

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 13 日現在

機関番号：14701
 研究種目：基盤研究(C) (一般)
 研究期間：2014～2016
 課題番号：26410050
 研究課題名(和文) AIM二元関数解析法の新展開：結晶および不安定物質中における弱い相互作用の解析

 研究課題名(英文) Advanced Development of AIM Dual Functional Analysis: Applications to Weak Interactions in Crystals and Unstable Materials

 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) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：相互作用を統一的に評価・分類できる解析法として確立したAIM二元関数解析法を物質科学の発展と新規物質創製に挑戦できる解析法として発展させ、確立するため、様々な非結合相互作用に適応した。この結果は高く評価されPCCPのinside coverに選定された。また動的特性に関連して新規な摂動構造の作成法を提案し、不安定化学種等を含めた相互作用の解析・評価において、有効な手法として確立することができた。

研究成果の概要(英文)：We have proposed and established AIM Dual Functional Analysis (AIM-DFA) to analyze, classify, characterize, and understand weak to strong interactions in a unified form, employing a series of standard interactions. AIM-DFA is applied mainly to the closed shell interactions. The applications contribute to the next advancement of chemical sciences, containing the pioneering the new materials and give a hint for the further development of AIM-DFA. Such investigations, containing the XH---, EH2---, and YX--- interactions, together with the E4 (4c-6e) and E2X2 (4c-6e) interactions, were highly regarded, where X and Y are halogen atoms and E of chalcogen atoms. Among them, the investigations on EH2--- (C6H6) was selected as a inside cover of PCCP. Notably, AIM-DFA is further established as a useful method to analyze the interactions in the unstable molecules, after proposal of the method to generate the perturbed structures suitable for it, although some are in progress.

研究分野：理論有機化学

キーワード：QTAIM二元関数解析法 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 拡張超原子価結合 量子化学計算

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QAIM (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。QAIM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QAIM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つつ実験化学者の要請を満たすことを考慮して、QAIM2元関数解析法(QAIM-DFA)を提唱するとともにその発展に努めてきた。

QAIM-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。QAIMの優れた分類・評価機能を生かす形で考案・提唱したこのQAIM-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

QAIM-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、QAIM-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) ファン・デル・ワールス(vdW)相互作用と水素結合の境界付近の特性解明: DNA等の多水素結合の動的特性の解明、C-H... π /ハロゲン結合の特性解明
- (2) 超原子価結合および拡張超原子価結合の生成要因や安定性を含めた特性解明
- (3) 精密X線構造解析等と連携して、弱い相互作用の電子状態を理論と実験の両面からの解析・解明

3. 研究の方法

量子化学計算は、化合物の構造最適化は、Gaussian 03およびGaussian 09プログラム、AIM2000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) ファン・デル・ワールス(vdW)相互作用と

水素結合の境界付近の特性の解明

QAIM-DFAを適用して様々な相互作用の解析・評価および分類を行った。摂動構造は、内部振動の基準座標(NIV: Normal coordinates of internal vibrations)を用いて作成した。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) を用いて解析した。 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(雑誌論文⑫)。 $45.0^\circ < \theta < 90.0^\circ$ 、 $90.0^\circ < \theta < 180.0^\circ$ 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)。

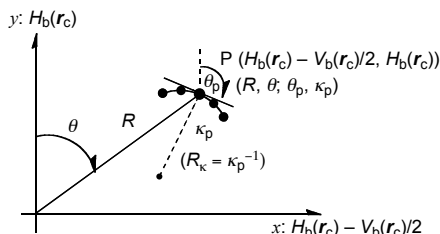


図1 Polar (R, θ) coordinated representation of $H_b(\mathbf{r}_c)$ versus $H_b(\mathbf{r}_c) - V_b(\mathbf{r}_c)/2$.

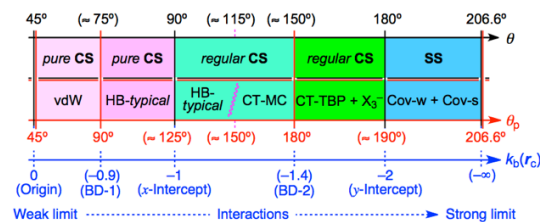


図2 Rough classification of interactions by θ and θ_p , together with κ_p .

QAIM-DFAを適用して、ジエタノジヒドロナフタレン(1)、ジエテノジヒドロナフタレン(2)、その誘導体(3)およびシクロファン類(4-6)における π - π 相互作用の解明を行った(チャート1)。

1)について、アルケニル系のみならず、フェニル系についても解析を行った。着目した炭素-炭素間における π - π 相互作用は、非共有結合性の典型的な水素結合(typical-HB-nc)の特性をもつことを明らかにした(雑誌論文⑦)。

1のエタノ架橋をエテノ架橋に置換した2, 3)について解析を行った。その過程で、炭素-炭素間に2種のBCPおよびbond path (BP)が現れ、vdW力程度から typical-HB程度の働きをしていることを明らかにした(雑誌論文④)。

対面したフェニル基をもつシクロファン類(4-6)では、対面する芳香環について、炭素-炭素間距離よりも両炭素の2p軌道の方向が π - π 相互作用の強さに起因する重要な因子で

あることを明らかにした(雑誌論文③)。

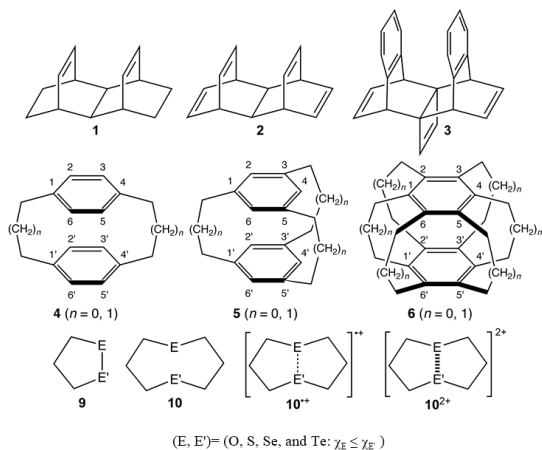


チャート1 Compounds 1-10

カルコゲン-カルコゲン結合は医薬や生化学等、幅広い分野で重要な役割を果たしている。HEE'H (7)、MeEE'Me (8)、cyclo-1,2-EE'(CH₂)₃ (9) について種々の電子状態におけるE-E'結合の挙動をQTAIM-DFAを用い、解析・評価・分類した(雑誌論文⑭)。

QTAIM-DFAを適用して、ベンゼンπ系におけるX-H---π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(図3参照)。

図4に示したようにこれらの相互作用はpure-closed shellとして分類され、vdW力程度であった(雑誌論文⑥, ⑨Inside Coverにも採用, ⑩)。ナフタレン系、アントラセン系についても研究を行った(雑誌論文⑧)。

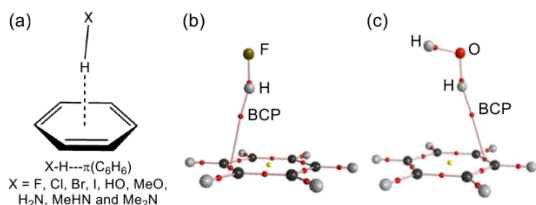


図3 Some X-H---π interactions in benzene π-system (a), molecular graph for F-H---π (C₆H₆) (b), and HO-H---π (C₆H₆) (c).

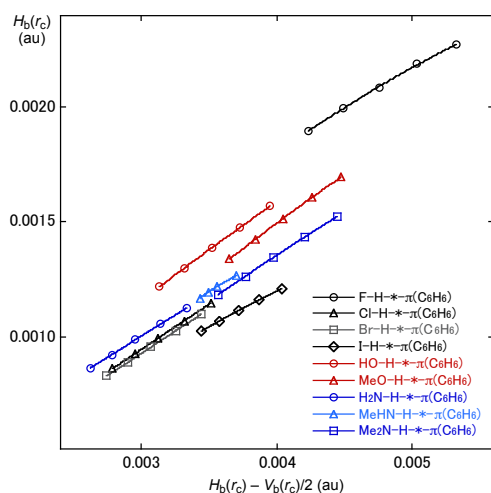


図4 Plots of $H_b(\mathbf{r}_c)$ versus $H_b(\mathbf{r}_c) - V_b(\mathbf{r}_c)/2$ for various X-H---π (C₆H₄).

(2) 超原子価結合および拡張超原子価結合の

生成要因や安定性を含めた特性解明

QTAIM-DFAを用いて¹E(CH₂CH₂CH₂)₂²E (10: ¹E, ²E = (O), S, Se, and Te)とそれらのラジカルカチオン(10⁺)およびジカチオン(10²⁺)との付加体11⁺および11²⁺における¹E-²Eおよび¹E-¹E相互作用を、静的・動的挙動の両面から解析した。11⁺および11²⁺は、それぞれ拡張超原子価結合²E---¹E---¹E---²E 4c-7e、4c-6eを有し、これらの相互作用の解明は大変興味深い。

11²⁺におけるQTAIM-DFAプロットを図5に示した。11g²⁺の両0*-0相互作用は、van der Waals力程度であり、11h²⁺の内側のS*-S、11i²⁺と11b²⁺の内側のSe*-Se、11j²⁺、11c²⁺、11e²⁺、11f²⁺の内側のTe*-Te相互作用は、弱い共有結合程度であった。その他の相互作用は、電荷移動型であった(雑誌論文②, ⑩)。

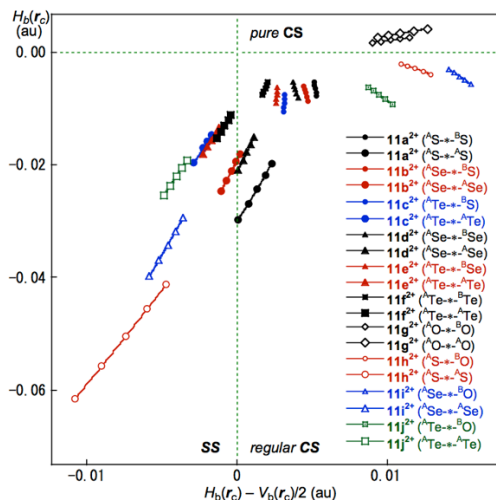


図5 Plots of $H_b(\mathbf{r}_c)$ versus $H_b(\mathbf{r}_c) - V_b(\mathbf{r}_c)/2$ for E*-E in 11²⁺.

カルコゲン結合を含んだタンパク質などの生体分子は様々な役割を果たす。一例として、ジスルフィド結合を有するグルタチオンジスルフィドは、細胞内において反応性に富んだ有害な活性酸素種を無害化する反応サイクルに欠かせない。さらに、生体内で必須の微量元素であるセレンを含むセレノシチンなどのジセレニド結合を有する分子の生体内における機能にも大きな関心を集められている。

そこで、ナフタレンの1,8-位におけるZ₄ 4c-6e相互作用(チャート2)に関してQTAIM-DFAを中心として理論解析を行った。

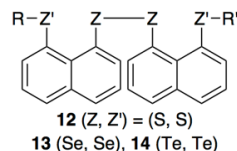


チャート2 Compounds 12-14

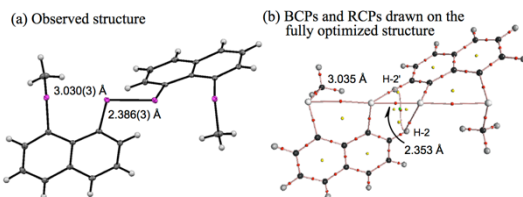


図6 Observed and optimized structures of 13 with the results of QTAIM analysis.

計算結果は、X線結晶構造解析で観測された Se---Se間距離を大変良く再現し、QTAIM-DFAでは、Se---Seおよび²H---H²間の相互作用を含み、期待される全てのBCPが検出された(図6参照)。**13**のSe---Se結合は、**12**のS---S結合よりも弱く、**13**のSe---S相互作用は、**12**のS---S相互作用よりも強いことを明らかにした(雑誌論文⑤)。

さらにナフタレンの1,8-位におけるZ₂X₂ 4c-6e相互作用やR-Cystineおよびその誘導体についてもQTAIM-DFAを中心として理論解析を行った(雑誌論文①, ⑬)。

(3)精密X線構造解析等と連携して、弱い相互作用の電子状態を理論と実験の両面からの解析・解明

イギリスのSouthampton大学のSimon Coles教授(Director, UK National Crystallography Service)らの協力を得て、化合物**12**とその関連化合物の精密X線構造解析を行った。現在報文にまとめているところである。

(4)その他

QTAIM-DFAを適用して相互作用の動的特性の解析する際、着目する相互作用の周辺からの影響を取り除いた(いわば絶対的な値として)形で相互作用の動的特性が解析できる新規摂動構造の作成法に取り組んだ。実際にはCompliant force constantsに対応する基準座標(CIV)を用いて作成した摂動構造がこの目的を果たすために有効に機能すると考え、新規摂動構造の作成のため、プログラムを工夫し、実証を行った。

データの打ち出し段階でプログラムに工夫を加える必要があり、時間は要したが、うまく行えた。操作性の容易さ等の微妙な調整を行っている。QTAIM-DFAを適応し、ほぼ満足いく成果が得られ、現在報文にまとめているところである。

QTAIM-DFAを実験化学者が用いて、自らの測定結果を自身のイメージで解析し、かつ化学者の要請を満たすことが考慮できた大きな成果が得られたが、汎用性や簡易性という点ではもう少し研究が必要である。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計14件)

①Yutaka Tsubomoto, Satoko Hayashi, Waro Nakanishi, Takahiro Sasamori, and Norihiro Tokitoh, Nature of E₂X₂ σ (4c-6e) of the X---E-E---X type at naphthalene 1,8-positions and model, elucidated by X-ray crystallographic analysis and QC calculations with QTAIM approach, *Acta Crystallographica Section B*, 査読有, **B73**, 2017, 265-275
DOI: org/10.1107/S205252061700364X

②Satoko Hayashi, Kengo Nagata, Shota Otsuki, and Waro Nakanishi, Linear Four-Chalcogen Interactions in Radical Cationic and Dicationic Dimers of 1,5-(Dichalcogeno)canes: Nature of the Interactions Elucidated by QTAIM Dual Functional Analysis with QC Calculations, *J. Phys. Chem. A*, 査読有,

121, 2017, 2482-2496

DOI: 10.1021/acs.jpca.7b00667

③Kohei Matsuiwa, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Dynamic and Static Behavior of Intramolecular π-π Interactions in [2.2]- and [3.3]Cyclophanes, Elucidated by QTAIM Dual Functional Analysis with QC Calculations, *ChemistrySelect*, 査読有, **2**, 2017, 1774-1782

DOI: 10.1002/slct.201602047

④Kohei Matsuiwa, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Behavior of Intramolecular π-π Interactions with Doubly Degenerated Bond Paths Between Carbon Atoms in Opposite Benzene Rings of Diethenodihydronaphthalenes by QTAIM Approach, *ChemistrySelect*, 査読有, **2**, 2017, 90-100

DOI: 10.1002/slct.201601494

⑤Waro Nakanishi, Yutaka Tsubomoto, and Satoko Hayashi, Nature of S₂Se₂ σ (4c-6e) at naphthalene 1,8-positions and models, elucidated by QTAIM dual functional analysis, *RSC Advances*, 査読有, **6**, 2016, 93195-93204

DOI: 10.1039/c6ra17767k

⑥Yuji Sugibayashi, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Behavior of Halogen Bonds of the Y-X---π Type (X, Y = F, Cl, Br, I) in Benzene π System, Elucidated by Using a Quantum Theory of Atoms in Molecules Dual-Functional Analysis, *Chem. Phys. Chem.*, 査読有, **17**, 2016, 2579-2589

DOI: 10.1002/cphc.201600227

⑦Kohei Matsuiwa, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Intramolecular π-π Interactions in Diethanodihydronaphthalene and Derivatives: Dynamic and Static Behavior of the Interactions Elucidated by QTAIM Dual Functional Analysis, *ChemistrySelect*, 査読有, **1**, 2016, 2344-2353

DOI: org/10.1002/slct.201600429

⑧Satoko Hayashi, Yuji Sugibayashi, and Waro Nakanishi, Quantum chemical calculations with the AIM approach applied to the π-interactions between hydrogen chalcogenides and naphthalene, *RSC Advances*, 査読有, **6**, 2016, 49651-49660

DOI: 10.1039/c6ra04738f

⑨Satoko Hayashi, Yuji Sugibayashi, and Waro Nakanishi, Dynamic and static behavior of the H---π and E---π interactions in EH₂ adducts of benzene π-system (E = O, S, Se and Te), elucidated by QTAIM dual functional analysis, *PhysChemChemPhys*, 査読有, **18**, 2016, 9948-9960, Inside Coverにも採用さ

れた

DOI: 10.1039/c5cp06062a

- ⑩ Satoko Hayashi, Kohei Matsuiwa, Nozomu Nishizawa, and Waro Nakanishi, Transannular E---E' Interactions in Neutral, Radical Cationic, and Dicationic Forms of *cyclo*-[E(CH₂CH₂-CH₂)₂E'] (E, E' = S, Se, Te, and O) with Structural Feature: Dynamic and Static Behavior of E---E' Elucidated by QTAIM Dual Functional Analysis, *J. Org. Chem.*, 査読有, **81**, 2016, 11963-11976
DOI: 10.1021/acs.joc.5b01794
- ⑪ Yuji Sugibayashi, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Dynamic and static behavior of hydrogen bonds of the X-H... π type (X = F, Cl, Br, I, RO and RR'N; R, R' = H or Me) in the benzene π -system, elucidated by QTAIM dual functional analysis, *PhysChemChemPhys*, 査読有, **17**, 2015, 28879-28891
DOI: 10.1039/C5CP04885K
- ⑫ Satoko Hayashi and Waro Nakanishi, AIM二元関数解析の基礎概念と応用: 相互作用に関連した実験結果のよりよい理解と説明のために, *有機合成化学協会誌*, 査読有, **73**, 2015, 39-52
DOI: org/10.5059/yukigoseikyokaishi.73.39
- ⑬ Yutaka Tsubomoto, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Dynamic and static behavior of the E-E' bonds (E, E' = S and Se) in cystine and derivatives, elucidated by AIM dual functional analysis, *RSC Advances*, 査読有, **4**, 2014, 44795-44810
DOI: 10.1039/C4RA13276A
- ⑭ Satoko Hayashi, Kohei Matsuiwa, Hiroaki Miza, and Waro Nakanishi, Dynamic and Static Behavior of E-E' Bonds in Neutral and Charged Forms of HEE'H, MeEE'Me, and *Cyclo*-1,2-EE'(CH₂)₃ (E, E' = O, S, Se, and Te) Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, *Heteroatom Chemistry*, 査読有, **25**, 2014, 449-472
DOI: 10.1002/hc.21194
- [学会発表] (計25件)
- ① 中西 和郎・林 聡子, QTAIM 2元関数解析法の新展開: コンプライアンスフォースコンスタント由来の内部振動座標を用いた摂動構造の適用, 第43回有機典型元素化学討論会, 0-31, 2016. 12. 8-10, 仙台市民会館(宮城)。
- ② 坪本 裕・林 聡子・中西 和郎, QTAIM 2元関数解析法によるナフタレン1,8-位およびそのモデルに組み込まれたS₉Se₂ σ (4c-6e) 相互作用の解析・評価および分類, 第43回有機典型元素化学討論会, P-70, 2016. 12. 8-10, 仙台市民会館(宮城)。
- ③ Waro Nakanishi, Satoko Hayashi, and Yutaka Tsubomoto, Behavior of Extended Hypervalent σ (4c-6e) Interactions Containing Halogen Atoms, Elucidated with QTAIM Dual Functional Analysis, 2nd International Symposium on Halogen Bonding (ISXB2), OC21, 2016. 6. 6-10, Gothenburg (Sweden).
- ④ Satoko Hayashi, Yuji Sugibayashi, and Waro Nakanishi, Halogen Bonds of the $n \rightarrow \sigma^*$ Type versus Conventional Hydrogen Bonds: Behavior of the XB and HB Interactions Elucidated with QTAIM-DFA, 2nd International Symposium on Halogen Bonding (ISXB2), P026, 2016. 6. 6-10, Gothenburg (Sweden).
- ⑤ Yutaka Tsubomoto, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Behavior of the E-E' Bonds (E, E' = S and Se) in Cystine, Glutathione, and the Derivatives, Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, 5th Workshop of Selenium and Sulfur Redox and Catalysis (WSeS-5), L04, 2016. 5. 21, Tokai University (Hiratsuka, Japan).
- ⑥ Satoko Hayashi and Waro Nakanishi, Behavior of the E-E' Bonds (E, E' = S, Se, and Te) in HE-*E'H and MeE-*E'Me', Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, 5th Workshop of Selenium and Sulfur Redox and Catalysis (WSeS-5), P02, 2016. 5. 21, Tokai University (Hiratsuka, Japan).
- ⑦ 坪本 裕・林 聡子・中西 和郎, グルタチオンジカルコゲニドの配座解析とカルコゲン-カルコゲン相互作用の挙動解明, 日本化学会第96春季年会, 2F1-19, 2016. 3. 24-27, 同志社大学 京田辺キャンパス (京都)。
- ⑧ 井上 宗之・林 聡子・中西 和郎, ベンゼンの1,2-位におけるチオ基間の非結合相互作用, 日本化学会第96春季年会, 3PC-063, 2016. 3. 24-27, 同志社大学 京田辺キャンパス (京都)。
- ⑨ 杉林 祐至・林 聡子・中西 和郎, AIM二元関数解析法によるベンゼン π 系におけるH-H... π 型水素結合の動的および静的挙動の解明, 第42回有機典型元素化学討論会, 0-31, 2015. 12. 3-5, 名古屋大学 野依記念学術交流館 (愛知)。
- ⑩ 大槻 昭太・永田 健吾・西澤 望・林 聡子・中西 和郎, AIM 二元関数解析法による1,5-(ジカルコゲナ)カンのモノおよびジカチオン二量体におけるカルコゲン-カルコゲン相互作用の挙動解明, 3C09, 2015. 9. 24-26, 愛媛大学・松山大学 (愛媛)。
- ⑪ Yuji Sugibayashi, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, DYNAMIC AND STATIC BEHAVIOR OF HALOGEN BONDS OF THE Y-X-- π TYPE (X, Y = F, Cl, Br AND I) IN BENZENE AND OTHER π -SYSTEMS, ELUCIDATED BY AIM-DFA, The 7th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM VII), L-03, 2015. 9. 3-6, CZESTOCHOWA (Poland).

- ⑫ Satoko Hayashi, Yuji Sugibayashi, and Waro Nakanishi, DYNAMIC AND STATIC BEHAVIOR OF HYDROGEN BONDS OF THE X-H \cdots π TYPE (X = F, Cl, Br, I, RO-H AND RR' N-H; R, R' = H AND/OR Me) IN BENZENE π -SYSTEM, ELUCIDATED BY AIM-DFA, The 7th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM VII), P-16, 2015.9.3-6, CZESTOCHOWA (Poland).
- ⑬ Waro Nakanishi, Kohei Matsuiwa, and Satoko Hayashi, BEHAVIOR OF HYDROGEN BONDS FROM PURE CLOSED SHELL TO SHARED SHELL INTERACTION REGIONS, ELUCIDATED BY AIM-DFA, The 11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-11), KN16-70, 2015.6.14-19, Caen (France).
- ⑭ Nozomu Nishizawa, Kohei Matsuiwa, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, BEHAVIOR OF E \cdots E' INTERACTIONS IN NEUTRAL AND CHARGED 1,5-(DICHALCOGENA)CANES, ELUCIDATED BY AIM-DFA, The 11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-11), P14, 2015.6.14-19, Caen (France).
- ⑮ Yuji Sugibayashi, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, DYNAMIC BEHAVIOR OF THE Y-X \cdots π INTERACTIONS (X, Y = F, Cl, Br, AND I) IN BENZENE π SYSTEM, ELUCIDATED BY AIM-DFA, The 11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-11), P15, 2015.6.14-19, Caen (France).
- ⑯ Kengo Nagata, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, BEHAVIOR OF E \cdots E' IN DICATIONIC OLIGOMERS OF CYCLO-E(CH₂CH₂CH₂)₂E' (E, E' = S, Se, AND Te) ELUCIDATED BY AIM-DFA, The 11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-11), P16, 2015.6.14-19, Caen (France).
- ⑰ Shota Otsuki, Kohei Matsuiwa, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, BEHAVIOR OF LINEAR ¹E \cdots ²E INTERACTIONS IN MONO- AND DI-CATIONIC DIMERS OF 1,5-(DICHALCOGENA)CANES: THEORETICAL INVESTIGATIONS, The 11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-11), P17, 2015.6.14-19, Caen (France).
- ⑱ Yutaka Tsubomoto, Yoshiyuki Nagano, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, EXTENDED HYPERVALENT Se₄ 4c-6e INTERACTIONS IN BENZENE AND NAPHTHALENE SYSTEMS, The 11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-11), P25, 2015.6.14-19, Caen (France).
- ⑲ Kengo Isoda, Kohei Matsuiwa, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, BEHAVIOR OF E \cdots E' IN NEUTRAL AND CHARGED FORMS OF CYCLO-1,2-EE' (CH₂)₃ (E, E' = O, S, Se, AND Te), ELUCIDATED BY AIM-DFA, The 11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-11), P27, 2015.6.14-19, Caen (France).
- ⑳ 松尾 力・林 聡子・中西 和郎, セレン原子の関与する拡張超原子価結合にジアセチレンを介在させた多原子直線状結合系の構築, 日本化学会第95春季年会, 3-PC-112, 2015.3.26-29, 日本大学(千葉)。
- ㉑ 榎川 和紘・林 聡子・中西 和郎, 拡張超原子価を有するアントラキノニルスルフェニルハライドの合成, 第41回有機典型元素化学討論会, P-32, 2014.11.27-29, 宇部市文化会館(山口)。
- ㉒ Waro Nakanishi and Satoko Hayashi, Behavior of Linear I-I-X⁻ and X-I-I-X²⁻ (X = I, Br, Cl) Anions in the Cavity of Me₃N⁺(CH₂)₆N⁻Me₃: Theoretical Investigations, 1st International Symposium on Halogen Bonding (ISXB-1), OC5, 2014.6.18-22, Porto Cesareo (Lecce, Italy).
- ㉓ Kengo Isoda, Satoko Hayashi, Taiki Uenaka, Katsumi Maeda, and Waro Nakanishi, Linear Interaction of Seven Se₂Br₅ Atoms in Bromine Adduct of Selenanthrene: Formation and the Nature of Se₂Br₅ 7c-10e, 1st International Symposium on Halogen Bonding (ISXB-1), P023, 2014.6.18-22, Porto Cesareo (Lecce, Italy).
- ㉔ Yuji Sugibayashi, Takatsugu Kushiro, Yoshiyuki Nagano, Satoko Hayashi, and Waro Nakanishi, Dynamic Behavior of Interactions Containing Halogens: Influence from Surroundings Elucidated by AIM Dual Functional Analysis, 1st International Symposium on Halogen Bonding (ISXB-1), P047, 2014.6.18-22, Porto Cesareo (Lecce, Italy).
- ㉕ Yutaka Tsubomoto, Satoko Hayashi, Ryota Yoshioka, and Waro Nakanishi, Molecular Bromine Inclusion in Selenanthrene Dibromides: Formation and the Nature of Neutral Br₄ 4c-6e, 1st International Symposium on Halogen Bonding (ISXB-1), OC5, 2014.6.18-22, Porto Cesareo (Lecce, Italy).

6. 研究組織

(1) 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

(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