

チタン-アルミニウム触媒系を用いたアルケンのヒドロアミノアルキル化反応の反応機構解析

大阪大学大学院 基礎工学研究科 井上まりこ・水上茉依・寺石怜矢・劔隼人

目的 新規に開発したTi/Al協働触媒による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Ti(III)-Al種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。

