

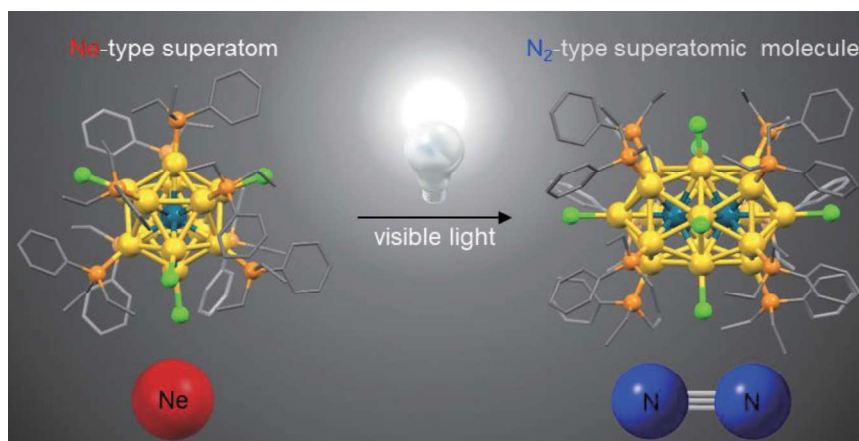
効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成

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

数十の金属原子により構成される金属ナノクラスターは、価電子が原子軌道と類似の対称性を示す分子軌道である超原子軌道に収容され安定化することから超原子と呼ばれる。近年、これらの超原子が融合した異方性金属ナノクラスターが発見され、その結合様式が盛んに研究されている。これまでに報告されている異方性金属ナノクラスターでは、二つの超原子間が超原子軌道の線形結合により単結合を形成した超原子分子の例しか知られておらず、超原子間の多重結合形成が可能なのか、またその物性に興味を持たれている。最近、我々は可視光照射によって超原子クラスター同士が融合し、超原子軌道の線形結合により三重結合が形成された窒素型の超原子分子が得られることを見出した。



本課題では、窒素型の超原子分子の電子構造を解明するために、DFT 計算を用いた分子軌道解析と光照射に伴う電子遷移解析を行った。その結果、今回初めて見出された超原子分子 Π 軌道間の電子遷移では、通常有機分子と同様に、対称性の等しい軌道間での遷移が許容であるのに対し、対称性の異なる軌道間では禁制遷移となることが確認された。本成果は超原子分子軌道においても軌道の対称性に基づく選択律が適用されることを示した初めての例である。

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、迅速な計算機化学的な検討ができた。この成果を報告すると共に謝意を表す。

発表論文（謝辞あり）

1. “Synthesis of N_2 -Type Superatomic Molecules” Saito, R.; Isozaki, K.; Mizuhata, Y.; Nakamura, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 20930.