

課題名 (タイトル) :

遷移金属錯体の触媒作用に関する理論的解析

利用者氏名 : 若槻康雄

所属 : 和光研究所 基幹研究所 俣有機金属化学研究室

---

1. 本課題では工業的利用の大きな可能性を持つ希土類錯体/有機アルミニウム触媒によるブタジエンのハイシス重合反応の解析を計算対象としている。金属錯体の中でも特に不安定な希土類金属錯体が対象であるため、中間状態を調べる実験的手法には限界があり理論計算によるシミュレーションが不可欠である。2009 年度に Gaussian を用いて一通りの理論解析を終了したが、その結果にもとづいて極めて新規な重合様式を提案するに至った。

2010 年度はこの結果を実験にフィードバックする事で同じ触媒系を用いたエチレンの重合を見だし、その結果を逆に上記の重合様式の証明にする為の実験的検討に時間を費やしたので理論計算は全く行わなかった。