

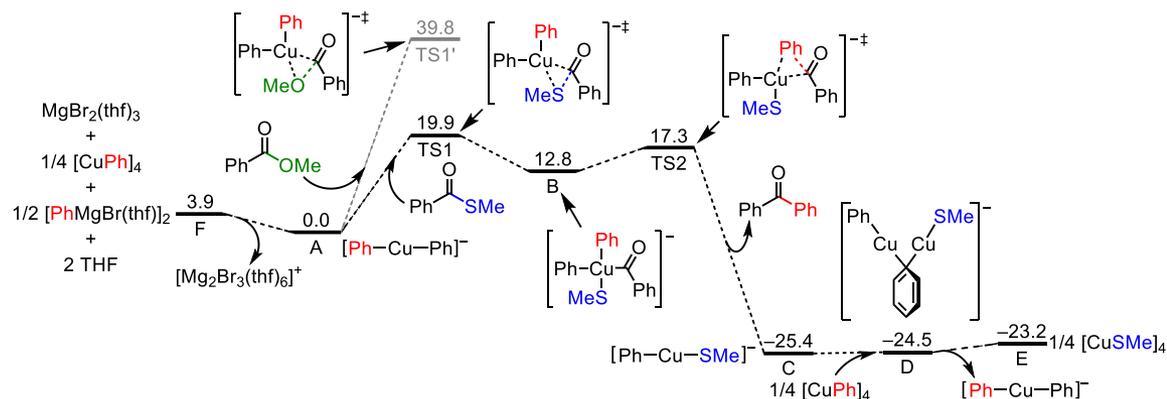
# 有機銅アート試薬とチオエステルの反応による ケトン合成における反応経路探索

大阪大学大学院 基礎工学研究科 氏名 加藤大樹

【目的】 有機銅アート試薬とチオエステルの反応によるケトン合成の反応経路探索により、活性化エネルギーや官能基選択性の発現について調査を行う。

【内容】 Gaussian 16を利用し、チオエステルまたはエステルを基質として用いた場合に想定されるCu錯体のギブズエネルギーを計算することで、反応経路と活性化障壁の違いについて検討を行った。

【結果】 反応中間体および遷移状態構造を明らかにし、活性化エネルギー障壁をもとに官能基選択性についての知見を得た。



【利用した計算機】

SQUID

ノード時間：1517時間

使用メモリ：200GB

OCTOPUS

ノード時間：788時間

使用メモリ：150GB