

令和 2 年 9 月 9 日現在

機関番号：14701

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05785

研究課題名(和文)全相互作用の統一的解析と分類・評価：AIM2元関数解析法の新展開と応用実践

研究課題名(英文)Advanced Development of QTAIM Dual Functional Analysis: Applications to Weak Interactions, Containing Those in Unstable Species

研究代表者

中西 和郎 (NAKANISHI, WARO)

和歌山大学・学内共同利用施設等・名誉教授

研究者番号：80110807

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：全相互作用を統一的に評価・分類できる解析法としてQTAIM二元関数解析法(QTAIM-DFA)を発展・確立した。QTAIM-DFAを---HX/XY系や遷移状態(IJQCの表紙に採択)に適用した。また、QTAIM-DFAの高信頼性・高精度化を実現するため、新規な摂動構造の作成法(CIV)を提案した(IJQCの表紙に採択)。CIVによる摂動構造は用いた座標系に依存しないため、本質的な動的特性が得られる。CIVをE-E(NJCの表紙に採択)やHBに適用し詳細を解明した(ChemistryOpenの表紙・CPSEuropeに採択)。また酢酸二量体や核酸塩基対の各HBの特性を独立に解析した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

実験化学者が自身の実験結果を直感的に解析・評価できるQTAIM-DFAのPOM、NIVのみならずCIVによる摂動構造作製法の確立により、化学現象全体を有効に解析できる方法に発展・整備することができた。多くの実験化学者にとって、実験結果の理論解析・理解を深める上で大きな手助けとなり、意味深いものと期待される。その結果、化学・薬学・生化学等の様々な分野で大きな成果を揚げると期待される。現時点でも国内外から多く解析や共同研究依頼が寄せられている。

研究成果の概要(英文)：We developed and established QTAIM Dual Functional Analysis (QTAIM-DFA) to analyze weak to strong interactions in a unified form. QTAIM-DFA was applied to the ---HX/XY interactions and the unstable ones in the transition states, for example. A new method, called CIV, was proposed to generate the perturbed structures for QTAIM-DFA, for the much higher reliability and applicability of QTAIM-DFA. The dynamic nature of the interactions with CIV is described as the "intrinsic dynamic nature of interactions", since the coordinates with CIV are invariant to the choice of the coordinate system. The QTAIM-DFA-CIV method was applied to lots of systems, such as E---E in the naphthalene system, HB of the neutral form, and each HB in multi-HB systems of acetic acid dimer and related species, together with that of the nucleoside base pairs. The results were introduced on the covers of many journals, such as NJC, IJQ, and CO, together with ChemPubSoc Europe for HB of the neutral form.

研究分野：化学

キーワード：QTAIM二元関数解析法 量子化学計算 ファンデルワールス相互作用 水素結合 p- 相互作用 超原子価結合 拡張超原子価結合 X線結晶構造解析

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

1. 研究開始当初の背景

R. F. W. Baderによって1960年代に提案されたQTAIM (the quantum theory of atoms-in-molecules)は、化学結合および相互作用の特性を評価・分類できる方法として注目されてきた。QTAIM発展の初期段階では主として理論科学者(量子化学者)の寄与が大きく、重要な多くの化学現象の解析に適用されてきた。しかしながら、実験化学者がQTAIMを用いて解析できるようになったのは今世紀に入ってからであるといえる。我々も2007年頃から自らの測定結果を自身のイメージで解析を行いかつ実験化学者の要請を満たすことを考慮して、QTAIM2元関数解析法(QTAIM-DFA)を提唱するとともにその発展に努めてきた。

QTAIM-DFAでは、Bond Critical Point (BCP: 化学結合や相互作用線上で電荷密度($\rho_b(\mathbf{r}_c)$)が最小となる点)において、全電子エネルギー密度($H_b(\mathbf{r}_c)$)をLaplacian $\rho_b(\mathbf{r}_c)$ ($\nabla^2 \rho_b(\mathbf{r}_c)$: $\rho_b(\mathbf{r}_c)$ の2次微分)でプロットすることによって相互作用の評価・分類を行う。相互作用は、BCPにおける $\nabla^2 \rho_b(\mathbf{r}_c)$ と $H_b(\mathbf{r}_c)$ の符号によって分類されるため、本法はこの分類法を取り込んだ形で評価を行うことができる。即ち、相互作用全体を $\nabla^2 \rho_b(\mathbf{r}_c)$ と $H_b(\mathbf{r}_c)$ の両軸が構成する第1、3、4象限の3種類に大別でき、相互作用の総合的な分類・評価が可能となった(第2象限には相互作用は現れない)。この結果、相互作用を視覚的に分類・評価できるために、実験化学者にとって極めて有用な方法となった。 $H_b(\mathbf{r}_c)$ vs $\nabla^2 \rho_b(\mathbf{r}_c)$ プロットでは、 x 軸、 y 軸ともにエネルギー単位をもつため、 xy 平面上の距離はエネルギー単位で与えられる。QTAIMの優れた分類・評価機能を生かす形で考案・提唱したこのQTAIM-DFAの成果は*J. Phys. Chem.* 2009のFront coverにも採用された。

2. 研究の目的

QTAIM-DFAを物質科学の発展と高機能物質創製に挑戦する解析法として発展させるために、QTAIM-DFAをより精密な解析法として確立し、不安定化学種や結晶中の(弱い)相互作用の有効な解析法として具体的に提唱・確立することを目的とした。そこで具体的には、次の3つの課題を中心に、研究課題に取り組んだ。

- (1) Compliant force constantsにおける基準座標(CIV)等を活用した摂動構造の作製法を確立し、周辺からの影響を取り除いた(いわば絶対的な値として)相互作用の動的特性の解析法を確立する
- (2) 遷移状態(TS)における相互作用を解析・評価する。TS周辺におけるNIVで作成した摂動構造と固有反応座標(IRC)による構造データを比較検討して解析法を確立・適用する。電荷の効果も検討する
- (3) CIV法等を適応し、精密X線構造解析等と連携して、結晶における弱い相互作用を解析・評価して、結晶生成の要因をその相互作用に基づいて分類する方法を提案・確立する

3. 研究の方法

量子化学計算は、化合物の構造最適化は、Gaussian 09、AIM2000、AIMAllプログラムを用いて行った。

精密X線構造解析は、イギリスのSouthampton大学のS. Coles教授(Director, UK National Crystallography Service)らの協力を得て行った。

4. 研究成果

- (1) Compliant force constantsにおける基準座標(CIV)等を活用した摂動構造の作製法の確立

QTAIM-DFAは、最適化構造と摂動構造を用いて様々な相互作用の解析・評価および分類を行う。摂動構造はこれまで、部分最適化法(POM)と内部振動の基準座標法(NIV: Normal coordinates

of internal vibrations)を用いてきた。最適化構造のデータは、極座標(R, θ)を用いて解析し(図1)、摂動構造のデータは、(θ_p, κ_p)を用いて解析する。 θ_p は最適化構造に対応するデータにおける摂動構造のデータによる接線方向であり、 κ_p はその曲率である。本解析においては、主として θ と θ_p を用いて評価と分類を行う。 $45.0^\circ < \theta < 90.0^\circ$ 、 $90.0^\circ < \theta < 180.0^\circ$ および $180.0^\circ < \theta < 206.6^\circ$ は、それぞれ *pure-CS* (closed shell)、*regular-CS*、*SS* (shared shell) に対応する。また、 $\theta_p < 90^\circ$ は *vdW-type* 相互作用に、 $\theta_p > 90^\circ$ は *typical-HB* (hydrogen bond)-*typical* 相互作用となる。さらに $\theta_p < 180^\circ$ は *CT(MC)*-*type* (molecular complexes formed through charge transfer)、 $\theta_p > 180^\circ$ は *CT(TBP)*-*type* (trigonal bipyramidal adducts formed through CT) となる(図2)。

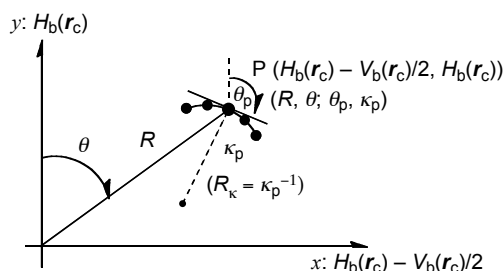


図1 Polar (R, θ) coordinated representation of $H_b(r_c)$ versus $H_b(r_c) - V_b(r_c)/2$

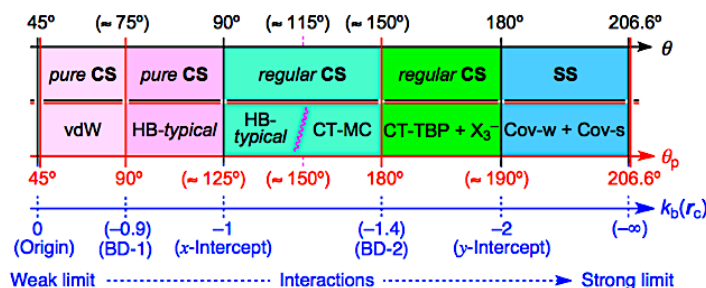


図2 Rough classification of interactions by θ and θ_p , together with κ_p

QTAIM-DFAを化学現象全体に有効に適用するために、相互作用の動的特性の評価において、POMおよびNIV法とは別に、着目する相互作用に対してその周辺環境からの影響を含まない新規摂動構造作成法を模索・提案する必要がある。この概念は、compliance force constants の概念と共通すると考えられるため、compliance force constantsの基準座標を用いて新規摂動構造を作成(CIV法)した。POM法、NIV法およびCIV法は、それぞれの作成特性に基づいて適応性(範囲)が異なるため、3者をうまく使い分けることによって不安定化学種や結晶生成因子としての相互作用を含む化学現象全体を有効に解析できると期待される。そこでCIV法を確立し、どのような相互作用がどの方法に最も適合するか

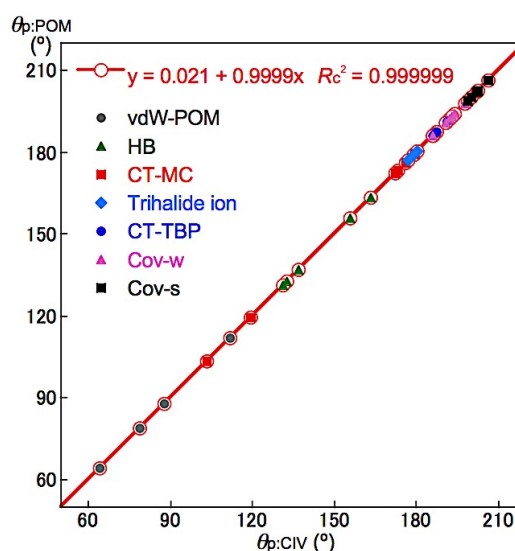


図3 Plot of $\theta_{p:POM}$ vs. $\theta_{p:CIV}$ evaluated with MP2/aug-cc-pVTZ

を具体例を示しつつ明らかにした。またPOM法とCIV法は様々な相互作用で良い一致を示した(図3)。POMは汎用的な方法であり、NIVは遷移状態の解析に、CIVは多環性化合物に、適合することが明らかになった(雑誌論文⑤, ⑨:Front Coverに採用)。

(2) 遷移状態(TS)における相互作用の解析・評価

TS周辺におけるNIVで作成した摂動構造と固有反応座標(IRC)による構造データを比較検討して解析法を確立・適用した。両者は大変良い一致を示した(図4)。電荷の効果も検討した(雑誌論文①:Front Coverに採用された)。

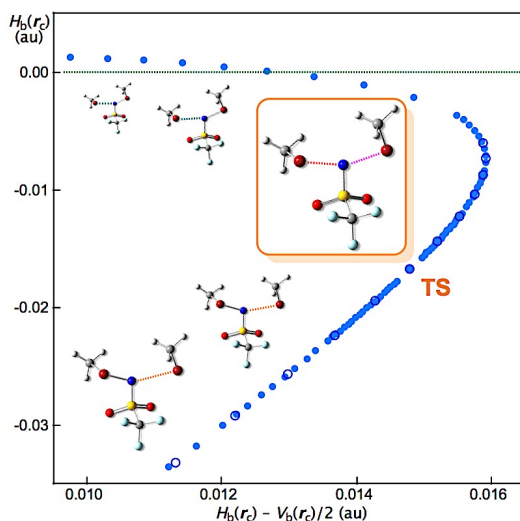


図4 Plots of $H_b(\mathbf{r}_c)$ vs. $H_b(\mathbf{r}_c) - V_b(\mathbf{r}_c)/2$ for the N*-Br and N*-Br' interactions of Br*-N*-Br' around TS. Data from the perturbed structures generated with IRC at step sizes of 10 (● for N*-Br and ● for N*-Br') and 2 (○ for N*-Br and ○ for N*-Br') are employed together with those generated with NIV of $w = (0)$ and $\pm 0.05n$ ($n = 1-6$).

(3) CIV法等を適応した精密X線構造解析との連携による結晶における弱い相互作用の解析・評価

1-(8-Ph^BEC₁₀H₆)^AE-^AE(C₁₀H₆^BEPh-8')-1' [(^AE, ^BE) = (S, S: 1), (S, Se: 2), (Se, S: 3), (Se, Se: 4)]において、1-4の全ての場合、^BE---^AE-^AE---^BEの4原子が直線状に並列することを明らか

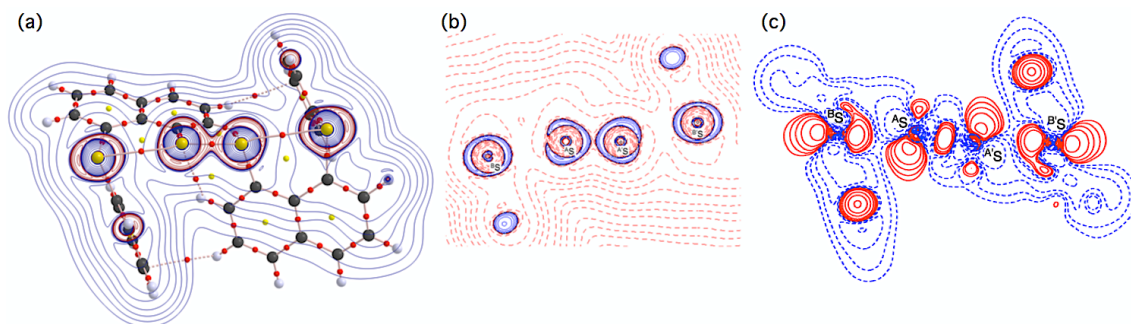


図5 Negative Laplacian map for **1** (S, S) calculated with MP2/BSS-A (a: Calcd). Positive Laplacian map in the ^BS^ASC₁ plane of **1** (S, S) (b: Obsd). Positive and negative areas are shown by red and blue lines, respectively and each contour level is 0.05 eÅ⁻³. Deformation density map for the ^BS---^AS-^AS---^BS S interaction drawn on the ^BSC^ASA^S plane of **1** which contour level is 0.05 eÅ⁻³ (c: Obsd).

にしている。1の高精度電子密度解析を行った($S_4 \sigma(4c-6e)$) (図5)。さらに1のフェニル基をメチル基に変えたところ、 ${}^B S - {}^A S - {}^A S - {}^B S - C_{Me}$ の5原子が直線状に並列する構造をとっていた。1-4の場合とは明らかに対照的であった(雑誌論文⑬)。

(4) CIV法のその他の系への適合

CIV法を多重水素結合に適応するため、まず通常の水素結合(雑誌論文⑧:Front Coverに採用され、CPSEuropeのCover Profileでも紹介された)、そしてマルチ水素結合へと展開した(雑誌論文⑦)。さらに核酸塩基中の多重水素結合へと展開し、現在論文投稿中である。

QTAIM-DFAを適用して、アントラセンおよびコロネン π 系におけるX-H $\cdots\pi$ 型水素結合の動的および静的挙動について研究を行った(雑誌論文⑪, ⑩)。

超原子価および拡張超原子価結合の解明にQTAIM-DFAを適用して、解析・評価、分類を行った(雑誌論文②, ③:Front Coverに採用, ⑥, ⑫)。

O-H/ π 非結合相互作用の解明にQTAIM-DFAを適用して、解析・評価、分類を行った(雑誌論文④)。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 9件）

1. 著者名 Waro Nakanishi, Satoko Hayashi, Taro Nishide, and Shota Otsuki	4. 巻 120
2. 論文標題 Dynamic and static nature of activated interactions in transition states as elucidated by quantum theory of atoms-in-molecules dual functional analysis: A case of ligand exchange at the N of sulfonylimino- 3-bromanes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Int. J. Quantum Chem.	6. 最初と最後の頁 e26073-1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1002/qua.26073	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 Satoko Hayashi, Taro Nishide, Waro Nakanishi, Luca Sancineto, and Claudio Santi	4. 巻 9
2. 論文標題 The nature of G---E-Y (3c-4e) in o-MenGCH2C6H4EY (MenG = Me2N and MeE; E = O, S, Se and Te; Y = F, Cl, Br, EMe and Me) with contributions from CT and compliance constants in noncovalent G--E interactions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 39435-39446
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1039/c9ra09022c	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 Satoko Hayashi, Manabu Uegaito, Taro Nishide, Eiichiro Tanaka, Waro Nakanishi, Takahiro Sasamori, Norihiro Tokitoh, and Mao Minoura	4. 巻 43
2. 論文標題 Nature of the E---E' interactions (E, E' = O, S, Se, and Te) at naphthalene 1,8-positions with fine details of the structures: experimental and theoretical investigations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 New J. Chem.	6. 最初と最後の頁 14224-14237
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1039/c9nj02198a	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 Satoko Hayashi, Taro Nishide, and Waro Nakanishi	4. 巻 9
2. 論文標題 Nature of intramolecular O-H/ interactions as elucidated by QTAIM dual functional analysis with QC calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 15521-15530
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1039/c9ra01788g	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 Satoko Hayashi, Taro Nishide, Kazuki Ueda, Koki Hayama, and Waro Nakanishi	4. 巻 4
2. 論文標題 Effects from Basis Sets and Levels of Calculations on the Nature of Interactions Predicted by QTAIM Dual Functional Analysis with QTAIM Functions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 6198 -6208
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1002/slct.201900998	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 Satoko Hayashi, Taro Nishide, and Waro Nakanishi	4. 巻 29
2. 論文標題 Behavior of I4 (4c-6e) in tellurolane system and related species, elucidated by QTAIM dual functional analysis with QC calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Heteroatom Chemistry	6. 最初と最後の頁 e21462-1 - 12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/110.1002/hc.21462	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 Satoko Hayashi, Taro Nishide, and Waro Nakanishi	4. 巻 1
2. 論文標題 Behavior of Multi-HBs in Acetic Acid Dimer and Related Species: QTAIM Dual Functional Analysis Employing Perturbed Structures Generated Using Coordinates from Compliance Force Constants	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bull. Chem. Soc. JPN	6. 最初と最後の頁 87-96
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1246/bcsj.20180186	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 Taro Nishide, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi	4. 巻 7
2. 論文標題 Intrinsic Dynamic Nature of Neutral Hydrogen Bonds Elucidated with QTAIM Dual Functional Analysis: Role of the Compliance Force Constants and QTAIM-DFA Parameters in Stability	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ChemistryOpen	6. 最初と最後の頁 565-575
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/110.1002/open.201800051	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 W. Nakanishi and S.Hayashi	4. 巻 118
2. 論文標題 Perturbed structures generated using coordinates derived from compliance constants in internal vibrations for QTAIM dual functional analysis: Intrinsic dynamic nature of interactions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Int. J. Quantum Chem.	6. 最初と最後の頁 e25590-1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/110.1002/qua.25590	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 Satoko Hayashi, Yuji Sugibayashi and Waro Nakanishi	4. 巻 8
2. 論文標題 Behaviour of the XH-* and YX-* interactions (X, Y = F, Cl, Br and I) in the coronene - system, as elucidated by QTAIM dual functional analysis with QC calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 16349-16361
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8RA01862F	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 Hayashi Satoko, Sugibayashi Yuji, Nakanishi Waro	4. 巻 7
2. 論文標題 Behavior of interactions between hydrogen chalcogenides and an anthracene -system elucidated by QTAIM dual functional analysis with QC calculations	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 31858 ~ 31865
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1039/c7ra04224h	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 Hayashi Satoko, Tsubomoto Yutaka, Nakanishi Waro	4. 巻 23
2. 論文標題 Behavior of the E-E' Bonds (E, E' = S and Se) in Glutathione Disulfide and Derivatives Elucidated by Quantum Chemical Calculations with the Quantum Theory of Atoms-in-Molecules Approach	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 443-443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.3390/molecules23020443	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 Tsubomoto Yutaka, Hayashi Satoko, Nakanishi Waro, Mapp Lucy K., Coles Simon J.	4. 巻 8
2. 論文標題 High-resolution X-ray diffraction determination of the electron density of 1-(8-PhSC10H6)SS(C10H6SPH-8')-1' with the QTAIM approach: evidence for S4 (4c-6e) at the naphthalene peri-positions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 9651-9660
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1039/c7ra13636f	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

〔学会発表〕 計23件(うち招待講演 0件/うち国際学会 9件)

1. 発表者名 西澤 望・林 聡子・中西 和郎
2. 発表標題 1,2-位におけるE2E'2 (4c-6e) (E, E' = S, Se)の特性
3. 学会等名 第28回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 箕浦 真生・小林 翔・西出 太郎・林 聡子・中西 和郎
2. 発表標題 ペリー擬回転の新遷移状態構造: 四角錐構造を有するテトラアリアルテルル(IV)の合成と理論計算
3. 学会等名 第45回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林 聡子・西出太郎・中西和郎・Luca Sancineto・Claudio Santi
2. 発表標題 o-MenGCH2C6H4EY (MenG = Me2N and MeE; E = O, S, Se, and Te) におけるG---E-Y (3c-4e)の特性
3. 学会等名 第46回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 林 聡子・西出太郎・中西和郎
2. 発表標題 核酸塩基対における各水素結合の静的および動的特性: QTAIM 2 元関数解析法の適用
3. 学会等名 第46回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Satoko Hayashi, Taro Nishide, Waro Nakanishi, Luca Sancineto, and Claudio Santi
2. 発表標題 The Nature of G---E-Y (3c-4e) in o-MenGCH2C6H4EY (MenG = Me2N and MeE; E = O, S, Se and Te) with Contributions from CT and Compliance Constants in Noncovalent G---E Interactions
3. 学会等名 The 9th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM IX) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mao Minoura, Sho Kobayashi, Taro Nishide, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi
2. 発表標題 Synthesis and Structure of Tetraaryltellurium(IV)
3. 学会等名 14th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (ICCST-14) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Satoko Hayashi, Manabu Uegaito, Taro Nishide, Eiichiro Tanaka, Waro Nakanishi, Takahiro Sasamori, Norihiro Tokitoh, Mao Minoura
2. 発表標題 Nature of E---E' (E, E' = O, S, Se, and Te) at Naphthalene 1,8-Positions: Theoretical and Experimental Investigations
3. 学会等名 14th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (ICCST-14) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Aleksandra Jasiak, Grazyna Mielniczak, Waro Nakanishi, Satoko Hayashi, and Jozef Drabowicz
2. 発表標題 Attempts to Isolate New Optically Active Organoselenium and Organotellurium Derivatives
3. 学会等名 14th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 林 聡子・杉林 祐至・中西 和郎・Lucy K. Mapp・Simon J. Coles
2. 発表標題 1-(8-MeSC ₁₀ H ₆)SS(C ₁₀ H ₆ SM _e -8')-1'の電子密度の高分解能X線回折測定およびQTAIM法による解析
3. 学会等名 第45回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 西出 太郎・林 聡子・中西 和郎
2. 発表標題 近接多重水素結合の解析: CIVIによる摂動構造を用いたQTAIM2元関数解析法の適用
3. 学会等名 第45回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 上田 一貴・端山 浩輝・西出 太郎・林 聡子・中西 和郎
2. 発表標題 相互作用特性における基底関数およびレベル依存性: QTAIM2 元関数解析法による評価
3. 学会等名 第45回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 奥村 彩・林 聡子・中西 和郎
2. 発表標題 アントラキノンの1,8,9-位における 拡張超原子価結合の評価・分類
3. 学会等名 2018 ハロゲン利用ミニシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 久城 敬嗣・林 聡子・中西 和郎
2. 発表標題 1-位にX-Se (X = H, F, Cl, Br)を有する アントラキノン誘導体における超原子価結合の理論的解明
3. 学会等名 2018 ハロゲン利用ミニシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林 聡子・坪本 裕・杉林祐至・中西 和郎・Lucy K. Mapp・Simon J. Coles
2. 発表標題 ナフタレンのペリ位におけるS4 (4c-6e): 電子密度の高分解能X線回折測定およびQTAIM法による解析
3. 学会等名 第29回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 林 聡子・中西 和郎
2. 発表標題 有機セレン化合物の微細構造決定因子としてのセレンを含む非結合軌道の役割
3. 学会等名 第4回日本セレン研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nishide Taro, Matsuiwa Kohei, Nishizawa Nozomu, Hayashi Satoko, Nakanishi Waro
2. 発表標題 Nature of the AE---BE Interactions in Neutral and Charged Forms of AE(CH ₂ CH ₂ CH ₂) ₂ BE (AE, BE = S, Se, Te, and O), Elucidated by Improved QTAIM-DFA
3. 学会等名 The 12th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-12) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Okumura Aya, Nishide Taro, Hayashi Satoko, Nakanishi Waro
2. 発表標題 Nature of E-E in Neutral and Charged Forms of Cyclo-1,2-EE(CH ₂) ₃ (E = S, Se, Te, and O), Elucidated by Improved Method of QTAIM Approach
3. 学会等名 The 12th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-12) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Satoko Hayashi, Tsubomoto Yutaka, Nakanishi Waro, Sasamori Takahiro, Tokitoh Norihiro,
2. 発表標題 Nature of E ₂ X ₂ (4c-6e) at Naphthalene 1,8-Positions and Models, Elucidated by QTAIM Dual Functional Analysis
3. 学会等名 The 12th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-12) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Sugibayashi Yuji, Hayashi Satoko, Nakanishi Waro
2. 発表標題 Dynamic and static behavior of hydrogen bonds of the X-H... type (X = F, Cl, Br, I, RO, and RR'N; R, R' = H or Me) in the benzene -system, elucidated by QTAIM dual functional analysis
3. 学会等名 the 8th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM VIII) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tsubomoto Yutaka, Hayashi Satoko, Nakanishi Waro
2. 発表標題 Halogen Bonding in Neutral Polybromine Clusters, Elucidated by QTAIM Dual Function Analysis
3. 学会等名 the 8th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM VIII) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 杉林 祐至、林 聡子、中西 和郎
2. 発表標題 QTAIM2元関数解析法による芳香族系におけるH... およびE... 相互作用の動的および静的挙動の解明
3. 学会等名 第44回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 永田 健吾、林 聡子、中西 和郎
2. 発表標題 ナフタレンの1,8-位における拡張超原子価結合系へのジアセチレン架橋効果
3. 学会等名 第44回有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 西出 太郎、林 聡子、中西 和郎
2. 発表標題 QTAIM2元関数解析法による新たな摂動作成法を用いた水素結合の分類・評価
3. 学会等名 第28回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2017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	林 聡子 (HAYASHI SATOKO) (00294306)	和歌山大学・システム工学部・准教授 (14701)	