

前周期遷移金属錯体触媒によるアルキンとシクロプロペンの環化付加反応に関する反応機構解析

秋山 拓弥¹、笠原 汰央¹、上田 瑛太郎²、黒田 悠¹、劔 隼人²

¹大阪大学大学院基礎工学研究科、²大阪大学大学院工学研究科

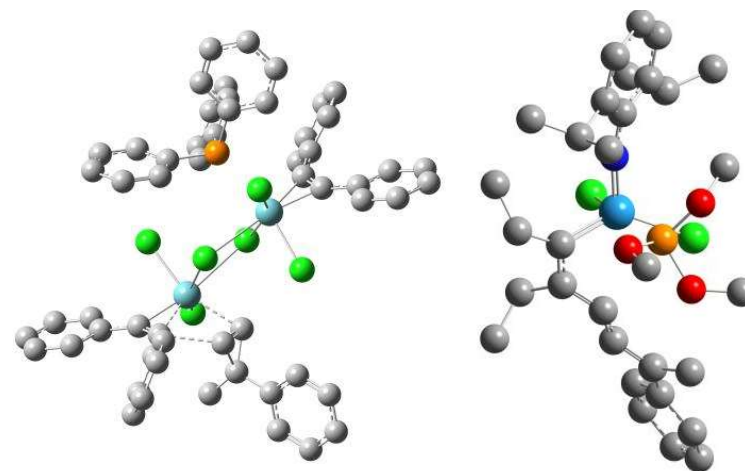
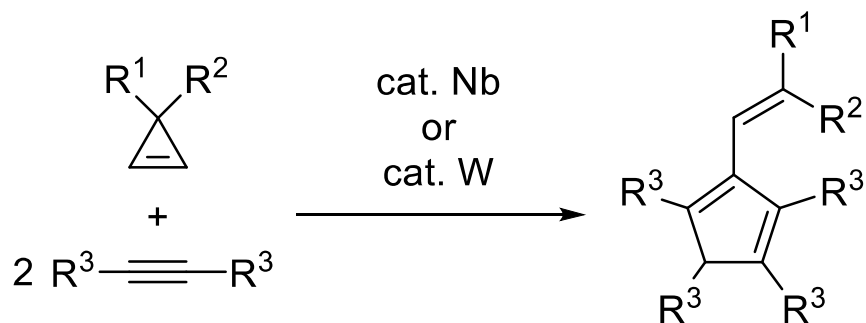
目的 前周期遷移金属錯体を触媒とするアルキンとシクロプロペンの環化付加反応によるシクロペンタジエン誘導体の合成反応について、DFT計算によりその詳細な反応機構を明らかにすることを目的とする。

内容 Gaussian 16 を利用して、触媒サイクル中の反応中間体および遷移状態の構造最適化およびエネルギー計算を行い、エネルギーダイアグラムを作成した。

結果 触媒サイクル中の触媒活性種の詳細な構造を明らかにすることに成功し、反応機構の解明につながる重要な知見を得た。

利用した計算機：SQUID ノード時間：7872 時間 使用メモリ：200 GB

前周期遷移金属錯体触媒によるシクロペンタジエンの合成



DFTにより明らかにした遷移状態や反応中間体の分子構造