

有機化学者が取り組むケモインフォマティクスによる フロー反応条件最適化

(静岡大・グリーン科学技術研究所) ○間瀬 暢之

Rapid optimization of flow reaction conditions by organic chemists using chemoinformatics
(Research Institute of Green Science and Technology, Shizuoka University)

○Nobuyuki MASE

Chemoinformatics has recently been widely introduced in the area of organic chemistry much faster beyond their prediction. Chemical synthesis, one of the fundamentals of manufacturing, however, should pay attention to the following points as the key factors; i.e., final products, methods of synthetic procedures, the scale of the end product, length of synthetic time, and saving of labor-intensive approach. We will present a scale-up-oriented rapid conditional optimization of continuous and discrete variables in flow reactions.

Keywords : Green manufacturing; Flow chemistry; Chemoinformatics; Design of Experiments; Reaction condition optimization

我々の予想を超えるスピードで有機化学の世界にケモインフォマティクスの導入が進んでいる。ものづくりの基盤となる合成化学を実施する上で、何を作る？どうやって作る（g スケール）？合成できた？どうやって作る（kg～ton スケール）？の各過程の迅速化が成功の鍵であり、人海戦術的アプローチからの脱却が望まれている。特に、どうやって作る（kg～ton スケール）の段階になると、実験化学者や技術者にしか理解しづらいノウハウや、装置に依存した制限などが生じる。

今回、スケールアップを指向した連続型と離散型変数のフロー反応条件迅速最適化について、有機化学者として取り組んだことを紹介する。できる限り、専門性の障壁を低くして、多くの方が利用できるようにするために、① シンプル、② 連続評価、③ 少試行回数、④ 自動化に着目し、フロー合成手法、グラジエント手法、インライン分析、実験計画法、機械学習による最適反応条件の迅速特定を検討した。その結果、2~4 変数 3 水準の連続変数、ならびに 278 種類の溶媒に対する離散型変数の最適化を達成した。装置の自動化をさらに推進することにより本手法の一般化が期待される。

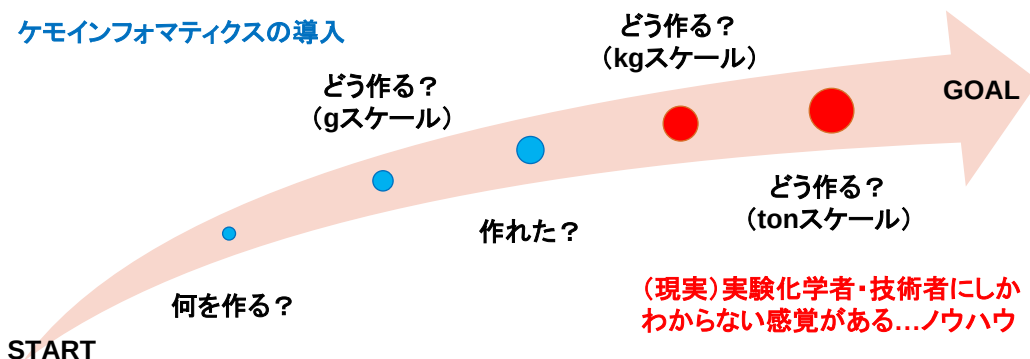


図. ケモインフォマティクスが牽引する新しい化学研究の進め方