

2024年 8月23日

## 学位論文の審査要旨

学位論文申請者氏名 内山 保

論文題目 Theoretical study of Si/C mixed saturated polyhedral compounds  
(炭素・ケイ素混合飽和多面体化合物の理論的研究)

## 論文の概要及び判定理由

プラトン正多面体構造を有する炭素・ケイ素混合飽和化合物は、未だ合成されていないが、優れた機能性物質になると期待されている。内山氏は、これら 14 族異周期元素の組み合わせが、新たな分子物性を示すと考え、正四面体、立方体、正十二面体形飽和炭化水素類縁体のケイ素割合と炭素・ケイ素配置の異なる計 2097 個の異性体に対して量子化学計算を実施し、構造の違いに伴う安定性や歪み、電子状態等の違いを調べた。その結果、立方体と正十二面体において、異性体の相対安定性は歪みエネルギーか両元素の非局在度合のいずれかと高い相関があり、歪みエネルギーの Si 割合変化に伴う変化は多面体により異なること、などを見出した。更に、正十二面体において、炭素とケイ素の混合による新しい性質を持つ分子も見出した。内山氏の業績は、骨格炭素の系統的な順次ケイ素置換に伴う構造の安定性への影響を系統的に研究した初めての研究であり、今後、新規機能性物質開拓につながることを期待される。

以上の理由から、博士(理工学)の学位に値するものと判定した。

審査年月日 2024年 8月 2日

## 審査委員

主査	群馬大学学術研究院	教授	氏名	海野 雅史
副査	群馬大学学術研究院	教授	氏名	尾崎 純一
副査	群馬大学学術研究院	教授	氏名	井上 裕介
副査	群馬大学学術研究院	准教授	氏名	佐藤 和好
副査	群馬大学学術研究院	准教授	氏名	樋山 みやび

関連論文

1. 著者名 内山保, 中村泰司, 樋山みやび, 工藤貴子

論文題目 Theoretical Study of Si/C Equally Mixed Dodecahedrane Analogues

(和訳)Si/C 半数混合ドデカヘドラン類縁体の理論的研究

雑誌名 Molecules, Vol. 28, Issue 6, 2769, March 2023

参考論文

1. 著者名 中村泰司, 内山保, 工藤貴子

論文題目 Comparison of group 14 elements in  $sp^3$  and  $sp^2$  environment by fragment structure energy analysis

(和訳)フラグメント構造エネルギー解析による第14属元素の  $sp^3$  及び  $sp^2$

環境の比較

雑誌名 Journal of Computational Chemistry, Vol. 42, Issue 25, 1817–1825, September 2021