

氏名： 土田 敦子
所属： 大学院人間文化創成科学研究科
職名： リサーチフェロー
学位： 博士（理学）/Ph. D. in chemistry
専門分野：
E-mail： tsuchida.noriko@ocha.ac.jp

◆研究キーワード / Keywords

量子化学／ホスフェニウム錯体／反応経路

quantum chemistry / phosphenium complexes / reaction pathway

◆主要業績

• "Ruthenium Seleno- and Tellurocarbonyl Complexes: Selenium and Tellurium Atom Transfer to a Terminal Carbido Ligand"

Y. Mutoh, N. Kozono, M. Araki, N. Tsuchida, K. Takano and Y. Ishii, *Organometallics*, 29, 519, (2010)

◆研究内容 / Research Pursuits

ホスフェニウム錯体は、アルケンへのホスフェニウム付加による難燃性ポリマー合成の触媒として活用が期待される錯体である。しかし錯体の合成例は少なく、その性質や反応機構について未解明な点が多々存在する。実験手法による追跡が困難な遷移状態や不安定な中間体などの探索が可能な量子化学計算により、分子設計の指針を得ることを目指して研究を推進している。

A large variety of phosphenium complexes have been synthesized to date. However, the understanding of the electronic features and synthetic pathways of them remain an open question. They are complexes to which examinations about industrial use are expected. Recent development of theoretical chemistry and high-performance computers brings us quantitative treatment of molecular properties and chemical reactions. This enables us to analyze the geometries and reactions of phosphenium complexes at the high level of theory.

◆研究計画

これまでの研究では有機反応と有機金属錯体の反応系の追跡を行い、それぞれの遷移状態探索について有効な手段を修得してきた。その経験と専門知識を活かして、有機金属錯体を触媒とする有機化学反応の追跡に挑戦する。