

# ニッケル／銅協働触媒による1, 3-ジエンの不斉ヒドロアリル化反応の反応経路解析

大阪大学大学院 基礎工学研究科 氏名 長江春樹

目的 新規に開発したNi/Cu 協働触媒のカップリング反応の反応経路を明らかにし、活性化エネルギーや立体選択性の発現について調査を行う。

内容 Gaussian 16 を利用して、想定されるNiおよびCu錯体のエネルギーを計算し、反応経路探索を行った。

結果 反応の律速段階ならびに遷移状態構造を明らかにし、種々の中間体構造の安定性をもとに立体選択性についての知見を得た。

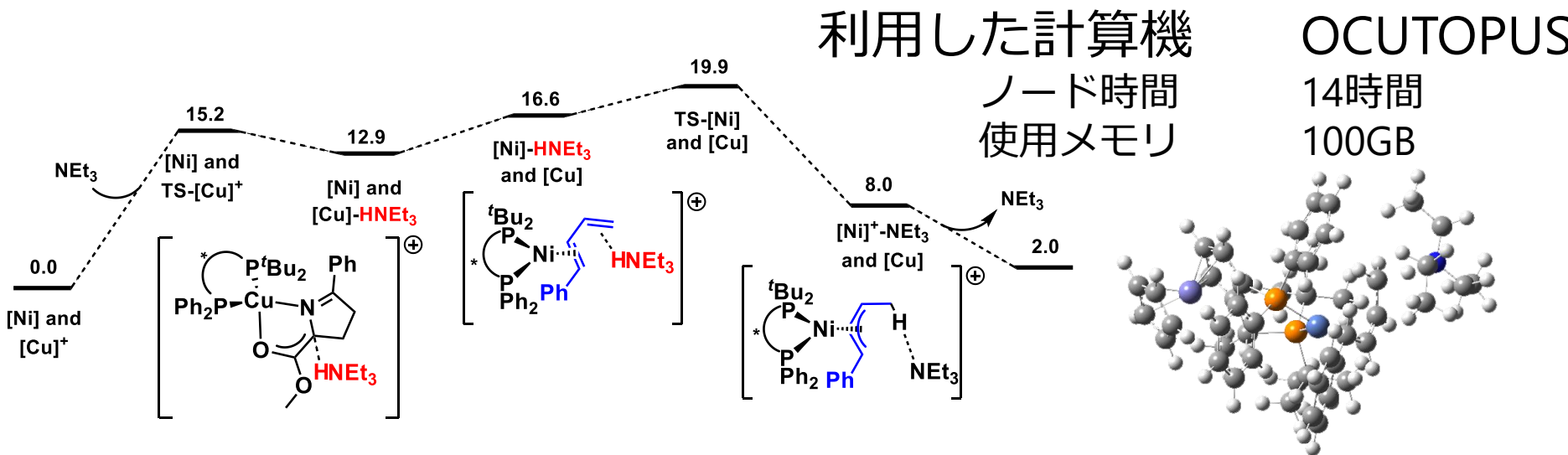


図 1 : 錯体TS-[Ni]の遷移状態構造