

令和 2 年 6 月 23 日現在

機関番号：32686

研究種目：基盤研究(B) (特設分野研究)

研究期間：2017～2019

課題番号：17KT0011

研究課題名(和文)理論計算が先導する遷移状態制御に基づく多様性指向型触媒・反応開発

研究課題名(英文)Development of computationally designed diversity-oriented catalysis based on transition-state control

研究代表者

山中 正浩 (YAMANAKA, Masahiro)

立教大学・理学部・教授

研究者番号：60343167

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、理論計算を先導的に活用した高効率かつ高選択的な分子触媒の開発と、その合理的設計手法の確立を目指して、新規分子触媒の実験検討と相互に連携しながら実施した。複数の相互作用点を有する有機分子触媒や複核金属触媒など多様な遷移状態が潜在する不斉触媒反応を中心に、GRRM法・AFIR法を用いた遷移状態の網羅探索手法の開拓からDFT計算を用いた立体制御機構の解明までを検討した。本研究を通して、反応系に潜在する多くの遷移状態の網羅探索手法に一定の指針を確立し、異種相互作用の協働作用の観点から触媒/基質の相互作用ネットワークを介した遷移状態の安定化による立体制御機構を解明することができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年の計算機や計算手法の進展により、理論計算に基づいて所望の分子を合理設計できる時代が到来している。現状では実験結果の説明のために散発的に実施されるにとどまっており、理論計算の先導的な活用は、高選択的反応・触媒開発の新しい方法論として挑戦的な課題であった。この実現のためには、多様な遷移状態を効率的に網羅探索し、反応制御の鍵となる遷移状態を確定する必要があるが、本研究によって、現実的な計算時間で遷移状態を網羅探索する手法に一定の指針を確立した点は、異種相互作用の協働による遷移状態制御の解明とともに学術的に意義深い。これらの成果は、現代社会を支える基幹技術としての分子触媒開発に貢献したといえる。

研究成果の概要(英文)：Development of highly efficient and selective molecular catalysts with leading theoretical calculations and the establishment of a rational design method for these catalysts were carried out in cooperation with experimental studies. Focusing on asymmetric catalysis of organocatalysts and multinuclear catalysts with multiple interaction points in which various types of transition states are latently existed, we have developed an exhaustive search method for transition states using GRRM and AFIR methods, as well as DFT calculations to elucidate the stereocontrol mechanism. In this research, we have established a certain guideline for the exhaustive search of many potential transition states in the reaction system and clarified high stereoselectivities achieved by stabilizing the transition states through the catalyst/substrate attractive interaction network in which different types of interactions are harmonized on the single reaction sphere.

研究分野：計算化学・有機合成化学

キーワード：遷移状態制御 分子触媒設計 DFT計算 不斉合成

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

分子触媒の開発研究は、医薬品、農薬から機能性材料などの有用物質の効率的合成手法を提供する現代社会を支える基幹技術であり、日本が先駆的に牽引する研究分野の1つである。現在も、その分子設計はますます精練されてきており、国内外で活発に研究が行われている。近年の計算機や計算手法の進展により、分子触媒開発の分野でも計算と実験のインタープレイが一つの潮流になっているが、その要因の1つとして、対象とする遷移状態 (Transition State: TS) モデルに実在系そのものを用いても、TS の量子化学計算が現実的な精度と時間で実施可能となったことが挙げられる。さらに計算手法の進展として、大野、諸熊、前田らが開発した GRRM (Global Reaction Route Mapping) 法・AFIR (Artificial Force Induced Reaction) 法によって、注目する反応系に潜在する TS 群を網羅探索することが、原理的に可能となっている。このように潜在的には、理論計算に基づいて新たな分子触媒を合理設計できる時代が到来しているが、現状では実験結果の説明のために散発的に実施されるにとどまっており、理論計算の先導的な活用は、高効率・高選択的反応・触媒開発を実現する新しい方法論として挑戦的な課題であった。

2. 研究の目的

本研究では、実験結果の説明のために散発的に実施されるにとどまっていた理論計算を先導的に活用し、新規な高選択的反応・分子触媒の開発へと展開する新しい方法論の確立を目的としている。特に、触媒/基質の相互作用ネットワークの構築によって TS を安定化して高選択性を発現する分子触媒に着目し、現実的な計算時間で化学的に意味のある TS を網羅探索する手法を確立することで、理論計算を先導的に活用した合理的触媒設計と開発を目指して検討を行った。

3. 研究の方法

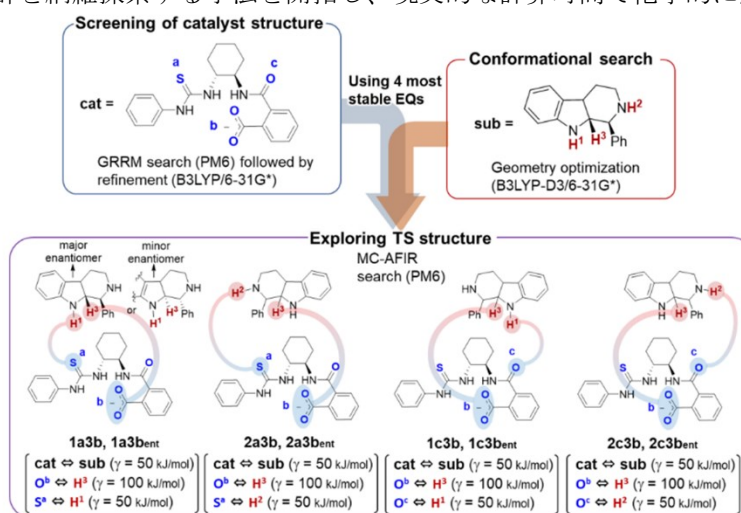
触媒/基質の相互作用ネットワークの構築による TS の安定化を指向した分子触媒は、複数の相互作用点を有する有機分子触媒や複核金属触媒であることが多い。その場合、多様な TS が潜在することになるため反応制御の鍵となる TS を確定することに多くの時間を要し、反応制御の要因を解明することや理論計算を先導的に活用して触媒設計に展開することが困難であった。そこで本研究では、(1) 現実的な計算時間で化学的に意味のある網羅探索を可能にする方法論の確立、(2) 触媒/基質の相互作用ネットワークを介した TS の安定化による高選択性発現の解明、(3) 理論計算で得られた知見に基づく高機能分子触媒の新規開発、を通して理論計算を先導的に活用した合理的な分子触媒の開発を行った。

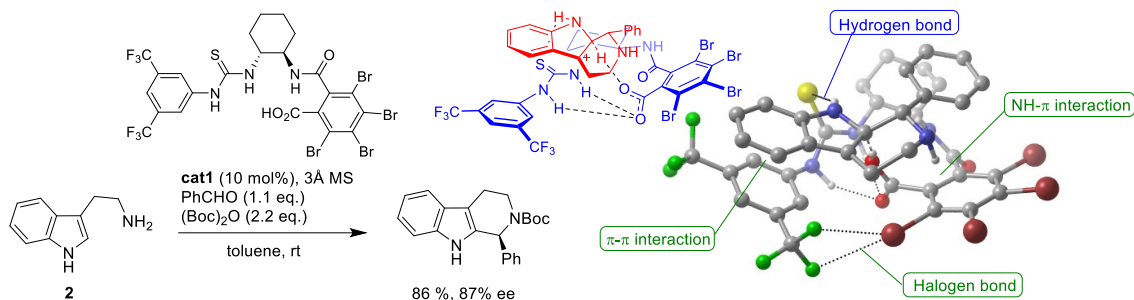
4. 研究成果

上記 (1) ~ (3) の枠組みにて、*P*-スピロイミノホスホラン触媒によるアズラクトンと *N*-アシルピロールの不斉 1,6-付加反応、カルボン酸-チオウレア触媒による不斉 Pictet-Spengler 反応、グアニジン-ビスウレア触媒による 1,4-ナフトキノ誘導体に対する不斉エポキシ化反応、ボロンエノラートによる求電子的不斉シアノ化反応、CF₃ 基を有するニトロスチレンとインドールの不斉 Friedel-Crafts 反応、三核亜鉛触媒による不斉ハロラクトン化反応、二核亜鉛触媒による触媒的不斉ヨードエステル化反応など、数多くの不斉触媒反応について検討を行った。

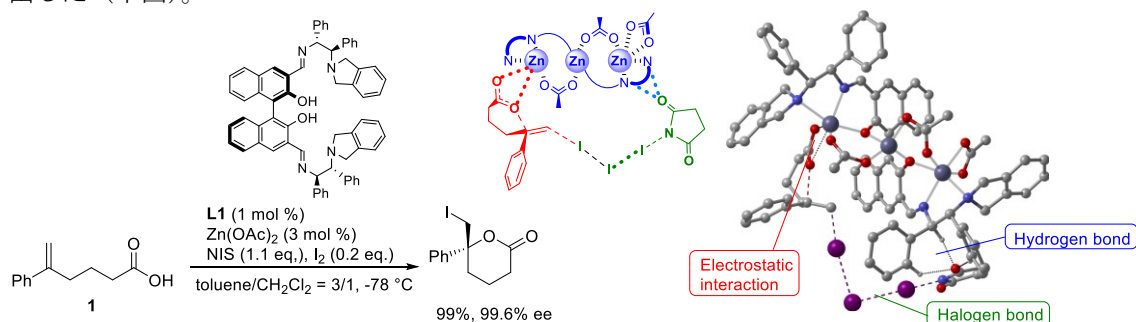
特に (1)、(2) に関連して、カルボン酸-チオウレア触媒による不斉 Pictet-Spengler 反応の検討について詳細を記す。本反応系では、触媒、反応基質ともに複数の相互作用点を有するため、数多くの TS が存在することが予想された。そこで、鍵となる TS を特定するため、GRRM 法・AFIR 法を用いて潜在する TS 群を網羅探索する手法を開拓し、現実的な計算時間で化学的に意

味のある TS を特定した (右図)。さらに高精度 DFT 計算によって、立体制御機構を解明した。カルボン酸-チオウレア触媒 (cat1) は分子内水素結合とハロゲン結合によってボウル型構造を形成しており、六員環形成後の脱プロトン化では、触媒/基質間に水素結合、 π/π -NH/ π 相互作用が存在することを見出した。これら複数の異種相互作用が協働することで遷移状態の安定化をもたらし、高立体選択性を達成することが分かった (下図)。

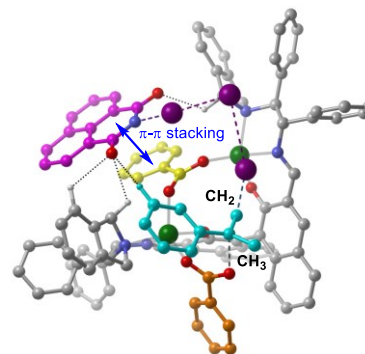




また(2)、(3)に関連して、三核亜鉛触媒による不斉ヨードラクトン化反応について詳細を記す。本反応系では、ビスアミノイミノピナフトール配位子(**L1**)とZn(OAc)₂より調製されるキラル亜鉛三核錯体(**L1-Zn₃**)が、5-フェニル-5-ヘキセン酸(**1**)と*N*-ヨードスクシンイミド(NIS)の不斉ヨードラクトン化反応に対して、高立体選択性を達成している。まず、**L1-Zn₃**における特異な不斉反応場に対して、基質の配向や触媒への配位様式など精査し、立体制御に関わるTSを特定した。さらに、そのTS構造に基づいて立体制御機構を解析したところ、**L1-Zn₃**は、**1**のカルボキシラートアニオンを亜鉛中心とのルイス酸/塩基相互作用によって、NISを配位子部位との水素結合によって補足することで、**1**とNISの接近方向を立体的に制御し、優れた立体選択性を発現していることを見出した。また、本反応では触媒量のI₂の添加が反応の進行に必須であったが、I₂が**1**のオレフィン部位とNISの間に挿入し、L字型のハロゲン結合を形成することでTSを安定化させ、反応促進していることが分かった。即ち、本反応では、ルイス酸/塩基相互作用、水素結合、ハロゲン結合という異なる相互作用が協働することで反応制御していることを見出した(下図)。



一方、異種相互作用の協働によるTSの安定化に着目し、分子内反応であるヨードラクトン化反応から分子間反応であるヨードエステル化反応の開発へと展開した。即ち、類似のビスアミノイミノピナフトール配位子と亜鉛カルボン酸塩より、新たに調製された二核亜鉛触媒に対して、上記で特定された安定なTS構造を参考に、亜鉛カルボン酸塩、ヨウ素化試薬などを精査することで、不斉ヨードエステル化反応の立体選択性を向上させることに成功した。特に、ルイス酸/塩基相互作用、水素結合、ハロゲン結合に加えて、 π / π 相互作用を強化するために平面性の高いナフタレン骨格を有するヨウ素化剤を新規に開発することで、高エナンチオ選択性を達成することができた点は、本研究の目指す理論計算を先導的に活用して高選択的反応を開発した例として特筆に値する(右図)。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 18件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Risa Tamura, R.; Kitamura, E.; Tsutsumi, R.; Yamanaka, M.; Akiyama, T.; Mori, M.	4. 巻 21
2. 論文標題 Diastereoselective Synthesis of CF ₃ Substituted Spiroisochromans by [1,5]-Hydride Shift/Cyclization/Intramolecular Friedel - Crafts Reaction Sequence	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 2383 ~ 2387
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.9b00668	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 agata, A.; Akagi, Y.; Masoud, S. S.; Yamanaka, M.; Kittaka, A.; Uesugi, M.; Odagi, M.; Nagasawa, K.	4. 巻 84
2. 論文標題 Stereoselective Synthesis of Four Calcitriol Lactone Diastereomers at C23 and C25	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Org. Chem.	6. 最初と最後の頁 7630 ~ 7641
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.9b00403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kobayashi, N.; Kaneko, K.; Amemiya, S.; Noguchi, K.; Yamanaka, M.; Saito, A.	4. 巻 55
2. 論文標題 Alkyne aza-Prins cyclization of N-(hexa-3,5-dienyl)tosylamides with aldehydes using triflic acid and a binuclear aluminum complex	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 8619 ~ 8622
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cc03700d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ibanez, I.; Kaneko, M.; Kamei, Y.; Tsutsumi, R.; Yamanaka, M.; Akiyama, T.	4. 巻 9
2. 論文標題 Enantioselective Friedel-Crafts Alkylation Reaction of Indoles with -Trifluoromethylated - Nitrostyrenes Catalyzed by Chiral BINOL Metal Phosphate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 6903 ~ 6909
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.9b01811	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamanaka, M.; Mochizuki, A.; Nakamura, T.; Maruoka, K.; Shirakawa, S.	4. 巻 101
2. 論文標題 Trialkylsulfonium and tetraalkylammonium salts as hydrogen-bonding catalysts in an aza-Diels-Alder reaction: experimental and computational studies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Heterocycles	6. 最初と最後の頁 580 ~ 592
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3987/COM-19-S(F)48	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Saito, K.; Miyashita, H.; Ito, Y.; Yamanaka, M.; Akiyama, T.	4. 巻 22
2. 論文標題 Oxidative Kinetic Resolution of Acyclic Amines Based on Equilibrium Control	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 3128 ~ 3134
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.0c00887	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakamura, T.; Okuno, K.; Kaneko, K.; Yamanaka, M.; Shirakawa, S.	4. 巻 18
2. 論文標題 Chiral bifunctional sulfide-catalyzed asymmetric bromoaminocyclizations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Org. Biomol. Chem.	6. 最初と最後の頁 3367 ~ 3373
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D00B00459F	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yang, J.; Mori, Y.; Yamanaka, M.; Yoshikai, N.	4. 巻 -
2. 論文標題 Cobalt-Catalyzed Intramolecular Hydroacylation Involving Cyclopropane Cleavage	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chem. Eur. J.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202001223	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Arai, T.; Horigane, K.; Suzuki, T.; Itoh, R.; Yamanaka, M.	4. 巻 -
2. 論文標題 Catalytic Asymmetric Iodoesterification of Simple Alkenes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202003886	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kawaguchi Masaki, Nakano Katsuhiko, Hosoya Keisuke, Orihara Tatsuya, Yamanaka Masahiro, Odagi Minami, Nagasawa Kazuo	4. 巻 20
2. 論文標題 Asymmetric Epoxidation of 1,4-Naphthoquinones Catalyzed by Guanidine Urea Bifunctional Organocatalyst	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 2811 ~ 2815
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.8b00641	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mori Keiji, Isogai Ryo, Kamei Yuto, Yamanaka Masahiro, Akiyama Takahiko	4. 巻 140
2. 論文標題 Chiral Magnesium Bisphosphate-Catalyzed Asymmetric Double C(sp ³) H Bond Functionalization Based on Sequential Hydride Shift/Cyclization Process	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Am. Chem. Soc.	6. 最初と最後の頁 6203 ~ 6207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b02761	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hisano Naoya, Kamei Yuto, Kansaku Yaoki, Yamanaka Masahiro, Mori Keiji	4. 巻 20
2. 論文標題 Construction of 1,3-Dithio-Substituted Tetralins by [1,5]-Alkylthio Group Transfer Mediated Skeletal Rearrangement	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 4223 ~ 4226
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.8b01610	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagata Takaya, Tamaki Atsuko, Kiyokawa Kensuke, Tsutsumi Ryosuke, Yamanaka Masahiro, Minakata Satoshi	4. 巻 24
2. 論文標題 Enantioselective Electrophilic Cyanation of Boron Enolates: Scope and Mechanistic Studies	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Eur. J.	6. 最初と最後の頁 17027 ~ 17032
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201804455	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nishiyori Ryuichi, Tsuchihashi Ayano, Mochizuki Ayaka, Kaneko Kazuma, Yamanaka Masahiro, Shirakawa Seiji	4. 巻 24
2. 論文標題 Design of Chiral Bifunctional Dialkyl Sulfide Catalysts for Regio-, Diastereo-, and Enantioselective Bromolactonization	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Eur. J.	6. 最初と最後の頁 16747 ~ 16752
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201803703	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Odagi Minami, Araki Hiroshi, Min Chang, Yamamoto Eri, Emge Thomas J., Yamanaka Masahiro, Seidel Daniel	4. 巻 2019
2. 論文標題 Insights into the Structure and Function of a Chiral Conjugate-Base-Stabilized Bronsted Acid Catalyst	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Eur. J. Org. Chem.	6. 最初と最後の頁 486 ~ 492
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejoc.201801024	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Arai Takayoshi, Horigane Kodai, Watanabe Ohji, Kakino Junki, Sugiyama Noriyuki, Makino Hiroki, Kamei Yuto, Yabe Shinnosuke, Yamanaka Masahiro	4. 巻 12
2. 論文標題 Association of Halogen Bonding and Hydrogen Bonding in Metal Acetate-Catalyzed Asymmetric Halolactonization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 iScience	6. 最初と最後の頁 280 ~ 292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.isci.2019.01.029	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamanaka, M.; Sakata, K.; Yoshioka, K.; Uraguchi, D.; Ooi, T.	4. 巻 82
2. 論文標題 Origin of High Regio-, Diastereo-, and Enantioselectivities in 1,6-Addition of Azlactones to Dienyl N-Acylpyrroles: A Computational Study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Org. Chem.	6. 最初と最後の頁 541 ~ 548
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.6b02572	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iwata, M.; Kamijoh, Y.; Yamamoto, E.; Yamanaka, M.; Nagasawa, K.	4. 巻 19
2. 論文標題 Total Synthesis of Pyrrole-Imidazole Alkaloid (+)-Cylindradine B	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 420 ~ 423
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.6b03722	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計16件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Yamanaka, M.
2. 発表標題 The Interplay between Experiment and Computation: Rational Design of Chiral Space in Asymmetric Catalysis
3. 学会等名 2nd ICRéDD International Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堤亮祐、長谷部智紀、楠部瑞樹、山中正浩
2. 発表標題 銅(II)ピスマジン触媒によるインドールと、 α -不飽和 ケトエステルの不斉 Friedel-Crafts 反応
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 岡田めぐみ、金子知真、山中正浩、白川誠司
2. 発表標題 キラル二官能性スルフィド触媒によるプロモラクトン化反応を利用した 3,3-二置換フタリドの不斉合成
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 栗田朋実、堤亮祐、山中正浩
2. 発表標題 金属アミジン触媒を用いた α -ケトエステルの不斉ピニロガス向山アルドール反応の開発
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高德知朗、堤亮祐、山中正浩
2. 発表標題 ケトエステル・亜リン酸ジエステル・アルデヒドの三成分連結型不斉付加反応の開発
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 木村朱里、堤亮祐、山中正浩
2. 発表標題 プロリノール骨格を含有する新規2,2'-ピピリジン型不斉配位子の開発
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 長谷部智紀、堤亮祐、山中正浩
2. 発表標題 金属ビスアミジン触媒による α,β -不飽和 γ -ケトエステルとインドールの不斉Friedel-Crafts反応
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堀金航大、亀井優斗、山中正浩、荒井孝義
2. 発表標題 触媒的不斉ヨードラクトン化反応における亜鉛多核錯体の触媒機能と分子間不斉ヨードエステル化反応への応用
3. 学会等名 第76回有機合成化学協会関東支部シンポジウム [新潟(長岡)シンポジウム]
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中野克洋、権藤匠洋、百武龍一、川端猛夫、山中正浩
2. 発表標題 α,β -不飽和ケトンを用いた位置選択的 aza-Morita-Baylis-Hillman 反応に関する理論的解析
3. 学会等名 第10回有機触媒シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川口昌輝、中野克洋、小田木陽、山中正浩、長澤和夫
2. 発表標題 グアニジン-ウレア触媒を用いた一置換型 1,4-ナフトキノン誘導体に対する不斉エポキシ化反応
3. 学会等名 第10回有機触媒シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yamanaka, M.
2. 発表標題 The interplay between experiment and computation: Rational design of bis-2-aminothiazoline as a new chiral scaffold
3. 学会等名 The 7th Sino-Japanese Symposium on Organic Chemistry for Young Scientists (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yamanaka, M.
2. 発表標題 The Interplay between Experiment and Computation: Rational Design of Chiral Space in Asymmetric Catalysis
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森悠斗、吉戒直彦、山中正浩
2. 発表標題 Co触媒によるシクロプロパンの開裂を含む分子内ヒドロアシル化 反応の理論的検討
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中野克洋、川口昌輝、細谷圭介、小田木陽、長澤和夫、山中正浩
2. 発表標題 グアニジン チオウレア触媒を用いたエントロピー依存的不斉アザ フリーデル クラフツ反応における立体制御機構の理論的解析
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中野克洋、川口昌輝、細谷圭介、小田木陽、山中正浩、長澤和夫
2. 発表標題 グアニジン チオウレア触媒を用いたエントロピー依存的不斉アザ フリーデル クラフツ反応の立体制御機構に対する実験的検証
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 矢崎恭史、堤亮祐、山中正浩
2. 発表標題 アミジニウム-カルボキシレート塩橋に基づく新規超分子不斉触媒の開発
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考