

令和 4 年 4 月 25 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18H02093

研究課題名(和文) 赤外円二色性の理論計算とラベル化による中分子・極性分子の新たな構造解析法の開発

研究課題名(英文) Development of structural analysis methods for middle-sized and polar molecules by VCD spectroscopy

研究代表者

谷口 透 (Taniguchi, Tohru)

北海道大学・先端生命科学研究院・講師

研究者番号：00587123

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：低分子・高分子に次ぐ生体機能分子として、中分子(分子量500～2000程度)が注目されている。有機合成手法や生合成遺伝子操作技術の進歩に伴って、新規構造を有する中分子の大量取得も可能になりつつあり、医薬・農薬を指向した中分子研究は今後さらに盛んになると予想される。しかし、新規分子の取得に伴う構造決定は依然として、研究のボトルネックとなりうる段階である。そこで本研究ではVCD(赤外円二色性)分光法を用いて、中分子にも適用可能な簡便かつ信頼性の高い構造解析法の開発に成功した。また本研究の過程において、片方のみの軸不斉を有するカルボジイミドという特殊な分子の創製にも成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究ではこれまで構造分析が困難だった中分子や、脂質のような柔軟分子、糖のような高極性分子などを簡便に構造決定する新たな方法論を提供した。本研究成果は、中分子を始めとする各種分子の構造決定というボトルネックを解消し、それらの研究が出口とする医薬・農薬創製に資すると期待される。さらに、1932年に提唱されてから86年間入手されてこなかった「片方のみの軸不斉を有するカルボジイミド」の合成に成功した。カルボジイミドは工業的に世界で最も汎用される分子であり、その基本的な性質を解明は今後の化学工業への波及効果が期待される。

研究成果の概要(英文)：Middle-sized natural products (M.W. 500 to 2000) such as oligosaccharides, cyclic peptides, macrolides, and other metabolites are promising drug candidates beyond Lipinski's rule of 5. Because middle-sized molecules target, for example, protein-protein interactions more efficiently than small molecules do, a large number of such drugs have been approved and under development in recent years. For the exploration of such natural products and their synthetic derivatives, their structural elucidation is one of the major bottlenecks as they possess multiple chiral centers. In this work, we developed new methods for structural analysis of middle-sized molecules by using vibrational circular dichroism (VCD) spectroscopy. Furthermore, this work achieved the first preparation of carbodiimides with one-handed axial chirality.

研究分野：有機化学

キーワード：円二色性 構造決定 中分子 柔軟分子 理論計算 カルボジイミド

1. 研究開始当初の背景

既存の医薬品の多くは低分子医薬品（アスピリンなどに代表される分子量 500 以下の分子）と高分子医薬品（インスリンなどに代表されるペプチド・タンパク質・核酸など分子量 2000 以上の分子）に大別される。これら低分子・高分子に次ぐ生体機能分子として、中分子（分子量 500～2000 程度）が注目されている。有機合成手法や生合成遺伝子操作技術の進歩に伴って、新規構造を有する中分子の大量取得も可能になりつつあり、医薬・農薬を指向した中分子研究は今後さらに盛んになると予想される。しかし、新規分子の取得に伴う構造決定は依然として、研究のボトルネックとなりうる段階であり、特に立体配置の決定は多大な時間と労力を要する。以上のような背景から、中分子の構造決定に対して実用的な手法の開発が求められている。

我々はこれまで、赤外円二色性（vibrational circular dichroism; VCD）分光法を用いて、試料分子の実測 VCD スペクトルと、DFT（密度汎関数法）で計算した理論スペクトルを比較するだけで構造決定する簡便な構造解析法を確立してきた。本法は、特に疎水性低分子において高い精度で適用可能であり、これまで本法を用いて各種の低分子の構造決定を達成してきた（図 1）。しかし本法を中分子の構造解析にそのまま適用するのは困難であり、新たな方法論の開発が必要だった。

VCD スペクトルの計算は低分子が主な研究対象であり、中分子は分子サイズ・構造の柔軟性・多数の官能基などの性質のため計算には不適である。さらに、中分子の場合には所望の立体配置の情報がスペクトル上で埋没してしまう場合がある。このような問題を解決しうる新たな構造解析法の開発は、中分子のみならず高柔軟性低分子を扱う各種研究の迅速な発展に資する。

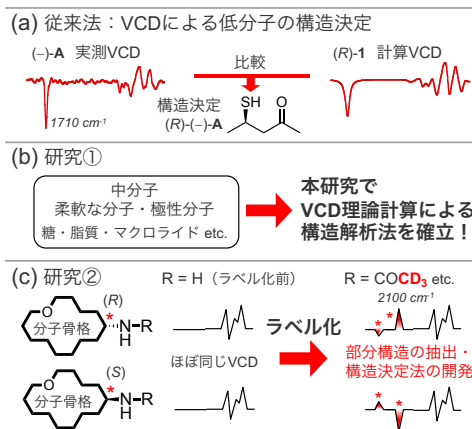


図1. VCDによる中分子の新規構造決定法の開発

2. 研究の目的

本研究の目的は以下の二点である。

- ① VCD 理論計算条件の最適化により、柔軟な分子（脂質や複合糖質など）を始めとする様々な中分子を構造決定する実用的な方法論を開発する。
- ② 不斉中心を多数含む中分子においても、1900~2400 cm^{-1} に吸収を有する発色団の導入（ラベル化）によって個々の立体配置の情報を抽出して観測し、理論計算を併用して構造決定する化学方法論を開発する。

3. 研究の方法

① 中分子の構造解析に対して実用的な VCD 計算条件の探索・最適化

脂質、マクロライド、オリゴ糖、フラボノイドなど柔軟な分子をモデルに用いて、計算時間と信頼性において最適な VCD 計算・測定条件を決定することとした。DFT 計算条件においては、汎関数、基底関数、溶媒効果、部分構造計算などを種々検討した。得られた理論スペクトルは、各種溶媒（水、クロロホルム、四塩化炭素、ジメチルスルホキシドなど）中で測定した実測スペクトルと比較することとした。

VCD の理論計算においては、溶液中に平衡状態で存在する全ての安定な立体配座異性体をまず同定する必要がある。低分子においては、分子力学を用いて配座探索をした直後に、高精度な DFT 計算（B3LYP/6-311++G(d,p)など）を実施し、安定配座異性体を同定する。柔軟分子の場合とりうる配座異性体の数が膨大であるため、上述の計算条件は実用的ではない。そこで計算時間の上で実用的な、低精度→中精度→高精度の段階的な計算を最適化することで、柔軟分子の計算を試みた。

② ラベル化と理論計算を併用して、個々の立体配置を決定する方法論の開発

図 1 のようにラベル部位付近の立体配置を抽出しうる発色団をまず同定する。1900~2400 cm^{-1} に吸収を有する官能基としてはニトリル (-CN)、イソニトリル (-NC)、アルキン (-C≡C)、アジド (-N₃)、カルボジイミド (-N=C=N-)、アレン (>C=C=C<)、炭素-重水素結合 (C-D) などが挙げられる。そこでまず各種官能基を導入したモデル化合物を合成し、それらの VCD を測定することとした。1900~2400 cm^{-1} 領域は一般の VCD 分光器では測定できない領域であるが、我々が以前の若手 A 研究 (JP26702034) にてカスタマイズした分光器を用いて、本領域の VCD の高精度測定を計画した。

最適な発色団の同定にあたり、キラルなビナフチル骨格や単糖をモデルとして、これらに各種

の発色団を導入した分子の VCD を測定する計画を立てた。有望な発色団についてはより大きな分子へも実際に適用した。

研究の進捗に応じて、他研究者からの構造決定依頼も随時引き受け、本研究成果を他の研究者にフィードバックする。

4. 研究成果

① 中分子の構造解析に対して実用的な VCD 計算条件の探索・最適化

多価不飽和脂肪酸 (polyunsaturated fatty acid ; PUFA) は、酵素的・非酵素的に酸化されて各種の酸化脂質を生じる。酸素が一つ導入されると hydroxy fatty acid や lipid epoxide が生じ、酸素が二つ導入されると lipid hydroperoxide が生じる。これらの酸化反応は脂質のアルキル鎖に一つ以上の不斉中心を導入するが、そのキラリティーと生物活性の相関はほとんど研究されてこなかった。特に非酵素的に生成した酸化脂質についてはほとんど研究されていない。脂肪酸はその高い柔軟性のため、最も構造決定が難しい分子群である。我々は本研究でまず、酸化脂質のキラリティーを VCD にて決定することを試みた。この目的の達成には、極めて柔軟性の高い脂肪酸に対する「VCD シグナルの検出」と「VCD スペクトルの理論計算」が必要である。

酸化脂質の研究実施にあたり、リシノール酸 (**1**)、リシノレイン (**2**)、リシネライジン酸 (**3**)、13-HpODE (**4**)、13-HpOTE (**5**)、15-HpETE (**6**)、メチル 9,10-エポキシ-12-ヒドロキシオクタデカン酸 (**7**) を解析対象分子として選択した (図 2)。**1** の VCD 測定条件の検討の末、比較的高濃度の 0.6 M 重クロロホルム溶液を用いることで VCD シグナルを検出することに成功した。理論計算条件の探索において、我々は **1** の部分構造を有する **8** を実際に合成しその VCD を測定したところ、**1** と **8** がほぼ同一の VCD スペクトルを示すことを見出した。したがって、**1** の構造決定においては **8** の理論計算を実施すれば良いこととなる。**8** も多数の配座異性体を取りうる柔軟構造であるものの、次の(i)~(iv)の手順によってその VCD を計算した。(i) 分子力学による配座探索 → (ii) 低精度の DFT 構造最適化 (B3LYP/6-31G*) → (iii) 高精度の DFT 構造最適化 (B3LYP/6-311+G**/PCM (chloroform) など) → (iv) 得られた安定配座異性体 (19 個) を用いた高精度 DFT の VCD 計算 (B3LYP/6-311+G**/PCM (chloroform) など)。以上の手順にて、実測スペクトルとよく一致する理論スペクトルを得ることに成功した (図 2)。両スペクトルの比較は、各シグナルを一对一で対応させる定性的比較、ならびに統計処理による定量的比較によって実施した。本結果より、本研究で確立した VCD 構造解析法を用いると、**1** のキラリティーを予備知識なしに R と決定できることを見出した (定量的比較に基づく、99%の信頼性)。なお、高精度 DFT の計算条件は他にも各種検討したが、モデル化合物 **8** の場合には上記の B3LYP/6-311+G**/PCM (chloroform) 条件が最も実測スペクトルと最も良い一致を示した。

確立した(i)~(iv)の手順をもとに、**2**~**7** についても VCD 構造解析法によってキラリティーを決定できるかどうかを検討した。いずれの分子においても、部分構造を適宜抽出してその VCD を計算した。99%の信頼性でその構造を決定できることを見出した。本研究は、VCD 分光法を脂肪酸の構造解析に用いた初の応用例であり、また hydroperoxide 天然物に対する初の応用でもある (Taniguchi, T. et al. *accepted with minor revision*)。

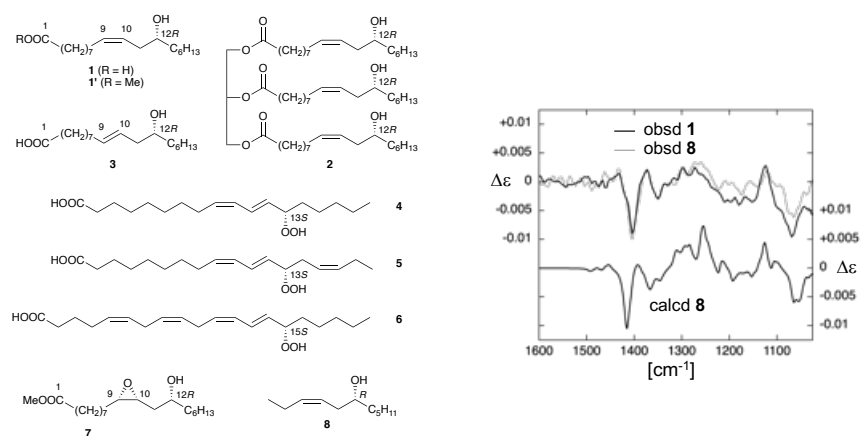


図2. VCD計算による柔軟分子(酸化脂質)の構造決定

得られた VCD 理論計算の知見を用いて、共同研究なども通じて各種天然物・合成化合物のキラリティーについても決定した (Murakami, R. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, Kiske, C. et al. *J. Agric. Food Chem.* **2019**; Okamura, H. et al. *Tetrahedron Lett.* **2019**; Koshino S. et al. *Chem.-Eur. J.* **2020**; Morishita, Y. et al. *Org. Biomol. Chem.* **2020**; Koshino S. et al. *Chem.-Eur. J.* **2021**; Mondal, S. et al. *Org. Lett.* **2022**)。また、VCD 理論計算で得られた知見は NMR 計算による分子の構造決定 (Keneko, A.

et al. *Org. Biomol. Chem.* **2019**; Morishita, Y. et al. *Org. Biomol. Chem.* **2020**) や、ECD 計算による分子の構造決定にも適用可能だった (Murakami, H. et al. *Org. Lett.* **2020**; Tani, H. et al. *ACS Omega* **2020**; Moosmann, P. et al. *Org. Lett.* **2021**)。

②ラベル化と理論計算を併用して、個々の立体配置を決定する方法論の開発

まずキラルなビナフチル骨格に対して、ニトリル、イソニトリル、アルキン、アジド基を二つずつ導入した化合物を合成した (図 3)。これらの分子をクロロホルム (CHCl₃) に溶解し、1900~2400 cm⁻¹ 領域の VCD を測定した。ニトリルとイソニトリルでは中程度の強度の VCD が、アルキンでは非常に弱い VCD が、そしてアジドでは極めて大きな VCD が観測された。VCD シグナルが大きいことは、より少ないサンプル量で観測できることを意味する。一方で、そのシグナル形状を見ると、アジドでは容易に解釈可能なツインピーク型のシグナルだったのに対して、ニトリルとイソニトリルでは非常に複雑であった。これはニトリルとイソニトリルが 1900~2400 cm⁻¹ 領域特有の anharmonic な振動モードを示すことに由来することが、理論計算によって示唆された。また、アジド基が示す実測 VCD 形状は理論計算によって容易に再現可能であったことから、実測スペクトルと理論計算スペクトルを比較することでアジド基を有する分子の立体配置を予備知識なしに決定できる。本結果より、本領域の VCD シグナルを用いた構造決定には、強度が大きく解釈が容易な発色団の利用が好ましいこと、またアジド基が有望であることも見出した (Taniguchi, T. et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**)。アジド基を用いた中分子の構造解析についてはさらなる応用研究を実施中である。

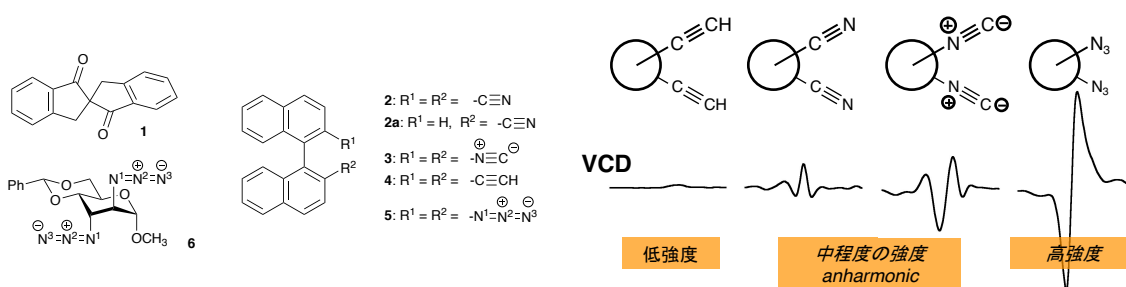


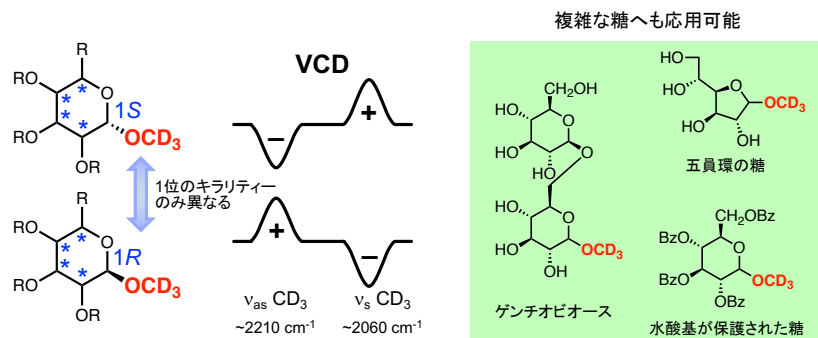
図3. 構造情報の抽出に最適な発色団の検討

各種発色団の同定の研究中に、当初予定していなかった興味深い結果が得られたのでここで報告する。我々は、アレンはそれ自身が軸不斉を示すために、解析対象分子の立体配置を抽出しうる発色団としては不適であると考えた。また、アレンが軸不斉であるなら、アレンと同様の混成軌道を示すカルボジイミドも軸不斉を示す筈であり、VCD にて解析可能であると考えた。カルボジイミドの軸不斉は 1932 年に予想されたものの (参考文献・Roll, J. L. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **1932**, *54*, 2494.)、片方の不斉のみを有するカルボジイミドの合成は 80 年以上経っても未達成だった。我々は、ビナフチル骨格による異性化制御と VCD 分光法による分析をブレイクスルーとして、軸不斉が制御された初のカルボジイミドの入手・同定に成功した (Taniguchi, T. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**)。

中分子の構造解析法の開発について再び述べる。アジド基は Huisgen 環化などのクリックケミストリー用の官能基として生命科学で汎用されているが、解析対象分子への導入が難しいこともある。そこで、炭素-重水素結合 (C-D) についても検討した。重水素が導入された生物活性分子は、化学的手法・酵素的な手法・生化学的手法など様々な方法によって入手可能である。本研究では糖をモデル分子として選択し、グルコース、ガラクトース、マンノースなど各種の単糖の 1 位に重水素メトキシ基 (OCD₃) を *S* または *R* の立体配置にて導入した分子を合成した。これらの分子の VCD を測定したところ、1 位の立体配置が *S* の場合には糖の種類に関わらず、CD₃ の対称伸縮振動 (ν_s) に由来する VCD シグナル (~2210 cm⁻¹) が正、非対称伸縮振動 (ν_{as}) に由来する VCD シグナルが負、ν_{as} CD₃ の VCD シグナルが正となることを見出した。一方で、*R* の場合には ν_s CD₃ の VCD シグナルが負、ν_{as} CD₃ の VCD シグナルが正となることを見出した (図 4)。この結果より、1 位の立体配置のみが異なるジアステレオマー対であっても、OCD₃ 基は近傍のただ一つの立体配置 (1 位) のみを顕著に反映し、ほぼ鏡像の VCD シグナルを示すことを見出した。これらの VCD シグナルの位置と符号は理論計算でも再現可能であったことから、実測スペクトルと理論スペクトルを比較することによって、1 位の立体配置の予備知識なしにその立体配置を *S* または *R* と決定できる。

本結果をもとに、より複雑な糖でも OCD₃ 基によって 1 位の立体配置を抽出・観測できるかどうかについて検討した。ゲンチオビオース (β1-6 結合を有するグルコース 2 糖)、5 員環を有する糖、アルキル鎖を有する糖、水酸基が全てベンゾイル基で保護された糖を合成し、それらの VCD スペクトルを測定した。全ての分子において、1 位が *S* の場合には正の ν_s CD₃ VCD シグナルと負の ν_{as} CD₃ VCD シグナルを、1 位が *R* の場合には負の ν_s CD₃ VCD シグナルと正の ν_{as} CD₃ VCD シグナルを示すことを見出した。ゲンチオビオースは 10 個の不斉中心を有するが、そのう

この1個の立体配置の情報を抽出・観測することができた。以上より本研究では重水素ラベル化を用いたVCD分光法によって、局所的な立体配置を決定できることを示した (Zubir, M. Z. M. et al. *Org. Biomol. Chem.* **2022**)。



以上、本研究では柔軟分子を始めとする中分子の立体配置決定に対して有効な、新たな理論計算法を確立し、またラベル化と理論計算の併用によって複雑な分子においても局所的な立体配置を決定する新たな方法論を示した。本研究成果は、中分子を始めとする各種分子の構造決定というボトルネックを解消し、それらの研究が出口とする医薬・農薬創製や生命科学の発展に資する。また、工業的に世界で最も用いられるカルボジイミドという分子群について軸不斉という新たな概念の創出にも成功した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計17件（うち査読付論文 17件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Santanu Mondal, Ravindra D. Aher, Venkati Bethi, Yu-Ju Lin, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, Fujie Tanaka	4. 巻 24
2. 論文標題 Control of Reactions of Pyruvates by Catalysts: Direct Enantioselective Mannich Reactions of Pyruvates Catalyzed by Amine-based Catalyst Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 1853-1858
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.2c00436	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 Mohamad Zarif Mohd Zubir, Nurul Fajry Maulida, Yoshihiro Abe, Yuta Nakamura, Mariam Abdelrasoul, Tohru Taniguchi, Kenji Monde	4. 巻 20
2. 論文標題 Deuterium Labelling to Extract Local Stereochemical Information by VCD Spectroscopy in C-D Stretching Region: A Case Study of Sugars	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Org. Biomol. Chem.	6. 最初と最後の頁 1067-1072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1ob02317a	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 Tohru Taniguchi, Mohamad Zarif Mohd Zubir, Nobuyuki Harada, Kenji Monde	4. 巻 23
2. 論文標題 Exploration of Chromophores for VCD Couplet in Biomolecularly Transparent Infrared Region	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 27525-27532
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp04074j	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 Seitaro Koshino, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, Eunsang Kwon, Yujiro Hayashi	4. 巻 27
2. 論文標題 Enantiodivergent One-Pot Synthesis of Axially Chiral Biaryls Using Organocatalyst-Mediated Enantioselective Domino Reaction and Central-to-Axial Chirality Conversion	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chem. - Eur. J.	6. 最初と最後の頁 15786-15794
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201905814	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 Philipp Moosmann, Tohru Taniguchi, Kazuo Furihata, Hiroaki Utsumi, Yuji Ise, Yasuhiro Morii, Nobuhiro Yamawaki, Tomohiro Takatani, Osamu Arakawa, Shigeru Okada, Shigeki Matsunaga	4. 巻 23
2. 論文標題 Myrindole A, an Antimicrobial Bis-indole from a Marine Sponge Myrmekioderma sp.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 3477-3480
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.1c00922	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 Yohei Morishita, Yu Aoki, Yu Aoki, Mei Ito, Daisuke Hagiwara, Kensho Torimaru, Daichi Morita, Teruo Kuroda, Hanako Fukano, Yoshihiko Hoshino, Masato Suzuki, Tohru Taniguchi, Keiji Mori, Teigo Asai	4. 巻 22
2. 論文標題 Genome Mining-Based Discovery of Fungal Macrolides Modified by glycosylphosphatidylinositol (GPI)-Ethanolamine Phosphate Transferase Homologues	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 5876-5879
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.0c01975	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 Hiroyuki Koshino, Tohru Taniguchi, Maiko Yoshimatsu, Susumu Hikami, Shunya Takahashi	4. 巻 5
2. 論文標題 Structural Studies on Stilbene Oligomers Isolated from the Seeds of Melinjo (<i>Gnetum gnemon</i> L.)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 12245-12250
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c00910	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Haruka Murakami, Tomohiro Asakawa, Yoshihiro Muramatsu, Ryo Ishikawa, Aiki Hiza, Yuta Tsukaguchi, Yohei Tokumaru, Masahiro Egi, Makoto Inai, Hitoshi Ouchi, Fumihiko Yoshimura, Tohru Taniguchi, Yoshinobu Ishikawa, Mitsuru Kondo, Toshiyuki Kan	4. 巻 22
2. 論文標題 Total Synthesis of Sophoraflavanone H and Confirmation of Its Absolute Configuration	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 3820-3824
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.0c01063	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 Yohei Morishita, Terutaka Sonohara, Tohru Taniguchi, Kiyohiro Adachi, Makoto Fujita, Teigo Asai	4. 巻 18
2. 論文標題 Synthetic-biology-based discovery of a fungal macrolide from <i>Macrophomina phaseolina</i>	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Org. Biomol. Chem.	6. 最初と最後の頁 2813-2816
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0ob00519c	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 Seitaro Koshino, Akira Takikawa, Keiichi Ishida, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, Eunsang Kwon, Shigenobu Umemiya, Yujiro Hayashi	4. 巻 26
2. 論文標題 Inversion of the Axial Information during Oxidative Aromatization in the Synthesis of Axially Chiral Biaryls with Organocatalysis as a Key Step.	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chem. - Eur. J.	6. 最初と最後の頁 4524-4530
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201602345	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 Hironori Okamura, Takanobu Fujioka, Naoki Mori, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, Hidenori Watanabe, Hirokazu Takikawa	4. 巻 60
2. 論文標題 First enantioselective synthesis of salinipostin A, a marine cyclic enol-phosphotriester isolated from <i>Salinispora</i> sp.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Tetrahedron Lett.	6. 最初と最後の頁 150917
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tetlet.2019.07.008	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 Yohei Morishita, Huiping Zhang, Tohru Taniguchi, Keiji Mori, Teigo Asai	4. 巻 21
2. 論文標題 The Discovery of Fungal Polyene Macrolides via a Postgenomic Approach Reveals a Polyketide Macrocyclization by trans-Acting Thioesterase in Fungi.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 4788-4792
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.9b01674	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 Akiho Kaneko, Yohei Morishita, Kento Tsukada, Tohru Taniguchi, Teigo Asai	4. 巻 17
2. 論文標題 Post-genomic approach based discovery of alkylresorcinols from a cricket-associated fungus, <i>Penicillium soppi</i> .	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Org. Biomol. Chem.	6. 最初と最後の頁 5239-5243
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9ob00807a	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 Yohei Morishita, Yusuke Okazaki, Yi Yi Luo, Jun Nunoki, Tohru Taniguchi, Yoshiteru Oshima, Teigo Asai	4. 巻 17
2. 論文標題 Use of plant hormones to activate silent polyketide biosynthetic pathways in <i>Arthrinium sacchari</i> , a fungus isolated from a spider.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Org. Biomol. Chem.	6. 最初と最後の頁 780-784
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8ob02837k	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 Christiane Kiske, Anja Devenie Riegel, Ronja Hopf, Anna Kvindt, Iulia Poplacean, Tohru Taniguchi, Mahadeva M. M. Swamy, Kenji Monde, Wolfgang Eisenreich, Karl-Heinz Engel	4. 巻 67
2. 論文標題 Determination of the Absolute Configurations and Sensory Properties of the Enantiomers of a Homologous Series (C6-C10) of 2-Mercapto-4-alkanones.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Agric. Food Chem.	6. 最初と最後の頁 1187-1196
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jafc.8b06599	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 Tohru Taniguchi, Takahiro Suzuki, Haruka Satoh, Yukatsu Shichibu, Katsuaki Konishi, Kenji Monde	4. 巻 140
2. 論文標題 Preparation of Carbodiimides with One-Handed Axial Chirality.	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Am. Chem. Soc.	6. 最初と最後の頁 15577-15581
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b08969	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 Ryo Murakami, Kentaro Sano, Tomohiro Iwai, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, Masaya Sawamura	4. 巻 57
2. 論文標題 Palladium-Catalyzed Asymmetric C(sp ³)-H Allylation of 2-Alkylpyridines.	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 9465-9469
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201802821	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8件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 谷口 透、井田南加、AGBO Davidson Obinna、門出 健次
2. 発表標題 VCD分光法による柔軟な酸化脂質の立体配置・立体配座決定
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Zarif Zubir, Nurul Fajry Maulida, Tohru Taniguchi, Kenji Monde
2. 発表標題 Exploration of Biomolecularly Transparent IR Region for Structural Identification Using VCD
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tohru Taniguchi, Shu Takimoto, Nurul Fajry Maulida, Kenji Monde
2. 発表標題 Three-dimensional structure of flexible lipids studied using VCD
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tohru Taniguchi, Shu Takimoto, Nurul Fajry Maulida, Kenji Monde
2. 発表標題 Stereochemical outcome of deoxyfluorination of bioactive lipids and their analogues studied using vibrational circular dichroism
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Zarif Zubir, Nurul Fajry Maulida, Tohru Taniguchi, Kenji Monde
2. 発表標題 Exploration of Biomolecularly Transparent IR Region for Structural Identification of Biomacromolecules Using VCD
3. 学会等名 Symposium on Molecular Chirality 2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 谷口 透・MAULIDA Nurul Fajry・門出 健次
2. 発表標題 不斉炭素を有する柔軟な脂肪酸とフッ素化誘導体のVCD構造研究
3. 学会等名 Symposium on Molecular Chirality 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 谷口 透・ファジュリ ヌルル・北原 卓弥・デビィソン アグボ・門出 健次
2. 発表標題 不斉炭素を有する柔軟な脂肪酸とフッ素化誘導体のVCD (赤外円二色性) 構造研究
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 Tohru Taniguchi
2. 発表標題 VCD Studies on Three-Dimensional Structures of Flexible Molecules in Solution State
3. 学会等名 The 10th Singapore International Chemistry Conference (招待講演) (国際学会)
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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
ドイツ	ミュンヘン工科大学			