

グリーンフロー化学：4級アンモニウム化合物の化学量論的マイクロ波フロー合成

(静岡大工) ○上田 潤・佐藤 浩平・鳴海 哲夫・武田 和宏・間瀬 暢之

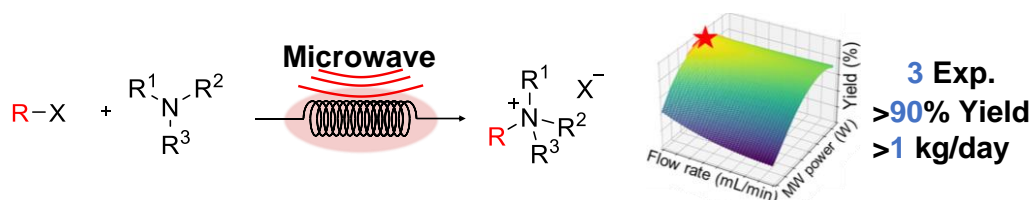
Green Flow Chemistry: Stoichiometric Synthesis of Quaternary Ammonium Compounds Based on Microwave Flow (*Faculty of Engineering, Shizuoka University*)

○Jun Ueda, Kohei Sato, Tetsuo Narumi, Kazuhiro Takeda, Mase Nobuyuki

Quaternary ammonium compounds (QACs) are broadly used valuable compounds as surfactants and ionic liquids. Although the conventional access to QACs depends on reaction conditions with high temperature ($\sim 150^{\circ}\text{C}$) and long reaction time (\sim several days), the microwave-mediated reaction has been reported to efficiently accelerate the reaction within a few minutes. However, the batch-type microwave heating method cannot satisfy the requirement of continuous and scale-up production. We have studied a flow-type microwave system applicable to scale-up and continuous production, to overcome the problematic batch-type microwave heating. In this study, the microwave-assisted flow method was utilized for the synthesis of QACs by employing the developed optimization method for the flow reaction conditions leading to short-time, scale-up, and continuous synthesis of QACs. *N*-methylimidazole, pyridine, and 1-iodobutane were reacted stoichiometrically. A machine learning algorithm was used to create a response surface based on the data from three experiments, and a maximum yield of 99% and productivity of 3.6 kg/day were obtained.

Keywords : *Flow Chemistry; Quaternary Ammonium Compounds (QACs); Reaction Condition Optimization; Green Manufacturing; Microwave*

4級アンモニウム化合物 (QACs) は、界面活性剤やイオン性液体などの様々な用途で利用される有用化合物群である。QACs 合成法の主流はバッチ方式による高温 ($\sim 200^{\circ}\text{C}$) かつ長時間 (\sim 数日間) の反応であったが、マイクロ波加熱を利用することで、短時間で合成できることが報告されてきた¹⁾。所属研究室では、バッチ型マイクロ波加熱で問題となるスケールアップや連続生産への適用を可能とするフロー型マイクロ波装置の開発と利活用を進めてきた²⁾。本研究では、QACs 合成にマイクロ波フロー法を適用し、これまでに開発してきたフロー反応条件最適化を組み合わせることで、QACs の短時間・スケールアップ・連続合成に取り組んだ。その結果、*N*-メチルイミダゾールとピリジンの各含窒素化合物と 1-ヨードブタンとの化学量論反応において、わずか3実験のデータを用いて、機械学習アルゴリズムによる応答曲面を作成することで予測最適反応条件を特定し、実際に最大収率 99%、生産性 3.6 kg/day (計算値) を達成した。



1) M. Deetlefs, K. R. Seddon, *Green Chem.* **2003**, 5, 181.

2) N. mase, N. *et al.*, *Chem. Rec.* **2019**, 19, 77.