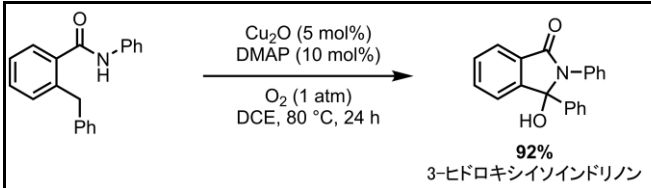
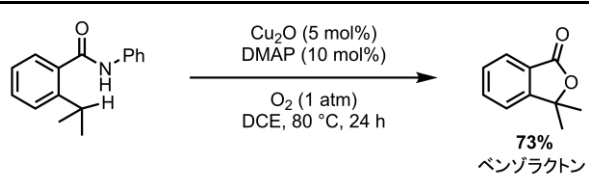


研究 成 果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB	分子状酸素を酸化剤として用いた銅触媒による複素環化合物の新規合成法				
研究テーマ (欧文) AZ	Copper-Catalyzed Intramolecular C(sp ³)-H Functionalization Using Molecular Oxygen as an Oxidant: Novel Synthesis of Heteroaromatics				
研究氏 代 表 名 者	カカナ CC	姓)クマダ	名)カナコ	研究期間 B	2017 ~ 2019 年
	漢字 CB	熊田	佳菜子	報告年度 YR	2019 年
	ローマ字 CZ	Nozawa-Kumada	Kanako	研究機関名	東北大学
研究代表者 CD 所属機関・職名	東北大学大学院薬学研究科・助教				
概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。) 分子状酸素を酸化剤とした銅触媒による分子内での sp³ 炭素-水素結合官能基化により, 含 sp³ 炭素複素環化合物の効率性かつ実用性に優れた合成法を確立することを目指して研究を行った。種々検討の結果, 2-benzyl-N-phenylbenzamide を基質とし, 銅触媒: Cu₂O 5 mol%, 溶媒: 1,2-dichloroethane, 反応温度: 80 °C, 酸素雰囲気下 (1 atm) にて反応を行うことで, 3-ヒドロキシイソインドリノン体が高収率で得られることが分かった。さらに, 基質を 2-isopropyl-N-phenylbenzamide へと変更することで, アミドの酸素原子から環化が進行したと考えられるベンゾラクトン体が選択的に得られた。これらの結果に関しては, 次世代シンポジウム等の学会でその成果を発表した。また, 現在論文投稿準備中であり, 国際的な学術誌にこの成果を発表する予定である。  3-ヒドロキシイソインドリノン  ベンゾラクトン さらに現在, 本反応系を用いたスルタム合成法の開発の検討を行っており, 広範な含 sp³ 炭素複素環合成が可能になることで, 本手法の有用性・実用性を高めることが可能である。 また本研究の予備的検討として, 過酸化物を酸化剤として用いた複素環合成法の開発も行っており, β-ラクタム合成法 (Chem. Eur. J. 2020, Accepted), ベンゾラクトン合成法 (Asian J. Org. Chem. 2019, 8, 1070) やこれらに関する総説 (Yakugaku Zasshi 2019, 139, 1243) を発表した。さらに関連研究として, 系内発生型一電子還元剤を用いた新規反応開発を行い, 炭素-水素結合アリール化反応 (Chem. Pharm. Bull. 2019, 67, 1042) やジチアンの脱硫反応 (Chem. Commun. 2019, 55, 12968) を報告した。					
キーワード FA	複素環	C(sp ³)-H 官能基化	銅触媒	分子状酸素	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Copper-Catalyzed Oxidative Benzylic C(sp ³)-H Cyclization for the Synthesis of β-Lactams							
	著者名 ^{GA}	Kanako Nozawa-Kumada, Satoshi Saga, Yuta Matsuzawa, Masahito Hayashi, Masanori Shigeno, Yoshinori Kondo	雑誌名 ^{GC}	Chemistry A European Journal					
	ページ ^{GF}	Accepted	発行年 ^{GE}	2	0	2	0	巻号 ^{GD}	Accepted
雑誌	論文標題 ^{GB}	Peroxydisulfate-Mediated Transition-Metal-Free Oxidative C(sp ³)-H Bond Lactonization							
	著者名 ^{GA}	Kanako Nozawa-Kumada, Satoshi Kurosu, Masanori Shigeno, Yoshinori Kondo	雑誌名 ^{GC}	Asian Journal of Organic Chemistry					
	ページ ^{GF}	1080~1083	発行年 ^{GE}	2	0	1	9	巻号 ^{GD}	8・7
雑誌	論文標題 ^{GB}	C-H Functionalization by Transition-metal-catalyst or in Situ Generated Base							
	著者名 ^{GA}	Kanako Nozawa-Kumada	雑誌名 ^{GC}	Yakugaku Zasshi					
	ページ ^{GF}	1243~1251	発行年 ^{GE}	2	0	1	9	巻号 ^{GD}	139・10
雑誌	論文標題 ^{GB}	Super Electron Donor-Mediated Reductive Desulfurization Reactions							
	著者名 ^{GA}	Kanako Nozawa-Kumada, Shungo Ito, Koto Noguchi, Masanori Shigeno, Yoshinori Kondo	雑誌名 ^{GC}	Chemical Communications					
	ページ ^{GF}	12968~12971	発行年 ^{GE}	2	0	1	9	巻号 ^{GD}	55・86
欧文概要^{EZ} In this study, we investigated copper-catalyzed intramolecular C(sp³)-H functionalization for the synthesis of heterocycles using molecular oxygen as a sole oxidant. As a result, we found that the reaction of 2-benzyl-<i>N</i>-arylbenzamides proceeded in the presence of Cu₂O as a copper source in DME at 80 °C, generating the corresponding 3-hydroxyisoindolinone in high yield. On the other hand, when using 2-isopropyl-<i>N</i>-arylbenzamide as a substrate, the benzolactone was obtained. We are currently preparing to publish these results in international journals. Furthermore, we will apply this method to sultam synthesis. 