

課題名(タイトル):

量子化学による化学反応解析 (Analysis of chemical reactions by quantum chemistry)

利用者氏名:

○奥出信一郎

理研における所属研究室名:

理化学研究所 科技ハブ産連本部 バトンゾーン研究推進プログラム 中村特別研究室

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

チオフェン誘導体は、天産物、薬剤、機能材料、フォトクロミック染料として重要な物質であり、世界的に多大な注目を受けている。本研究では、基礎研究上重要で、かつ、工業生産の安全性確保にも必須な、2-ブロモ-3-メキシチオフェンの自己発火現象の解明を、実験的研究(龍谷大学)と理論的研究(理研)を相補的に用いて研究を推進した。実験結果については、論文が済んでいる(添付ファイル参照)。

2. 具体的な利用内容、計算方法

密度汎関数法、B3LYP 汎関数使用。6-31G(d) 基底関数使用。Minimum Energy Path 法、OPT=TS 法、Reverse-Forward IRC 法を用いて、複雑な燃焼の反応経路を解析した。

3. 結果

年商反応の、最重要な素反応の割り出しに成功。今まで得られてきた広範な実験結果を一元的に説明出来た。理論計算の詳細は、現在、論文投稿の最終状態にある。

4. まとめ

実験と理論の連携、大学と理研の連携が功を奏して、独自性、汎用性が高く、かつ、明晰な研究結果が得られた。

5. 今後の計画・展望

今回の研究で、貴重な基礎的計算ノウハウがふんだんに得られた。このノウハウを、現在既に強力に推し進めている、企業との共同研究に活用する。

2020年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

Polymer Journal <https://doi.org/10.1038/s41428-020-00435-1>

Autopolymerization of 2-bromo-3-methoxythiophene, analysis of reaction products and estimation of polymer structure

Ryo Nishimura Yohei Hattori Masako Akazawa¹ Jun-ichiro Kitai¹ Shinichiro Okude Yuki Sakamoto

Seiji Yamazoe Satoshi Yokojima Shinichiro Nakamura Kingo Uchida