

## シリコン半導体のモデルとしての有機ケイ素クラスターの化学

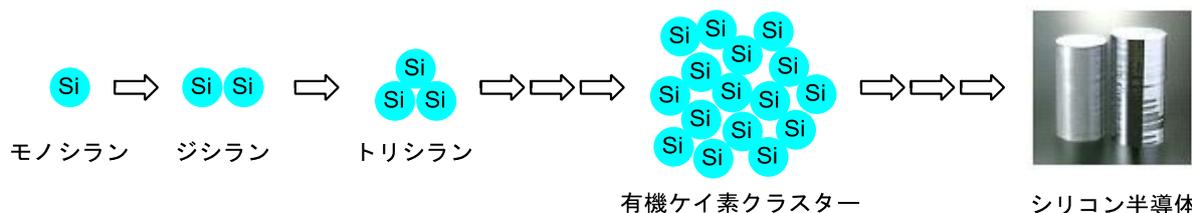
## The Chemistry of Organosilicon Clusters as Models of Silicon Semiconductors

○久新 荘一郎<sup>1</sup>、石田 真太郎<sup>2</sup>、津留崎 陽大<sup>3</sup>、大塚 恭平<sup>1</sup> (1.群馬大院理工、2.東北大院理、  
3.産総研)

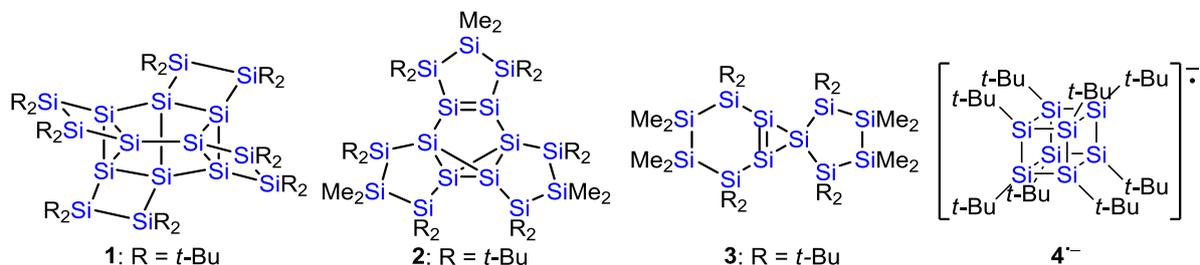
○Soichiro Kyushin<sup>1</sup>, Shintaro Ishida<sup>2</sup>, Akihiro Tsurusaki<sup>3</sup>, Kyohei Otsuka<sup>1</sup> (1.Gunma Univ., 2.Tohoku  
Univ., 3.AIST)

E-mail: kyushin@gunma-u.ac.jp

有機ケイ素クラスターは通常の有機ケイ素化合物とシリコン半導体の間に位置する化合物である。通常の有機ケイ素化合物は 1~数個のケイ素原子を含んだ化合物であり、シリコン半導体は多数のケイ素原子から成る単体であるが、両者の間には非常に大きな隔りがある。ケイ素原子を数 10~数 100 個含んだ有機ケイ素クラスターはどのような化合物であろうか。その構造や性質には興味もたれるが、合成上の難しさのためにほとんど研究が行われてこなかった。本講演ではこの分野の最近の研究成果について説明する。



我々が合成した有機ケイ素クラスター $1\sim3$ ではケイ素原子が通常の正四面体構造以外にも多様な立体構造をとっていることが明らかになった<sup>1-3</sup>)。また、紫外可視吸収スペクトルと理論計算から、化合物 $1$ の分子軌道は通常の有機ケイ素化合物とシリコン半導体の中間的な状態にあること、化合物 $2$ や $3$ の最長波長吸収帯は二重結合によって決まることがわかった。オクタシラキューバンのラジカルアニオン $4^{\cdot-}$ では、中性状態に比べて構造パラメータが変化すること、不対電子がケイ素骨格の内部と *tert*-ブチル基の三級炭素の近くに分布することが明らかになった<sup>4</sup>)。



1) S. Ishida, K. Otsuka, Y. Toma, S. Kyushin, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, *52*, 2507.

2) A. Tsurusaki, C. Iizuka, K. Otsuka, S. Kyushin, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 16340.

3) A. Tsurusaki, J. Kamiyama, S. Kyushin, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 12896.

4) K. Otsuka, N. Matsumoto, S. Ishida, S. Kyushin, *Angew. Chem., Int. Ed.*, in press.