

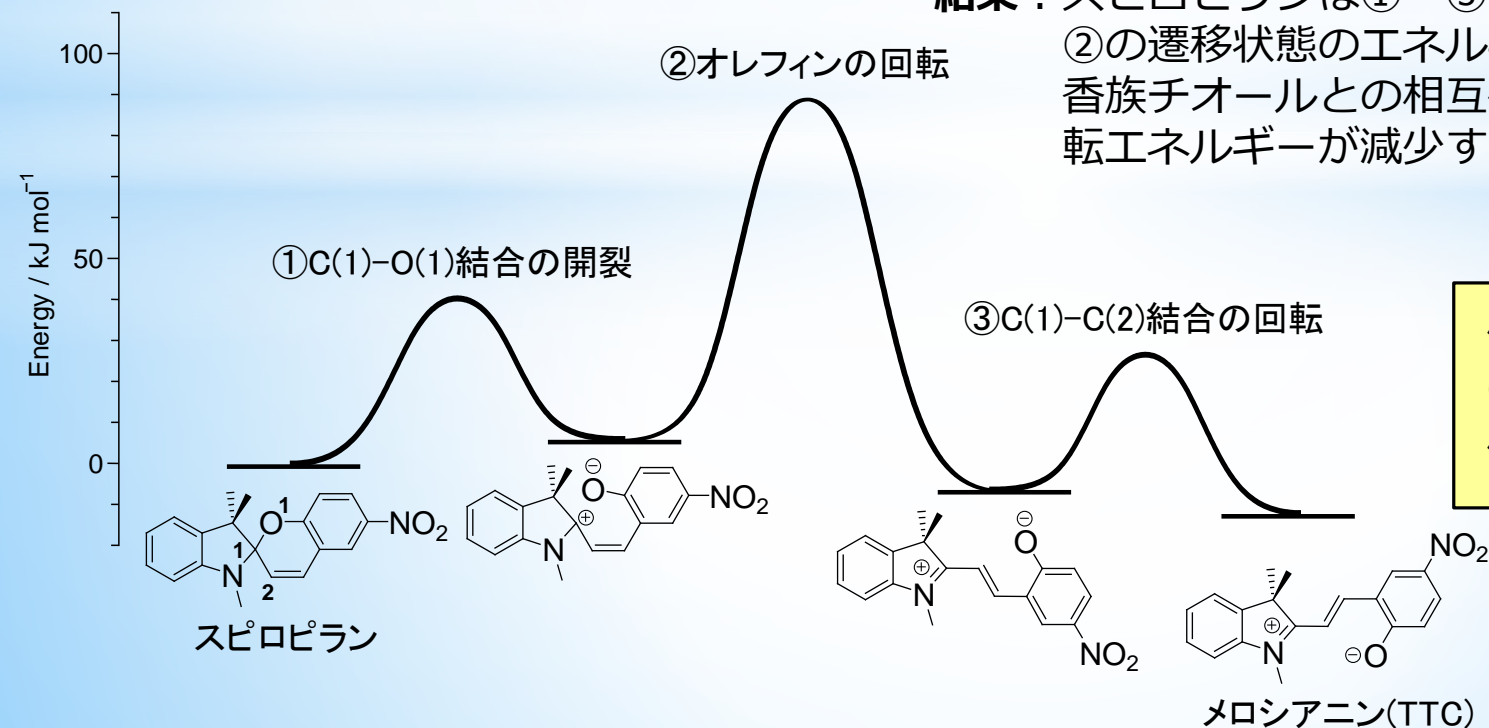
求核剤によるスピロピランの熱異性化促進効果の解明

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。本研究では、異性化促進の原因を明らかにすることを目的としている。

内容： DFT計算より異性化過程の遷移中間体および遷移状態の最適化構造とエネルギーを求めた。

結果： スピロピランは①～③の過程を経て異性化する。②の遷移状態のエネルギーが最も大きいため、芳香族チオールとの相互作用によりオレフィンの回転エネルギーが減少すると考えられる。



使用計算機	SX-8R
CPU時間	24時間
使用メモリ	6GB