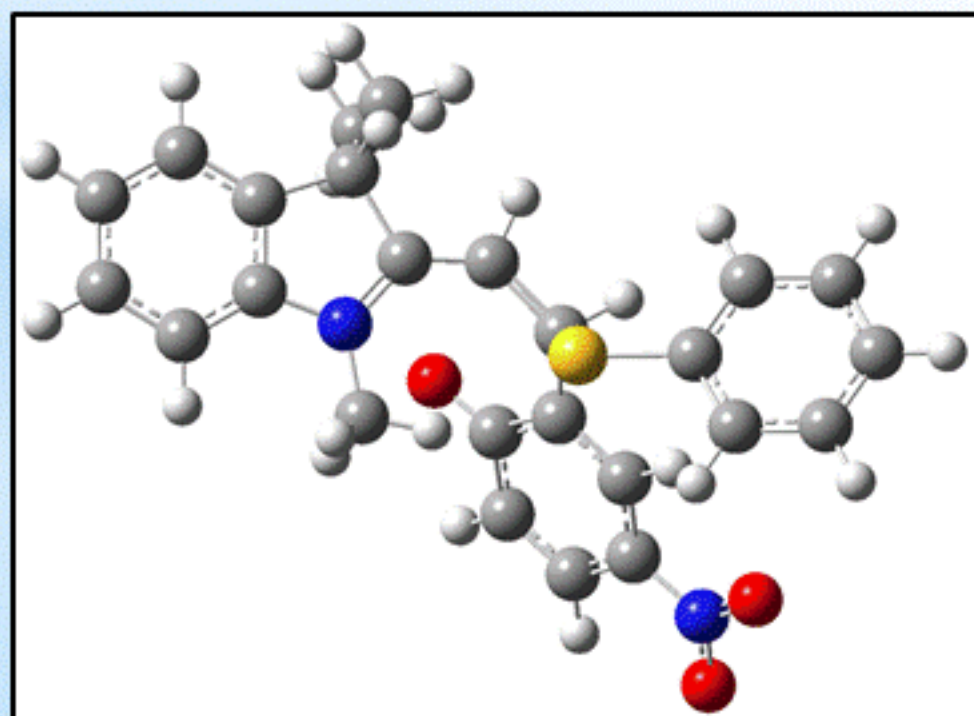


# 求核剤によるスピロピランの熱異性化促進効果の解明

大阪大学 基礎工学研究科 氏名 角谷 繁宏

**研究目的：** スピロピランは水溶液中で開環したメロシアニン構造に熱異性化するが、この異性化は芳香族チオール存在下で促進される。これは芳香族チオラートがスピロピランと相互作用することで異性化の活性化エネルギーが減少するためである。本研究では、この原因を明らかにすることを目的としている。

**内容：** DFT計算より、芳香族チオラートがスピロピランに付加した遷移状態の構造最適化を行い、活性化エネルギーを算出した。



ベンゼンチオールが付加した遷移状態の最適化構造

**結果：** 芳香族チオラートがスピロピランのオレフィン部位に付加した遷移状態の構造を求めた。この際、異性化の活性化エネルギーは49.85 kJ/molであり、スピロピランのみの活性化エネルギー(99.75 kJ/mol)より低い値となった。これは、チオラートの付加によりオレフィン部位が単結合となり、回転が容易になったためであると考えられる。

使用計算機	PCクラスタ
CPU時間	24時間
使用メモリ	10GB