

マイクロフロー電解リアクターによるシアノメチル化反応の機械学習支援型条件探索

(岡山大工¹・岡山大院自然²) ○谷 明音¹・國本 俊平²・佐藤 英祐²・菅 誠治²
Machine Learning-Assisted Reaction Condition Exploration of Cyanomethylation Using Electrochemical Microflow Reactor (¹ School of Engineering, Okayama University, ² Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama University) ○Akine Tani, ¹ Shunpei Kunitomo, ² Eisuke Sato, ² Seiji Suga²

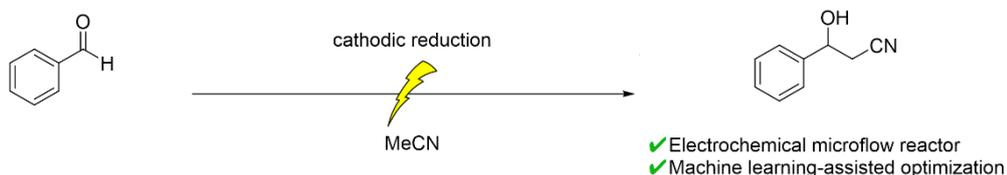
Cyanomethylation of carbonyl compounds is one of the powerful methods to introduce cyano group, which could be converted various functional groups. Herein, we report the efficient cyanomethylation of carbonyl compounds by using electrochemical microflow reactor. In addition, we also report the machine learning-assisted reaction condition exploration.

We have already achieved the machine learning-assisted reaction condition exploration of cyanosylation using current and flow rate as input parameters. In this work, we adopt the chemical properties of the starting materials as a new parameter, and the constructed models could suggest the reaction conditions against different starting materials.

Keywords : Electro Chemical Organic Synthesis, Electrochemical Microflow Synthesis, Cyanomethylation, Machine Learning

シアノ基はさまざまな官能基に変換することが可能であり、有機合成において重要な官能基である。本研究では、より環境負荷の少ない有機電解合成とフロー合成を組み合わせたマイクロフロー電解リアクターによるカルボニル化合物の高効率なシアノメチル化反応を開発した。

また、近年有機合成化学の条件探索に機械学習を活用することに注目が集まっている。電解フロー合成では多数のパラメータが存在することから、機械学習を活用することで効率的な条件探索が行えることが期待される。これまでに、我々は実験時に設定される流速や電流値を入力変数とし、予測収率と予測生産性を出力とした反応性予測モデルの構築を報告した¹⁾。これに対して、出発物質の化合物特有の情報を入力変数として用いた例は限られている。本研究では実験時に設定する反応条件に加え、出発物質がもつ化合物固有の情報を入力変数として用いた反応性予測モデルの構築を行い、化合物情報を組み込んだ反応性の予測に取り組んだので報告する。



- 1) Sato, E.; Fujii, M.; Tanaka, H.; Mitsudo, K.; Kondo, M.; Takizawa, S.; Sasai, H.; Washio, T.; Ishikawa, K.; Suga, S. *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 16035–16044.