

嵩高い置換基を有するフェナントロリン配位子を有するコバルト錯体の理論計算

大阪大学大学院 基礎工学研究科 氏名 上田 耀平

目的 新規に合成を行った0価のコバルト錯体の電子構造、および末端アルキンとの反応における反応機構に関する知見を得る。

内容 Gaussian 09 を利用して0価のコバルト錯体についてMullikenの電子スピン計算と末端アルキンとの反応時のエネルギー計算を行った。

結果 Mullikenの電子スピン計算の結果、不対電子がコバルト中心上に局在化していることを確認した。また、末端アルキンのC-H結合がコバルト中心に σ 配位した中間体の存在を理論的に明らかにした（図1）。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ

VCC

1297時間
65GB

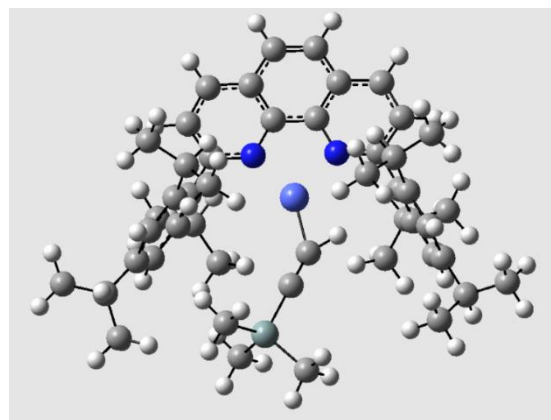


図1：シミュレーション結果