

# 遷移金属触媒による炭素-フッ素結合 変換反応の開発

大阪大学 工学部 氏名 岩本紘明、生越専介

炭素(sp<sup>3</sup>)-フッ素結合は非常に強固な化学結合の一つであり、その切断反応は困難な反応の一つとして知られている。当研究室では、電子豊富なニッケル錯体を用いることで、炭素(sp<sup>3</sup>)-フッ素結合切断が進行することを見出した。本研究では、このニッケル錯体による炭素(sp<sup>3</sup>)-フッ素結合切断過程を理論計算ソフトであるGaussian 09を使用した密度汎関数 (DFT) 計算によって解析した。その結果、ベンゼン環への電子供与を經由する新たな反応メカニズムを発見することに成功した。

利用した計算機  
ノード時間  
間  
並列化

VCC  
3500時  
1 node

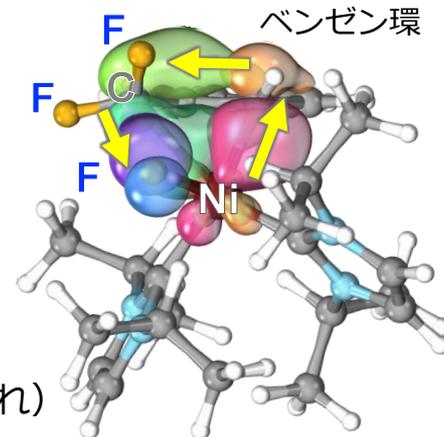
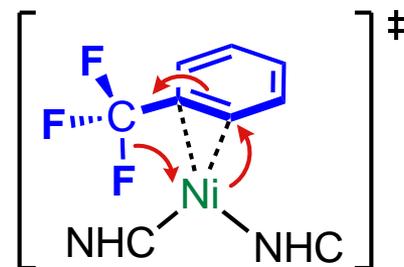


図 (C-F結合切断時の電子の流れ)