

前周期遷移金属錯体を触媒とするアルキンとアゾ化合物またはシクロプロペンの環化付加反応に関する反応機構解析

大阪大学大学院 基礎工学研究科 秋山 拓弥、劔 隼人

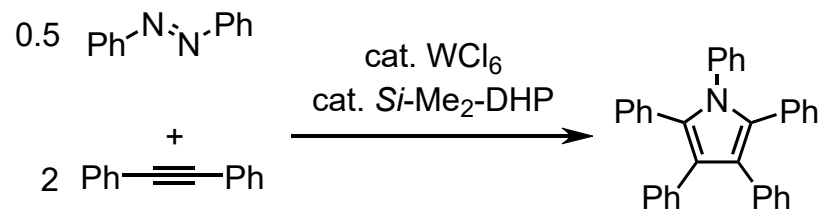
目的 前周期遷移金属を触媒とするアルキンとアゾ化合物またはシクロプロペンの[2+2+1]-環化付加反応について、DFT計算によりその詳細な反応機構を明らかにすることを目的とする。

内容 Gaussian 16 を用いて可能な反応経路の中間体および遷移状態の自由エネルギーを計算し、エネルギープロファイルを作成した。

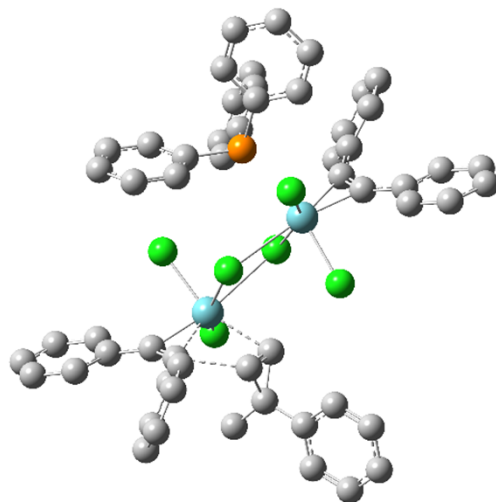
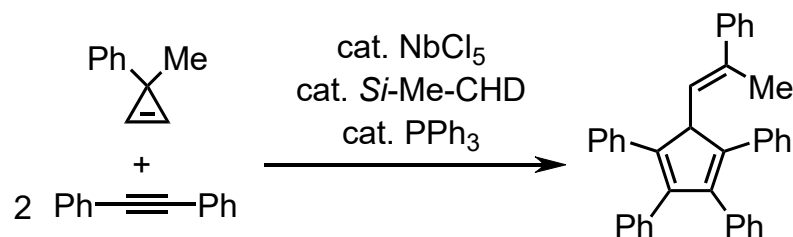
結果 反応機構の解明に成功したことに加え、前周期遷移金属イミド錯体・カルベン錯体の反応性に関する知見を得た。

利用した計算機	SQUID
ノード時間	9498時間
使用メモリ	200GB

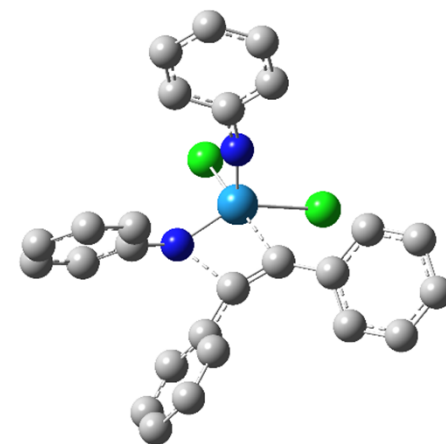
(a) タングステン触媒によるアルキンとアゾ化合物の環化付加反応



(b) ニオブ触媒によるアルキンとシクロプロペンの環化付加反応



(左) ニオブ触媒反応の遷移状態



(右) タングステン触媒反応の遷移状態