平成28年度　　京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

次世代リビングラジカル重合制御剤の開発
Development of the next-generation controlling agent in living radical polymerization

京都大学化学研究所 高分子制御合成領域　　中村泰之

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、新たなリビングラジカル重合制御剤の開発に係る化学反応機構の研究を行った。

有機テルル化合物、有機アンチモン化合物がリビングラジカル重合の制御剤として優れた性質を持つことをこれまでに明らかにしている。一方で新しい分子構造を持つ有機テルル、アンチモン化合物の開発は、重合制御能の向上や、重合反応の生成物であるポリマーの末端基の修飾などの観点から興味深い。重合制御能は化合物の C-Te または C-Sb 結合の結合解離エネルギーと密接な関係があることから、新しい制御剤の設計においてこれら結合解離エネルギーを見積もることは非常に有用である。

Gaussian ソフトウェアを用いて、種々の有機テルル、アンチモン化合物について C-Te 結合または C-Sb 結合の結合解離エネルギーを算出した。適当な大きさの結合解離エネルギーを持つ化合物については実際に合成を行い、重合制御能について検討を行った。

今後もより高い制御能や、新しい分子構造を持つ化合物の設計および反応性の予想のために計算サーバーを利用する予定である。