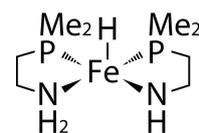




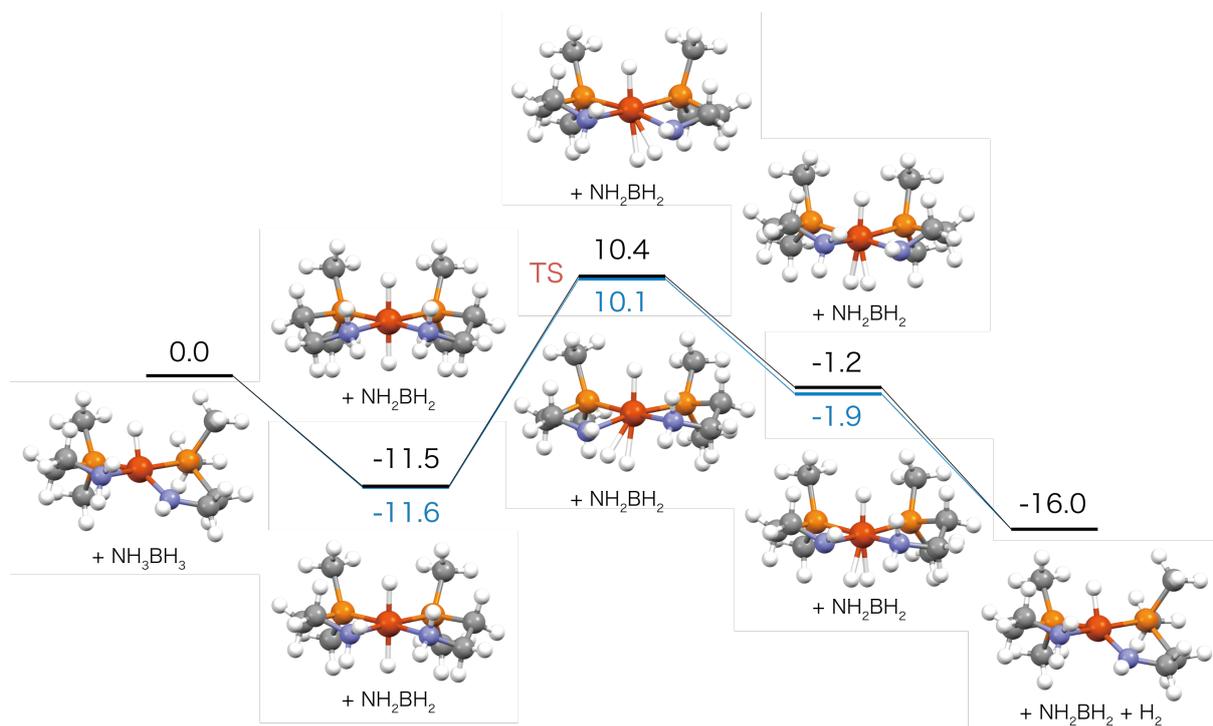
## 計算方法

右図の鉄錯体を用いたアンモニアボラン脱水素反応過程の各構造を計算し、Gibbs 自由エネルギーを算出した。計算パッケージは Gaussian 09 を使い、計算手法は B3LYP、基底関数は鉄原子に DZVP を、その他の原子には TZVP を用いた。



## 結果

反応前のエネルギーを原点とし、気相における Gibbs 自由エネルギー (kcal/mol) を下図に示した。黒線と青線は配座異性体のエネルギーである。これにより鉄の場合もルテニウムと同様に、窒素原子から中心金属への水素移動に活性化障壁が存在し脱水素反応が進行することが示唆された。しかし、その活性化障壁の大きさはルテニウム触媒の 18.8 kcal/mol よりも大きくなることがわかった。詳細は当日に報告する。



## 参考文献

- [1] A. D. Sutton, et al, *Science*, 331, 1426 (2011)
- [2] V. Pons, et al, *Chem. Commun.*, 6597 (2008)
- [3] N. Blaquiere, et al, *J. Am. Chem. Soc.*, 130, 14034 (2008)