

## イミノホスホナミドクロロシリレンを介した強固な C–F 結合活性化反応

(埼玉大院理工) ○淡路 拓矢・高橋 慎太郎・石井 昭彦・中田 憲男  
 Robust C–F bond Activation Mediated by Iminophosphonamide–Chlorosilylene  
 (Department of Chemistry, Graduate School of Science and Engineering, Saitama University)  
 ○Takuya Awaji, Shintaro Takahashi, Akihiko Ishii, Norio Nakata

It is well known that the reactivity of silylene is attributed to its high HOMO level, e.g., the C–F bond activation.

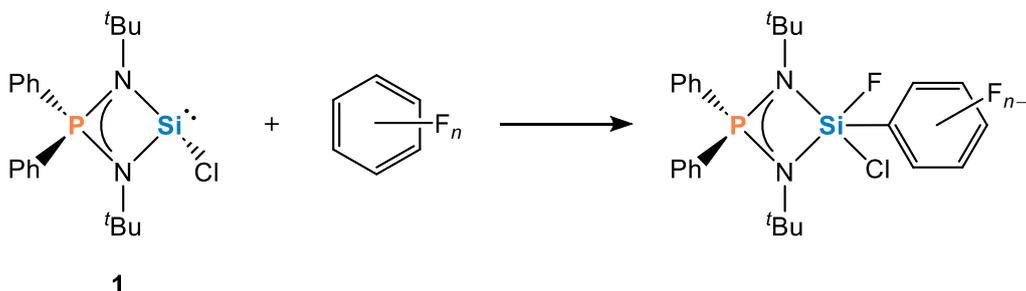
We recently investigated the synthesis and unique properties of three-coordinated silylene **1** supported by an iminophosphonamide ligand.

Here, we report the C–F bond activation reactions of various perfluoroarenes with **1** under mild conditions and discuss the reaction mechanism using DFT calculations. We also report the reaction of **1** with fluorinated compounds having stronger C(sp<sup>3</sup>)–F bonds.

**Keywords** : Silylene; Iminophosphonamide ligand; C–F bond activation; Perfluoroarenes; DFT calculation

カルベンの高周期類縁体であるシリレンは、これまでに様々な配位子によって安定化され、その多種多様な反応性について興味もたれている。シリレンの反応性の高さは HOMO 準位の高さに起因することが知られており、その例としてパーフルオロアレーン類の C–F 結合活性化反応が挙げられる<sup>1)</sup>。これまでに、当研究室ではイミノホスホナミド配位子によって安定化された三配位シリレン **1** の合成に成功しており、HOMO 準位の上昇に起因した特異的な反応性を明らかにしている<sup>2-4)</sup>。

本発表では、シリレン **1** と種々のパーフルオロアレーン類との反応から穏和な条件下での C–F 結合活性化反応を見出し、その反応機構を理論計算に基づいて考察したので報告する。また、より結合エネルギーの大きな C(sp<sup>3</sup>)–F 結合を有する含フッ素化合物との反応についても検討したので併せて報告する。



- 1) Jana, A.; Samuel, P. P.; Tavcar, G.; Roesky, H. W.; Schulzke, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 10164–10170.
- 2) Takahashi, S.; Sekiguchi, J.; Ishii, A.; Nakata, N. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 4055–4059.
- 3) Takahashi, S.; Ishii, A.; Nakata, N. *Chem Commun.* **2021**, *57*, 3203–3206.
- 4) Takahashi, S.; Sekiguchi, J.; Nakaya, K.; Ishii, A.; Nakata, N. *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 7266–7273.