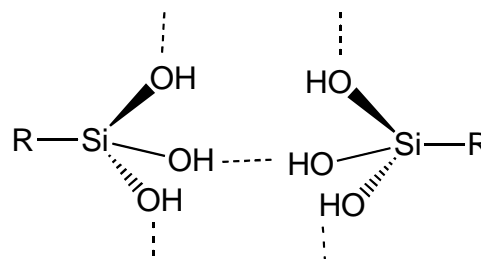


ディビジョン番号	5
ディビジョン名	錯体化学・有機金属化学

大項目	2. 有機金属化学
中項目	2-4. 有機典型元素化合物
小項目	2-4-5. シラノールの新しい化学

#### 概要（200字以内）

シラノールは有機合成の分野では不安定中間体として捉えられてきたが、例えばイソプロピル基程度の置換基を導入することで、安定に単離することができる。アルコールと異なり、シラノールはジェミナル水酸基を複数持つものが安定に存在し、多点水素結合により超分子を形成する。また、シラノールが脱水縮合したシロキサンは、熱安定性など種々の特性を有する材料であり、高度に構造が規制されたシロキサンの合成など、応用展開も有用である。

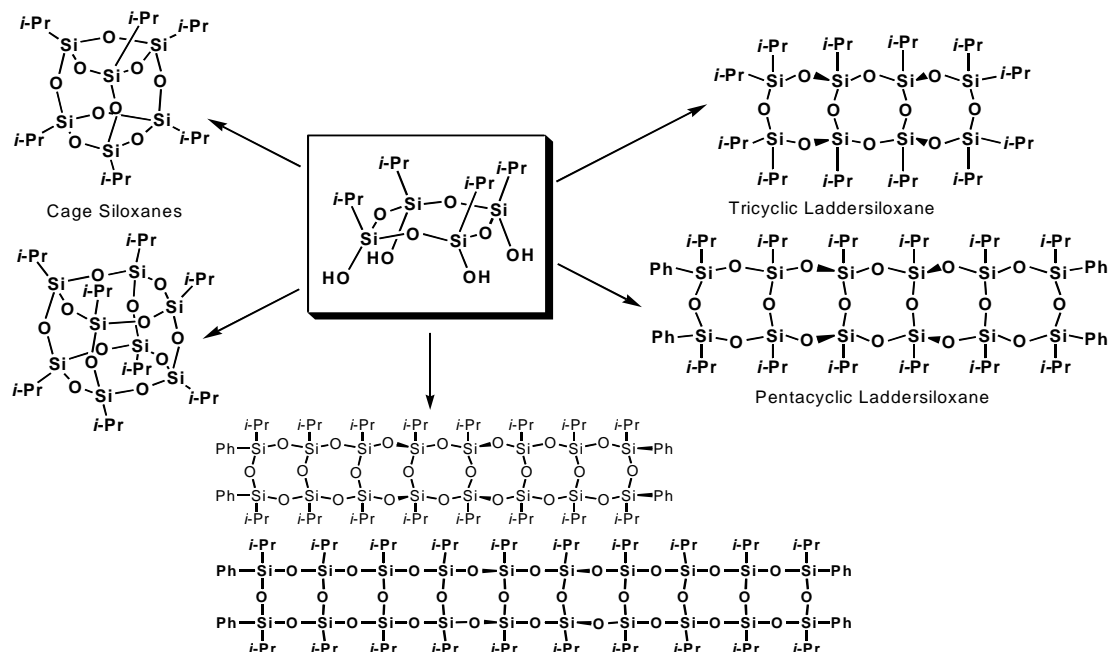


#### 現状と最前線

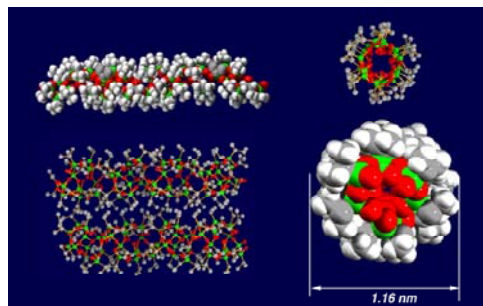
これまでは、シラノールの研究はもっぱらその構造に目が向けられており、その多彩な水素結合による構造をX線結晶構造解析で明らかにすることが中心であった。たとえば、先に示したケイ素上に水酸基が3つあるシラントリオールでは、2分子でダイマーを形成することもあるが、置換基のサイズにより、球状集合体、シート状集合体、チューブ状集合体など種々の形態を取ることができる。さらに、シラントリオール2分子が縮合すれば、ケイ素2個で、水酸基を4つ有する、ジシロキサンテトラオールが生成する。この化合物は水酸基が減ることさらに安定になり、また、分子の形状も変化するため、同じ置換基でもシラントリオールとは異なった結晶中での集合体構造を示す。

ところで、我々は、かさ高い置換基を有するかご状シルセスキオキサンの合成法の開拓を行っていた際に、シラノールを安定に単離し、それを縮合させることでシルセスキオキサンが合成できることを見出した。これまで、シルセスキオキサン合成に当たっては、原料となる置換クロロシランあるいはアルコキシシランを加水分解・脱水縮合させることで得る方法がほとんどであった。この方法は簡便であり、大量合成にも適していることから、現在でも材料開発においてはこの合成法が中心である。ところが、生成物の構造、物性を制御しようとする、反応条件を変える以外に方策がなく、また、生成してくるシルセスキオキサンの構造を制御することは非常に困難であった。一方、シラノールからの合成が可能になったことで、原料となる

シラノールの構造を制御することで、これまでに困難であった高度に構造が規制されたシルセスキオキサン合成が可能になった。以下に、我々の研究室で開発した種々のシルセスキオキサンのシラノールからの合成をまとめる。



また、シラノール自身の構造を、単純なものから、複雑環状のポリシラノールに変化させることで、様々な構造の超分子集合体を形成することができる。以下に示したのは2種類のシラノールを共結晶化させたものの構造解析の結果である。ナノサイズのチューブになっていることが分かる。



#### 将来予測と方向性

##### ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

今後は物性を軸にした合成及び構造の制御が求められる。たとえば、高い絶縁性を有する素材、高耐熱性材料などはすでにデバイス材料を中心にその開発が強く求められており、シラノールを基軸とした合成により、要求を満たす材料開発が可能になる。

##### ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

新しい機能として光物性が上げられる。シラノールを集合、配列させることにより、単分子では発現しない、新しい吸光、発光特性を実現することが期待される。

#### キーワード

超分子、シロキサン、高機能材料、水素結合、耐熱性材料

(執筆: 海野雅史 )