

# 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	湊 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、メチル基の1、3-転移反応について研究を行った。メチル基の1、3-転移反応は、Woodward-Hoffmann 則によれば立体反転を伴うことが知られている。多くの実験は反転を伴う経路を示しているが、立体保持の経路も見つかっている。本年度は対称禁制の反応機構を明らかにするために、主として立体保持の経路に焦点をあてて研究を行った。

## 2. 研究方法・計算方法

分子軌道計算は、GAUSSIAN88およびMOPACにより行った。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、メチル基とアリル基の系について行った。

## 3. 研究成果

RHF法およびMP2法ともに、立体保持の経路は中央の炭素と転移基が引き合うRoute 2で、反転をとともなう経路は中央の炭素と転移基が反発するRoute 3であることを示した。即ち、立体保持の経路は連続的な1、2-転移の傾向を持っているが、反転をとともなう経路は直接的な1、3-転移であることが分かった。また、立体保持の経路について、RHF法ではこの反応は1段の反応であるが、MP2法では2段の反応であることが示された。

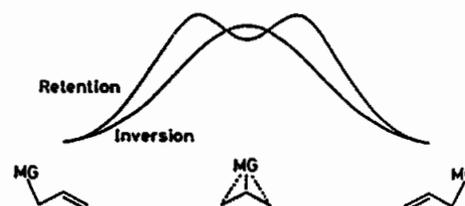
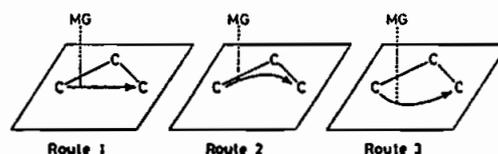


図. 反応のポテンシャル・エネルギー

## 4. 発表・出版実績

山辺、湊、分子構造総合討論会、11月21日、於横浜  
 川尻、山辺、湊、町口、分子構造総合討論会、11月21日、於横浜