

ガラスの基本単位であるオルトケイ酸の単結晶構造解析 Single crystal structural analysis of orthosilicic acid, basic unit of glass

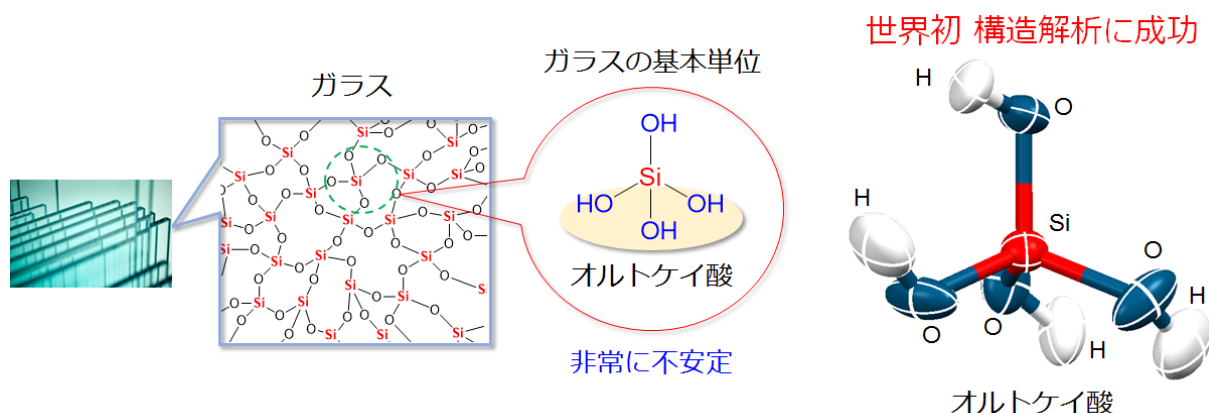
五十嵐正安¹、松本朋浩¹、八木橋不二夫¹、大原高志²、花島隆泰³、中尾朗子³、茂吉武人³、佐藤一彦¹、島田茂¹

1 産総研触媒化学融合研究センター、2 日本原子力研究開発機構、3 総合科学研究機構

無機ケイ素化合物(ガラス、シリカ、ゼオライト等)や有機ケイ素化合物(シリコーン等)の基本単位であるオルトケイ酸($\text{Si}(\text{OH})_4$)は、テトラアルコキシシラン($\text{Si}(\text{OR})_4$)や四塩化ケイ素(SiCl_4)の加水分解行程において中間体として発生するが、極めて不安定であり単離された例は皆無である。これまでにない機能や高い性能を有するケイ素材料を製造するために、“真の前駆体”であるオルトケイ酸の安定な合成と単離が求められてきた。

一方、自然界には石などから溶出したごく低濃度のオルトケイ酸が存在しており、動植物は天然のオルトケイ酸を吸収し、組織の一部として蓄積している。動植物がオルトケイ酸を取り込むメカニズムの詳細を明らかにするためにも、オルトケイ酸の詳細な分子構造の解明が求められてきた。

オルトケイ酸を安定に合成することを目的とし、無水条件による合成法の開発を検討した。Pd/C 触媒存在下、ベンジル保護基を有するケイ素化合物を水素化分解することで、オルトケイ酸を安定に合成し、粉体化することに成功した。さらに、中性子結晶構造解析により、その詳細な構造を世界で初めて明らかにすることに成功した。同様の反応によりオルトケイ酸の2量体、環状3量体、環状4量体の合成に成功し、X線結晶構造解析によってそれらの構造を明らかにした。



この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務の結果得られたものです。

1) Igarashi, M., Matsumoto, T., Yagihashi, F., Yamashita, H., Ohhara, T., Hanashima, T., Nakao, A., Moyoshi, T., Sato, K. & Shimada, S. *Nat. Commun.* 8, 140 (2017).