

令和 4 年 6 月 28 日現在

機関番号：13904

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06373

研究課題名（和文）金属錯体の結晶ポテンシャルの開発と多形転移現象のメカニズム解析

研究課題名（英文）Development of Crystal Potential of Metal Complex and Mechanism Analysis of Polymorphic Transition Phenomena

研究代表者

後藤 仁志（Goto, Hitoshi）

豊橋技術科学大学・情報メディア基盤センター・教授

研究者番号：60282042

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 32,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、様々なソフトクリスタルの転移現象の学理を明らかにするための計算化学技術を開拓するとともに、15研究グループと17共同研究テーマを推進した。主な成果は、これまで分子力場計算では扱うことができなかった金属イオンを含む様々な有機金属錯体の結晶力場ポテンシャルを開発し、結晶構造予測やダイナミクス解析を可能にしたことである。また、粉末X線回折パターンを用いた結晶構造予測法を開発し、構造未決定のソフトクリスタルの特性解析を可能にした。加えて、外力印可に伴う分子性結晶の機械特性を予測する方法論を確立した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果の学術的意義は、これまで困難であった分子性結晶の結晶構造を推定し、その特性を理論的に予測することを可能にしたことである。特に、第一原理計算で扱うことが困難であった有機金属錯体結晶に対して、古典力学に基づく結晶力場を用いて計算可能にしたことによって、分子動力学シミュレーションや第一原理計算による高精度物性予測へ展開できるようになった。また、分子性結晶の機械特性を計算する手法を確立したことによって、低分子の分子性結晶をナノマシン等の材料や素材としての可能性を広げたことの社会的意義はとても重要であると考えている。

研究成果の概要（英文）：In this project, we pioneered computational chemistry techniques to clarify the science of transition phenomena in various soft crystals and promoted 17 collaborative research themes with 15 research groups. Major achievements include the development of crystal force field potentials for various organometallic complexes containing metal ions, which could not be treated by molecular force field calculations, enabling crystal structure prediction and dynamics analysis. In addition, the crystal structure prediction using powder X-ray diffraction patterns was made possible, and the characterization of soft crystals whose structure has not yet been determined was made possible. In addition, we established a methodology to predict the mechanical properties of molecular crystals under the application of external forces.

研究分野：計算化学

キーワード：結晶構造予測 結晶多形探索 結晶力場 密度汎関数理論法 分子力学法 配座空間探索

1. 研究開始当初の背景

固体材料として広く一般に知られている結晶は、金属系、セラミックス系、高分子系のいずれかに分類される。また、それぞれの特性が活かせる様々な用途に応用され、製品として一般社会で活用されている。一方、有機化合物が形成する分子性結晶は、医薬や農薬の成分として含まれているものの期待されているのは分子としての特性であり結晶のそれではない。このため、理論計算で結晶の特性を予測しようという試みは、金属系やセラミックス系に対して盛んに行われ、特に、電子デバイスや電池材料に対しては、第一原理に基づく物性予測が適用可能で、実際に多くの成果を上げている。では、分子性結晶の特性はそうした理論計算で予測できないのか、といえばそうではない。計算はできるが、あまり現実的ではなかった。つまり、ある程度正確に予測するには、相応の分子数の集合体を計算対象にしなければならず、そうすると非現実的な計算時間がかかってしまう。また、新規材料の開発には未知組成の結晶構造を合理的に推定する必要があるが、分子性結晶の場合、結晶構造を予測する手法が確立していなかった。この二つの課題は、分子性結晶の可能性を展開していく上で大きな障害となっている。

2. 研究の目的

本研究領域全体の標的である「ソフトクリスタル」は、『堅い』結晶構造が低刺激によって構造変化する新しい物質群であり、その準安定状態や周期構造の制御技術を開発することで、これまで到達不可能な全く新しい機能性材料を自由自在に創造できるようになることが期待される。

本研究では、特に「ソフトクリスタル」の転移現象に注目し、その学理を明らかにするための計算化学的なアプローチを開拓する。一つは、これまで扱うことができなかった有機金属錯体が形成する結晶構造とそのダイナミクスを高速かつ精密に評価できるポテンシャルを開発し、有機金属錯体の結晶構造予測を可能にする。もう一つは、結晶構造予測から得られる多数の結晶多形から多形間遷移過程を理論的に評価し、その相転移現象を可視化し解析する手法を開発する。我々独自に開発してきた結晶構造予測システムをプラットフォームとして「ソフトクリスタル」という新たな標的の解明を目指す。

3. 研究の方法

本研究では、「ソフトクリスタル」が示す様々な新奇現象を理論的に解析するため、(1) 有機金属錯体結晶の結晶力場ポテンシャルの開発、(2) 構造相転移ダイナミクスの解析法の開発を主テーマとして研究開発を推進した。

(1) 結晶力場ポテンシャルの開発

ソフトクリスタル現象を示す有機金属錯体の多くは金属イオンを含むため、理論計算で扱うには計算負荷が大きい。不斉触媒としての用途が広がるにつれ、量子化学計算は盛んに行われるようになってきている。しかし、有機金属錯体が形成する分子性結晶を扱うことは依然として難しい。本研究では、古典力学に基づく分子力場を用いて結晶構造計算を行えるように拡張する。具体的には、X線結晶構造解析で決定された結晶構造を参照データにして、結晶力場ポテンシャルを開発する。

(2) 結晶多形と構造相転移の解析法の開発

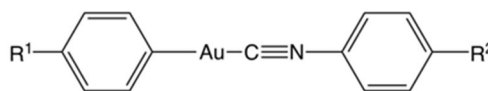
ソフトクリスタル現象の本質は、二つ以上の結晶多形構造が安定に存在し、化学環境の変化または比較的弱い外力を印可することで相転移を起こすことである。本研究では、単結晶—単結晶構造相転移を標的に、結晶多形の構造予測、結晶中のダイナミクスを明らかにする方法論、構造相転移ダイナミクスのシミュレーションを可能にするプラットフォームなどの開発を目標にする。

4. 研究成果

(1) 結晶力場ポテンシャルの開発

金イソシアニド錯体

北海道大学の伊藤等によって合成された Phenyl(phenylisocyanide)gold(I) (Fig.1, $R^1=R^2=H$) の結晶構造は、2種類の結晶多形としてそれぞれ単結晶 Ib (空間群 $P\bar{1}$) と IIy (空間群 $I\bar{4}2d$) を形成する (Fig. 2) が、軽微な物理的刺激、例えば、二つの多形を触れさせるだけで、構造相転移が誘起される。この時、UV 照射によって、青色 Ib 相が徐々に黄色の IIy 相に変化していく様子も観察できる。二つの結晶構造の違いを詳しく観察すると、Ib から IIy に転移する際、Au-Au 間に緩い結合が形成され、かつ 2 つの Ph 環同士の二面角が変化していることに気づく。この現象を計算機シミュレーションで明らかにするために、有機金属錯体を結晶力場で計算できるようにした。まず、Au の原子タイプを新たに定義し、Au に関する力場パラメーター (結合伸縮, 変角, 伸縮 変角, 静電, vdW) を開発した。こうしてできた結晶力場を用いて結晶構造を最適化し、得られた格子定数を実測値と比較した。実験構造との差異を $RMSD_{20}$ で求めると、それぞれ Ib は 0.468 \AA , IIy は 0.595 \AA であった。IIy の Au..Au 間距離も比較的良く再現することができた。



$R^1=OMe, Me, H, Cl, CF_3, CN$
 $R^2=NMe_2, OMe, Me, H, Cl, CF_3, CN, NO_2$

Fig. 1 Phenyl (phenylisocyanide) gold(I) ($R^1 = R^2 = H$) and its derivatives.

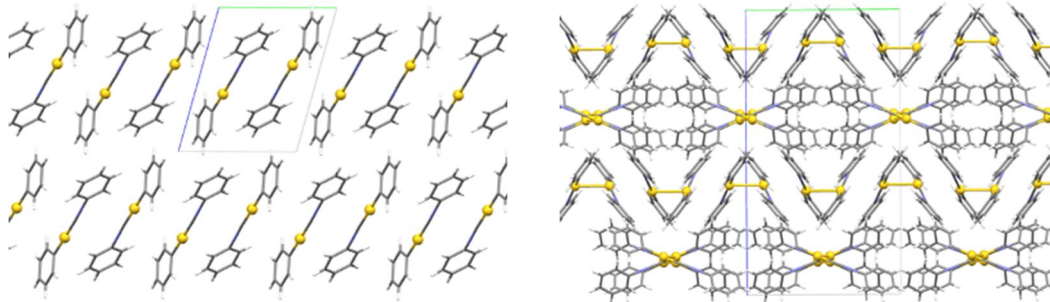


Fig. 2 Polymorphs of Phenyl(phenyl isocyanide)gold(I) exhibiting blue (upper, Ib) and yellow (lower, IIy) emissions.

ランタニド錯体

希土類元素の中でもランタニド系列元素は、原子番号が大きくなるとイオン半径が小さくなるランタニド収縮で知られている。青山学院大学の長谷川等が合成した発光特性を持つ 6 配位ランタニド (Ln) 錯体 (Fig.3, 以下 LnL 錯体) は、10 種類の Ln (Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm) の周辺で類似の配位構造を取る結晶 (空間群 $P\bar{1}$) を持つ。これらの結晶構造では、リガンドであるエチレンジアミン誘導体の N 原子と中心金属 Ln との間の距離が規則的に変化することが分かっており、ランタニド収縮の影響が表れた事例の一つである。また、配位するリガンドが形成するキラルならせん構造も Ln によって変化することも、この物質の応用性が期待されるとも興味深い点である。

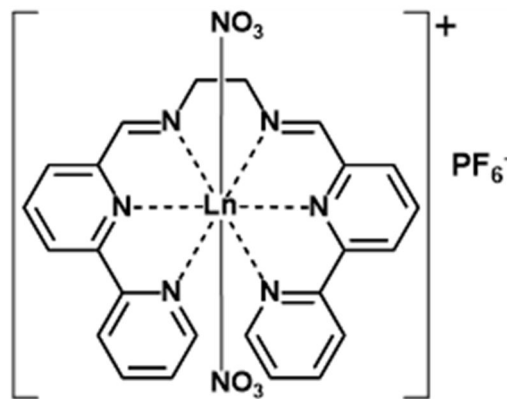


Fig. 3 LnL complex

LnL 錯体を結晶力場で扱うためには、Ln-N 間の配位結合を考慮せずに、Ln を遊離したイオン種として扱い、Ln リガンドの間の非結合相互作用のみで記述するようモデル化した。このうち静電相互作用に Ln の形式電荷を用いるとすれば、新たに必要になるパラメータは vdW 相互作用のみである。前述の金イソシアニド錯体の事例では、Au-C 間の結合に関して、共有結合性と配位結合性の両方からアプローチする必要があったが、この LnL 錯体はもっとシンプルに考えても良い系である。10 種類の Ln 系列イオンに対する vdW 相互作用パラメータを決定して結晶構造最適化を行ったところ、RMSD20 で 0.32 ~ 0.43 Å の範囲内で X 線解析に基づく結晶構造を再現することができた。実験構造に基づいて決定された vdW 半径からランタニド収縮が明確に観測できたことは、観測事実として世界で初めてのことであり (Fig. 4) また、今回決定した力場パラメータは、分子動力学シミュレーションにも応用することが可能であり、今後、Ln を含む新規物質の結晶構造予測やダイナミクスの研究に利用可能である。

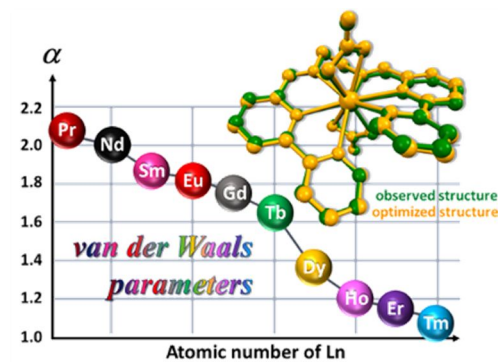


Fig. 4 vdW parameters of Ln series.

ジシラン架橋マクロサイクル

温度変化によって結晶片が飛び跳ねるようにしてその外形が変化する現象は、サーモサリエント効果と呼ばれる。この瞬発的な現象は、結晶中の分子の構造変化によって引き起こされる。計算機シミュレーションでこの前後の様子を解析することは、相転移のメカニズムを明らかにする上で重要な知見となる。奈良先端科学技術大学院大学の尾本等は、4 つのフェニレンをジシランで架橋した環状分子 (Fig. 5) を合成し、その結晶が低温条件下で相転移によるサーモサリエント現象を起こすことを見つけた。また、転移前後の結晶構造も決定している。

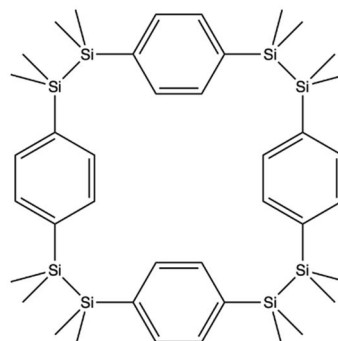


Fig. 5 Disilanyl macrocycle composed of four disilane (Si-Si) bonds and four p-phenylene.

転移前後の結晶構造が分かっていることから、それぞれの結晶構造を、その格子定数を保ったまま構造最適化を行ったところ、結晶中の分子の立体構造を良く再現することができ、二つの結晶構造のエネルギー差が分子間相互作用に起因していることが明らかになった。さらに、格子長 a, b, c をそれぞれ個別に伸ばしながら結晶構造を最適化し、結晶エネルギーを比較したところ、格子長 b と c の伸びることによるエネルギー上昇が、 a のそれよりも緩やかであることが分かった (Fig. 6)。これは、結晶が (001)面、または(010)面に沿って裂けることによってサーモサリエント現象が引き起こされる観測に対応している。

ただし、課題も残っている。既存の結晶力場を用いて格子定数を含めて構造最適化を行うと、2つの結晶構造は同じ構造に収束してしまうことが分かっている。これは実験観測と異なる。それらの結晶構造をより正確に再現するためには、力場パラメーターを改良する必要があるが、特に、Si 原子周りの力場パラメーターの改良が鍵となっていて、現在、継続的に開発を進めている。

(2) 結晶多形と構造相転移の解析法の開発 実験データを用いた結晶構造予測法

結晶構造予測法によって創出された結晶多形構造の回折パターンと、実験で得られた粉末X線回折パターン(PXRD)を比較することによって、膨大な候補多形構造の中から実際に観測されている結晶構造を速やかに特定する方法論を確立した (Fig. 7)。

最初の事例として、東京大学の竹谷等が開発中だった有機半導体に対して結晶多形探索を行い、得られた多数の候補構造から回折パターンを求めた。これらを、実験で得られた PXRD と比較し、その類似性指標を考慮して、結晶多形のエネルギースコアで評価すると、観測された結晶構造と一致する結晶多形のランキングが優位になった。このように粉末結晶であっても PXRD さえ得られれば、結晶構造を推定でき、さらに第一原理計算を適用することで、物性値を予測することが可能になった。

メカノクロミズムの結晶力学

前述した Phenyl(phenylisocyanide) gold(I) が示すメカノクロミズムは、Ib相 (P1) と IIy 相 (I4 $\bar{2}$ d) が接触するだけで、Ib 相が IIy 相に転移する。二つの単結晶は全く異なる構造であるため、アモルファス状態を経由していると考えられている。これに対して複数の短寿命な結晶多形を経由する仮説も考えられる。

後者の仮説を検証するため、多段階相転移経路を探索した。例えば、Ib 相の格子振動モードの一つに沿って動力学シミュレーションを開始すると、Fig. 9 に示すような変形を経て、別の新しい結晶多形に至ることが分かっている。この方法を繰り返すことによって、複数の結晶多形を経由して、構造相転移を特定できることを確認した。ただし、現時点では Ib IIy 相には到達できていないが、この現象が少なくとも多段階の構造相転移を起こすことは示唆された。

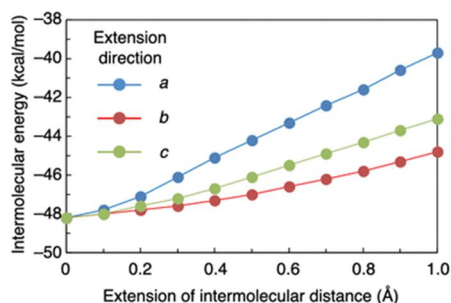


Fig. 6 Brute-force lattice expansion to generate virtual crystal structures: Changes in intermolecular energy of the virtual crystals of C4a with extension of the intermolecular distance.

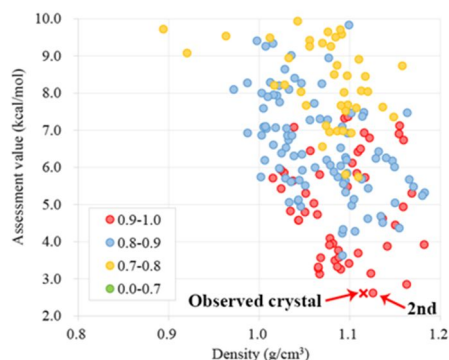


Fig. 7 Landscape of polymorphic structures evaluated by crystal energy score including similarity.

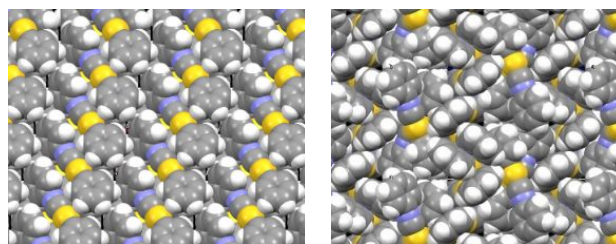


Fig. 8 Space-filling models of Phenyl(phenyl isocyanide) gold(I) crystals: Ib (left) and IIy (lower)

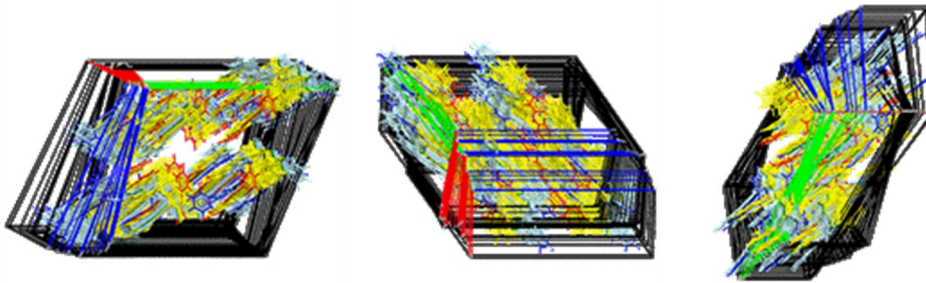


Fig. 9 Crystal dynamics simulation of Ib phase.

有機超弾性の結晶力学

横浜市立大学の高見澤等が発見した Terephthalamide の有機超弾性は、単結晶に剪断力を加えると変形して、別の単結晶が出現する。よく観察すると、相にせん断応力を加えると徐々に相が広がって結晶が変形するが、力を弱めると相が徐々に相へ戻り、応力を除荷すると元の形状に戻る (Fig. 10)。

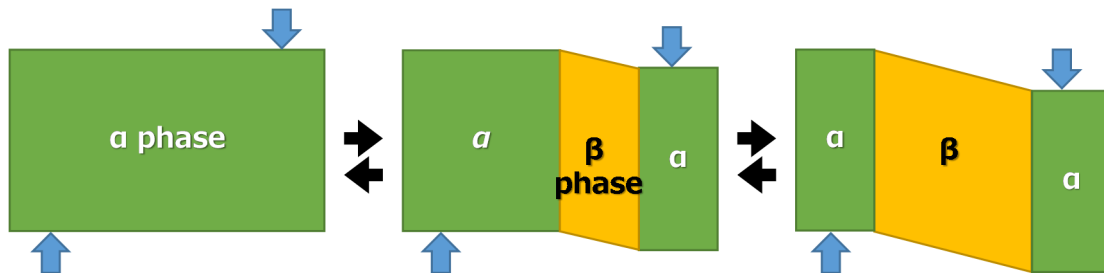


Fig. 10 Organo-superelasticity of Terephthalamide: β -phase expands when a shear force is applied. Returns to α phase when unloaded.

この課題に対して、我々は単位格子を強制的に少しずつ変形することによって、相から相までの相転移を再現することに成功した。つまり、変形した格子定数を固定して最適化構造を求めれば、単位格子にかかる力から剪断応力を計算することができる。実際、単位格子の変形を剪断応力で記述できると、剪断力を変数軸にポテンシャルエネルギー面の変化を記述できる。しかし、この方法は二つの結晶多形の構造が既知である場合にはとても有効な手段ではあるが、任意の外力が加わったときには対応できるとは限らない。より汎用的な手法として、材料工学で用いられている理論に従って、印可される外力を圧力(等方的圧縮応力)項とトレースレス項で記述して構造最適化できるようにした。これによって、圧力-応力相図や応力-ひずみ線図を描くことに成功した。その結果、テレフタルアミド結晶の応力-ひずみ線図を Fig. 11 に示した。

このように、外部刺激による構造相転移を外力印可による結晶ポテンシャルエネルギー面の変化として説明できるようになった。つまり、本プロジェクトの目標である「ソフトクリスタル現象の学理解明」に一步踏み込めたのではないかと考えている (Fig. 12)。また、応力印加下のポテンシャルエネルギー面を記述できるようになると、応力変形試験から算出された実験値と比較できる機械特性の諸係数を求めることができるだけでなく、同条件下の相転移ダイナミクスのシミュレーションも可能になる。なお、本研究で開発した結晶力場ポテンシャルや外部刺激による構造相転移解析法は、汎用計算化学アプリケーション CONFLEX に実装され、誰でも利用することができるようになる。

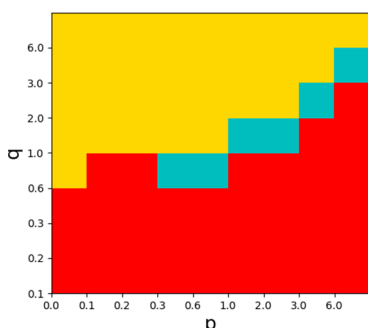


Fig. 11 Pressure-stress phase diagram of terephthalamide crystals: α phase (purple), β phase (blue), fracture phase (yellow)

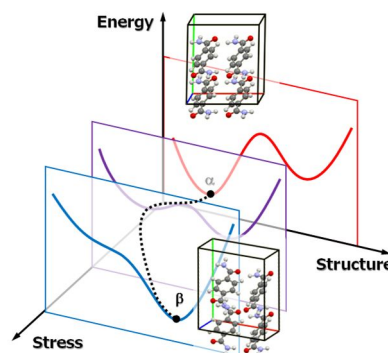


Fig. 12 Soft crystal hypothesis: The potential energy surface changes due to external stimuli, and the stable crystal structure also changes.

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 Nakayama Naofumi, Hijikata Masahiro, Ohmagari Hitomi, Tanaka Hideyuki, Inazuka Yudai, Saito Daisuke, Obata Shigeaki, Ohta Kazuo, Kato Masako, Goto Hitoshi, Hasegawa Miki	4. 巻 94
2. 論文標題 Computational Studies for Crystal Structures of Helicate Lanthanide Complexes Based on X-ray Analyses	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 2973 ~ 2981
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20210339	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 HAMADA Shinji, GOTO Hitoshi	4. 巻 63
2. 論文標題 Crystal Structure Optimization Method for Evaluation of Mechanical Properties of Soft Crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nihon Kessho Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 63 ~ 68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5940/jcrsj.63.63	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 UTSUMI Yohei, UMEDA Daiki, OKUWAKI Koji, OBATA Shigeaki, NAKAYAMA Naofumi, GOTO Hitoshi, FURUIISHI Takayuki, FUKUZAWA Kaori, YONEMOCHI Etsuo	4. 巻 20
2. 論文標題 Improving the Accuracy of Crystal Structure Prediction Using FMO Crystal Energy: An Example of Target XXIII	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 92 ~ 93
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2021-0041	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 OBATA Shigeaki, NAKAYAMA Naofumi, GOTO Hitoshi	4. 巻 62
2. 論文標題 Crystal Structure Prediction; From the Present to the Future	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nihon Kessho Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 260 ~ 268
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5940/jcrsj.62.260	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 Nishio Masaki, Shimada Masaki, Omoto Kenichiro, Nakae Toyotaka, Maeda Hiroaki, Miyachi Mariko, Yamanoi Yoshinori, Nishibori Eiji, Nakayama Naofumi, Goto Hitoshi, Matsushita Tomonori, Kondo Takashi, Hattori Mineyuki, Jimura Keiko, Hayashi Shigenobu, Nishihara Hiroshi	4. 巻 124
2. 論文標題 Selective Formation and SHG Intensity of Noncentrosymmetric and Centrosymmetric 1,1,2,2-Tetramethyl-1-(4-(N,N-dimethylamino)phenyl)-2-(2-cyanophenyl)disilane Crystals under External Stimuli	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 17450 ~ 17458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c03139	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 Omoto Kenichiro, Nakae Toyotaka, Nishio Masaki, Yamanoi Yoshinori, Kasai Hidetaka, Nishibori Eiji, Mashimo Takaki, Seki Tomohiro, Ito Hajime, Nakamura Kazuki, Kobayashi Norihisa, Nakayama Naofumi, Goto Hitoshi, Nishihara Hiroshi	4. 巻 142
2. 論文標題 Thermosalience in Macrocyclic-Based Soft Crystals via Anisotropic Deformation of Disilanyl Architecture	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 12651 ~ 12657
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.0c03643	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 中山 尚史, 小畑 繁昭, 後藤 仁志	4. 巻 59
2. 論文標題 ソフトクリスタルのための計算機シミュレーション技法と応用事例	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本画像学会誌	6. 最初と最後の頁 308 ~ 315
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11370/isj.59.308	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 Ishii Hiroyuki, Obata Shigeaki, Niitsu Naoyuki, Watanabe Shun, Goto Hitoshi, Hirose Kenji, Kobayashi Nobuhiko, Okamoto Toshihiro, Takeya Jun	4. 巻 10
2. 論文標題 Charge mobility calculation of organic semiconductors without use of experimental single-crystal data	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 2524
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-59238-2	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 Kato Yoshiki, Hamada Shinji, Goto Hitoshi	4. 巻 39
2. 論文標題 Validation Study of QSAR/DNN Models Using the Competition Datasets	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecular Informatics	6. 最初と最後の頁 1900154 ~ 1900154
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/minf.201900154	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 Nakagawa Yoko, Nakayama Naofumi, Goto Hitoshi, Fujisawa Ikuhide, Chanthamath Soda, Shibatomi Kazutaka, Iwasa Seiji	4. 巻 31
2. 論文標題 Computational chemical analysis of Ru(II)-Pheox-catalyzed highly enantioselective intramolecular cyclopropanation reactions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chirality	6. 最初と最後の頁 52 ~ 61
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chir.23033	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 Nakagawa Yoko, Imokawa Yusuke, Fujisawa Ikuhide, Nakayama Naofumi, Goto Hitoshi, Chanthamath Soda, Shibatomi Kazutaka, Iwasa Seiji	4. 巻 3
2. 論文標題 Ligand Exchange Reaction on a Ru(II)-Pheox Complex as a Mechanistic Study of Catalytic Reactions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 11286 ~ 11289
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.8b01510	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 NAKAYAMA Naofumi, OBATA Shigeaki, HORI Yoshikazu, GOTO Hitoshi, SEKI Tomohiro, ITO Hajime	4. 巻 17
2. 論文標題 Soft Crystal Force Field for Reproducing the Crystal Structures of Aryl Gold Isocyanide Complexes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 155 ~ 157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2018-0031	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 Tone Masaya, Nakagawa Yoko, Chanthamath Soda, Fujisawa Ikuhide, Nakayama Naofumi, Goto Hitoshi, Shibatomi Kazutaka, Iwasa Seiji	4. 巻 8
2. 論文標題 Highly stereoselective spirocyclopropanation of various diazooxindoles with olefins catalyzed using Ru(ii)-complex	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 39865 ~ 39869
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8RA09212E	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 5件 / うち国際学会 12件)

1. 発表者名 後藤仁志
2. 発表標題 計算化学によるソフトクリスタルの結晶構造と構造相転移の解析
3. 学会等名 ソフトクリスタル第8回公開シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 濱田信次, 後藤仁志
2. 発表標題 応力印加下における分子性結晶の構造最適化と機械特性評価
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 細見駿介, 納本淳, 後藤仁志
2. 発表標題 トレンド除去ゆらぎ解析を用いた配座変換過程の判定
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hitoshi Goto
2. 発表標題 Computational Chemistry in Soft Crystals
3. 学会等名 4th International Symposium on Photofunctional Chemistry of Complex Systems (ISPPCS2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 後藤仁志
2. 発表標題 有機半導体材料の結晶構造予測と物性計算
3. 学会等名 アモルファス・ナノ材料と応用 第147委員会 / 第147回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Naofumi Nakayama
2. 発表標題 The calculation of electronic circular dichroism (ECD) spectra based on Pariser-Parr-Pople (PPP) model including external Coulomb interaction
3. 学会等名 The 2nd International Symposium on Soft Crystals (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigeaki Obata
2. 発表標題 Phase Transition Mechanism of Soft Crystal Materials: Computational Simulations
3. 学会等名 The 2nd International Symposium on Soft Crystals (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naofumi Nakayama
2. 発表標題 Computational analysis of Ru(II)-Pheox-catalyzed enantioselective intramolecular cyclopropanation reaction
3. 学会等名 17th Conference on Chiroptical Spectroscopy -CD2019- Pisa (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naofumi Nakayama
2. 発表標題 ECD calculation based on σ -electron SCF-CI-DV method including external Coulomb interaction
3. 学会等名 17th Conference on Chiroptical Spectroscopy -CD2019- Pisa (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 立花尚登、井上雅都、金子晶夫、加藤凱生、濱田信次、後藤仁志
2. 発表標題 配座DBを用いたグラフ畳み込みニューラルネットワークによる構造物性相関
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 後藤仁志
2. 発表標題 ソフトクリスタルの結晶計算と多形転移解析の技術考
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中山尚史
2. 発表標題 分子・分子性結晶の機能を解明するための計算化学ソフトウェアの利活用
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hitoshi GOTO
2. 発表標題 Theoretical and computational approach to functional design of molecular crystals
3. 学会等名 CCS international symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naofumi Nakayama, Shigeaki Obata, Hitoshi Goto, Miki Hasegawa
2. 発表標題 Force field parameters for modeling the soft crystals of lanthanides (Nd, Eu, Gd, Tb, and Ho) complexes
3. 学会等名 256th ACS National Meeting & Exposition (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 後藤仁志
2. 発表標題 ソフトクリスタル解析のための結晶計算
3. 学会等名 光化学応用講座2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hitoshi GOTO
2. 発表標題 Approach to Soft Crystals: Toward Investigation of Their Phase Transition Mechanisms
3. 学会等名 The Satellite International Symposium on Soft Crystals in Europe (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hitoshi GOTO
2. 発表標題 Development of Organometallic Force Field for Soft Crystal
3. 学会等名 7th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naofumi Nakayama, Shigeaki Obata, Yoshikazu Hori, Hitoshi Goto, Tomohiro Seki, Hajime Ito
2. 発表標題 Soft crystal force field for elucidation of crystal-crystal phase transition of gold isocyanide complexes
3. 学会等名 255th ACS National Meeting & Exposition (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中山尚史、小畑繁昭、堀芳和、後藤仁志、関朋宏、伊藤肇
2. 発表標題 ソフトクリスタルの結晶力場の構築：フェニル（フェニルイソシアニド）金（I）の場合
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 後藤仁志、中山尚史、小畑繁昭
2. 発表標題 金属錯体の結晶ポテンシャルの開発と多形転移現象のメカニズム解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hitoshi Goto
2. 発表標題 Theoretical design of functional molecular crystals; a case of organic semiconductors
3. 学会等名 EMN Meeting on Computation and Theory (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 NaofumiNakayama, ShigeakiObata, Hitoshi Goto, Tomohiro Seki, Hajime Ito
2. 発表標題 Soft crystal force field for elucidation of crystal-crystal phase transition of gold isocyanidecomplexes
3. 学会等名 255th ACS National Meeting and Exposition (国際学会)
4. 発表年 2018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	中山 尚史 (Nakayama Naofumi) (90402669)	コンフレックス株式会社(研究)・研究・主任研究員 (92665)	

6. 研究組織（つづき）

	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
研究協力者	小畑 繁昭 (Obata Shigeaki) (00533192)	コンフレックス株式会社（研究）・研究・研究員 (92665)	
研究協力者	五十幡 康弘 (Ikabata Yasuhiro) (10728166)	豊橋技術科学大学・情報メディア基盤センター・准教授 (13904)	
研究協力者	濱田 信次 (Hamada Shinji) (50521407)	豊橋技術科学大学・情報メディア基盤センター・研究員 (13904)	

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