

利 用 報 告 書

課 題 名	化学反応の経路に関する理論的研究
(英 文 名)	Theoretical Study on Chemical Reaction Paths
利用 者 名	湊 敏 (情報処理センター)

1. 研究目的・内容

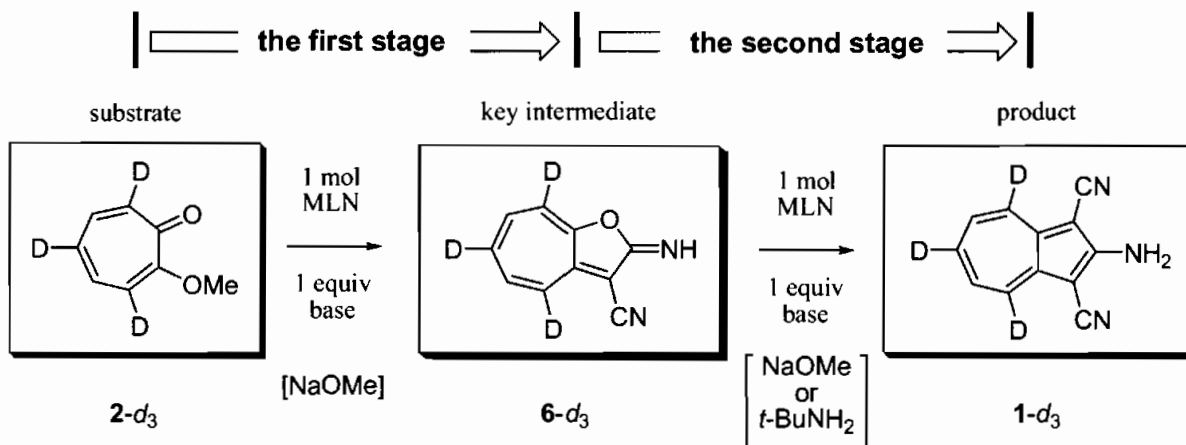
2-メトキシトロポン(2)とマロノニトリル2分子を用いたアズレン(1)の合成について理論的立場から研究した。この合成反応はマロノニトリル2分子を用いるため、多段の反応になり反応機構は非常に複雑である。この反応機構を明らかにするため、密度汎関数法を用いて反応経路を追跡した。

2. 研究方法・計算方法

アズレン合成反応の経路は、6-31+G(d)基底関数を用いたB3LYP法 (B3LYP/6-31+G(d)) により求めた。反応中間体および遷移状態の構造の確認は、振動解析を行うことにより行った。

3. 研究成果

アズレン合成反応は、付加、閉環、脱離といった多くの素過程を持った反応であることが確かめられた。この素過程をまとめると、先ずマロノニトリルアニオンが2-メトキシトロポン(2)を攻撃し、キー中間体(6)を生成する。次に2分子目のマロノニトリルアニオンがキー中間体を攻撃し最終生成物アズレン(1)を生成する。



4. 発表・出版実績または予定

未定