

DFT計算によるC-F結合の酸化的付加に有効な錯体の探索

大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻 土井良平

目的 計算科学による新物質設計により、試行錯誤の段階における実験数を減らし、物質的資源の削減を試みた。

内容 モデルとして、Pd錯体を用いたパーフルオロベンゼンの酸化的付加反応の開発を検討した。様々な配位子を有するPd錯体への酸化的付加反応をシミュレーションし、候補分子を探索した。

結果 アミノホスフィン配位子を候補として発見した。また、実際に化学合成したところ、酸化的付加反応が進行することを見出した。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
	ノード時間 3000 時間
	使用メモリ 40 GB
	並列化 1ノード 並列