

主論文の要約

論文題目 Theoretical Study on Microscopic Processes in
Catalytic Polymerization Reactions
(触媒重合反応における微視的過程の理論的研究)

氏名 松本 健太郎

論文内容の要約

本学位論文では、触媒重合反応の微視的過程を計算化学的手法で解明することを目的として、重合反応を構成する各段階の詳細な分子機構から全重合反応過程までを取り扱った一連の研究成果を、二部構成としてまとめた。

序論では、高分子合成に用いられる金属触媒と非金属触媒それぞれの特徴を説明した後、重合反応過程を構成する個々の段階のみならず、その過程全体を対象とした全原子シミュレーションを実現することが、本学位論文の主題であることを述べた。

第一部では、金属触媒の一種を用いた触媒重合反応に着目した。

第一部第一章では、分子動力学法を用いて、活性化段階の詳細な分子機構を解析した。

第一部第二章では、量子化学計算によって、開始・成長段階の反応機構を詳細に解析した。

第一部第三章では、ここまでの研究成果をもとに、重合反応過程の全原子シミュレーションを実現し、その結果の妥当性について議論した。

続く第二部では、第一部で得られた重合反応シミュレーションに関する知見をもとに、非金属触媒の一種を用いた触媒重合反応に着目した。

第二部第一章では、対象とする触媒重合反応の研究の第一歩として、分子動力学法を用いて開始段階の分子機構を調べた。

最後に、結論として、本学位論文全体の成果をまとめると共に、今後の課題と将来の展望を述べた。

以上のように、本学位論文では、二つの典型的な触媒重合反応を構成する個々の段階の詳細を明らかにすると共に、これまで全く不可能であった触媒重合反応過程の全原子シミュレーションを実現した。本学位論文で実現した新手法により、今後、期待する高分子の合成に最適な触媒構造の設計や反応条件の設定などを、理論的観点から合理的に提供することが可能となり、触媒重合反応の手法の発展に大きく貢献できると期待される。