

グリーンものづくり：擬定常法によるフロー反応条件変数最適化手法の開発

(静岡大院総) ○宮下 直己・Arun Kumar MANNA・小林 隆士・佐藤 浩平・鳴海 哲夫・間瀬 暢之

Green Manufacturing: Optimizing Flow Reaction Condition Variables by Pseudosteady-State Technique (*Graduate School of Integrated Science and Technology, Shizuoka University*)

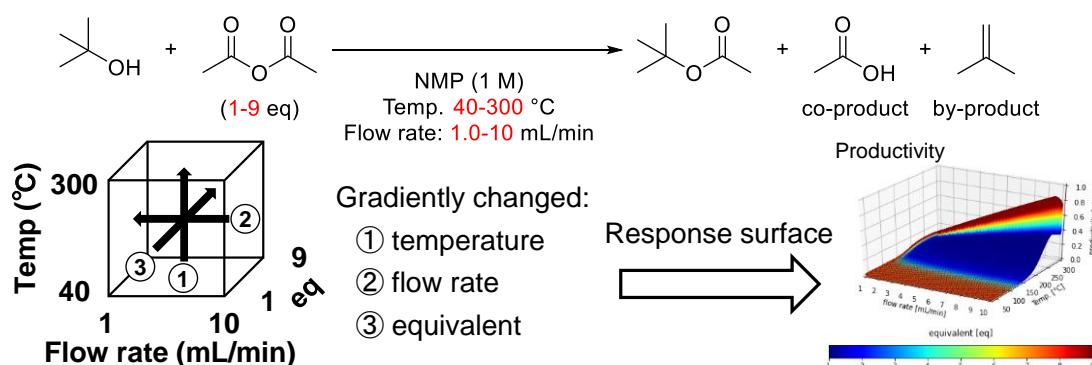
○Naoki Miyashita, Arun Kumar Manna, Ryuji Kobayashi, Kohei Sato, Tetsuo Narumi, Nobuyuki Mase

The flow method allows for simple and accurate control of reaction parameters, enabling the reaction conditions to be easily manipulated. We previously reported a gradient method for optimizing two variables in two experiments in which the flow rate and reaction temperature were gradually varied. We have extended our method to optimize three variables. This method is helpful in optimizing sequential reactions for the synthesis of fairy compounds since the distribution of yield and productivity within the reaction condition space can be determined.

Keywords : Green Manufacturing; Green Manufacturing; Reaction Condition Optimization; Gradient Method; Fairy Chemicals

一般的にフロー法は、反応パラメータの正確な制御や反応条件の変更が容易である。これまで、反応速度論解析におけるフロー法の擬定常状態による実験数の削減に着目し¹⁾、*tert*-BuOH と無水酢酸 (1.05 eq) のアセチル化において流量と温度を同時に経時変化させ、2 実験で 2 変数を迅速最適化可能なグラジエント法を開発してきた²⁾。

本研究では、流量と温度に加えて試薬当量 (無水酢酸当量 : 1-9 eq) を含めた 3 変数最適化へと本手法を拡張した。種々のグラジエントデータから応答曲面を作成し、予測された最適条件と完全要因計画法、中央複合計画法、ボックスベンケン計画法に基づいたサンプリング手法によって予測された最適条件を比較した。また、本手法を植物の成長を制御するフェアリー化合物 (FCs) 合成に適用した。本手法は、反応条件内の収率・収量分布が把握できるため、逐次反応最適化に有用である。



1) Jensen, K. F. *et al. React. Chem. Eng.* **2018**, 3, 94., 2) 第 101 回日本化学会春季大会 (A19-4am-10)