

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 24 日現在

機関番号：12101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K05016

研究課題名(和文)量子化学・情報科学融合アプローチによる金属及び酵素触媒反応機構の解明

研究課題名(英文)Mechanistic Insights into metal- and enzyme-catalyzed reactions using hybrid quantum chemical and information science approaches

研究代表者

森 聖治 (MORI, SEIJI)

茨城大学・理工学研究科(理学野)・教授

研究者番号：50332549

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、高精度量子化学計算と情報科学的解析を融合させることで、合成化学的に重要な金属を用いた均一的触媒反応および、医学的にも重要な酵素反応機構の非共有結合性相互作用、添加物の効果、立体配座によるエネルギー分布をはじめとした統計力学的効果および動力学効果の役割を明確にすることを目的とする。期間全体の実績として、(1)金属触媒を用いた種々の化学選択的あるいは立体選択的な分子変換反応に関するDFT計算を行い、メカニズムの解明や律速段階の予測などを種々の論文に報告した。(2)さまざまな酵素の化学的性質を、マルチフィジックス手法や情報科学的手法を組み合わせながら検討し、立体配座の重要性を理解した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

以上行った研究は、医薬の設計や高効率・選択的反応設計に役立つであろうと考えられる。さらに、マルチフィジックス的手法や情報科学的解析方法を駆使していることから、これらの改良・開発にも指針を与えると期待される。

研究成果の概要(英文)：In this study, we aim to clarify the roles of non-covalent interactions, effects of additives, and energy distributions due to stereoconformations, as well as statistical mechanical effects and kinetic effects in homogeneous metal-catalyzed reactions that are important in synthetic chemistry, and in enzyme reaction mechanisms that are also medically significant, by integrating high-precision quantum chemical calculations with informatics analysis. As achievements over the entire period, we have (1) conducted DFT calculations on various chemically-selective or stereoselective molecular transformation reactions using metal catalysts, reported the elucidation of mechanisms and prediction of rate-determining steps in various scientific papers, and (2) examined the chemical properties of various enzymes, understanding the importance of stereoconformations while combining multiphysics methods with informatics techniques.

研究分野：理論有機化学

キーワード：触媒反応 酵素反応 密度汎関数計算 非共有結合性相互作用 QM/MM法 反応機構

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

有機合成化学の分野で重要な高選択的・高効率触媒分子変換反応のメカニズムに関する量子化学計算は、反応の開発に伴って数多く実施されてきた。有機分子変換反応の選択性は、いままで置換基の電子的効果や立体反発で説明されてきた。2010年以降、DFT 計算法では分散相互作用が考慮されてきたことから、反応経路解析はより緻密になってきている。非共有結合性相互作用を解析する手法として、電子密度の一次・二次勾配に基づいた解析法が開発され、反応の前駆体、遷移状態や生成物における結合や相互作用の解析に応用されてきている。生体分子の安定性や酵素反応機構においても、分散相互作用が重要な役割を果たすことは容易に想像できるが、量子力学理論を用いて解析された例はほとんどない。

2. 研究の目的

本研究では、情報科学的解析、シングルおよびマルチフィジックス的手法（量子化学計算、QM/MM 法など）を組み合わせ、分子変換反応の反応性や選択性、非共有結合性相互作用の役割や立体配座の効果を解析することを目的とする。これらの知見により、反応や触媒設計に役立つことが期待される。

3. 研究の方法

量子化学計算や QM/MM 計算には Gaussian 16 Rev. B. 01 あるいは Rev. C 01, ORCA 5.0, および GAMESS (September 30, 2022 R2 Public Release) プログラムを用いた。さらに、化学結合解析に用いられる QTAIM 解析、非共有結合性相互作用(NCI)の表示には、VMD および Multiwfn 3.8 を用いた。酵素反応や機能の研究に関しては、分子動力学 (MD) シミュレーション及び量子力学と分子力学のハイブリッド (QM/MM) 計算を行ったほか、ONIOM-MM(DFT:MM)計算により構造最適化などを行った。

4. 研究成果

(1) バナジウム-オキソ触媒による 3 成分不斉カップリング反応

有機フッ素化合物は、様々な分野で利用されており、特に、医薬分野において注目されている。CF₃ 基を導入すると、強い電子吸引性、酸化的代謝に対する安定性の向上(強い C-F 結合)、脂溶性の向上などの機能を有機化合物に与えることができる。*tert*-ロイシンから誘導された三座 Schiff 塩基配位子 (N-サリチリデン型配位子) を含むオキソバナジウム触媒と Togni 試薬(ヨウ素を含む)の組み合わせを用いて、常温でオレフィンのトリフルオロメチル化の反応を起こすことに成功した。酸化的トリフルオロメチル化反応による不斉炭素の構築は分子間反応として初めての例である (図 1)。

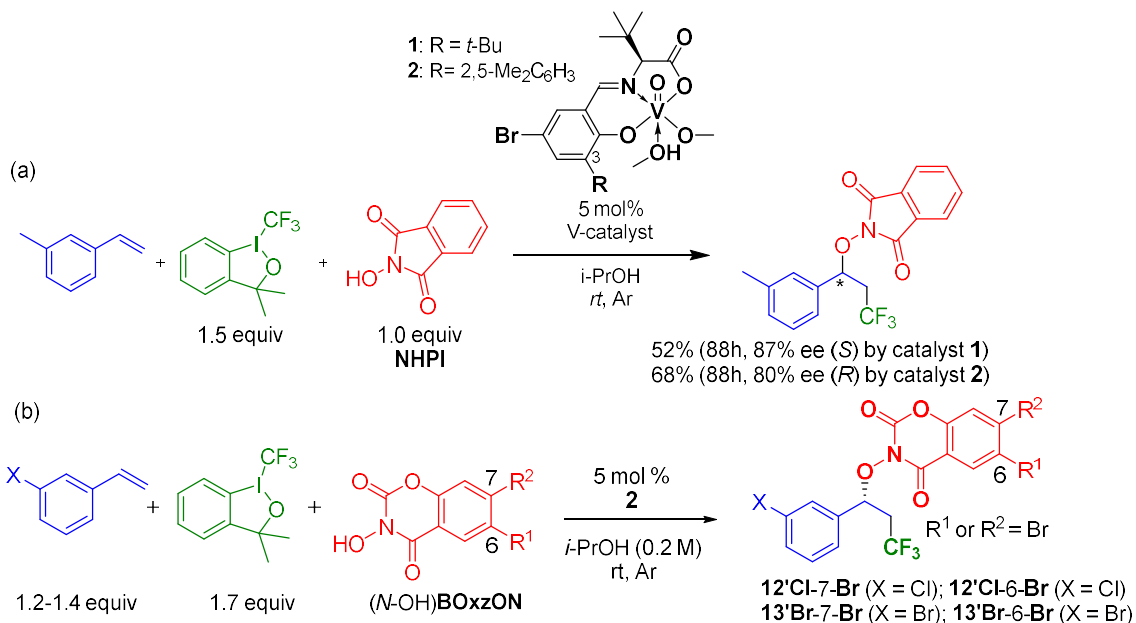


図1 キラルなバナジウムオキシ触媒を用いた、スチレン誘導体、Togni II 試薬と(a) *N*-hydroxyphthalimide (NHPI) あるいは(b) 1-benzyl-quinazoline-2,4-diones ((*N*-OH)BOxzON)の高エナンチオ選択的な酸化的トリフルオロメチル化反応

スチレン、NHPI(*N*-ヒドロキシフタルイミド)あるいは 1-benzyl-quinazoline-2,4-diones((*N*-OH)BOxzON)とオレフィンの3成分 1,2-酸化的トリフルオロメチル化の反応機構を検討したところ、Togni 試薬から放出された CF₃ ラジカルがオレフィン基質に付加して生成したベンジルラジカルが NHPI 由来の NOPI 配位子の O² 原子に攻撃してラジカル置換反応が起きる経路(S_H2 反応的)がもっともらしいことが分かった。

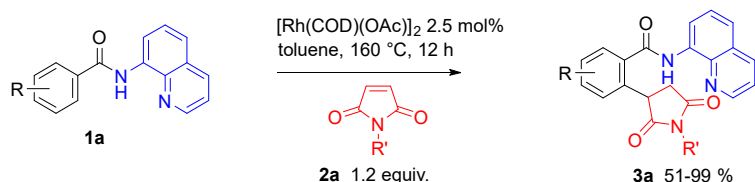
一方、配位子の C3 位が(2,5-dimethyl)phenyl 基の触媒 2 を用いた場合(*R*)-体を主に生成するというエナンチオ選択性の原因に関して、非共有結合性相互作用 (NCI)解析および分子内原子の量子論(QTAIM)解析を行った結果、(2,5-dimethyl)phenyl 置換基と NOPI の間に基質由来のベンジルラジカルが挟まりπ-π相互作用が起きていることが説明できる。

NHPI から(*N*-OH)BOxzON にカップリングパートナーが変わると非共有結合性相互作用が増し、エナンチオ選択性の向上が見られると考えられる理論的結果を得た。

(2) ロジウムおよびパラジウム触媒による炭素-水素結合活性化を経由した配向基を含む α-マレイミドとのカップリング反応

C-H 結合の活性化反応を含む環化付加反応は、従来の反応に比べて、基質を事前に活性化する必要がなく、反応の工程数を減らすことができるため、有機合成の分野において非常に重要なものとなっている。Rh 触媒マレイミドの C-H アルケニル化反応において、ベンズアミドの配向基が変わると、生成物が異なることが実験によって示された。ただし、これらの反応機構はまだ未解明のままだった。*N*-8-アミノキノリニルベンズアミド誘導体および *N*-(2-メチルチオ)フェニルベンズアミド誘導体を配向基として用いた、Rh 触媒マレイミドの C-H アルケニル化反応(図2)の DFT 計算を行った。

(a) C-H alkylation of *N*-8-aminoquinoliny benzamide



(b) C-H alkylation of *N*-(2-methylthio)phenyl benzamide

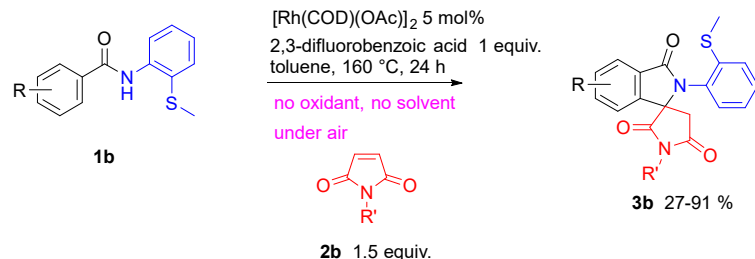
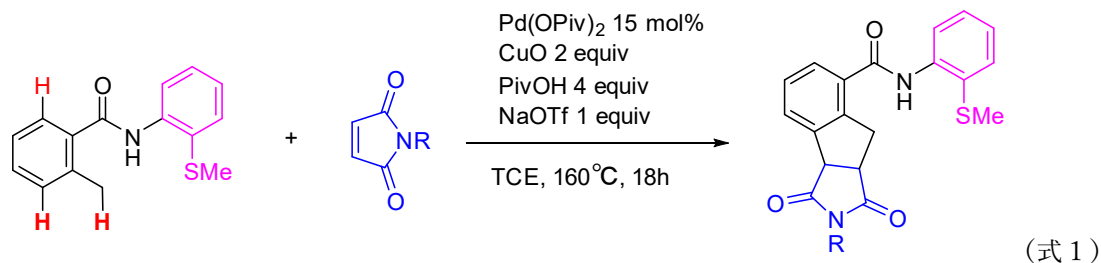


図2 ロジウム(I)触媒を用いたマレイミドの酸化的 C-H アルケニル化反応

いずれの反応も、酸化的付加/転移挿入 (OA/MI) の方が配位子間水素移動 (LLHT) に比べて有利であること、触媒の turnover を決める段階が、酸化的付加および転移挿入であることもわかった。

次に、2020 年に大阪大学の茶谷らによって開発されたベンジル位とメタ位の二つの C-H 結合活性化を経由したパラジウム触媒によるマレイミドの位置選択的な[3+2]環化付加反応 (式 1) について、DFT 計算を行った。



窒素の脱プロトン化、ベンジル位の C-H 結合活性化を介するマレイミドの挿入、メタ位の C-H 結合活性化 (触媒回転頻度決定段階)、そして還元的脱離を含む 4 ステップからなる経路からなることがわかった。

(3) マルチフィジックス計算と情報科学的解析を融合した手法の、酵素の機能および反応への適用

(3-1)医学的にも重要な酵素である 3 α -ヒドロキシステロイドデヒドロゲナーゼ(3 α -HSD)のダイナミクスと還元反応 (図 3) の検討を計算科学的に行った。我々は活性部位周辺における各残基の役割を詳述するために分子動力学 (MD) シミュレーション及び量子力学と分子力学のハイブリッド (QM/MM) 計算を行った。100 ns の MD シミュレーションにおいては、結果について DBSCAN (Density-based Spatial Clustering of Applications with Noise)法でクラスタリングを行った。さらに、代表的なクラスターについて、ONIOM-ME(M06-2X/def-2SVP:Amber)計算により構造最適化を行った。QM/MM 計算後の電子密度トポロジカル解析によって、還元剤である補因子 NADPH の近傍にある Tyr216 残基は、NADPH と Tyr216 ベンゼン環の間の非共有結合相互作用によって反応の進行を助け、生成物の安定化に寄与するという重要な役割を持つと示唆された (図 3 (b))。

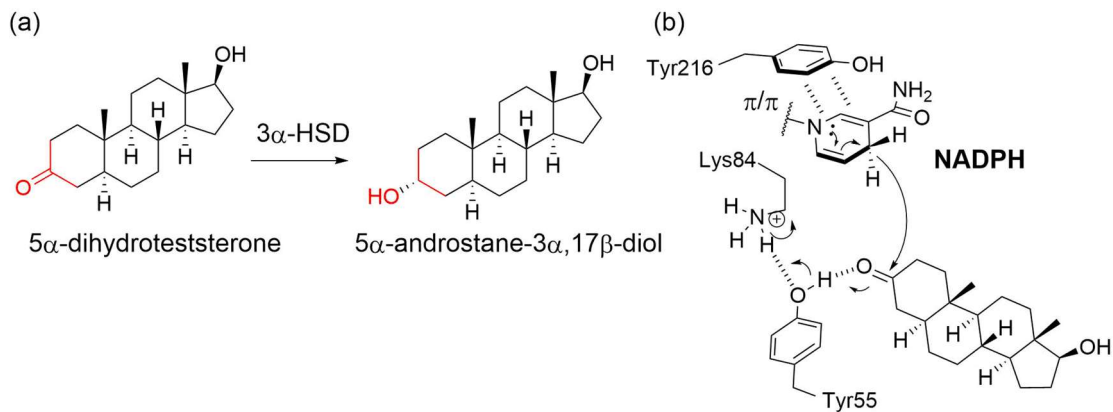


図3 5α-ジヒドロテストステロンから、5α-androstane-3α,17β-diol を生成する 3α-ヒドロキシステロイドデヒドロゲナーゼ触媒の還元反応経路

また、基質と相互作用している水分子を含め、適切な QM 領域の設定が重要であることが明らかになった。

(3-2) フェレドキシソキシゲナーゼ PcyA と基質であるビリベルジン (BV: ヘム分解物質) の複合体および PcyA D105N-BV および I86D-BV 複合体における、ビリベルジンとその周囲のプロトン化状態について、中性子結晶構造解析と QM/MM 計算および TD-DFT 計算を組み合わせ報告した。さらに PcyA の I86D-BV 複合体が 730 nm 周辺で鋭い吸収ピークを持つユニークな可視吸収スペクトルを示すことを見出した。QM(TD-DFT)/MM 計算による可視吸収スペクトルの解析から、BV の 4 つの環のうちの D 環に結合するビニル基のそばで Glu76 残基がプロトン化されているほか、いくつかのプロトン化状態が混合していることが示唆された。

(3-3) ブルー銅タンパク質の機能に関する計算化学的研究

ブルー銅タンパク質の一種であるシュウドアズリン (PAz) は電子伝達タンパク質として知られ、生体内における窒素循環において、 N_2O を N_2 へと還元する亜硝酸還元酵素への電子供与体として働く。酸化還元を担う銅中心に配位した His81 に接近しているメチオニン残基 Met16X (X = Phe, Leu, Val, Ile) 変異体について、第二配位圏を介した非共有結合相互作用 (NCI) の機能を明示した (図4)。Leu 変異体は高等植物、Phe 変異体はシダ植物でよくみられる。放射光を用いた Met16X PAz の高分解能 X 線結晶解析および QM/MM 計算+NCI 解析を行うことによって、活性部位の構造が Met16 の置換によって大きく影響を受けていることを示した。

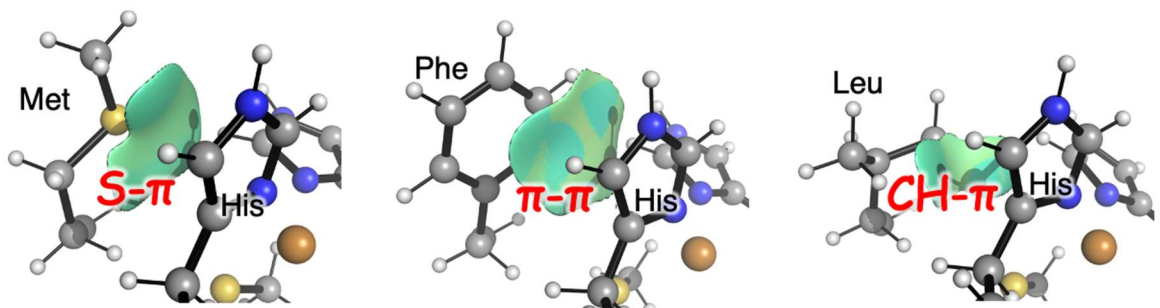


図4 量子化学計算によって可視化された、シュウドアズリン第二配位圏における非共有結合性相互作用の分布。第二配位圏のアミノ酸の種類によって S-π 相互作用、π-π 相互作用、CH-π 相互作用がそれぞれ見いだされた。

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 4件／うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Shima Yuto, Suzuki Takashi, Abe Hitoshi, Yajima Tatsuo, Mori Seiji, Shimazaki Yuichi	4. 巻 58
2. 論文標題 Non-innocent redox behavior of Cu(I)- π -dimethylaminophenolate complexes: formation and characterization of the Cu(I)-phenoxy radical species	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 6401 ~ 6404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cc01409b	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 Yamakawa Yuki, Ikuta Takashi, Hayashi Hiroki, Hashimoto Keigo, Fujii Ryoma, Kawashima Kyohei, Mori Seiji, Uchida Tatsuya, Katsuki Tsutomu	4. 巻 87
2. 論文標題 Iridium(III)-Catalyzed Asymmetric Site-Selective Carbene C-H Insertion during Late-Stage Transformation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 6769 ~ 6780
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.2c00470	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 Joutsuka Tatsuya, Nanasawa Ryota, Igarashi Keisuke, Horie Kazuki, Sugishima Masakazu, Hagiwara Yoshinori, Wada Kei, Fukuyama Keiichi, Yano Naomine, Mori Seiji, Ostermann Andreas, Kusaka Katsuhiko, Unno Masaki	4. 巻 299
2. 論文標題 Neutron crystallography and quantum chemical analysis of bilin reductase PcyA mutants reveal substrate and catalytic residue protonation states	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Biological Chemistry	6. 最初と最後の頁 102763 ~ 102763
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jbc.2022.102763	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 Skhiri Aymen, Taborosi Attila, Ohara Nozomi, Ano Yusuke, Mori Seiji, Chatani Naoto	4. 巻 10
2. 論文標題 Experimental and theoretical studies of the rhodium(I)-catalysed C-H oxidative alkylation/cyclization of N-(2-(methylthio)phenyl)benzamides with maleimides	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Organic Chemistry Frontiers	6. 最初と最後の頁 1617 ~ 1625
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3qo00023k	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 Sakai Naoki, Ojima Kohei, Mori Seiji, Oriyama Takeshi	4. 巻 87
2. 論文標題 Integrated Experimental and Computational Studies on the Organocatalytic Kinetic Resolution of -Unfunctionalized Primary Alcohols Using a Chiral 1,2-Diamine: The Importance of Noncovalent Interactions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4468 ~ 4475
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.1c03033	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 Taborosi Attila, He Qiyuan, Ano Yusuke, Chatani Naoto, Mori Seiji	4. 巻 87
2. 論文標題 Reaction Path Determination of Rhodium(I)-Catalyzed C-H Alkylation of N-8-Aminoquinolinyl Aromatic Amides with Maleimides	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 737 ~ 743
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.1c02737	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 Takeyama Tomoyuki, Suzuki Takashi, Kikuchi Misa, Kobayashi Misato, Oshita Hiromi, Kawashima Kyohei, Mori Seiji, Abe Hitoshi, Hoshino Norihisa, Iwatsuki Satoshi, Shimazaki Yuichi	4. 巻 2021
2. 論文標題 Solid State Characterization of One and Two Electron Oxidized CuII salen Complexes with para Substituents: Geometric Structure Magnetic Property Relationship	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 European Journal of Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4133 ~ 4145
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejic.202100776	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 Udagawa Taro, Murphy Rhys B., Darwish Tamim A., Tachikawa Masanori, Mori Seiji	4. 巻 94
2. 論文標題 H/D Isotope Effects in Keto-Enol Tautomerism of -Dicarbonyl Compounds: Importance of Nuclear Quantum Effects of Hydrogen Nuclei	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1954 ~ 1962
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20210083	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 Su Kuan-Hsuan, Wu Chin-Teng, Lin Shang-Wei, Mori Seiji, Liu Wei-Min, Yang Hsiao-Ching	4. 巻 155
2. 論文標題 Calculation of CYP450 protein-ligand binding and dissociation free energy paths	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 025101 ~ 025101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0046169	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 Sakai Naoki, Kawashima Kyohei, Kajitani Masashi, Mori Seiji, Oriyama Takeshi	4. 巻 23
2. 論文標題 Combined Computational and Experimental Studies on the Asymmetric Michael Addition of α -Aminomaleimides to β -Nitrostyrenes Using an Organocatalyst Derived from Cinchona Alkaloid	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 5714 ~ 5718
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.1c01831	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 Chen Chien-Tien, Su Yu-Cheng, Lu Chia-Hao, Lien Chien-I, Hung Shiang-Fu, Hsu Chan-Wei, Agarwal Rachit, Modala Ramuasagar, Tseng Hung-Min, Tseng Pin-Xuan, Fujii Ryoma, Kawashima Kyohei, Mori Seiji	4. 巻 11
2. 論文標題 Enantioselective Radical Type, 1,2-Oxytrifluoromethylation of Olefins Catalyzed by Chiral Vanadyl Complexes: Importance of Noncovalent Interactions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 7160 ~ 7175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.1c01813	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 Mitsuizumi Hiroaki, Mori Seiji	4. 巻 125
2. 論文標題 Combined MD and QM/MM Investigations of Hydride Reduction of 5 α -Dihydrotestosterone Catalyzed by Human 3 α -Hydroxysteroid Dehydrogenase Type 3: Importance of Noncovalent Interactions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 4998 ~ 5008
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpccb.1c01751	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 Hirato Misaki, Yokoya Akinari, Baba Yuji, Mori Seiji, Fujii Kentaro, Wada Shin-ichi, Izumi Yudai, Haga Yoshinori	4. 巻 25
2. 論文標題 Incorporation of a bromine atom into DNA-related molecules changes their electronic properties	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 14836 ~ 14847
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP01597A	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 Yamaguchi Takahide, Taborosi Attila, Sakai Chihiro, Akao Kohei, Mori Seiji, Kohzuma Takamitsu	4. 巻 246
2. 論文標題 Systematic elucidation of the second coordination sphere effect on the structure and properties of a blue copper protein, pseudoazurin	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Inorganic Biochemistry	6. 最初と最後の頁 112292 ~ 112292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jinorgbio.2023.112292	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 Yoshimoto Rie, Taborosi Attila, He Qiuyan, Ano Yusuke, Chatani Naoto, Mori Seiji	4. 巻 18
2. 論文標題 Theoretical Investigations of Palladium Catalyzed [3+2] Annulation via Benzylic and meta C-H Bond Activation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 e202300531
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.202300531	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 Tauchi Daiki, Kanno Katsuya, Hasegawa Masashi, Mazaki Yasuhiro, Tsubaki Kazunori, Sugiura Ken-ichi, Shiga Takuya, Mori Seiji, Nishikawa Hiroyuki	4. 巻 53
2. 論文標題 Aggregation-induced enhanced fluorescence emission of chiral Zn(ii) complexes coordinated by Schiff-base type binaphthyl ligands	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 8926 ~ 8933
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D4DT00903G	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 Chen Chien Tien, Hung Shiang Fu, Tsai Bang You, Chen Tsung Cheng, Lein Chien I, Tseng Pin Xuan, Chang Yu Chang, Chuang Chin Wei, Agarwal Rachit, Hsu Chan Wei, Shimizu Yuto, Fujii Ryoma, Mori Seiji	4. 巻 366
2. 論文標題 Asymmetric Cross Couplings of Trifluoromethyl Radical to Vinylarenes with <i>N</i> -Hydroxy oxazinediones and Subsequent Aerobic Oxidative Homocoupling of 2 Naphthols Catalysed by Chiral Vanadyl Complexes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Advanced Synthesis & Catalysis	6. 最初と最後の頁 248 ~ 261
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adsc.202300901	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 Taniguchi Naoya, Ueda Mitsuhiro, Michigami Kenichi, Mori Seiji, Ohashi Masato	4. 巻 97
2. 論文標題 Asymmetric cyclization catalyzed by a chiral phosphoric acid-gold(I) hybrid complex as a multifunctional catalyst	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 uoae026
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/bulcsj/uoae026	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22件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 Seiji Mori, Chien-Tien Chen
2. 発表標題 Combined DFT and experimental studies on the importance of noncovalent interactions in vanadium-catalyzed oxidative trifluoromethylation reactions of olefins
3. 学会等名 WATOC 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉元 理江、Attila Taborosi, Qiyuan He、阿野 勇介、茶谷 直人、森 聖治
2. 発表標題 パラジウム触媒を用いたマレイミドの[3+2]環化付加反応における 2-メチルベンズアミド類の窒素上の配向基効果に関する理論的研究
3. 学会等名 化学反応経路探索のニューフロンティア2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水雄仁、Chien-Tien Chen、森 聖治
2. 発表標題 キラルなバナジル触媒によるオレフィンのエナンチオ選択的 1,2-オキシトリフルオロメチル化反応における遷移状態の相互作用エネルギー分割解析
3. 学会等名 化学反応経路探索のニューフロンティア2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 穂積 玲於、川島 恭平、西原 康師、森 聖治
2. 発表標題 ニッケル触媒による脱カルボニル化を含む塩化アシルのシアノ化反応に関する理論的研究
3. 学会等名 錯体化学会第72回討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉元 理江、Attila Taborosi、Qiyuan He、阿野 勇介、茶谷 直人、森 聖治
2. 発表標題 パラジウム触媒による[3+2]環化付加反応を含むベンジル及びメタ炭素-水素結合活性化反応に関する理論的研究
3. 学会等名 錯体化学会第72回討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大塚 悠斗、西原 康師、森 聖治
2. 発表標題 パラジウム触媒を用いた四置換ビニルシランの檜山カップリングに関する理論的研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年秋季年会in 長野
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水 雄仁、Christof Israel Marbella Fontanilla、長田浩一、橋本 久子、森 聖治
2. 発表標題 モリブデン-ゲルミリン錯体によるカルボニル化合物のヒドロホウ素化反応の理論的研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会(2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 酒井 直樹、小島 高平、森 聖治、折山 剛
2. 発表標題 キラル1,2-ジアミン触媒を用いる 位に官能基を有さない第一級アルコールの速度論的光学分割
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡本 優悟, 森 聖治
2. 発表標題 パラジウム触媒によるAlkenyl Carboxylatesのクロスカップリング反応の理論的研究
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤井 稜馬, Bang-You Tsai, Tsung-Cheng Chen, Chien-I Lein, Yu-Chang Chang, Pin-Xuan Tseng, Chin-Wei Chuang, Rachit Agarwal, Chan-Wei Hsu, Chien-Tien Chen, 森 聖治
2. 発表標題 キラルなバナジウム触媒を用いた酸化的1,2-トリフルオロメチル化反応の理論的研究
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡本 優悟, 森 聖治
2. 発表標題 Theoretical Investigations of Palladium-Catalyzed Cross-Coupling of Alkenyl Carboxylates
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 酒井直樹, 森聖治, 折山剛, 川島恭平
2. 発表標題 Theoretical study on the asymmetric Michael addition of α -aminomaleimides to α -nitrostyrenes
3. 学会等名 令和3年度化学系学協会東北大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森 聖治
2. 発表標題 Computational Perspectives of Non-covalent Interactions in Transition Metal- and Enzyme-catalyzed Reactions
3. 学会等名 錯体化学会第71回討論会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 萬代充裕, 飯島愛璃, 坏優佳, 海野昌喜, 城塚達也, 森聖治
2. 発表標題 ピリン還元酵素PcyA-ピリベルジン 複合体の計算科学的研究
3. 学会等名 スーパーコンピュータワークショップ2022
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉元 理江、Attila Taborosi、Qiyuan He、阿野 勇介、茶谷 直人、森 聖治
2. 発表標題 パラジウム触媒による[3+2]環化付加反応の反応経路及び配向基効果に関する理論的研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会（横浜）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 萬代 充裕、加藤 俊介、小野田 晃、林 高史、森 聖治
2. 発表標題 MDシミュレーションを用いたCp*Rh(III)錯体連結型人工金属酵素NitrobindinHLH-Cp*Rh(III)における変異の影響の評価
3. 学会等名 錯体化学会第73回討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 清水雄仁、Christof Israel Marbella Fontanilla、長田 浩一、橋本久子、森 聖治
2. 発表標題 モリブデン - ゲルミリン錯体による芳香族アルデヒドのヒドロホウ素化反応に関する理論的研究
3. 学会等名 錯体化学会第73回討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 谷口 直哉、植田 光洋、道上 健一、森 聖治、大橋 理人
2. 発表標題 キラルリン酸-Au(I)複合錯体を用いた触媒的インドール縮環型七員環形成反応の不斉発現機構の解明
3. 学会等名 錯体化学会第73回討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 谷口 直哉、植田 光洋、道上 健一、森 聖治、大橋 理人
2. 発表標題 キラルリン酸-Au(I)複合錯体触媒を用いたエナンチオ選択的環化反応の開発
3. 学会等名 第49回反応と合成の進歩シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Christof Israel Marbella Fontanilla, Koichi Nagata, Yuto Shimizu, Seiji Mori, Hisako Hashimoto
2. 発表標題 Molybdenum-Germanium Triple-Bonded Complex for Base-Free Catalytic Hydroboration of Aldehydes and Ketones
3. 学会等名 7回ケイ素化学協会シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Seiji Mori
2. 発表標題 Importance of noncovalent interactions in homogeneous and enzymatic catalysis
3. 学会等名 TCS Conference 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Seiji Mori
2. 発表標題 Importance of noncovalent interactions in homogeneous and enzymatic catalysis
3. 学会等名 PACCON2024 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

物理有機化学ホームページ http://smori.sci.ibaraki.ac.jp/ 太陽光エネルギーの吸収が水素原子1つで変わる！（プレスリリース） https://www.ibaraki.ac.jp/news/2022/12/21011834.html 物理有機化学ホームページ http://smori.sci.ibaraki.ac.jp/ 位に官能基を有さない第一級アルコールの速度論的光学分割法の開発に成功 https://www.ibaraki.ac.jp/news/2022/03/07011531.html 前例のない14成分の非対称ラジカル1,4-オキシトリフルオロメチル化反応の開発に成功 https://www.ibaraki.ac.jp/news/2021/06/22011254.html

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1件

国際研究集会 7th International Symposium of Quantum Beam Science at Ibaraki University	開催年 2022年～2022年
---	--------------------

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
---------	---------