

# バイオマス由来分子 HMF のフミン化反応:

## 系統的な探索を用いた反応経路解析

(北大院総化) 田代啓介

tashiro\_ch@eis.hokudai.ac.jp

### 【背景】

化石燃料由来の化学製品への依存から脱却することは、持続可能な社会の達成に向けた課題の一つである。ヒドロキシメチルフルフラール(HMF)をプラットフォームとした分子合成は、フランジカルボン酸(FDCA)などのフラン骨格を持つ分子を合成するグリーンな反応プロセスとして期待されてきた。特に FDCA は PET 原料であるテレフタル酸の代替分子として有力な分子である。一方で、HMF を基質とする反応は HMF の高い反応性に起因してフミンと呼ばれる複雑な構造を持つ HMF 重合物を生成する自己重合反応が併発することが知られている。フミン生成機構は複数の素反応が関与した反応ネットワークを形成することから、その詳細な反応機構の解析は行われてこなかった。本研究では GRRM プログラムを用いて HMF のフミン化反応を 3 量体化まで追跡し重合の初期段階での重要な素反応を抽出することでフミン化反応の鍵となる反応を特定した。<sup>[1]</sup>

### 【結果】

探索によって得られた反応のうち、低障壁かつ結合変化のある反応を図示した(図 1)。色付けした反応経路はフミン化反応において重要な経路である。講演では得られた反応経路の化学的意味の議論や、フミン化抑制へのアプローチについての紹介をおこなう。

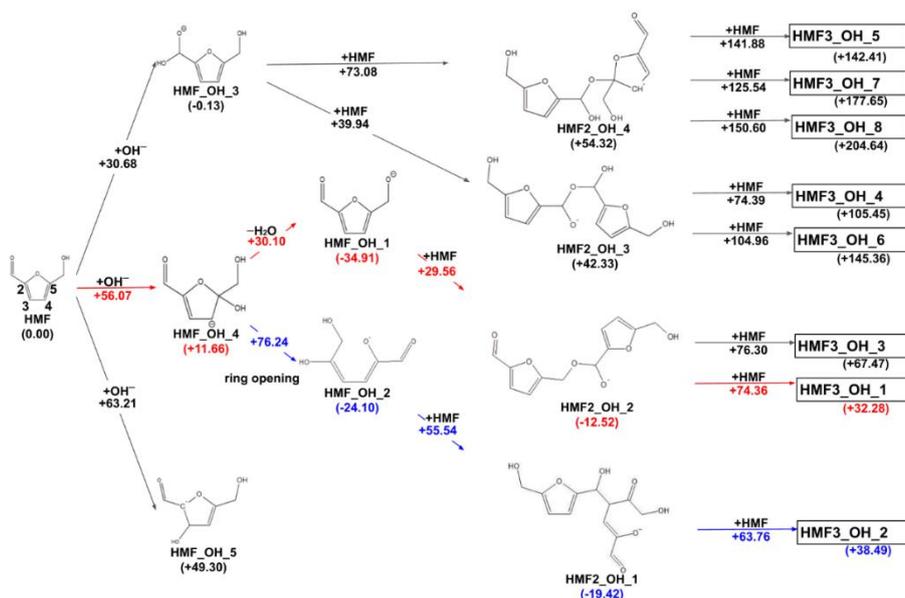


図 1 フミン化反応初期段階の反応経路地図

[1]K. Tashiro, M. Kobayashi, K. Nakajima, and T. Taketsugu, *RSC Adv.*, **2023**, 13, 16293-16299.