

課題名 (タイトル) :

ラジカル重縮合の理論的解析

利用者氏名 : ○水越 祥英

所属 : 環境資源科学研究センター 先進機能元素化学研究チーム

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

重縮合においても近年連鎖重合で進行する例が報告されているがその中においてもラジカル的なカップリング反応を利用した連鎖重合に関しては未だ系統だった研究がなされていない。そこで本研究では亜鉛を用いたカップリング反応を重合反応へと展開し、ラジカル重縮合の理論的な解析を行う事を目的とした。重合反応では低分子での計算と異なり、原子数が多いためスーパーコンピュータを利用した計算が不可欠である。これまでに反応に関する知見は少なく、本反応の機構を解明する事は有機化学的にも高分子化学的にも意義があると考えられる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 09 を使用した。DFT 計算を用いて素反応の遷移状態を探索し、その活性化エネルギーを調べた。また、アート錯体の反応系中での挙動を調べた。

3. 結果

遷移状態の候補が見つかる事ができたが、そのエネルギー障壁は反応が進行するには高いと考えられた。

4. まとめ

計算科学によって想定していた反応機構を破棄し、今まで得られている実験データを参考にしながら新たに構築し直す必要があった。

5. 今後の計画・展望

実験、計算の双方が指示する反応機構を探し出し、適切な反応系をデザインする。よりスムーズな新規材料の開発が可能になると期待される。