

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 10 日現在

機関番号：14701

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23350019

研究課題名(和文) 相互作用の分類・評価と機能開発のための AIM 2 元関数解析法の確立と応用

研究課題名(英文) Establishment and Applications of AIM Dual Functional Analysis for Evaluation and Classification of Interactions Toward Development of Novel Properties

研究代表者

中西 和郎 (NAKANISHI, Waro)

和歌山大学・システム工学部・教授

研究者番号：80110807

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 15,800,000 円、(間接経費) 4,740,000 円

研究成果の概要(和文)：弱い相互作用から強い相互作用全体を統一かつ有効に解析できる方法を模索し、AIM2元関数解析法を提案した。本法は理論化学者の活用が中心であったAIMを、その厳密性を損なうことなく実験化学者がより容易に取扱えるようにした画期的な方法である。Hb(rc)を $Hb(rc) - Vb(rc)/2 (= (h/2)^2/8m - 2 b(rc))$ でプロットし、最適化構造のデータからは相互作用の静的特性が、最適化構造周辺における摂動構造のデータからは相互作用の動的特性が得られる。本法を適用し、広範な水素結合や超原子価結合等について解析・評価および分類を行った。

研究成果の概要(英文)：We proposed AIM dual functional analysis to analyze, evaluate, and classify weak to strong interactions, systematically. The concept of dynamic nature of interactions is derived from data of perturbed structures around the fully optimized ones, which are employed in addition to those of the fully optimized structures, in our treatment. How can the perturbed structures, necessary for the analysis, be generated? Two methods were established. One employs the partial optimizations with interaction distances in question being fixed suitably (POM) and the other does the normal coordinates of internal vibrations (NIV). It was confirmed that both methods predict the dynamic nature for weak to strong interactions, very similar with each other. The method was applied to wide variety interactions and gave very good results. The application to hydrogen bonds from pure-closed shell to shard-shell regions is a typical example.

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・有機化学

キーワード：理論有機化学 有機典型元素 構造有機化学 AIM解析 水素結合 ファン・デル・ワールス相互作用 X線結晶構造解析 超原子価結合

## 1. 研究開始当初の背景

我々は、「計算先導」と愛称する研究法を提唱・実践してきた。初期の成果は、「実験結果と計算値をうまく組み合わせることによって実験結果のみでは手の届かないような解析を可能にする方法」として、雑誌『化学』に「1999年の化学：注目される論文」で紹介された。「計算先導」は弱い相互作用の研究に極めて有効であり、「超原子価結合」を発展させた。「拡張超原子価結合」の概念を提唱・実証した。この概念は、他の研究者らによっても電気・磁気材料の機能発現や薬学・生化学における課題の解明に重要であることが実証された。結果、有名論文誌のIntroductionで紹介され、総説等の執筆依頼、国際学会のInternational Committeeへの招聘等を頂いた。また、*New. J. Chem.* 2008のFront inside coverにも採用された。

研究推進の際に、弱い相互作用を分類・評価する必要にせまられ、AIM (Atoms-in-Molecules)の優れた分類・評価機能を生かすことにした。

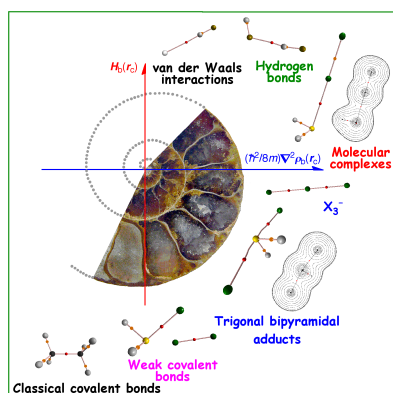


Fig. 1 弱い相互作用から強い相互作用のAIM2元関数解析法分離

AIM解析は、実験化学者が機能物質を開発するための極めて重要な方法であると期待されるものの、これまでは理論化学者(量子化学者)による研究が主要な部分を占めてきた。我々は実験化学者として、自らの実験結果を、自らのイメージで解析・評価できる方法を模索し、AIM2元関数解析法を考案・提唱した。(図1参照)この成果は*J. Phys. Chem.* 2009のFront coverに採用された。

AIM解析では、bond critical point (BCP)と呼ばれる化学結合や相互作用における特異点(電荷密度( $\rho_b(r_c)$ )が最小となる点)におけるAIM諸関数の特性を中心に論じる。例えば相互作用は、BCPにおける $\rho_b(r_c)$ の2次微分(Laplacian  $\nabla^2 \rho_b(r_c)$ ; $\nabla^2 \rho_b(r_c)$ )および全電子エネルギー密度( $H_b(r_c)$ )の符号によって分類される。AIM2元関数解析法では、 $H_b(r_c)$ をLaplacian  $\nabla^2 \rho_b(r_c)$ でプロットすることによって相互作用の分類・評価を行う。 $H_b(r_c)$  vs  $\nabla^2 \rho_b(r_c)$

プロットでは、x軸  $\nabla^2 \rho_b(r_c)$ とy軸 $H_b(r_c)$ の両軸によって相互作用を第1象限から第4象限までの4種類に大別できるため、相互作用の総合的な分類・評価が可能となった。(このうち第2象限には対応する相互作用は存在しないため3種類となる。)すなわち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いえる

AIM2元関数解析法は、理論化学者の活用が中心のAIMを、その厳密性を損なうことなく、実験化学者が容易に取扱えるようになった画期的な方法である。理論の分野を含めて多くの分野から注目を集めている。

## 2. 研究の目的

AIM2元関数解析法は、X線回折法による精密結晶構造解析とも極めて緊密に関連している。よってX線構造解析においても、結晶の構成要因の解析を通して構造を分類する容易な手段を提供し、重要な役割を果たすと期待される。また、化学における弱い相互作用の分類・評価は、化合物の微細構造の決定因子を平易な形で説明・説明し、高性能な機能物質を創製・開発する際に必要なヒントを直感的に与えてくれる。

AIM2元関数解析法を物質科学や機能性物質の創製・開発における静的および動的特性を解明する手法として有用な手段であることを実証し、高機能物質創製に挑戦できる解析法として発展・確立させることを目的とした。実験化学者が容易に自分の系の相互作用を解析・評価できるようになり、高性能な関連物質の創製への挑戦の強力な助けとなると期待している。

## 3. 研究の方法

AIM2元関数解析法により、物質間や物質と磁場との弱い相互作用を支配する因子等できるだけ多岐に渡り、化学現象全体の描写に取り組んだ。理論と実験の両面から解析・解明した。

- (1) 実行する計算法や基底関数を適切に選択して、分子の最適化構造、振動解析およびAIM関数を、Gaussian 03およびGaussian 09プログラムを用いて、算出した(我々の計算結果は、実験結果と比較検討し得るほど、高い信頼性があることは既の実証している。)
- (2) AIM2000 (version 2)を用いて、Gaussian 03およびGaussian 09プログラムを用いて作成したAIM関数データを解析した。
- (3) 生化学、薬学、物性物理学等の分野における既報のX線結晶構造解析のデータの収集とデータ整理を行った。
- (4) 理論的データと実測のデータの比較検討を行った。

## 4. 研究成果

- (1) 静的挙動と動的挙動の特性解析

我々は既に、従来のような相互作用の静的特性の解析に加え、遷移状態等を含む動的特性の解析が可能となるよう、最適化構造に加えて、摂動構造に対応するデータを加味した解析法を提案している(図2, 図3参照)。しかし、摂動構造の作成法が重要であるため、本研究では、分子や付加体、遷移状態における内部振動の基準座標を用いる方法(NIV)を改良・確立した。

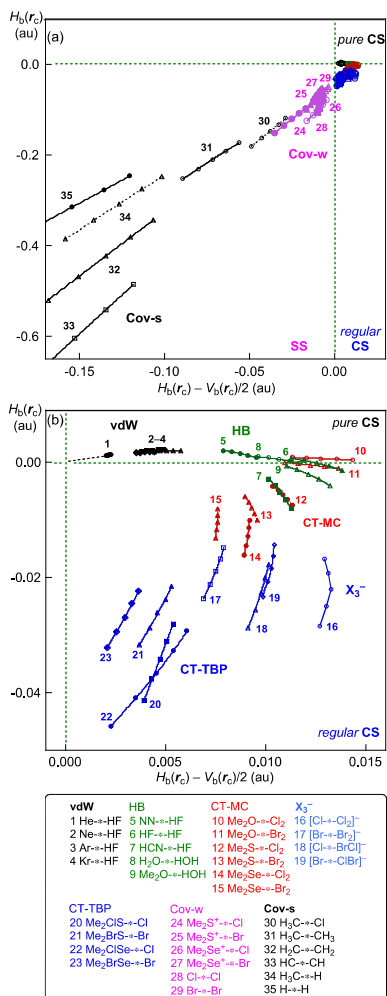


Fig. 2  $H_b(r_c)$  vs  $H_b(r_c) - V_b(r_c)/2$ プロット: (a)全体図、(b)部分拡大図

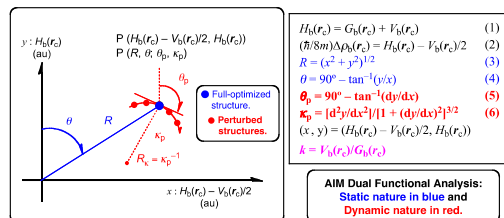


Fig. 3  $H_b(r_c)$  vs  $H_b(r_c) - V_b(r_c)/2$ プロットを用いたAIM解析の際の極座標表示

図4にPOM法の、図5にNIV法による摂動構造作成の概略を示した。摂動構造の作成法が重要であるため、分子や付加体、遷移状態における内部振動の基準座標を用いる方法(NIV)を改良・確立した。

NIV法の結果を既に開発したPOM法(W. Nakanishi, et al. *J. Phys. Chem. A* 2008, 112, 13593)の結果と比較した(図6参照)。

両者は、大変良い一致を示した。相互作用の解析には、POM法およびNIV法とも有効であり、遷移状態等の解析にはNIV法が有効である。

$$r = r_0 + wa_0 \quad (w = 0, \pm 0.05, \text{ and } \pm 0.1):$$

$$r_0 = r_0(X, Y) \quad (\text{full-optimized distance}); \quad r = r(X, Y) \quad (\text{fixed distance});$$

$$a_0 = 0.5292 \text{ \AA} \quad (\text{Bohr radius}).$$

$$D(n) = D(1) - 0.60 \cdot \log n$$

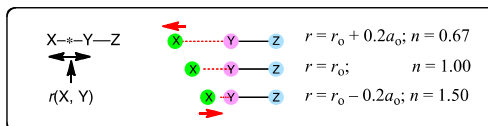


Fig. 4 POM法(部分最適化法)による摂動構造の作成

$$S_{kw} = S_0 + f_{kw} \cdot N_k$$

$$r = r_0 + wa_0 \quad (w = (0), \pm 0.05, \text{ and } \pm 0.1; a_0 = 0.52918 \text{ \AA})$$

$S_{kw}$ : The  $k$ -th perturbed-structures in question of a species.  
 $S_0$ : The coordinates of a full-optimized structure of a species.  
 $N_k$ : The normal coordinates of the  $k$ -th internal vibration of a species.

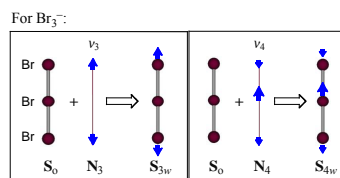


Fig. 5 NIV法による摂動構造の作成

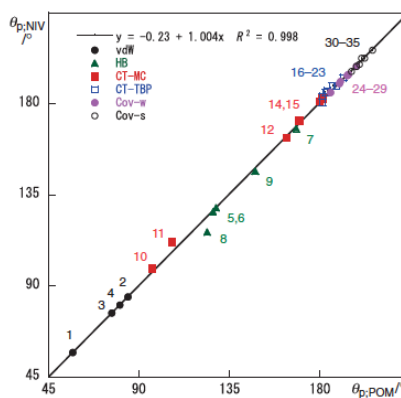


Fig. 6 NIV法とPOM法を用いて得た  $\theta_p$  の比較 (図中の番号は図2の化合物番号と同じ)

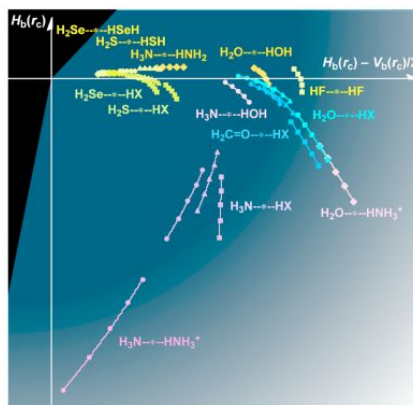


Fig. 7 様々な水素結合に対する  $H_b(r_c)$  vs  $H_b(r_c) - V_b(r_c)/2$ プロット

(2) 広範囲にわたる水素結合の動的および静

## 的挙動による分類

水素結合は、その実態はあるが相互作用としての分類には含まれていない。図7に広範な水素結合に対するAIM2元関数解析法の適用結果(一部)を示した。最適化構造のデータは、極座標( $R_c$ )を用いて解析し、摂動構造のデータは、( $r_p$ ,  $\rho_p$ )を用いて解析した(図3参照)。

## (3)2-(2-Pyridylimino)-2H-1,2,4-thiadiazolo[2,3-a]-pyridine (1)およびその誘導体におけるN-Z-N 3c-4e (Z = S, Se, Te)の静的・動的挙動

1およびその誘導体の超原子価相互作用にAIM2元関数解析法を適用するとともに、1の電荷密度( $\rho(r)$ )を高分解能X線回折によって正確に測定した。実験・理論の両面から解析を行った。

図8に1の最適化構造( $C_{2v}$ )と実測の構造( $C_1$ , close to  $C_{2v}$ )を示した。これらは非常に良く一致していた。1-3および5-7は $C_{2v}$ として最適化されたが、4は $C_s$ であり、5は $C_1$ であった。また1の( $r$ ), negative Laplacian, trajectoryプロット等の結果は理論と実測の高分解能X線回折法の精密測定で良い一致を示した。

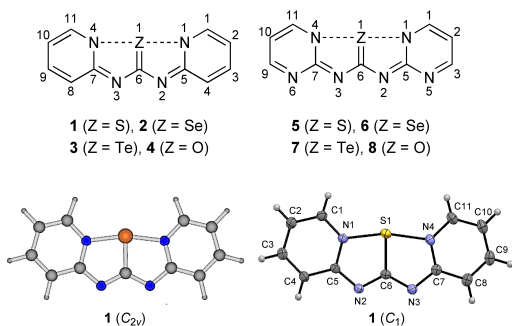


Fig. 8 化合物1の最適化構造と実測の構造

次に、N-Z-N 3c-4e (Z = S, Se, Te)の特性を調べるために、1-8のN-Z-N相互作用に対してAIM2元関数解析法を適用した。図9に1-3に対する結果を示した。1および5のN-S-N 3c-4eは弱い共有結合相互作用に匹敵し、2および6のN-Se-N 3c-4eは $R_2ZX_2$  (TBP: Z = S, Se; X = Cl, Br)等のX-Z-X 3c-4eと同程度の相互作用であった。また3および7のN-Te-N 3c-4eは $R_2Z---X_2$  (MC: Z = S, Se; X = Cl, Br)等のZ--- $X_2$ に近いことが明らかとなった。なお、4および8のN-O---N相互作用は非対称となる。短結合長のN-Oは強い共有結合相互作用である。長結合長のN---Oに関しては、4( $C_s$ )では典型的なvan der Waals相互作用の特性を示すが、8( $C_1$ )ではBCPが検出されなかった。結合長がBCP検出の限界を超えたためと考えられる。

以上のように、AIM2元関数解析法と高分解能X線回折による( $r$ )の精密測定法を融合させた研究法は、相互作用全体を実験・理論の両面から極めて高精度に解析を

行うことが可能であることを実証した。

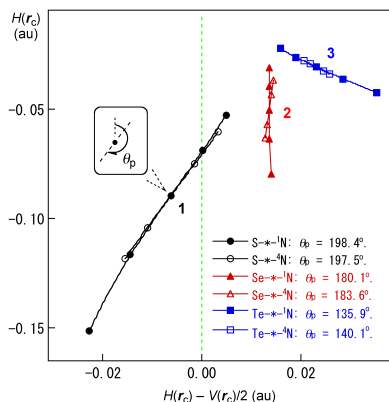


Fig. 9 1-3に対する $H_b(r_c)$  vs  $H_b(r_c) - V_b(r_c)/2$ プロット

実験化学者が自らの実験結果を直感的に解析・評価できるAIM2元関数解析法を、POM法やNIV法による摂動構造作成法の確立等を通して、化学現象全体を有効解析できる方法に発展・整備することが、本研究の特色であり、独創的な点である。

これらの成果は、実験結果の理論解析・理解を含め、化学・薬学・生化学等の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。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

(雑誌論文)(計13件)

T. Murai, D. Nishi, S. Hayashi, and W. Nakanishi, Aromatic Selenic, Selenothioic Diselenic acid Salts: Isolation, Characterization, and  $^{77}\text{Se}$  NMR Spectra, Together with Theoretical Elucidation, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 査読有, doi:10.1246/bcsj.20140018, 印刷中(2014).

B. V. Babu, N. K. Konduru, W. Nakanishi, S. Hayashi, N. Ahmed, and P. M. Mitrasinovic, Experimental and Theoretical Advances in Functional Understanding of Flavonoids as Anti-Tumor Agents Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry, *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry*, 査読有, 13, 307-332 (2013).

W. Nakanishi and S. Hayashi, Role of  $dG/dw$  and  $dV/dw$  in AIM Analysis: An Approach to the Nature of Weak to Strong Interactions, *J. Phys. Chem. A*, 査読有, 117, 1795-1803 (2013).

S. Hayashi, K. Matsuiwa, M. Kitamoto, and W. Nakanishi, Dynamic Behavior of Hydrogen Bonds from Pure Closed Shell to Shared Shell Interaction Regions Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, *J. Phys. Chem. A*, 査読有, 117, 1804-1816 (2013).

T. Nakai, M. Nishino, S. Hayashi, M. Hashimoto and W. Nakanishi, Role of  $p(Z)$ - (Ar/Nap) conjugation in

structures of 1-(arylchalcogeno)-naphthalenes for Z = Te versus Se, S and O: experimental and theoretical investigations, *Dalton Transactions*, 査読有, **41**, 7485-7497 (2012).

W. Nakanishi and S. Hayashi, Applications of Normal Coordinates of Internal Vibrations to Generate Perturbed Structures: Dynamic Behavior of Weak to Strong Interactions Elucidated by Atoms-in-Molecules Dual Functional Analysis, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 査読有, **85**, 1293-1305 (2012).

O. Niyomura, Y. Kito, S. Kato, M. Ishida, M. Ebihara, S. Hayashi, and W. Nakanishi, Unusual Saddle-like Structure of (2-MeOC6H4CS)<sub>2</sub>S: Theoretical Studies and Comparison with its Oxygen Isologue, *Zeit. Anorg. Allgem. Chem.*, 査読有, **638**, 2508-2520 (2012).

W. Nakanishi, S. Hayashi, M. B. Pitak, M. B. Hursthouse, and S. J. Coles, Dynamic and Static Behaviors of N-Z-N (3c-4e) (Z = S, Se, and Te) Interactions: Atoms-in-Molecules Dual Functional Analysis with High-Resolution X-ray Diffraction Determination of Electron Densities for 2-(2-Pyridylimino)-2H-1,2,4-thiadiazol[2,3-a]pyridine, *J. Phys. Chem. A*, 査読有, **115**, 11775-11787 (2011).

W. Nakanishi, S. Hayashi, Y. Katsura, and M. Hada, Relativistic Effect on <sup>77</sup>Se NMR Chemical Shifts of Various Selenium Species in the Framework of Zeroth-Order Regular Approximation, *J. Phys. Chem. A*, 査読有, **115**, 8721-8730 (2011).

S. Kato, K. Tani, M. Ishida, J. Nonogaki, M. Ebihara, S. Hayashi, W. Nakanishi, O. Niyomura, F. Ando, and J. Koketsu, Synthesis, Structures and Ab Initio Studies of Selenium and Tellurium Bis(carbodithioates and carbothioates) *Dalton Transactions*, 査読有, **40**, 8156-8169 (2011).

A. Tanioku, T. Nakai, S. Hayashi, and W. Nakanishi, How do Weak Z-X-X and Stronger X-Z-X Interactions Affect NMR Chemical Shifts of Halogen Adducts with Chalcogenides (R<sub>2</sub>Z·X<sub>2</sub>)? Theoretical Background on the Structural Prediction of R<sub>2</sub>Z·X<sub>2</sub> Through Chemical Shifts in Solutions, *Heteroatom Chemistry*, 査読有, **22**, 446-456 (2011).

M. Ochiai, K. Miyamoto, T. Kaneaki, S. Hayashi, and W. Nakanishi, Highly Regioselective Amination of Unactivated Alkanes by Hypervalent Sulfonylimino-<sup>3</sup>-Bromane, *Science*, 査読有, **332**, 448-451 (2011).

O. Guzyr, C. Vinas, H. Wada, S. Hayashi, W. Nakanishi, F. Teixidor, A. V. Puga, and V. David, Synthesis, Structural, Spectroscopic and Electrochemical Studies of Carborane Substituted Naphthyl Selenides, *Dalton Transactions*, 査読有, **40**, 3402-3411 (2011).

[学会発表](計20件)

杉林 祐至・林 聡子・中西 和郎・大泉 明久・佐藤 総一, 6配位方ルコゲニウム塩における相互作用のAIM解析, 日本化学会第94春季年会, 4K4-13, 2014.3.27-30, 名古屋大学東山キャンパス(愛知)。

W. Nakanishi, Basic Concept of AIM Dual Functional Analysis with Applications to Hydrogen Bonds: Dynamic and Static Behavior of HBs, 56th Annual Scientific Meeting of the Polish Chemical Society (PTChem) and the Association of Engineers and Technicians of Chemical Industry (SITPChem), SO6W05, 2013.9.16-20, Siedlce (Poland).

K. Matsuiwa, Y. Sigibayashi, S. Hayashi, and W. Nakanishi, Dynamic and Static Behaviors of Intramolecular Interactions in Diethenonaphthalene and Related Compounds Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, 56th Annual Scientific Meeting of the Polish Chemical Society (PTChem) and the Association of Engineers and Technicians of Chemical Industry (SITPChem), SO6P25, 2013.9.16-20, Siedlce (Poland).

Y. Tsubomoto, H. Miza, K. Matsuiwa, S. Hayashi, and W. Nakanishi, Dynamic and Static Behavior of E-E' Interactions in MeEE' Me (E, E' = S and Se) and Related Species, Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, 56th Annual Scientific Meeting of the Polish Chemical Society (PTChem) and the Association of Engineers and Technicians of Chemical Industry (SITPChem), SO6P22, 2013.9.16-20, Siedlce (Poland).

林 聡子・松岩 浩平・中西 和郎, 広範囲にわたる水素結合の動的および静的挙動による分類: AIM2元関数解析法の適用, 第24回基礎有機化学討論会, 4K4-13, 2013.9.5-7, 学習院大学(東京)。

W. Nakanishi, R. Shimabukuroi, K. Matsuiwa, and S. Hayashi, Structure, Stability, and Behavior of Neutral and Ionic Polybromine Clusters: Theoretical Studies Containing AIM Dual Functional Analysis, Halchem VI, IL21, 2012.12.8-11, Bangalore (India).

林 聡子・松岩 浩平・中西 和郎, 内部基準振動座標を用いた摂動構造の構築: AIM2元関数解析法の適用による種々の相互作用における動的挙動の解明, 第39回有機典型元素化学討論会, 0-40, 2012.12.6-8, いわて県情報交流センター(岩手)。

松岩 浩平・林 聡子・中西 和郎, 分子内相互作用の動的および静的挙動の解析: AIM2元関数解析法の適用, 第23回基礎有機化学討論会, B24, 2012.9.19-21, 京都テレサ(京都)。

見座 弘祥・林 聡子・中西 和郎, [Z(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Z']<sup>2+</sup>とZ(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Z'との付加体 (Z, Z' = S, Se, and Te)におけるZ-Z'相互作用: AIM2元関数解析法による解析, 第23回基礎有機化学討論会, 2P035, 2012.9.19-21, 京都テレサ(京都)。

W. Nakanishi, S. Hayashi, H. Miza, and K. Matsuiwa, AIM Dual Functional Analysis of Chalcogen-Chalcogen Interactions in

[Z(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Z']\* (Z, Z' = S and Se; \* = null, + and 2+) and the Di-cation Dimers, 25th International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS-25), OC-A-02, 2012.6.24-29, Częstochowa (Poland).

W. Nakanishi and S. Hayashi, Formation, Stability, Reactivity, and Nature of Extended Hypervalent 4c-6e Interactions, The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), C-14, 2012.5.20-25, Kyoto (Japan).

Y. Tsubomoto, S. Hayashi, and W. Nakanishi, Behaviors of Z-Z' Interactions (Z, Z' = S and Se) in MeZZ'Me and the Related Species, Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), PB-69, 2012.5.20-25, Kyoto (Japan).

A. Tanioku, K. Harumoto, S. Hayashi, and W. Nakanishi, Fine Structures of 1,2-Bis(arylselanyl)benzenes: Nonbonded Se---Se Interactions as Factors to Determine the Structures, The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), PB-06, 2012.5.20-25, Kyoto (Japan).

A. Nomoto, T. Ozaki, S. Hayashi, W. Nakanishi, and A. Ogawa, Crystal Structure of -Chalcogeno-, -Unsaturated Chalcogenoesters and Interactions between the O-Ch Atoms, The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), PB-75, 2012.5.20-25, Kyoto (Japan).

W. Nakanishi, Dynamic and Static Behaviours of Interactions in Multi-Interaction Systems Elucidated by Atoms-in-Molecules Dual Functional Analysis, 12th Eurasia Conference on Chemical Sciences (EuAsC2S-12), S6-OP1, 2012.4.16-21, Corfu (Greece).

林 聡子・島袋 里佐・松岩 浩平・中西 和郎, ナフタレン系におけるカルコゲン-カルコゲン非共有相互作用: Z<sub>2</sub> 2c-4e, Z<sub>2</sub>C 3c-4eおよびZ<sub>4</sub> 4c-6eに対するAIM 2元関数解析, 日本化学会第92春季年会, 4K4-13, 2012.3.25-28, 神奈川大学 (神奈川).

松岩 浩平・林 聡子・中西 和郎, AIM2元関数解析法による分子内 - 相互作用の動のおよび静的挙動の解析: 摂動構造生成における内部振動基準座標の適用, 第38回有機典型元素化学討論会, P-40, 2011.12.7-9, 石川県立音楽堂邦楽ホール (金沢).

見座 弘祥・林 聡子・中西 和郎, AIM2元関数解析法による中性および荷電型 Cyclo-1,2-ZZ'(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub> および Cyclo-1,5-Z(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Z' (Z, Z' = O, S, Se, and Te)におけるZ---Z'相互作用の解明, 第38回有機典型元素化学討論会, P-44, 2011.12.7-9, 石川県立音楽堂邦楽ホール (金沢).

野元 昭宏・尾崎 紀哉・林 聡子・中西 和郎・小川昭弥, -カルコゲン-, -不飽和カルコゲノエステルの位置および立体選択的な合成と結晶構造, 第38回有機典型元素化学討論会, 0-45, 2011.12.7-9, 石川県立音楽堂邦楽ホール (金沢).

W. Nakanishi, S. Hayashi, M. Pitak, M. Hursthouse, and S. Coles, Atoms-in-Molecules Dual Functional Analysis of N-S-N (3c-4e) in 2-(2-Pyridylimino)-2H-1,2,4-thiadiazolo [2,3-a]pyridine: Theoretical and Experimental Investigations, The 14th Asian Chemical Congress 2011 (14 ACC), OR-G7-02, 2011.9.5-8, Bangkok (Thailand).

[図書](計4件)

W. Nakanishi and S. Hayashi, <sup>77</sup>Se NMR: Theoretical Aspects and Practical Applications in Organoselenium Chemistry Between Synthesis and Biochemistry, C. Santi (Ed.), Bentham e-Book, Chapter 13, pp. 379-417 (2014), ISBN: 9781849736220.

S. Hayashi and W. Nakanishi, Hypervalent chalcogen compounds in Handbook of Chalcogen Chemistry: New Perspectives in Sulfur, Selenium and Tellurium, F. Devillanova and W.-W. Du Mont (Eds.), Royal Society of Chemistry, Chapter 12.3, pp. 335-372 (2013), ISBN: 9781849736220.

W. Nakanishi and S. Hayashi, Theoretical calculations and NMR spectroscopy in Handbook of Chalcogen Chemistry: New Perspectives in Sulfur, Selenium and Tellurium, F. Devillanova and W.-W. Du Mont (Eds.), Royal Society of Chemistry, Chapter 12.4, pp. 373-432 (2013), ISBN: 9781849736220

W. Nakanishi, S. Hayashi, M. Hashimoto, M. Arca, M. C. Aragoni, and V. Lippolis, Recent Advances of Structural Chemistry of Organoselenium and Organotellurium Compounds in The Chemistry of Organic Selenium and Tellurium Compounds, Volume 4, Parts 1 and 2 Set (Patai's Chemistry of Functional Groups), edited by Z. Rappoport (Ed.) Chapter 11, pp. 885-972 (2013), ISBN: 9781118336939.

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

中西 和郎 (NAKANISHI Waro)  
和歌山大学・システム工学部・教授  
研究者番号: 80110807

### (2) 研究分担者

林 聡子 (HAYASHI Satoko)  
和歌山大学・システム工学部・准教授  
研究者番号: 00294306