

## マイクロフロー電解リアクターを用いた carbon-Ferrier 転位反応と機械学習による最適条件探索

(岡山大院自然) ○刀脇 樂・藤井麻由・佐藤英祐・菅 誠治

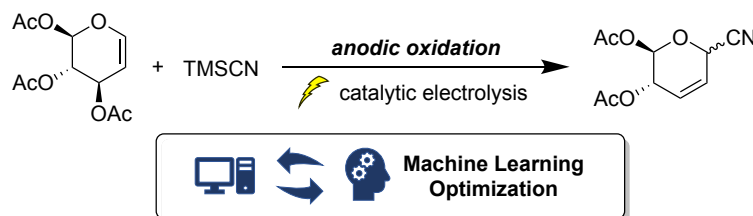
Carbon-Ferrier Rearrangement Using Electrochemical Microflow Reactor and Machine Learning Optimization (*Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama University*) ○Gaku Tachiwaki, Mayu Fujii, Eisuke Sato, Seiji Suga

C-Glycosides which are generally possess resistance against hydrolysis, exhibit various bioactivities, are paid attention as potent pharmaceuticals<sup>1</sup>. One of the well-known methods for synthesizing C-glycosides is carbon-Ferrier rearrangement, which normally requires acid or metal catalysts. Herein, we developed a new process of the rearrangement that promoted by catalytic electrolysis. The electrolysis of the mixture of glycal and TMSCN with a catalytic amount of electricity (0.1 F/mol) gave C-glycoside in a good yield. When this rearrangement was applied to an electrochemical microflow reactor, a balance between current values and flow rates would be important. Thus, Gaussian process regression (GPR), which is one of the machine learning methods, was used to explore reaction conditions. GPR could construct two models which estimate yields and productivities.

**Keywords :** Carbon-Ferrier Rearrangement; Electroorganic Synthesis; Microflow Synthesis; Machine Learning

C-グリコシド結合を持つ化合物には、生物活性を有する物が多く、また加水分解を受けにくいという特徴から、医薬品などへの応用も広く行われている<sup>1</sup>。このようなC-グリコシドを合成する手段の一つとして carbon-Ferrier 転位反応が挙げられる。この反応は酸や金属触媒の添加で進行することが知られている。本研究では、触媒量の電気を駆動力とした新規反応プロセスの開発を目的として研究を行った。

グリカルと TMSCN を溶解させたアセトニトリル溶液に 0.1 F/mol 分の通電を行ったところ、C-グリコシドが収率 91%で得られた。この反応をマイクロフロー電解系で行う場合には、機械学習の一つであるガウス過程回帰(GPR)を利用した電流値と流速の効率的な反応条件の探索を行った。この方法により、収率と生産性を予測する2つの異なるモデルを構築し、最適条件を合理的に見出すことができた。



1) Zhu, F.; Rodriguez, J.; Yang, T.; Kevlishvili, I.; Miller, E.; Yi, D.; O'Neil, S.; Rourke, J. M.; Liu, P.; Walczak, A. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 17908–17922.