

令和 6 年 6 月 17 日現在

機関番号：34306

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21H02611

研究課題名(和文)カルコゲン結合で構造制御する分子認識型触媒の創製

研究課題名(英文) Development of catalysts with molecular recognition ability through chalcogen-bonding interaction

研究代表者

古田 巧 (Furuta, Takumi)

京都薬科大学・薬学部・教授

研究者番号：30336656

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)：カルコゲン結合は、カルコゲン元素とヘテロ原子との間に働く非共有結合性の相互作用である。水素結合に匹敵する分子間力を持ち、有機分子の構造を制御する要因となることは知られていたが、触媒構造の制御には活用されてこなかった。本研究は、このカルコゲン結合を触媒構造を制御する分子間力として活用する、新たな触媒設計指針の確立を目的に実施した。具体的には、ビアリール構造中に硫黄やセレンなど種々のカルコゲン元素を持つナフトチオフェン型のビアリールジカルボン酸の立体構造を精査した。また、有機分子触媒や遷移金属触媒の配位子として重要なウレアの構造制御にも展開した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

持続可能な社会の構築に向け、効率的な物質創製が求められる現代有機化学では、立体選択性や位置選択性など高度な選択性を示す分子変換が求められる。このような選択性を発揮する触媒の開発には、触媒作用や基質認識を司る官能基を「いかに精緻に配置できるか」が鍵となる。本研究は、非共有結合性相互作用の中でも、カルコゲン結合で触媒を配座制御することで、研究者が意図した位置に触媒作用や基質認識に預かる官能基を配置した触媒開発を目的とする。この触媒により多官能性化合物の位置・立体選択的官能基化のような高度な分子変換や医薬品などの効率的合成、環境負荷の少ない有機合成法が開発できれば、その社会的な意義は大きい。

研究成果の概要(英文)：The chalcogen-bonding interaction, i.e., the attractive non-covalent interaction between chalcogen atoms (S, Se, Te) and heteroatoms such as oxygen or nitrogen, has already been employed to control the molecular structures of bioactive compounds and organic materials. In this study, we demonstrate the formation of the chalcogen-bonding interactions and their reliability for the conformational locking of catalyst, in which a variety of conformations are accessible due to the conformational flexibility. In this study, the conformational rigidities on account of the chalcogen-bonding interactions in the chalcogen atom containing biaryl dicarboxylic acids and the urea frameworks were visualized and quantified by X-ray diffraction analysis, spectroscopic means, and computational calculations.

研究分野：有機合成化学

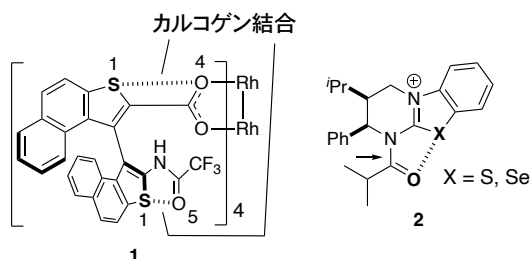
キーワード：カルコゲン結合 触媒 構造制御 ウレア

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

カルコゲン結合は、硫黄などのカルコゲン (16 族) 元素とヘテロ原子 (酸素、窒素、ハロゲンなど) との間に働く非共有結合性の相互作用である。この分子内での寄与は、立体配座の制御につながり、医薬化学の領域で生物活性に影響を与える因子として (Nagao, Y. *et al. JACS*, **1998**, *120*, 3104)、また材料化学の領域で有機材料の機能を左右する要因として認知されてきた。その結合エネルギーは水素結合と同等であることに加え、ヘテロ原子の孤立電子対とカルコゲン元素を含む反結合性軌道との軌道相互作用が主要因であるため、媒質に依存せず分子間力を発揮する特徴がある。また、カルコゲン結合は、分散力の寄与が大きく、非共有電子対を受容するカルコゲン原子が高周期であるほど結合エネルギーが増すことが示されている (Tsunami, S. *et al. J. Phys. Chem. B* **2013**, *117*, 6849)。そのため、構造制御への寄与は「硫黄<セレン<テルル」の順に強固になると考えられる。

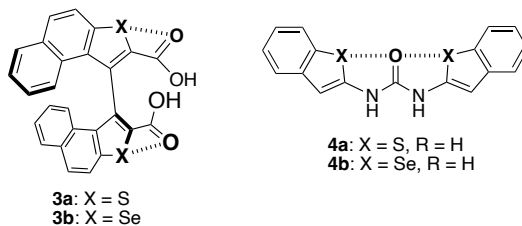
カルコゲン結合は、このような特徴を持つにもかかわらず、これまで触媒の立体構造制御に用いた試みは、S-O 間の相互作用による申請者のロジウム二核錯体 **1** (Furuta, T. *et al. ACS Catal.*, **2021**, *11*, 568)、ならびに不斉アシル化触媒の活性種 **2** で、矢印で示す C-N 結合の配座を制御した例があるのみで (Smith, A. D. *et al. ACIE*, **2020**, *59*, 3705)、類例は皆無に等しい状況にあった。



2. 研究の目的

本研究は、カルコゲン結合でどこまで触媒構造の制御が可能か、を明らかにすることを目的に実施した。特に、ロジウム二核カルボキシレート錯体 **1** のカルコゲン結合による構造制御の精査を目的に、ビアリール構造中に硫黄やセレンなど種々のカルコゲン元素を持つナフトチオフェン型のビアリールジカルボン酸 **3a** (X = S), **3b** (X = Se) の立体構造を精査した。

また、上記のロジウム二核錯体 **1** のアミド部は 1,5-型のカルコゲン結合で配座固定され、不斉空間を拡張していることが判明している。そこで本研究では、この 1,5-型のカルコゲン結合を有機分子触媒や遷移金属触媒の配位子として重要なウレアの構造制御に展開し、**4a** (X = S), **4b** (X = Se) 等の構造制御を検討した。すなわち、ウレア **4a** (X = S), **4b** (X = Se) のようにカルボニル基の両側にカルコゲン原子を配すれば、酸素-カルコゲン原子間にカルコゲン結合が形成されることで、その構造制御が可能と考え検証した。



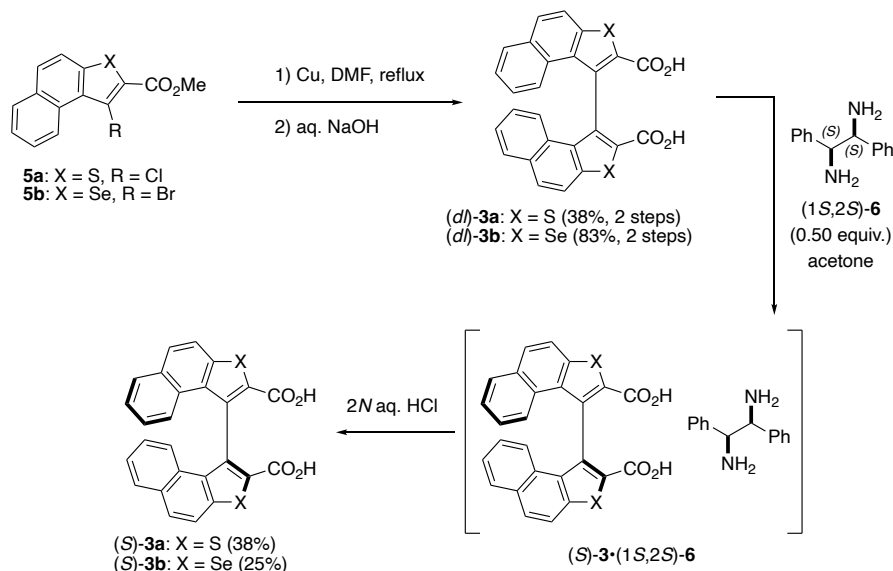
3. 研究の方法

ビアリールジカルボン酸 **3a**, **3b** を合成し、単結晶 X 線構造解析や DFT 計算により立体構造を解析することで、カルコゲン結合の構造制御への効果を検証することとした。同様にウレア誘導体 **4a**, **4b** 等においても、X 線構造解析を中心に立体構造の解明を行い、カルコゲン結合が構造制御ならびに物性にもたらす効果を検討した。

4. 研究成果

カルコゲン原子を持つ軸性不斉ジカルボン酸の合成¹⁾

化合物 **3a**, **3b** は下記のように合成した。まず、ナフトチオフェン環を持つ塩化物 **5a** およびナフトセレンフェン環を有する臭化物 **5b** のウルマンカップリング、およびエステル部の加水分解によりラセミ体の **3a**, **3b** を合成した。これらに対し、アセトン溶媒中、0.5当量の (1*S*,2*S*)-ジフェニルエチレンジアミン ((*S,S*)-**6**) を作用させるジアステレオマー塩法による光学分割を行い、99% ee 以上の光学純度で *S* 体のジカルボン酸 **3a** および **3b** を得た。このジカルボン酸の絶対配置は、単結晶 X 線構造解析および CD スペクトルのコットン効果により決定した。



カルコゲン原子を持つ軸性不斉ジカルボン酸の立体構造¹⁾

ジカルボン酸 **3a, 3b** の結晶構造を図に示す。いずれのジカルボン酸についても、2つの芳香環が不斉軸まわりにほぼ垂直にねじれていることがわかった (**3a:** $\phi a, b, c, d = 81.4(3)^\circ$, **3b:** $\phi a, b, c, d = 94.9(5)^\circ$)。さらに、それぞれの結晶構造についてカルコゲン原子-酸素原子間距離、およびカルボキシ基の二面角に着目し、カルコゲン原子と酸素原子の間にカルコゲン結合が形成されているか評価した。

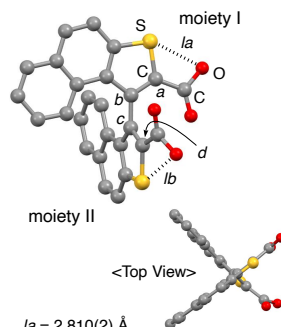
まず **3a** の結晶構造においては、硫黄-酸素原子間の距離がいずれもファンデルワールス半径の和である 3.3 \AA よりも短く ($S \cdots O = 2.810(2) \text{ \AA}$, $2.921(2) \text{ \AA}$)、1,4 型のカルコゲン結合を形成する距離に位置していることがわかった。さらに、それぞれのカルボキシ基が芳香環とほぼ同一平面上に位置していることから ($\phi S-C-C-O = -3.4(2)^\circ$, $15.8(2)^\circ$)、硫黄-酸素原子間に 1,4 型のカルコゲン結合を形成していることが示唆された。また、セレン-酸素原子間の距離がファンデルワールス半径の和 3.4 \AA よりも短く、さらにそれぞれのカルボキシ基が芳香環とほぼ同一平面上に位置していることから、カルコゲン結合の形成が示唆された ($Se \cdots O = 2.933(3) \text{ \AA}$, $2.996(3) \text{ \AA}$, $\phi Se-C-C-O = -2.3(5)^\circ$, $-15.1(5)^\circ$)。

上記のX線構造解析により示唆されたカルコゲン結合は、DFT 計算により裏付けた。 $\omega B97XD/6-311G(d,p)$ レベルでの NBO 解析の結果、**3a, 3b** ではカルコゲン原子 (X) と酸素原子の間にカルコゲン結合 ($n_O \rightarrow \sigma^*_{X-C}$ 相互作用、X = S, Se) を形成していることが裏付けられた。**3a** の二次摂動エネルギーはそれぞれ 1 kcal/mol を超えることはなかったが (0.96 , 0.54 kcal/mol)、**3b** のセレン原子を介したカルコゲン結合は 1.18 , 1.15 kcal/mol を示し、より強い相互作用を形成していることも判明した。

化合物 (S)-3a

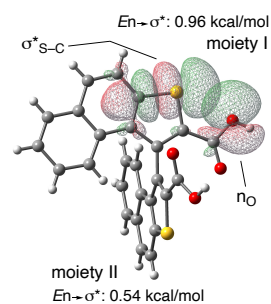
(1) Crystal Structure of (S)-3a in the racemic crystal

<Side View>



<Top View>

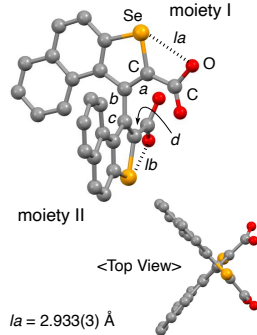
(2) NBO Analysis (S \cdots O)



化合物 (R)-3b

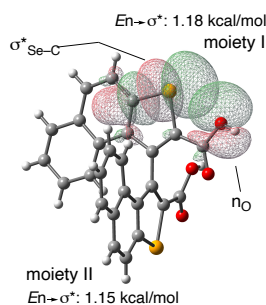
(1) Crystal Structure of (R)-3b in the racemic crystal

<Side View>



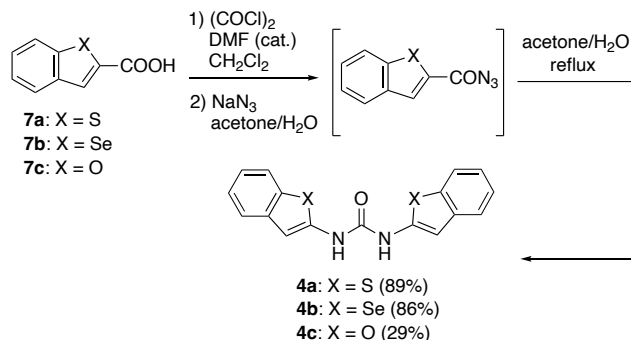
<Top View>

(2) NBO Analysis (Se \cdots O)



カルコゲン原子を持つウレア誘導体の合成²⁾

ベンゾカルコゲノフェンカルボン酸 **7a** (X = S), **7b** (X = Se), **7c** (X = O) から誘導した酸アジドについて、クルチウス転位を経る二量化を行うことで、カルボニル基の両側にカルコゲン原子を持つウレア誘導体 **4a-4c** を合成した。また、アリール基を導入したカルボン酸 **8** について同様の反応を行うことで、アリール基を 3, 3' 位に導入したウレア誘導体 **9a-9f** の合成も達成した。



カルコゲン原子を持つウレア誘導体の立体構造²⁾

上記のウレア誘導体の立体構造を X 線構造解析により解明した。まず、酸素を持つウレア **4c** は、次ページの図のように縮環構造内の酸素とカルボニル酸素が互い違いとなる配座が優先することがわかった。この構造は、酸素-酸素間にはカルコゲン結合は形成せず、むしろ電子的な反発が働いたためと考えられた。

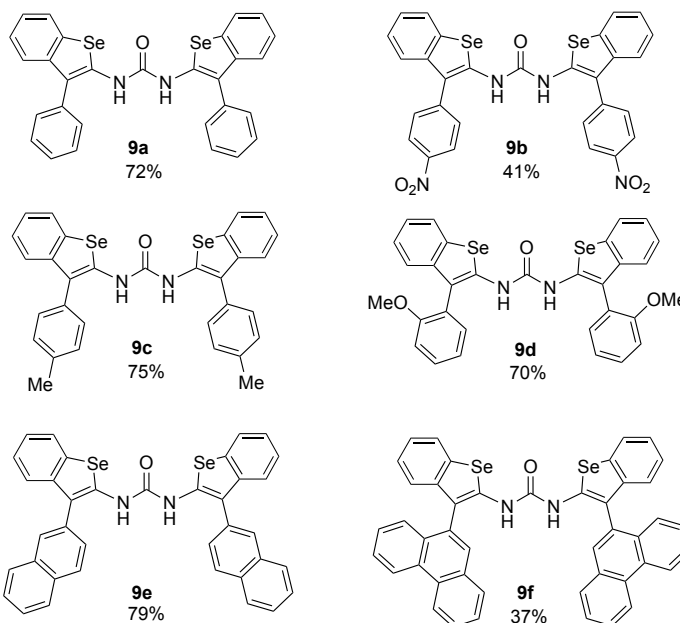
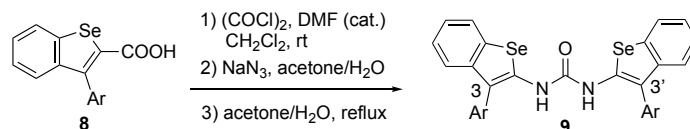
一方、硫黄やセレンを持つウレア **4a, 4b** では、アセトンから得られた単結晶の X 線構造解析により、カルボニル酸素の両側にカルコゲン結合が形成され X...O...X が直線状に配置する極めて平面性の高い立体構造に制御されることを明らかにした。これらの結晶構造により示唆されたカルコゲン結合は、DFT 計算により裏付けた。ωB97XD/6-311G(d,p) レベルでの NCI 解析および NBO 解析の結果、**4a** では硫黄と酸素原子の間にカルコゲン結合を形成していることが裏付けられた。特に NBO 解析の結果から、**4a** の二次摂動エネルギーは、カルボニル酸素 s-type の非共有電子対 (LP1) に対し 0.84, 0.76 kcal/mol、p-type の非共有電子対 (LP2) に対し 1.95, 1.85 kcal/mol 程度であったが、**4b** のセレン原子を介したカルコゲン結合は、LP1 に対し 1.78, 1.53 kcal/mol、LP2 に対し 3.43, 3.04 kcal/mol を示し、より強力な相互作用を形成していることが判明した。

さらに、3,3' 位にナフチル基を導入した**9e** の X 線構造解析も行った。その結果、カルコゲン結合による配座制御により、2 つのナフチル基が NH 基側に平行に配置し、そのナフチル基同士で隔たれた空間に結晶溶媒のテトラヒドロフランが包接され、水素結合および C-H/π相互作用を介して取り込まれることを X 線構造解析から明らかにした。

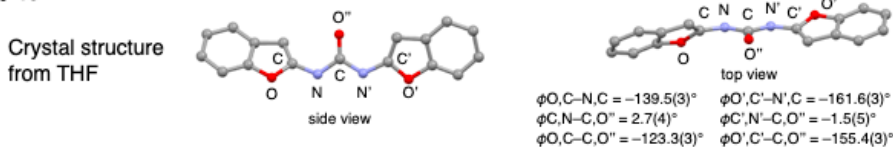
カルコゲン原子を持つウレア誘導体の酸性度²⁾

硫黄およびセレンを持つウレア **4a, 4b** の酸性度を測定した。**4a** は pK_a = 12.4 ± 0.1 (DMSO)、**4b** は pK_a = 11.5 ± 0.1 (DMSO) の pK_a 値を示し、セレン誘導体により強い酸性を示すことを明らかにした。本結果より、これらのウレア誘導体において、カルコゲン結合の増強は酸性の増大をもたらすことが示唆された。

以上の研究結果は、カルコゲン結合が、触媒として期待される分子の構造制御や物性の調節に有効に働くことを示すもので、高い選択性や触媒活性を発揮する高性能触媒の開発に向けた基礎知見となるものである。今後の触媒開発への応用が期待される。

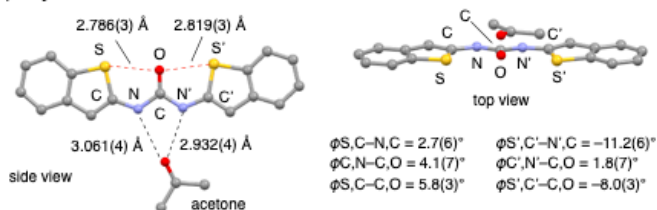


化合物 4c

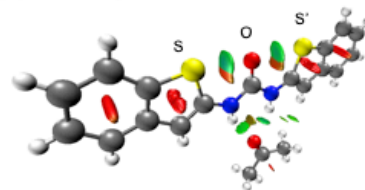


化合物 4a

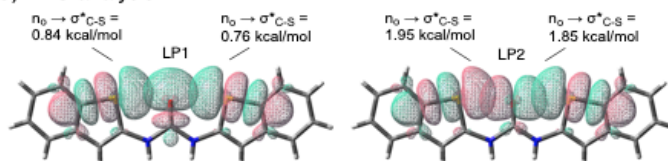
(A) Crystal structure from acetone



(B) NCI analysis

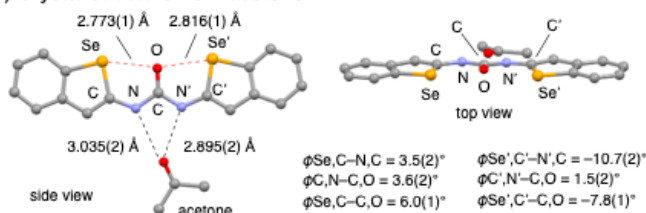


(C) NBO analysis

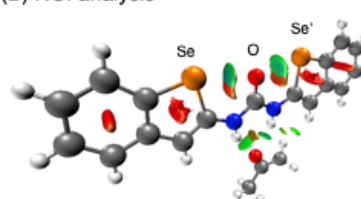


化合物 4b

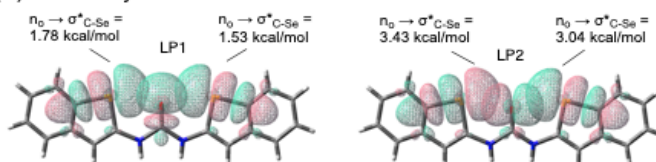
(A) Crystal structure from acetone



(B) NCI analysis



(C) NBO analysis

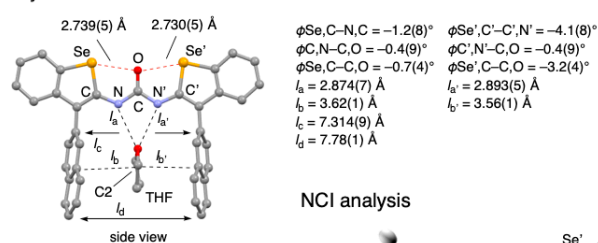


References

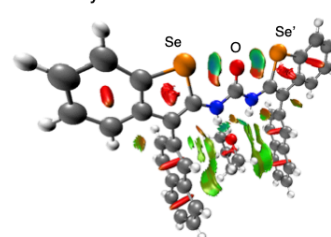
- 1) Murai, T.; Hamada, S.; Kobayashi, Y.; Sasamori, T.; Furuta, T. Synthesis, structural and physical properties of axially chiral biaryl dicarboxylic acids bearing chalcogen atoms. *Chem. Pharm. Bull.* 66, 605–615 (2022).
- 2) Inoue, T.; Ota, M.; Amijima, Y.; Takahashi, H.; Hamada, S.; Nakamura, S.; Kobayashi, Y.; Sasamori, T.; Furuta, T. Dual chalcogen-bonding interactions for the conformational control of urea. *Chem. Eur. J.* e202320139 (2023).

化合物 9e

Crystal structure from THF



NCI analysis



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計14件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

| | |
|--|-----------------------------|
| 1. 著者名 古田 巧 | 4. 巻 59 |
| 2. 論文標題 カルコゲン結合を活用した触媒構造制御 | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 ファルマシア | 6. 最初と最後の頁 745 ~ 747 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14894/faruawpsj.59.8_745 | 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 - |
| 1. 著者名 Inoue Takumi, Ota Moe, Amijima Yui, Takahashi Haru, Hamada Shohei, Nakamura Seikou, Kobayashi Yusuke, Sasamori Takahiro, Furuta Takumi | 4. 巻 29 |
| 2. 論文標題 Dual Chalcogen Bonding Interactions for the Conformational Control of Urea** | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 Chemistry-A European Journal | 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.202302139 | 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 Hamada Shohei, Sakamoto Kaori, Miyazaki Eri, Elboray Elghareeb E., Kobayashi Yusuke, Furuta Takumi | 4. 巻 13 |
| 2. 論文標題 Diverse Site-Selective Transformation of Benzylic and Allylic Silyl Ethers via Organocatalytic Oxidation | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 ACS Catalysis | 6. 最初と最後の頁 8031 ~ 8037 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.3c01153 | 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 Hamada Shohei, Sumida Maiko, Yamazaki Rikako, Kobayashi Yusuke, Furuta Takumi | 4. 巻 88 |
| 2. 論文標題 Oxidative Deprotection of Benzyl Protecting Groups for Alcohols by an Electronically Tuned Nitroxyl-Radical Catalyst | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry | 6. 最初と最後の頁 12464 ~ 12473 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.3c01217 | 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 Murai Takuya, Hamada Shohei, Kobayashi Yusuke, Sasamori Takahiro, Furuta Takumi | 4. 巻 70 |
| 2. 論文標題 Syntheses, and Structural and Physical Properties of Axially Chiral Biaryl Dicarboxylic Acids Bearing Chalcogen Atoms | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Chemical and Pharmaceutical Bulletin | 6. 最初と最後の頁 605 ~ 615 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1248/cpb.c22-00217 | 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 Murai Takuya, Xing Yongning, Kurokawa Mayu, Kuribayashi Toshifumi, Nikaido Masanori, Elboray Elghareeb E., Hamada Shohei, Kobayashi Yusuke, Sasamori Takahiro, Kawabata Takeo, Furuta Takumi | 4. 巻 87 |
| 2. 論文標題 One-Pot Preparation of (<i>NH</i>)-Phenanthridinones and Amide-Functionalized [7]Helicene-like Molecules from Biaryl Dicarboxylic Acids | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry | 6. 最初と最後の頁 5510 ~ 5521 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.1c02769 | 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 Inoue Takumi, Hamada Shohei, Nakamura Rina, Kobayashi Yusuke, Sasamori Takahiro, Furuta Takumi | 4. 巻 104 |
| 2. 論文標題 Synthesis of Amide-Functionalized Thia[7]helicene-Like Molecule and Its Supramolecular Assembly in the Solid State | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 HETEROCYCLES | 6. 最初と最後の頁 786 ~ 786 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3987/COM-21-14603 | 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 Kimura Tomohiro, Hamada Shohei, Furuta Takumi, Takemoto Yoshiji, Kobayashi Yusuke | 4. 巻 24 |
| 2. 論文標題 <i>N</i>-Acylimino- ³-iodanes from the Metathesis of Iodosoarenes and Nitriles for the Photoinduced C?H Perfluoroacylation of (Hetero)Arenes | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Organic Letters | 6. 最初と最後の頁 4835 ~ 4839 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.2c02054 | 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 Hamada Shohei, Yano Kyoko, Kobayashi Yusuke, Kawabata Takeo, Furuta Takumi | 4. 巻 83 |
| 2. 論文標題 Oxidation of cyclic benzylic ethers by an electronically tuned nitroxyl radical | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Tetrahedron Letters | 6. 最初と最後の頁 153404 ~ 153404 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tetlet.2021.153404 | 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 Kimura Tomohiro, Hamada Shohei, Furuta Takumi, Takemoto Yoshiji, Kobayashi Yusuke | 4. 巻 11 |
| 2. 論文標題 Synthesis and Properties of ortho-t-BuSO ₂ C ₆ H ₄ -Substituted Iodonium Ylides | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Crystals | 6. 最初と最後の頁 1085 ~ 1085 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst11091085 | 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 Yusuke, Masakado Sota, Murai Takuya, Hamada Shohei, Furuta Takumi, Takemoto Yoshiji | 4. 巻 19 |
| 2. 論文標題 A bench-stable <i>N</i> -trifluoroacetyl nitrene equivalent for a simple synthesis of 2-trifluoromethyl oxazoles | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Organic & Biomolecular Chemistry | 6. 最初と最後の頁 6628 ~ 6632 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1ob00947h | 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 Imayoshi Ayumi, Lakshmi Bhatraju Vasantha, Ueda Yoshihiro, Yoshimura Tomoyuki, Matayoshi Aki, Furuta Takumi, Kawabata Takeo | 4. 巻 12 |
| 2. 論文標題 Enantioselective preparation of mechanically planar chiral rotaxanes by kinetic resolution strategy | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Nature Communications | 6. 最初と最後の頁 404 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-20372-0 | 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 Murai Takuya, Lu Wenjie, Kuribayashi Toshifumi, Morisaki Kazuhiro, Ueda Yoshihiro, Hamada Shohei, Kobayashi Yusuke, Sasamori Takahiro, Tokitoh Norihiro, Kawabata Takeo, Furuta Takumi | 4. 巻 11 |
| 2. 論文標題 Conformational Control in Dirhodium(II) Paddlewheel Catalysts Supported by Chalcogen-Bonding Interactions for Stereoselective Intramolecular C-H Insertion Reactions | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 ACS Catalysis | 6. 最初と最後の頁 568 - 578 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.0c03689 | 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 Furuta Takumi, Xing Yongning, Nikaido Masanori, Murai Takuya, Hamada Shohei, Kobayashi Yusuke, Sasamori Takahiro, Kawabata Takeo | 4. 巻 103 |
| 2. 論文標題 Concise Synthesis of an Amide-Functionalized [7]Helicene-like Molecule via Intramolecular Amidation | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 HETEROCYCLES | 6. 最初と最後の頁 544 - 544 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3987/COM-20-S(K)40 | 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28件（うち招待講演 3件 / うち国際学会 0件）

| |
|--|
| 1. 発表者名 古田 巧 |
| 2. 発表標題 ピアリアル型アミノ酸の創製からカルコゲン結合による触媒構造制御への展開 |
| 3. 学会等名 2023年度有機合成化学北陸セミナー（招待講演） |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 網島 唯、井上 拓美、太田 萌絵、森田 名美、浜田 翔平、小林 祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合により配座制御されたウレア誘導体の立体構造と物性 |
| 3. 学会等名 第73回日本薬学会関西支部総会・大会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 中村 優希、三上 紋加、松山 千夏、井上 拓美、浜田 翔平、小林 祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合を持つロジウム二核錯体の合成と第二級アルコールの位置選択的アルキル化の検討 |
| 3. 学会等名 第73回日本薬学会関西支部総会・大会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 森田 名美、井上 拓美、太田 萌絵、浜田 翔平、古田 巧、小林 祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン元素を持つチオウレア誘導体の合成と立体構造 |
| 3. 学会等名 第43回有機合成若手セミナー「明日の有機合成を担う人のために」 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 高橋 暖、中村 梨那、太田 萌絵、井上 拓美、村井 琢哉、笹森 貴裕、浜田 翔平、小林 祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合で立体制御したウレア型軸性不斉配位子の合成 |
| 3. 学会等名 第21回次世代を担う有機化学シンポジウム |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 高橋 暖、中村 梨那、太田 萌絵、井上 拓美、村井 琢哉、笹森 貴裕、浜田 翔平、小林 祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合で立体制御したピピリジル部を持つ軸性不斉非対称ウレアの合成 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第143年会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 井上 拓美、太田 萌絵、中村 梨那、網島 唯、高橋 暖、笹森 貴裕、浜田 翔平、小林 祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合による配座制御ウレアの合成とその物性評価 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第143年会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 高橋 暖、中村梨那、太田萌絵、井上 拓美、村井琢哉、笹森 貴裕、浜田翔平、小林祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合で立体制御した軸性不斉ウレアの合成と立体構造 |
| 3. 学会等名 第72回日本薬学会関西支部総会・大会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 井上 拓美、太田萌絵、中村梨那、網島 唯、高橋 暖、村井琢哉、笹森 貴裕、浜田翔平、小林祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 二重のカルコゲン結合で構造制御したウレアの合成とその立体構造 |
| 3. 学会等名 第20回次世代を担う有機化学シンポジウム |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 松山千夏、Elghareeb Elboray、井上拓美、村井琢哉、浜田翔平、小林祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合による基質認識を志向したロジウム二核錯体の合成と位置選択性の検討 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第142年会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 中村梨那、太田萌絵、井上拓美、村井琢哉、笹森 貴裕、浜田翔平、小林祐輔、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合で構造制御した軸性不斉ウレア誘導体の合成 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第142年会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 村井琢哉、浜田翔平、小林祐輔、笹森貴裕、古田 巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン元素を有する不斉ロジウム二核錯体の合成と立体構造の解 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第142年会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 古田 巧 |
| 2. 発表標題 ピアリール型アミノ酸の創製からカルコゲン元素による触媒構造の制御へ |
| 3. 学会等名 近畿化学協会ヘテロ原子部会2021年度第3回懇話会（招待講演） |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 村井琢哉、井上拓美、森崎一宏、上田善弘、浜田翔平、小林祐輔、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン元素を持つロジウム二核錯体の合成と不斉誘起能の評価 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第141年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 井上拓美、中村梨那、村井琢哉、笹森貴裕、浜田翔平、小林祐輔、古田巧 |
| 2. 発表標題 縮環構造内に硫黄を持つ二核ロジウム触媒と[7]ヘリセン様化合物の合成 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第141年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 浜田翔平、矢野恭子、Elghareeb E. Elboray、小林祐輔、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 Electronic Tuning 型ニトロキシル酸化触媒によるイソクロマンの酸化 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第141年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 黒川真由、村井琢哉、刑永寧、Elboray Elghareeb、浜田翔平、小林祐輔、笹森貴裕、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 ピアリールジカルボン酸からのフェナントリジノン誘導体のワンポット合成 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第141年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名 角田舞子、浜田翔平、杉本晃一、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 ニトロキシル型酸化触媒によるベンジル系保護基の脱保護 |
| 3. 学会等名 日本薬学会第141年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 村井琢哉、井上拓美、圓井亜由美、森崎一宏、上田善弘、浜田翔平、小林祐輔、笹森貴裕、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン元素を含む軸性不斉ジカルボン酸の合成とロジウム二核錯体への展開 |
| 3. 学会等名 第19回次世代を担う有機化学シンポジウム |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 角田舞子、浜田翔平、杉本晃一、小林祐輔、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 ニトロキシラジカルを用いたベンジル系保護基の脱保護 |
| 3. 学会等名 第41回有機合成若手セミナー 明日の有機合成を担う人のために |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 飯田雅士、浜田翔平、小林祐輔、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 Electronic Tuning 型ニトロキシル酸化触媒による第二級水酸基選択的酸化 |
| 3. 学会等名 第41回有機合成若手セミナー 明日の有機合成を担う人のために |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 太田萌絵、中村梨那、井上拓美、村井琢哉、浜田翔平、小林祐輔、古田巧 |
| 2. 発表標題 二重のカルコゲン結合によるウレア誘導体の構造制御 |
| 3. 学会等名 第41回有機合成若手セミナー 明日の有機合成を担う人のために |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 村井琢哉、古門大輔、森崎一宏、上田善弘、浜田翔平、小林祐輔、笹森貴裕、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合を介して配座制御されたロジウム二核錯体による天然 γ -ラクトンの不斉合成 |
| 3. 学会等名 第 6 3 回天然有機化合物討論会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 村井琢哉、浜田翔平、小林祐輔、笹森貴裕、古田巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン元素を含むロジウム二核錯体の合成と不斉誘起能の評価 |
| 3. 学会等名 第 5 0 回複素環化学討論会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 太田萌絵、中村梨那、井上拓美、村井琢哉、浜田翔平、小林祐輔、笹森貴裕、古田巧 |
| 2. 発表標題 二重のカルコゲン結合を利用したウレア誘導体の構造制御 |
| 3. 学会等名 第 7 1 回 日本薬学会 関西支部大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 松山千夏、Elghareeb Elboray、井上拓美、村井琢哉、浜田翔平、小林祐輔、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 カルコゲン結合による基質認識を志向したロジウム二核錯体の合成研究 |
| 3. 学会等名 第 7 1 回 日本薬学会 関西支部大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 浜田翔平、角田舞子、杉本晃一、Elghareeb E. Elboray、小林祐輔、川端猛夫、古田巧 |
| 2. 発表標題 ニトロキシラジカルを触媒としたベンジル系保護基の脱保護 |
| 3. 学会等名 第54回酸化反応討論会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 古田巧 |
| 2. 発表標題 ヒアリアル型人工アミノ酸の創製を起点とする触媒開発 |
| 3. 学会等名 第41回有機合成若手セミナー 明日の有機合成を担う人のために（招待講演） |
| 4. 発表年 2021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 |
|-------|---|-------------------------------|----|
| 研究分担者 | 小林 祐輔 (Kobayashi Yusuke) (90509275) | 京都薬科大学・薬学部・准教授 (34306) | |
| 研究分担者 | 浜田 翔平 (Hamada Shohei) (00833170) | 京都薬科大学・薬学部・助教 (34306) | |

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 |
|---------|---------|
|---------|---------|