

令和 6 年 6 月 18 日現在

機関番号：14601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2023

課題番号：19K05476

研究課題名(和文)電子欠乏性アルケンの反応性を利用した高効率の選択的環化合物の合成

研究課題名(英文) Highly effective and selective synthesis of cyclic compounds utilizing reactivity of electron-deficient alkenes

研究代表者

山崎 祥子 (YAMAZAKI, Shoko)

奈良教育大学・理科教育講座・教授

研究者番号：50182481

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：電子欠乏性アルケン基質の高い反応性を利用した、高効率環化合物合成法を開発した。環境調和型、温和な条件でのワンポットで多結合同時形成による5,6員環含窒素、酸素などのヘテロ環、シクロブタン環、インデン環、ナフタレン環などの炭素環、多環骨格を合成した。蛍光などの新しい物性が期待される化合物の合成も達成した。生成物の有用物質への変換および、本研究成果を踏まえた、さらなる高効率連続的合成反応の開発が期待される。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高温、低温を必要としない、ワンポット多結合同時形成による、低エネルギー型、短工程の環化合物骨格の選択的な新合成反応開発を達成した。環境負荷軽減に貢献することができる。種々の置換基を用いて電子的、立体的効果による反応性、選択性の違いを調べ、計算化学を用いて、起こりうる反応経路を詳細に調べることにより、反応が成功する鍵となる因子、選択性を解明した。蛍光などの物性を持つ多修飾環化合物の合成も達成した。含窒素、酸素などのヘテロ環、炭素環をもつ生物活性のある物質や、機能性有機材料開発が期待される。

研究成果の概要(英文)：Highly effective and selective synthesis of cyclic compounds utilizing reactivity of electron-deficient alkenes has been achieved.

Inter- and intramolecular cycloaddition of ethenetricarboxylates with styrenes in the presence of Lewis acid gave cyclobutanes, stereoselectively. The intramolecular reactions of styrene-functionalized ethenetricarboxylate amides showed high diversity of reaction modes. Heating -bromostyrene-functionalized amides of monomethyl fumarate with Et₃N gave 1,4-dihydronaphthalenes. Dehydrogenation of various 1,4-dihydronaphthalenes gave naphthalene derivatives. Intramolecular cyclization reactions of arylpropargyl amides of electron-deficient , -alkenyl carboxylates gave benz[f]isoindolines and aroyl pyrrolidines depending on the reaction conditions. Sequential Knoevenagel condensation/cyclization leading to indenes and benzofulvenes have also been developed. The reaction mechanisms have been studied using DFT calculations.

研究分野：有機合成化学

キーワード：電子欠乏性アルケン 分子内環化反応 環化付加 Knoevenagel縮合 ヘテロ環 炭素環 スチレン アルケン

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

環境負荷軽減を指向した高選択的、効率的な有機合成法の開発は、医薬品や有機材料の合成において重要である。特にヘテロ環や炭素環およびその縮環化合物は、生物活性のある物質に多く存在し、また機能性有機材料に使われ、その多結合連続形成などの短工程、低エネルギー型の合成開発は興味もたれる。

環化付加や共役付加では、高温、触媒または不安定中間体を通るため低温が必要なものが多い。高温、低温を必要としない省エネルギーなどによるワンポット多結合形成による、短工程の環化合物骨格の選択的な新合成反応開発をいかに行うかが重要である。反応性の高いエテントリカルボン酸誘導体では比較的温和な温度での反応条件で効率的、選択的に結合形成が起こる。例えば、アミド生成条件下でシンナミルアミンと分子内の[2+2]環化付加および[4+2]環化付加が置換基により選択的に進行することがわかってきていた。反応は連続的に進行し、ワンポット多結合形成反応が起こる。類似の環化付加反応に比べ、より温和な条件で起こり、高効率である。中間体であるエテントリカルボン酸アミドの C=C 電子欠乏性に加え、対応するエステル誘導体に比べて、環化のための配座が有利なことに起因している。スチリル基の修飾により反応はより効率的に進行することが予想されていた。

2. 研究の目的

本研究では、分子内および分子間での新規な高効率環化合物合成法の開拓を目指すとともに、反応が成功する鍵となる因子、選択性などを調べた。開発される結合形成反応によって、従来、長い工程、高温または低温による合成で低効率であった複雑なまたは歪みのある化合物の立体選択的合成が実用的になり、生物機能分子開発等の研究に用いることが可能となると考えた。種々の置換基を用いて電子的、立体的効果による反応性、選択性の違いを調べ、さらに計算化学を用いて、起こりうる反応経路を詳細に調べることで、反応が成功する鍵となる因子、選択性を解明することを目的とした。

共役付加や協奏的環化付加および段階的環化付加について、これまでの類似の報告では、高い温度、高価な遷移金属触媒、または低温が必要であるものが多かったが、本研究では、それぞれの基質の高反応性を利用した創造的な環形成反応により、温和な条件でのワンポットで多結合同時形成によるヘテロ環、炭素環、多環骨格を合成することを目指した。環境調和を指向した高効率な結合生成反応による、生物活性、新しい物性が期待される多修飾環化合物の迅速な創出は種々の有用物質への実用的なアプローチを可能にし、発展性があると考えた。

3. 研究の方法

基質の高い反応性を利用した、低エネルギー型、触媒、短工程での環化合物骨格の選択的な新合成反応開発を行い、反応の選択性について、DFT計算を用いて考察した。

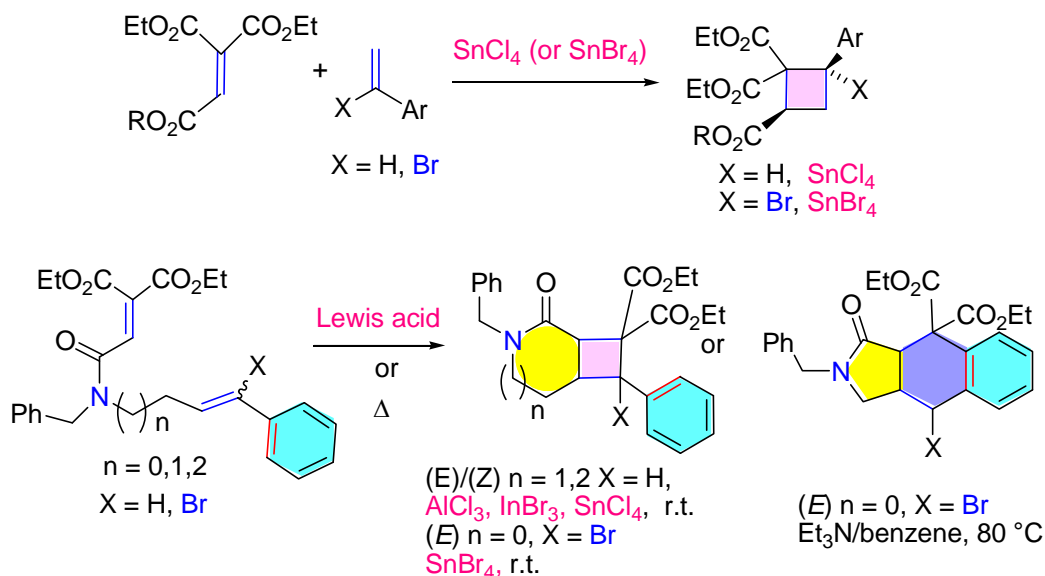
- (1) 電子欠乏性アルケニルカルボン酸とアリールアルケニル、ハロゲン化アルケニル基を含むアミンとの、アミド誘導体を経る分子内反応で、選択的環化反応を検討した。
- (2) インデン骨格は生理活性物質や機能性物質に多く見られる。基質の1,1-ジフェニルエテン部分の反応性の特徴を利用した、連続的Knoevenagel縮合/環化反応によるインデン誘導体の合成を行った。
- (3) ハロゲン置換基効果が興味深い、 α -ブromosチレン修飾アミンと不飽和カルボン酸とのアミド縮合を経る分子内付加環化反応を調べた。
- (4) 分子内 Diels-Alder 反応は1工程で多環性化合物を与える有用な反応である。 α -ブromosチレン部分をジエン成分として利用した分子内 Diels-Alder 反応で1,4-ジヒドロナフタレンおよびナフタレン誘導体を合成した。
- (5) アリールアルケンにジエン成分、求電子性アルケンにジエノフィルとして利用した分子内 Diels-Alder 反応を試みた。
- (6) 基質の高い反応性や溶媒の性質を利用した、効率的分子内反応による有用な炭素環、ヘテロ環形成反応の開発を行った。

4. 研究成果

(1) 分子間[2+2]環化付加反応でシクロブタンを立体選択的に合成した。求電子性アルケン、エテントリカルボン酸トリエステルとスチレン誘導体との塩化スズとの反応で、1,3-*trans*置換シクロブタンを得た。

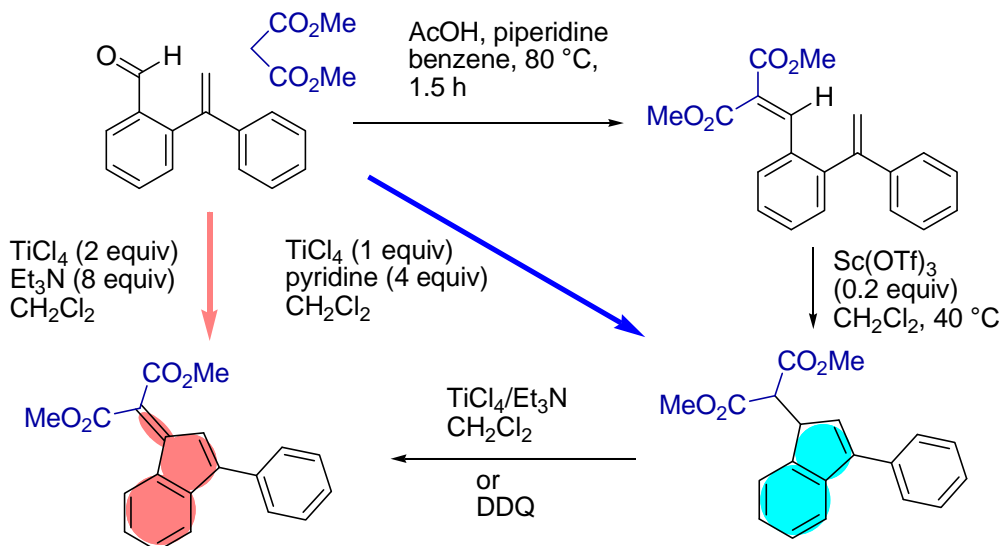
- プロモスチレンでは、[2+2]環化付加体、アルケン付加体などの生成物が立体選択的に得られた (Scheme 1)。

(*E*)-4-アリール-3-ブテニルアミドの触媒量の InBr_3 , AlCl_3 などを用いる反応で、*trans*-シクロブタン縮環含窒素6員環を立体選択的に得た。さらに (*E*)-5-フェニル-4-ペンテニルアミドの1当量の AlCl_3 を用いる反応で、*trans*-シクロブタン縮環含窒素7員環を得た。エテントリカルボン酸ジエステルと (*E*)-3-フェニル-3-プロモ-2-プロペンアミンとの反応では、室温ではアミド縮合体が得られ、連続的又は段階的加熱条件下で *cis* 縮環三環性化合物が得られた。 SnBr_4 との反応では [2+2] 付加体を得た。さらに一炭素伸長体 (*Z*)-4-フェニル-4-プロモ-3-ブテニルアミドと SnBr_4 との反応で、*trans* 縮環 [2+2] 付加体を得られた。



Scheme 1

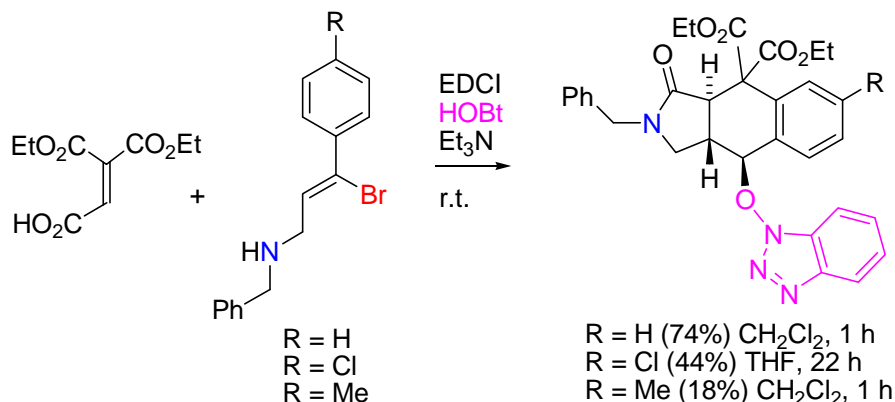
(2) 2-(1-フェニルビニル)ベンズアルデヒドとマロン酸ジメチルとの種々の縮合の反応条件下、縮合、続いて Michael 付加による環化でインデン、さらに脱水素が起こったベンゾフルベン誘導体がそれぞれ得られた (Scheme 2)。ピペリジン - 酢酸、四塩化チタン - ピリジン/トリエチルアミンなどの反応条件に依存して、選択的に得られた。種々の誘導体を用いて検討したところ、同様にインデン、ベンゾフルベン誘導体得られた。ベンゾフルベン誘導体は橙色などの結晶である。



Scheme 2

(3) (*Z*)-3-アリール-3-プロモ-4-プロペニルアミンとエテントリカルボン酸ジエチルとのアミ

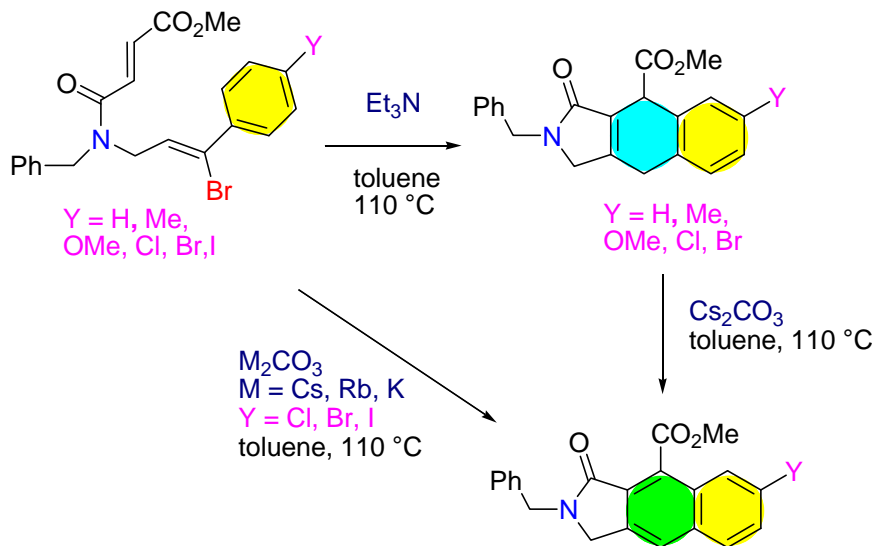
ド縮合反応では室温で[4+2]付加環化を経て 0Bt 置換ベンゾ[f]イソインドール誘導体を得られた (Scheme 3)。また、アミンとフマル酸モノメチルとの縮合反応では室温でアミド縮合のみが起こった。



Scheme 3

(4) α -ブロモスチレン修飾フマル酸アミドをトルエン中 110 °C で加熱したところ、トリエチルアミン存在下で Diels-Alder/脱 HBr/プロトン移動により、1,4-ジヒドロナフタレンが得られた (Scheme 4)。カリウム、ルビジウム、セシウム炭酸塩存在下では、芳香環上の置換基がハロゲンのとき、さらに脱水素を伴いナフタレン誘導体を得られた。種々の 1,4-ジヒドロナフタレンの炭酸セシウム (又は炭酸ルビジウム) との 110 °C での加熱でナフタレン誘導体を得られた。

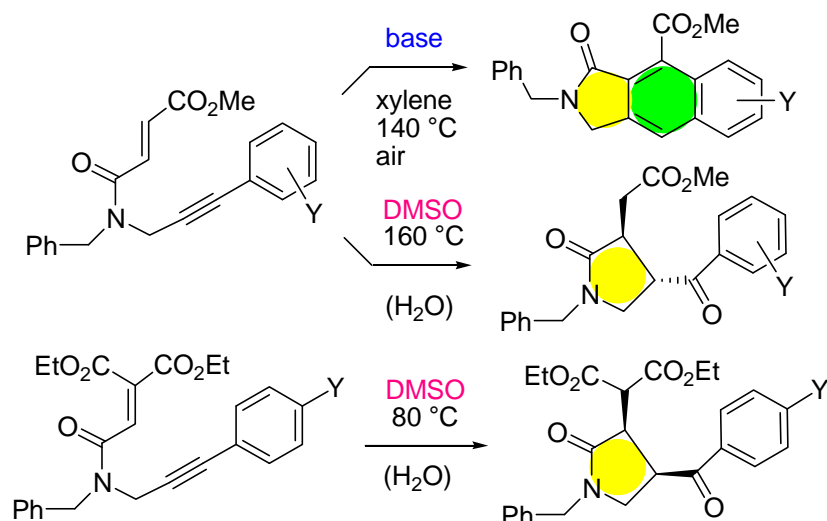
脱水素の反応機構について、ラジカル捕捉剤 TEMPO 存在下で反応がやや遅くなる例、空気中での反応で速くなる例がある。また、炭酸塩が必要である実験結果や DFT 計算により、従来報告例のある協奏的な脱水素反応によるナフタレンの生成ではなく、炭酸塩によるエノラート化、続いて混入する酸素による酸化反応と考察している。ハロゲン置換基は Pd クロスカップリング反応などで種々の誘導体に変換し、本反応の有用性を示した。誘導したアミノ基置換ナフタレンは良好な蛍光性がある。



Scheme 4

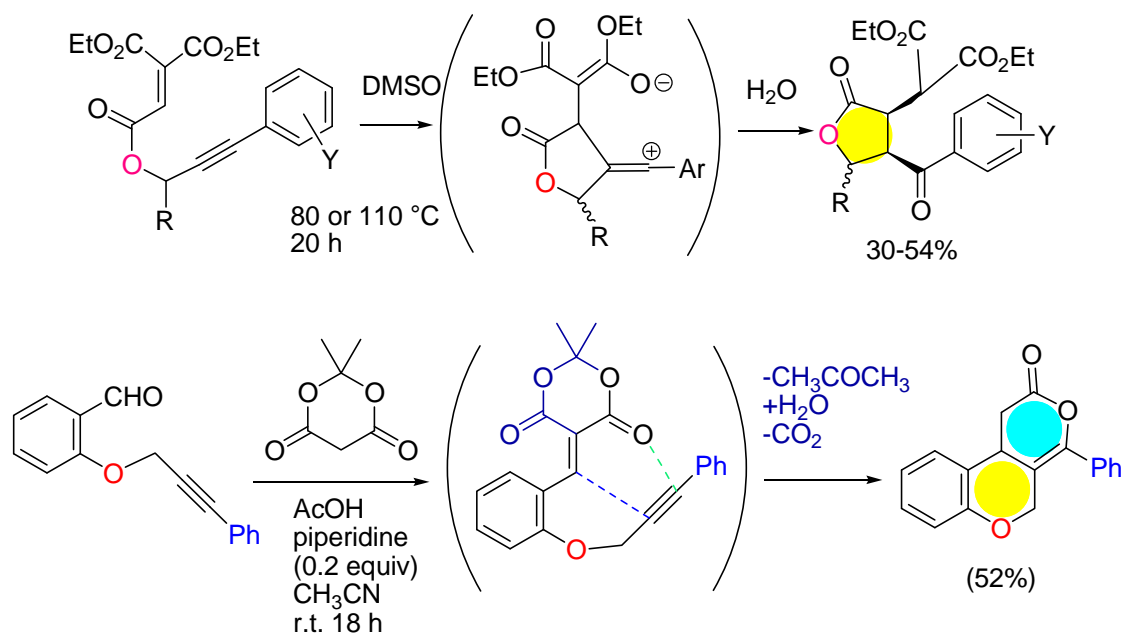
(5) アリールプロパルギルフマル酸アミドをキシレン中塩基存在下 140 °C で加熱すると、分子内 Diels-Alder 反応を経て、ベンゾ[f]イソインドリン骨格をもつ三環性化合物が主生成物として得られた (Scheme 5)。一方、アリールプロパルギルフマル酸アミドを DMSO 中で 160 °C で加熱するとアロイル基 *trans* 置換ピロリジン誘導体が生じた。系内の水が関与した環化反応が起こったと考えられる。アリールプロパルギルエントリカルボン酸アミド誘導体の反応では DMSO 中で 80 °C でアロイル基 *cis* 置換ピロリジン誘導体を得られた。さらに H および Me 置換プロパルギルアミドの DMSO 中の反応を検討したところ、同様の環化-水付加アルデヒドまたはエン反応環化体などが選択的に得られた。

環化体生成の反応機構を DFT 計算を用いて考察した。ニトロ基置換ベンゾ[f]イソインドリンを蛍光性を示すジメチルアミノ基置換誘導体に変換した。



Scheme 5

(6) アリールプロパルギルエテントリカルボン酸エステル誘導体の反応で、DMSO 中で 80-110 °C でアロイル基 3,4-cis 置換テトラヒドロフラン誘導体が 30-54%の収率で得られた (Scheme 6)。さらにアルキンを利用する新規 6 員環合成を試みた。ベンズアルデヒド誘導体のメルドラム酸との縮合反応条件下で縮合反応、ヘテロ Diels-Alder, 脱アセトン、水付加、脱炭酸が連続的に進行した含酸素 6 員環を含む三環性化合物が主生成物として得られた。



Scheme 6

以上、分子内および分子間での新規な高効率環化合物合成法の開拓を行った。これまでの類似の報告では、高い温度、高価な遷移金属触媒、または低温が必要であるものが多かったが、本研究では、それぞれの基質の高反応性を利用して、環境調和型、温和な条件でのワンポットで多結合同時形成による 5,6 員環含窒素、酸素などのヘテロ環、炭素環および多環骨格を合成した。蛍光などの物性を持つ新しい多修飾環化合物の合成も達成した。生成物の有用物質への変換および、本研究成果を踏まえた、さらなる高効率連続的合成反応の開発が期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計29件（うち査読付論文 28件 / うち国際共著 10件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Wang Zhichao, Yamazaki Shoko, Morimoto Tsumoru, Takashima Hiroshi, Nakaoku Ayane, Shimizu Makoto, Ogawa Akiya	4. 巻 21
2. 論文標題 Intramolecular cyclization reactions of arylpropargyl amides of electron-deficient , -alkenyl carboxylates and related compounds	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Organic & Biomolecular Chemistry	6. 最初と最後の頁 2172 ~ 2187
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D30B00129F	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 Kakimoto Yuna, Ikemura Ryoya, Imai Yoshitane, Tohnai Norimitsu, Yamazaki Shoko, Nakata Eiji, Takashima Hiroshi	4. 巻 13
2. 論文標題 Circularly polarised luminescence from excimer emission of anthracene derivatives complexed with -cyclodextrin in the solid state	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 1914 ~ 1922
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2RA07971B	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 Yoshikawa Naokazu, Yamazaki Shoko, Eguchi Shiori, Nishiyama Ayaka, Yamashita Yuki, Tohnai Norimitsu, Nakata Eiji, Takashima Hiroshi	4. 巻 1271
2. 論文標題 Octahedrons of 1,10-phenanthroline and 4 ?chloro-2,2 :6 ,2 -terpyridine induced by protonation of nitrogen atoms: Synthesis and analysis	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Structure	6. 最初と最後の頁 134075 ~ 134075
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molstruc.2022.134075	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 Wang Zhichao, Yamazaki Shoko, Mikata Yuji, Oba Miho, Takashima Hiroshi, Morimoto Tsumoru, Ogawa Akiya	4. 巻 87
2. 論文標題 Intramolecular Diels-Alder Reactions of -Bromostyrene-Functionalized Unsaturated Carboxamides	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 11148 ~ 11164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.2c01417	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 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 20
2. 論文標題 A DFT study of the active role of the phosphate group of an internal aldimine in a transamination reaction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Organic & Biomolecular Chemistry	6. 最初と最後の頁 5334 ~ 5341
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D20B00913G	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 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 1214
2. 論文標題 A DFT study on the tautomerization of vitamin B3 (niacin)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational and Theoretical Chemistry	6. 最初と最後の頁 113800 ~ 113800
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.comptc.2022.113800	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 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 19
2. 論文標題 How is vitamin B1 oxidized to thiochrome? Elementary processes revealed by a DFT study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organic & Biomolecular Chemistry	6. 最初と最後の頁 4529 ~ 4536
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D10B00677K	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 Yamazaki Shoko	4. 巻 6
2. 論文標題 Three or Four Heteroatoms Including at Least One Selenium or Tellurium	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV	6. 最初と最後の頁 303 ~ 409
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/B978-0-12-818655-8.00053-6	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 Yamazaki Shoko	4. 巻 13
2. 論文標題 Thiepanes and Thiepinos	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV	6. 最初と最後の頁 125 ~ 180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/B978-0-12-818655-8.00091-3	査読の有無 無
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 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 34
2. 論文標題 A density functional theory study of the hydride shift in the Escheweiler-Clarke reaction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physical Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e4253
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/poc.4253	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 Sawai Mika、Matsumoto Sayaka、Mimura Yuki、Imai Yoshitane、Yamazaki Shoko、Kanehisa Nobuko、 Tohnai Norimitsu、Nakata Eiji、Takashima Hiroshi	4. 巻 102
2. 論文標題 Circularly polarized luminescence (CPL) characteristics of hydrophobic pyrene derivatives/ - cyclodextrin (-CD) complexes in aqueous solution dissolved by grinding	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry	6. 最初と最後の頁 133 ~ 142
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10847-021-01108-z	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 Yamazaki Shoko、Katayama Kohtaro、Wang Zhichao、Mikata Yuji、Morimoto Tsumoru、Ogawa Akiya	4. 巻 6
2. 論文標題 Sequential Knoevenagel Condensation/Cyclization for the Synthesis of Indene and Benzofulvene Derivatives	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 28441 ~ 28454
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c05283	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 該当する

1. 著者名 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 125
2. 論文標題 How Is the Oxidation Related to the Tautomerization in Vitamin B9?	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 9346 ~ 9354
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c06678	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 Yoshikawa Naokazu、Yamazaki Shoko、Kakimoto Yuna、Eguchi Shiori、Yokoyama Risa、Kanehisa Nobuko、Tohnai Norimitsu、Nakata Eiji、Takashima Hiroshi	4. 巻 1242
2. 論文標題 Emission properties of 1,10-phenanthroline derivatives induced by protonation of a nitrogen atom	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Structure	6. 最初と最後の頁 130728 ~ 130728
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molstruc.2021.130728	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 Yoshikawa Naokazu、Yamazaki Shoko、Nishiyama Ayaka、Yamashita Yuki、Kanehisa Nobuko、Tohnai Norimitsu、Nakata Eiji、Takashima Hiroshi	4. 巻 1251
2. 論文標題 Structures, atomic charges, emission properties and DFT studies of biquinoline derivatives induced by protonation of a nitrogen atom	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Structure	6. 最初と最後の頁 131990 ~ 131990
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molstruc.2021.131990	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 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 4
2. 論文標題 A DFT study on the degradation mechanism of vitamin B2	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Food Chemistry: Molecular Sciences	6. 最初と最後の頁 100080 ~ 100080
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.fochms.2022.100080	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 該当する

1. 著者名 Yoshikawa, N.; Yamazaki, S.; Kimori, K.; Kakimoto, Y.; Mito, K.; Eguchi, S.; Yokoyama, R. Kanehisa, N.; Tohnai, N.; Nakata, E.; Takashima, H.	4. 巻 19
2. 論文標題 Structures, DFT calculations and emission properties of protonated adenine, cytosine and guanine bases	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Trends in Photochemistry & Photobiology	6. 最初と最後の頁 1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Yamazaki Shoko, Wang Zhichao, Iwata Kentaro, Katayama Khotaro, Sugiura Hirotaka, Mikata Yuji, Morimoto Tsumoru, Ogawa Akiya	4. 巻 53
2. 論文標題 Inter- and Intramolecular Cycloaddition Reactions of Ethenetricarboxylates with Styrenes and Halostyrenes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Synthesis	6. 最初と最後の頁 731 ~ 753
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1055/s-0040-1706547	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 Yamazaki Shoko	4. 巻 8
2. 論文標題 1,3-Dioxins, Oxathiins, Dithiins, and Their Benzo Derivatives	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV	6. 最初と最後の頁 1-87
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/B978-0-12-409547-2.14933-9	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 Yamabe Shinichi, Tsuchida Noriko, Yamazaki Shoko	4. 巻 34
2. 論文標題 A density functional theory study of the reaction mechanism of formation of phenolphthalein and fluorescein	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physical Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e4136
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/poc.4136	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 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 5
2. 論文標題 A DFT Study on Transition States of Inhibition of Oxidation by Tocopherol	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 9184 ~ 9194
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/slct.202002139	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 Yasui Shinro、Yamazaki Shoko	4. 巻 33
2. 論文標題 31P NMR spectroscopic analysis on photooxidation of 1,n bis(diphenylphosphino)alkanes with the aid of DFT calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physical Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e4021
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/poc.4021	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 Yamabe Shinichi、Tsuchida Noriko、Yamazaki Shoko	4. 巻 124
2. 論文標題 DFT Study of the Hydroxyl Radical Addition to 2'-Deoxyguanosine and the Guanine Base in Four Double-Stranded B-Form Dimers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 1374 ~ 1382
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b10330	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 Yoshikawa Naokazu、Yamazaki Shoko、Kato Natsumi、Sawai Mika、Noda Kaoru、Kanehisa Nobuko、Nakata Eiji、Takashima Hiroshi	4. 巻 4
2. 論文標題 Anion Influence of Emission Properties and DFT Calculations of Diprotonated and Triprotonated Terpyridines	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 13284 ~ 13294
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/slct.201904062	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 Sugiura Hirotaka, Yamazaki Shoko, Ogawa Akiya	4. 巻 56
2. 論文標題 Sequential Intramolecular Diels-Alder Reaction of 3 Heteroaryl 2 propenylamides of Ethenetricarboxylate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Heterocyclic Chemistry	6. 最初と最後の頁 2592 ~ 2603
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jhet.3665	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 Yamabe Shinichi, Tsuchida Noriko, Yamazaki Shoko	4. 巻 51
2. 論文標題 A DFT study of the hydrolysis of hydantoin	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Chemical Kinetics	6. 最初と最後の頁 831 ~ 839
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/kin.21312	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 Yamabe Shinichi, Tsuchida Noriko, Yamazaki Shoko	4. 巻 4
2. 論文標題 Keto Enol Tautomerization Controls the Acid Catalyzed Robinson Annulation A DFT Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 4962 ~ 4966
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/slct.201900338	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 Yamabe Shinichi, Tsuchida Noriko, Yamazaki Shoko	4. 巻 9
2. 論文標題 A DFT Study on the Tautomerization of Alanine	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 e202304052
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/slct.202304052	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 Yoshikawa Naokazu, Yamazaki Shoko, Nakaoku Ayane, Manabe Yui, Tohnai Norimitsu, Nakata Eiji, Takashima Hiroshi	4. 巻 8
2. 論文標題 1,10 Phenanthroline Based Octahedra Induced by Protonation of a Nitrogen Atom: Structures and Emission Properties	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 e202303561
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/slct.202303561	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21件(うち招待講演 0件/うち国際学会 9件)

1. 発表者名 王 智超、山崎 祥子、森本 積、小川 昭弥
2. 発表標題 電子欠乏性 , -アルケニルカルボン酸アリールプロパルギルアミドの分子内環化反応
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Yamazaki, Z. Wang, T. Morimoto, A. Ogawa
2. 発表標題 Intramolecular cycloaddition reactions of -bromostyrene-functionalized fumaramides
3. 学会等名 Chemical Science symposium 2022: Sustainable synthesis and catalysis (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 王智超, 山崎祥子, 森本積, 大場美穂, 高島弘, 小川昭弥
2. 発表標題 分子内Diels-Alder反応による修飾ナフタレン誘導体の合成; 反応機構と生成物の物性
3. 学会等名 第32回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 王智超, 山崎祥子, 森本積, 大場美穂, 高島弘, 小川昭弥
2. 発表標題 -ブロモスチレン修飾フマル酸アミドの分子内Diels-Alder反応を利用したナフタレン誘導体の合成
3. 学会等名 第51回複素環化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Yamazaki,* Z. Wang, T. Morimoto, A. Ogawa
2. 発表標題 Intramolecular Diels-Alder Reactions of α -Bromostyrene-functionalized Unsaturated Carboxamides
3. 学会等名 ACS Fall Meeting 2022, Division of Organic Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Yamazaki, K. Iwata, K. Katayama, Z. Wang, A. Ogawa, M. Morimoto
2. 発表標題 Inter- and intramolecular cycloaddition reactions of ethenetricarboxylates with styrenes and halostyrenes
3. 学会等名 21st Tetrahedron Symposium (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shoko Yamazaki, Kohtaro Katayama, Zhichao Wang, Akiya Ogawa, and Tsumoru Morimoto
2. 発表標題 Sequential Knoevenagel condensation/cyclization for the synthesis of indene and benzofulvene derivatives
3. 学会等名 ACS Fall 2021, Division of Organic Chemistry, SESS10N: New Reactions & Methodology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 片山 耕太郎・山崎 祥子・森本 積
2. 発表標題 連続的/段階的Knoevenagel縮合/環化反応 によるインデンおよびフルオレン誘導体の合成
3. 学会等名 第11回CSJ化学フェスタ2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 王 智超・山崎 祥子・小川 昭弥・森本 積
2. 発表標題 -プロモスチレン誘導体の分子内Diels-Alder反応
3. 学会等名 第11回CSJ化学フェスタ2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 王 智超、山崎 祥子、小川 昭弥、森本 積
2. 発表標題 -プロモスチレン修飾フマル酸アミドの分子内Diels-Alder反応によるナフタレン誘導体の合成
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 片山 耕太郎、山崎 祥子、森本 積
2. 発表標題 o-置換ベンズアルデヒドと活性メチレン化合物との連続的Knoevenagel縮合/環化反応
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 片山 耕太郎, 山崎 祥子、王 智超、小川 昭弥、森本 積
2. 発表標題 連続的KnoevenageI縮合/環化反応によるインデンおよびベンゾフルベン誘導体の合成
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 王 智超、山崎 祥子、小川 昭弥、森本 積
2. 発表標題 -プロモスチレン修飾不飽和カルボン酸アミドの分子内環化反応
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山崎祥子, 片山耕太郎, 森本積
2. 発表標題 ルイス酸促進によるハロステレン誘導体のC-C結合形成反応
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 山崎祥子, 岩田健太郎, 片山耕太郎, 王智超, 杉浦弘隆, 小川昭弥
2. 発表標題 エントリカルボン酸ステレン修飾アミドの分子内環化反応
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 S. Yamazaki, K. Iwata, T. Morimoto
2. 発表標題 Stereoselective Formation of Nitrogencontaining Heterocycle-fused Cyclobutanes via Intramolecular Cycloadditions of Styrene-derived Ethenetricarboxylate Amides
3. 学会等名 12th International Symposium on Integrated Synthesis (ISONIS-12) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Yamazaki, K. Katayama, H. Sugiura, A. Ogawa, T. Morimoto
2. 発表標題 Inter- and Intramolecular Lewis acidpromoted [2+2] Cycloaddition Reactions of Ethenetricarboxylates with Styrenes and Halostyrenes
3. 学会等名 12th International Symposium on Integrated Synthesis (ISONIS-12) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shoko Yamazaki, Kohtaro Katayama, Tsumoru Morimoto
2. 発表標題 Intra- and intermolecular stereoselective [2+2] cycloaddition reactions of ethenetricarboxylates and styrenes
3. 学会等名 The 21st European Symposium on Organic Chemistry. (ESOC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Yamazaki,* Z. Wang, T. Morimoto, A. Ogawa,
2. 発表標題 Intramolecular cyclization reactions of arylpropargyl amides of electron-deficient , -alkenyl carboxylates and related compounds
3. 学会等名 ACS Fall Meeting 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Yamazaki,* Z. Wang, T. Morimoto, A. Ogawa,
2. 発表標題 Intramolecular Cyclization Reactions of Arylpropargyl Amides of Electron-deficient , -Alkenyl Carboxylates and Related Compounds
3. 学会等名 The 15th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-15) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉浦弘隆, 王智超, 山崎祥子, 小川昭弥, 森本積
2. 発表標題 電子欠乏性 , -アルケニルカルボン酸アリールプロパルギルエステルのアルキン環化 水和反応によるテトラヒドロフラン環合成
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024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
---------	---------