

## パーフルオロアルキル化合物の物性を分子構造から理解する

(京大化研) ○長谷川 健

Understanding the material properties of perfluoroalkyl compounds from the primary chemical structures (*Institute for Chemical Research, Kyoto University*) ○Takeshi Hasegawa

Organic fluorine compounds having perfluoroalkyl groups are collectively called PFAS, ranging from small molecules to polymers, and are essential materials for semiconductor manufacturing and fuel cells because of their unique properties represented by the water and oil repellency and low dielectric permittivity. On the other hand, there are concerns about their accumulation and toxicity in the environment and human body, and finding a solution that balances the environment and industry is a pressing issue worldwide. The delay in understanding the physical and chemical aspects of PFAS has been a stumbling block for solving the problem. Recently, experimental and computational results have revealed that the Stratified Dipole-Array (SDA) model is useful to understand physical properties by unifying the dipole moment, molecular polarizability, and molecular conformation, all of which have been suggested to be related so far, have an impact for the understanding of PFAS. Interdisciplinary research has begun across industry, government, and academia.

**Keywords :** *Perfluoroalkyl substances (PFAS); Stratified Dipole-Arrays (SDA) model*

有機フッ素化合物の中でもパーフルオロアルキル基をもつものは、小分子から高分子までまとめて PFAS と呼ばれる。PFAS は撥水撥油性や低誘電率に代表される、炭化水素にはまねのできない高機能で特異な物性により[1], 半導体製造や燃料電池などに不可欠の材料である。その一方、環境や人体での蓄積性や毒性が懸念され[2], 環境と産業のバランスの取れた解を見出すことが世界的な喫緊の課題となっている[3]。PFAS は有用な物質が多数開発された一方で、物性発現のメカニズムを分子論的に理解するという点では非常に遅れており、とくに物理化学的な理解の遅れが問題解決の足かせになっている。最近、階層双極子アレー(SDA)モデル[1,4]を用いると、従来から関連が示唆されていた双極子モーメント、分子分極率、分子コンフォメーションのすべてが統一的に絡み合っ、物性理解に使えることが実験と計算の蓄積で明らかになり、PFAS の理解に重要な指針を与えて産官学を超えた学際研究が始まっている。

1. T. Hasegawa, *Chem. Rec.* **2017**, 17, 903.
2. S. F. Nakayama, M. Yoshikane, Y. Onoda, Y. Nishihama, M. Iwai-Shimada, M. Takagi, Y. Kobayashi, T. Isobe, *Trends Anal. Chem.* **2019**, 121, 115410.
3. T. Hasegawa, S. Nakayama, *ChemRxiv* **2023**.
4. T. Hasegawa, T. Shimoaka, N. Shioya, K. Morita, M. Sonoyama, T. Takagi, T. Kanamori, *ChemPlusChem* **2014**, 79, 1421.