

# 立体特異性カチオン重合の研究

大阪大学大学院理学研究科 高分子科学専攻 渡邊大展

目的 新規に見出された立体特異性カチオン重合の反応機構に関する知見を得る

内容 Gaussian16を用いて、重合触媒となるチタン錯体等の構造をDFT計算による構造最適化を利用して調べた。また、カチオン重合のモデル反応において遷移状態構造を検討した。

結果 重合中に生成すると考えられる生長カチオンや対イオンの構造最適化をすることができた。また、モデル系の遷移状態についても確認できた。

利用した計算機

使用メモリ  
並列化

OCTOPUS

1-24GB  
1node

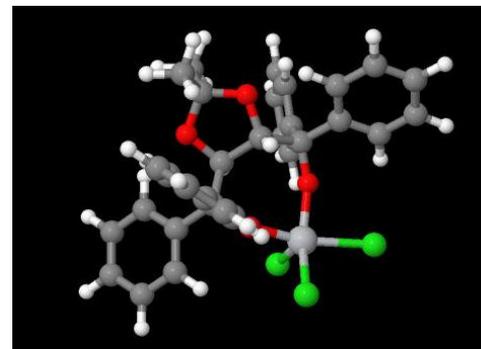


図1 対アニオン構造のシミュレーション結果