

利用報告書

課題名	化学反応の経路に関する理論的研究
	Theoretical Study on Chemical Reaction Paths
利用者名	凌 敏 (教養部助教授)

1. 研究目的・内容

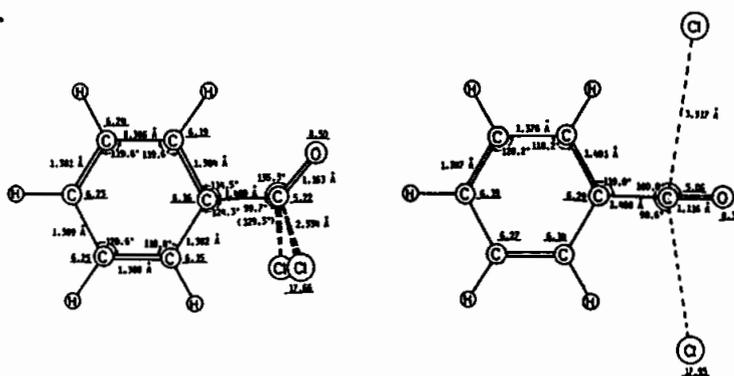
本研究は、分子軌道計算により化学反応の経路を求め、求められた経路に基づいて軌道相互作用を考察することにより化学反応機構を明らかにし、新しい化合物や特定の化合物の合成のための分子設計に役立つ知見を得ようとするものである。本年度は、主としてカルボニル炭素上における求核置換反応についての研究を行なった。この置換反応は四面体構造の中間体を通るものと考えられているが、先にこの四面体構造は中間体ではなく反応の遷移状態であることを提唱した。本研究では特に反応遷移状態の構造に注目した研究を行なった。

2. 研究方法・計算方法

分子軌道計算は、GAUSSIAN80 および MOPAC により行なった。エネルギーの極値を与える構造については、振動解析を行ない求められた構造が中間体であるか遷移状態であるかを確かめた。分子軌道計算は、実際に反応の起こる塩化ベンゾイルと塩素アニオンの系について行なった。

3. 研究成果

分子軌道計算を行なった結果、カルボニル炭素上での求核置換反応は2つの遷移状態を持っていることが分かった。1つは上で述べた四面体構造の遷移状態であり、他は直線型の遷移状態である。2つの遷移状態を持っていることは、Bentley と Cevasko の速度論的解析と一致している。



四面体構造

直線型

4. 発表・出版実績

山辺, 小山, 凌, 稲垣, Bull. Chem. Soc. Jpn., 63, 1684(1990).
市ノ瀬, 凌, 日本物理学会分科会, 10月4日, 於岐阜