

課題名 (タイトル) :

アラインの重合の理論的解析

利用者氏名 : ○巳上 幸一郎

所属 : 内山元素化学研究室

<p>1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係</p> <p>アラインの重合はこれまで不可能でしたが、触媒を作用させる事で重合反応が効率よく進行する事が明らかとなりました。そこで本研究ではアラインの重合の理論的な解析を行う事を目的としました。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>Gaussian 09 を用いて DFT 計算を行った。計算は汎関数として B3LYP, 基底関数として Ni に LANL3DZ を用い、その他の原子には 6-31G(d) を用いた。系統的に反応経路を探索するために artificial force induced reaction (AFIR) 法を用いて反応中間体と遷移構造を求めた。振動計算により安定構造と遷移構造の虚振動の数は 0 と 1 である事を確認した。得られた遷移構造に対して intrinsic reaction coordinate (IRC) 計算を行う事で対応する局所構造と反応経路がスムーズにつながっている事を確認した。</p> <p>3. 結果</p> <p>理論解析の結果、反応経路が次第に明らかになった。まず、アラインの三重結合に銅が配位した後に、アラインの炭素-炭素三重結合が銅と CN 結合に挿入する事がわかった。その後、その銅に対してアラインが配位・挿入を繰り返す事で重合反応が進行している事が示唆された。</p> <p>4. まとめ</p> <p>アラインの重合反応は銅を触媒として進行し、配位重合形式である事が示唆された。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>今後は別の反応経路を含めて計算を行う。また、得られた構造に対して計算コストが高い一点計</p>	<p>算を行う事で、さらに詳細に理論解析を行う。また、溶媒効果も考慮した計算も行う予定である。本重合はこれまで発見されてこなかった新しい重合法であるため、モノマーの適応範囲や他の触媒などを探索する事で、新たなイノベーションに貢献したいと考えている。</p>
--	--