

# Theoretical Study on Reaction Pathway and Ligand Design for Nitrogen Fixation Catalyzed by Molybdenum Complexes

江木, 晃人

<https://hdl.handle.net/2324/6787560>

---

出版情報 : Kyushu University, 2022, 博士 (工学), 課程博士  
バージョン :  
権利関係 :

氏 名	江木 晃人			
論 文 名	Theoretical Study on Reaction Pathway and Ligand Design for Nitrogen Fixation Catalyzed by Molybdenum Complexes (モリブデン錯体を用いた触媒的窒素固定の反応経路と配位子設計に関する理論的研究)			
論文調査委員	主 査	九州大学	教授	吉澤 一成
	副 査	九州大学	教授	小江 誠司
	副 査	九州大学	教授	石原 達己
	副 査	大同大学	教授	田中 宏昌

### 論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本研究は、三座ピンサー配位子を有するモリブデン錯体を用いた触媒的窒素固定反応について理論化学的な観点から反応経路解析を行うとともに、モリブデン錯体の電子状態を効果的に制御し、触媒活性の向上につながる新規置換基導入ピンサー配位子を実験に先駆けて提案している。本研究では新規配位子の提案だけでなく、配位子設計指針に関する極めて有益な提案を示しており、理論化学のみならず錯体化学および触媒化学上価値ある業績であると認める。よって本論文は博士（工学）の学位論文に値するものと認める。