

## 亜鉛間相互作用に基づく、亜鉛複核錯体・クラスターの可視光機能開拓

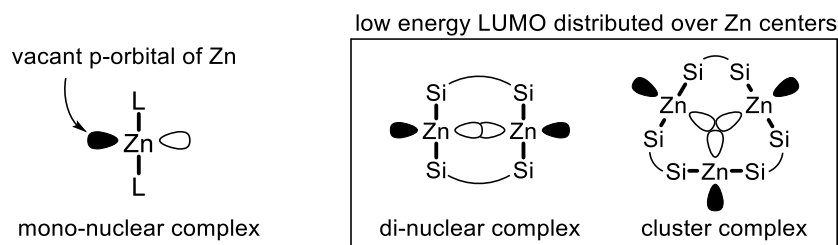
(東大生研<sup>1</sup>・東大院工<sup>2</sup>・JST さきがけ<sup>3</sup>) ○和田 啓幹<sup>1,2</sup>・丸地 貴大<sup>2</sup>・石井 玲音<sup>2</sup>・砂田 祐輔<sup>1,2,3</sup>

Development of visible-light responsive multinuclear Zn complexes and Zn clusters based on Zn-Zn interaction (<sup>1</sup>*Institute of Industrial Science, The University of Tokyo*, <sup>2</sup>*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*, <sup>3</sup>*JST-PRESTO*) ○Yoshimasa Wada,<sup>1,2</sup> Takahiro Maruchi,<sup>2</sup> Reon Ishii,<sup>2</sup> Yusuke Sunada<sup>1,2,3</sup>

It has been widely known that Zn(II)-based complexes are colorless and therefore “silent” toward visible-light<sup>1)</sup>. In this research, we developed a visible-light “active” Zn complex<sup>2)</sup> and a cluster molecule based on a theoretical molecular design introducing interatomic orbital interaction between Zn centers. Using sterically bulky oligosilyl-ligands resulted in electron deficient and coordinatively unsaturated Zn(II) centers, which in turn induced interaction between empty p-orbital of Zn centers and formed energetically stabilized LUMO over Zn centers. Owing to the decreased LUMO energy level, visible-light absorption was realized. We believe our findings open up untapped possibility for inexpensive and less-toxic Zn-based photo functional materials such as photocatalysts and chromic sensors, as well as emitting materials for light-emitting diodes.

**Keywords :** multinuclear Zn complex; Zn cluster molecule; intermetallic interaction; visible-light absorption; theoretical calculation

亜鉛は錯体中において2価の  $d^{10}$  電子配置をとることに由来し、可視光応答を示さず、無色ないし白色の化合物であることが教科書事実として知られてきた<sup>1)</sup>。本研究では、亜鉛原子間に働く軌道間相互作用に注目し、これを適切に利用する分子設計に基づき、実際に可視光吸収を示す有色の亜鉛複核錯体<sup>2)</sup>・クラスター分子を開発したのでこれを報告する。立体的にかさ高い二座のケイ素配位子(Si-Si)を用い、電子不足かつ高度に配位不飽和な2配位の亜鉛(II)中心を形成させることにより、複数の亜鉛原子の空p軌道からなる低エネルギーのLUMOが生じた。その結果、HOMO-LUMO間のエネルギー差が大幅に低下し、可視光領域に吸収を示した。本研究結果により、亜鉛を中心金属として用いた様々な可視光機能材料への展開が大いに期待される。



1) C.E. Housecroft and A.G. Sharpe, **2018**, Inorganic chemistry, Fifth edition. Edition (Pearson).

2) Y. Wada, T. Maruchi, R. Ishii, and Y. Sunada, *available at SSRN*, DOI : 10.2139/ssrn.4197384.