2023 年度年次報告書地球環境と調和しうる物質変換の基盤科学の創成2023 年度採択研究代表者

土井 良平

大阪大学 大学院工学研究科 助教

フッ素化合物の水素還元反応の開発

## 研究成果の概要

本研究では、有機フッ素化合物に対して水素と塩基を反応させることで、炭化水素に変換する反応の開発を目標としている。

2023 年度はパーフルオロアルキル基の脱フッ素水素化をターゲットとし、ヒドロシランを用いた反応の検討を行った。これまでにニッケル触媒存在下、パーフルオロアルキルアレーンとヒドロシランとの脱フッ素水素化反応を開発している。しかし、これまでの検討ではパーフルオロアルキル基にナフタレン環が結合していることが必須であり、適用範囲が大きく限定されていた。密度汎関数法 (DFT)を用いた計算から、ナフタレン環はニッケルが結合する部位として必要であることが示唆されている。本反応の現実的なアプリケーションを鑑みると、ベンゼン環以外の置換基への拡張が必須である。そこで、アルケニル基および水素を有するパーフルオロアルキル化合物の還元反応に取り組んだ。これらは、長鎖のパーフルオロアルキル化合物に対して、ナトリウムナフタレニドなどの強い還元剤を反応させることで部分的に発生させることができる。そのため、これらのモデル化合物で還元が進行すれば、長鎖のパーフルオロアルキル化合物を二段階で還元する手法に発展できると考えた。実際に、パーフルオロアルキルアレーンの場合と同様の条件で反応させるとそれぞれフルオロシランを与えることを見出した。パーフルオロアルキルアレーンの反応ではリン酸カリウムなどの塩基の添加によって反応が促進されていたが、今回検討したアルケニル基を有するパーフルオロアルキル化合物では塩基の添加の有無は反応性にほぼ影響を与えなかった。

今後は、ヒドロシランを用いた反応において、より最適な触媒の探索を行う。また、水素を活用した反応開発にむけても検討を進めていく。