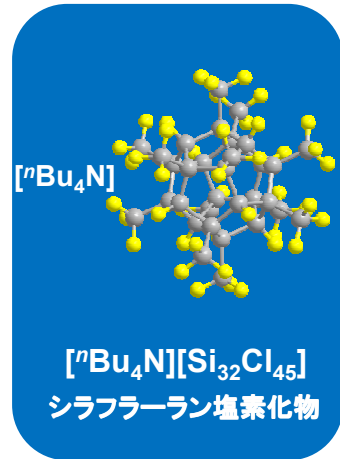


- 中空カゴ型構造を有するシラフラーラン類縁体を開発中
- 電子材料(Liイオン電池、半導体など)分野への応用展開に期待
- 計算化学による材料設計、合成、物性評価についてもご相談ください



### 目的・背景

中空カゴ型構造体のシラフラーランはC<sub>60</sub>のアナログとして新奇な特性が期待できます。

理論計算上、シラフラーラン(Si<sub>20</sub>H<sub>20</sub>)<sup>1,2)</sup>はLiイオンを内包できること、

バンドギャップは3.64 eVとされておりまして。

計算化学による物性解明は進んでいるものの、2015年になり

シラフラーラン塩素化物([<sup>n</sup>Bu<sub>4</sub>N][Si<sub>32</sub>Cl<sub>45</sub>])<sup>3)</sup>合成が報告されました。

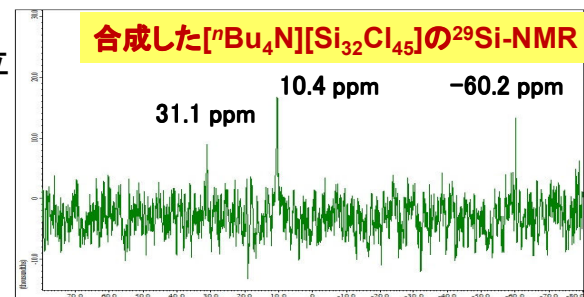
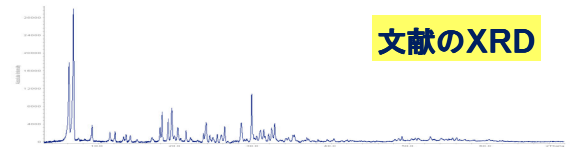
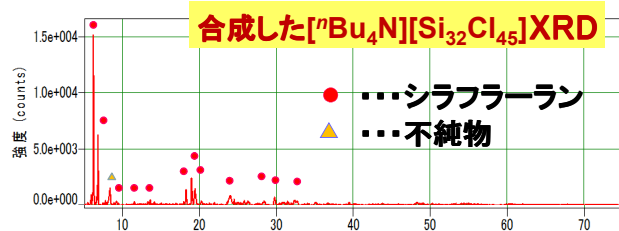
また、シラフラーランを重合体にするにより、安定化、

高比表面積、及びシラフラーラン単体の物性増幅が期待できます。

### 本技術の特徴

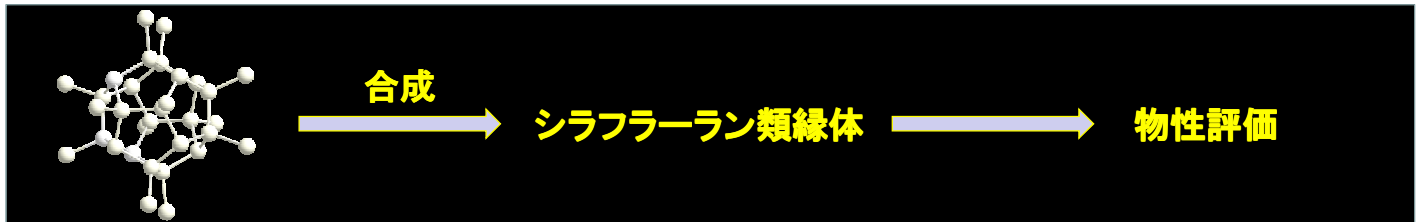
- 弊社では上記のシラフラーラン塩素化合物合成の合成手法まで確立  
重合体の合成検討にも着手しております。この新機能性材料を御社の  
キーマテリアルに成長させます!!
- 設計から物性評価までまるごとおまかせ開発プランもご提案  
**例. Liイオン電池負極材の開発**

- ・ 計算化学により、最適構造の算出または化合物の物性シミュレーション
- ・ 化合物の合成
- ・ 電池評価



文献値:<sup>29</sup>Si-NMR=31.1, 10.3, -60.3ppm

**KRIに  
おまかせください!**



KRIからのご提案/今後の展開/期待される成果など

リチウムイオン電池負極材 / キャパシタ材料 / 半導体

1) C-Y. Zhang.; H-S. Wu.; H. Jiao, *Chem. Phys. Lett.* **2005**, 410, 457.    2) Z. MahdaviFar.; M. Poulad.; A. Ostovan, *J. Mol. Liq.* **2016**, 219, 561.

3) J. Tillmann.; J. H. Wender.; U. Bahr.; M. Bolte.; H-W. Lerner.; M. C. Holthausen.; M. Wagner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 5429.