

# 利 用 報 告 書

課 題 名 (英文名)	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 (情報処理センター 教授)

## 1. 研究目的・内容

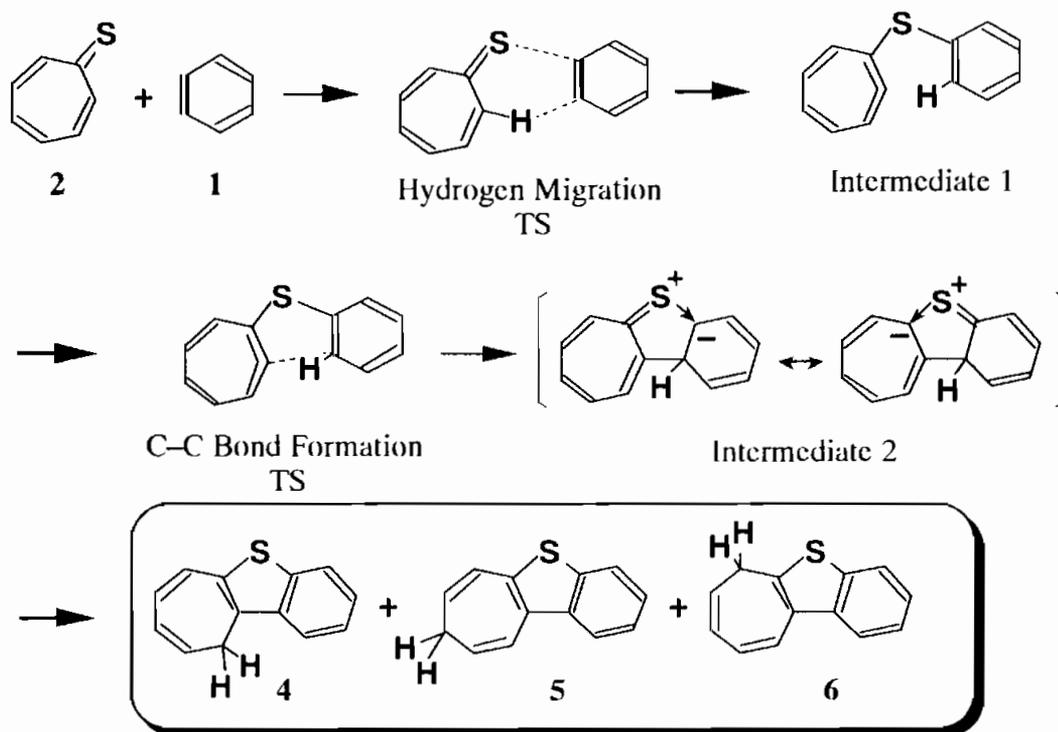
本研究では、ベンザイン (1) がトロポチオン (2) へ付加する反応について理論的に考察した。無水マレイン酸がトロポチオンおよびトロポチオンに付加する経路を研究した結果、無水マレイン酸がトロポチオンに付加する場合は [4 + 2] 付加を起こし、トロポチオンの場合は [8 + 2] 付加を起こすことを見出した。また、無水マレイン酸より強い親電子試薬であるベンザインがトロポチオンに付加する場合は、[4 + 2] 付加を起こすことが知られている。ベンザインがトロポチオンに付加する場合、無水マレイン酸と同様に [8 + 2] 生成物が得られるかどうか注目して研究を行った。

## 2. 研究方法・計算方法

ベンザインがトロポチオンに付加する反応経路は、溶媒効果を含んだ 6-31G(d) 基底関数を用いた密度汎関数法 (B3LYP/6-31G(d) SCRF) により追跡した。

## 3. 研究成果

計算結果から、この反応はベンザインがトロポチオンの  $\alpha$  水素を引き抜き、累積二重結合を持った 1 中心付加中間体を経由する反応であることが解った。



## 4. 発表・出版実績または予定

1) Yamabe, S., Nishihara Y and Minato, T. *J. Phys. Chem. A* 2002, 106, 4980-4987