令和 7 年度　　京都大学化学研究所　スーパーコンピュータシステム　利用報告書

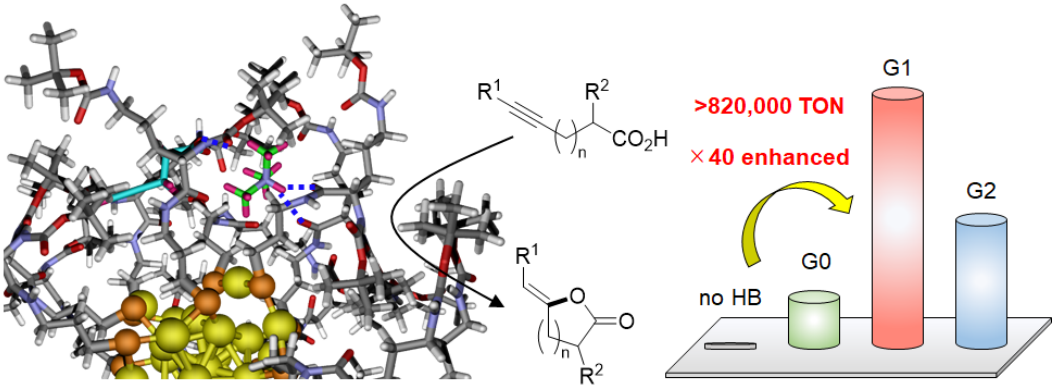
効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成
Design and Synthesis of Metal Catalysts toward Efficient Organic Molecular Transformation

京都大学　化学研究所　元素科学国際研究センター　有機分子変換化学　中村　正治

研究成果概要

金属ナノクラスターは数個～数十個の金属から成る単一組成を有する分子であり，様々な反応に理容される金属ナノ粒子よりも高い比表面積を持つことから，触媒としての利用が期待されている。これまでに，様々な配位子で保護された金属ナノクラスターが報告されているものの，広く研究されているチオラート配位子で保護された金属ナノクラスターは高い安定性を示すものの，金属－硫黄結合が強固であることから，触媒活性は低く止まることが一般的であった。このような背景の中，我々は樹状に広がり，多数の水素結合点を有するペプチドデンドロン部位をチオラート配位子に導入することで，金属ナノクラスター上に水素結合に基づく超分子反応場を構築する手法について研究してきた。これまでに，反応基質が水素結合を介して触媒表面に捕捉されることで，金ナノクラスターによる光触媒反応が大きく促進されることを明らかにしてきた。しかし，触媒表面の分子構造が変化してしまう触媒反応に対する超分子反応場の効果は未解明だった。今回，金ナノクラスター上の超分子反応場がアルキン酸の触媒的環化反応に対して高い触媒反応促進効果を示すことを明らかにした。本反応では，超分子反応場の効果により，一般的なアルキルチオラート配位子に対して 40 倍もの反応促進効果を示すとともに，82 万回を超える高い触媒回転数を示した。

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを用いることにより，迅速に計算機化学的な反応機構解析ができた。この成果を報告すると共に謝意を表する。



発表論文（謝辞あり）

1. “Accelerated Catalysis of Atomically Precise Thiolate-Protected Gold Nanoclusters by Supramolecular Ligand Engineering” Ueda, K.; Saito, R.; Iseri, K.; Sekiya, S.; Nakamura, M.; Isozaki, K. *ACS Catal.* **2025,** *15,* 12260.