ランタンヒドリドボレート触媒による二酸化炭素のヒドロシリル化反応の反応経路解析

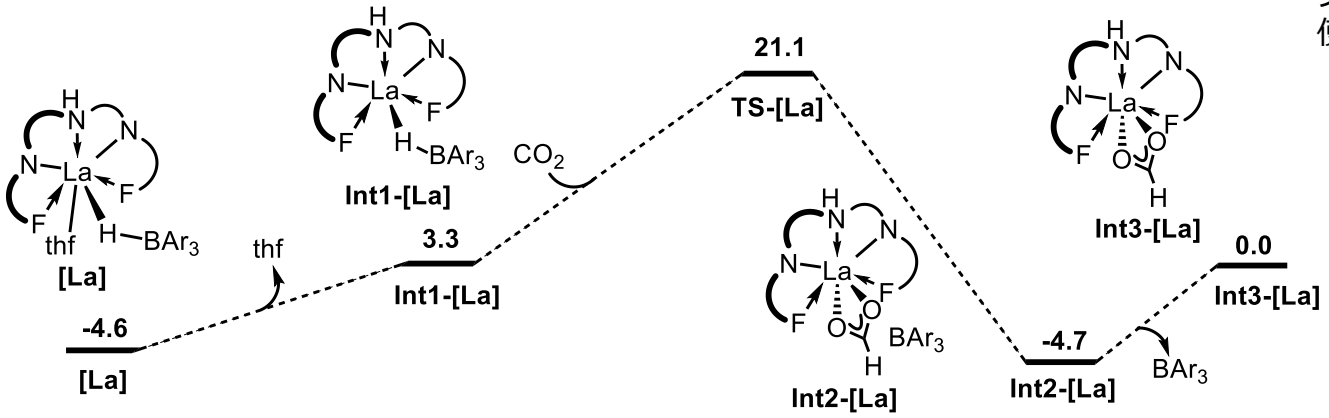
大阪大学大学院 基礎工学研究科　篠原 功一、川上 友美、森 春菜、劒 隼人

目的　新規に開発したランタンヒドリドボレート錯体触媒による二酸化炭素のヒドロシリル化反応の反応経路を明らかにし、活性化エネルギーやヒドリドボレートのホウ素上の置換基の影響について調査を行う。

内容　Gaussian 16 を利用して、想定されるランタン錯体のエネルギーを計算し、反応経路探索を行った。

結果　反応の律速段階ならびに遷移状態構造を明らかにすると共に、ホウ素上に異なる置換基を有する種々のヒドリドボレートの反応性に関する知見を得た。

利用した計算機	OCUTOPUS
ノード時間	3619時間
使用メモリ	100GB



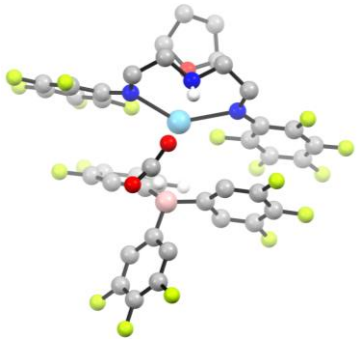


図１：錯体TS-La]の遷移状態構造