

## アンモニア生成活性向上を志向した PCP 型ピンサー配位子を有する新規モリブデン錯体の合成とその性能評価

(出光興産<sup>1</sup>・東大院工<sup>2</sup>) ○石飛 佑真<sup>1</sup>・西林 仁昭<sup>2</sup>

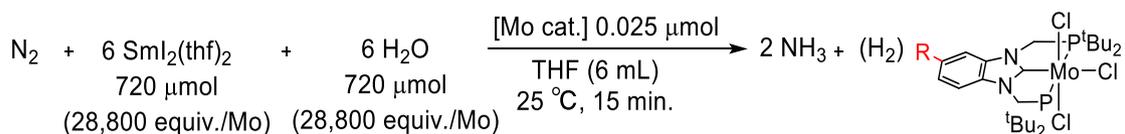
Synthesis of molybdenum complex with novel PCP-type pincer ligands for improving ammonia production activity (<sup>1</sup>*Idemitsu Kosan Co.,Ltd.*, <sup>2</sup>*School of Engineering, The University of Tokyo*) ○Yuma Ishitobi,<sup>1</sup> Yoshiaki Nishibayashi<sup>2</sup>

Recently, we reported highly efficient ammonia production from dinitrogen and water under ambient reaction conditions catalyzed by molybdenum complexes bearing PCP-type pincer ligands. More recently, we found the introduction of electron-withdrawing groups into the PCP-type ligand dramatically improved the catalytic activity. As an extensive study, we have newly designed and synthesized novel molybdenum complexes bearing PCP-type pincer ligands with aromatic groups to expand the conjugated system. As a result, we have found that these novel molybdenum complexes worked as more effective catalysts.

**Keywords :** Molybdenum complex; Ammonia; Pincer ligand

これまでに当研究室では、PCP 型ピンサー配位子を有するモリブデン錯体を触媒として利用した、常温常圧下で進行する窒素ガスと水とからの高効率なアンモニア合成反応の開発に成功している<sup>1)</sup>。最近になり、電子求引性基を配位子に導入することで、飛躍的に触媒活性が向上することを見出している<sup>2)</sup>。

これらの研究の一環として、共役系を拡張する目的で芳香環を配位子に導入した新規なモリブデン錯体を設計・合成した。その結果、一連の新規モリブデン錯体は、触媒的アンモニア合成反応においてより高い触媒活性を示すことが明らかとなった。導入した芳香環の共役能と触媒活性との相関関係について議論する。



R	NH <sub>3</sub>		H <sub>2</sub>	
	(equiv./Mo)	(%)	(equiv./Mo)	(%)
H	4,190	44	47	0.3
Ph	5,600	49	20	0.1
3,5-(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	7,230	75	14	0.1

1) Ashida, Y.; Arashiba, K.; Nakajima, K.; Nishibayashi, Y. *Nature* **2019**, 568, 536.

2) Nishibayashi, Y.; Ashida, Y.; Mizushima, T.; Arashiba, K.; Egi, A.; Tanaka, H.; Yoshizawa, K. *ChemRxiv* **2022**.

この成果は、NEDO の委託業務 (JPNP21020) の結果得られたものです。