

七座シッフ塩基配位子を有するセリウム錯体における 安定な配位様式の解明

大阪大学 工学研究科 鋤田 梨衣奈、宮本 侑昂、大石 詩歩、垣内 勇哉、劔 隼人

目的

七座シッフ塩基配位子を有する一連のセリウム錯体について、その安定な配位様式を明らかにする。

内容

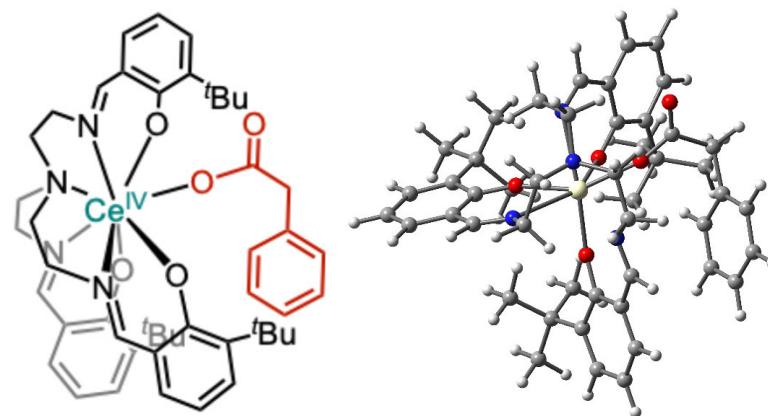
結果

七座シッフ塩基配位子をもつセリウム錯体は一方に空配位座を有し、そこへ種々のX型配位子が配位できることが明らかとなっている。そこで、様々なX型配位子を有するセリウム錯体について構造解析化と振動子計算を行うことにより、その配位様式を明らかにした。特に、カルボキシラート配位子は κ^1 と κ^2 の2種類の配位様式を取りうるが、構造最適化を行った結果 κ^1 が安定であることがわかった。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 1000 時間

使用メモリ 200 GB



κ^1 で配位したセリウムカルボキシラート錯体