多次元データ中の疎な領域の解析によるデヒドロアミノエステルへの光ラジカル反応の条件最適化

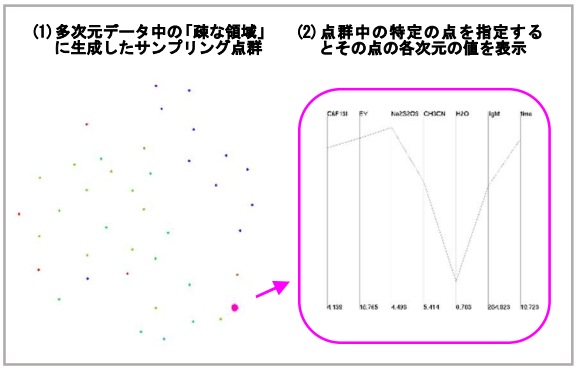
（お茶女大院理）○田上 湖都・伊藤 貴之・矢島 知子

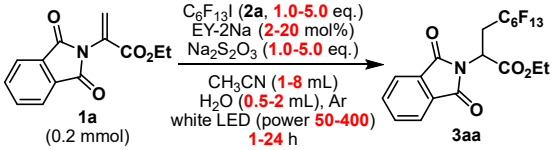
Reaction optimization for photo-induced radical reaction of dehydroamino esters through analysis of sparse regions in multidimensional data (*Department of Chemistry, Ochanomizu University*) ○Koto Tagami, Takayuki Itoh, Tomoko Yajima

In recent years, reaction optimizations that combine information science with organic chemistry has been attracting attention. One efficient way to reduce the number of experiments is to visualize untried experimental settings among multidimensional parameters and select reaction conditions that are likely to produce good results based on the experimenter's own experience. In this presentation, we propose a method to visualize "sparse regions" by placing a large number of sampling points in low-density regions in multidimensional space. We applied this method to the optimization of reaction conditions for the photo-induced radical hydro-perfluoroalkylation reaction of dehydroamino esters.

Keywords : Reaction Optimization; Multidimensional Data Analysis; Visualization; Dehydroamino Esters; Photo-Induced Radical Reaction

反応条件探索での実験回数削減のために、有機化学に情報科学を組み合わせることが注目されている[1]。特に、複数変数の同時探索において未実施の実験条件を可視化し、実験者が自らの経験則と照らし合わせて良好な結果が得られそうな設定を選択することができれば、効率の良い反応条件探索が可能となる。我々は、多次元空間における低密度領域に多数のサンプリング点を配置することで「疎な領域」を可視化する手法を開発した[2]。今回、この手法をデヒドロアミノエステルへの光ラジカルヒドロペルフルオロアルキル化反応の条件最適化に適用した。





α-エチルフタルイミドアクリレート (**1a**、0.2 mmol) に対してヨウ化ペルフルオロヘキシルを **1.0–5.0** 当量、エオシン Y-2Na を **2–20** mol%、チオ硫酸ナトリウムを **1.0–5.0** 当量、アセトニトリルを **1–8** mL、水を **0.5–2** mL、白色 LED の照射強度を **50–400**、反応時間を **1–24** 時間に設定し、これら 7 つのパラメーターの同時探索と最適化を試みた。

1) K. Tagami, M. Kondo, S. Takizawa, N. Mase, T. Yajima, *J. Fluorine Chem*, **2024**, 276, 110294.
2) 伊藤貴之、田上湖都、矢島知子、李国政、第 32 回インタラクティブシステムとソフトウェアに関するワークショップ(WISS)、3-A12、**2024**.

© The Chemical Society of Japan