

第14回 京都大学 福井謙一記念研究センターシンポジウム

プログラム

日時 2017年1月27日(金) 10:00~19:00

場所 京都大学 福井謙一記念研究センター

開会式 (Opening) : 3階大会議室

[開会の辞] 赤木 和夫 (京都大学 福井謙一記念研究センター長) 10:00 – 10:05

[ご挨拶] 北村 隆行 (京都大学 工学研究科長) 10:05 – 10:15

講演会 (Lecture Session) : 3階大会議室

● 高塚 和夫 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 10:15 – 11:15

「化学反応における電子動力学 –電子の運動が観える時代の基礎化学–」

司会: 榊 茂好 (福井センター)

● 八島 栄次 (名古屋大学 大学院工学研究科) 11:25 – 12:25

「らせん構造を基本骨格とする超分子・高分子の創成、構造と機能」

司会: 赤木 和夫 (福井センター)

● 高田 彰二 (京都大学 大学院理学研究科) 12:35 – 13:35

「複雑生体分子系のマルチスケールシミュレーション」

司会: 林 重彦 (京大院理)

— 昼食 —

「福井謙一奨励賞」表彰式 (Ceremony of Kenichi Fukui Encouragement Award) :

3階大会議室

15:00 – 15:30

受賞者: 辻 雄太 (九州大学 分子システムデバイス国際リーダー教育センター)

ポスターセッション (Poster Session) : 3階大会議室

15:30 – 17:20

懇親会 (Banquet) : 1階多目的ルーム

17:30 – 19:00

ポスターリスト (3 階大会議室 15:30~17:20)

- ✓ 番号が奇数の方は前半 (15:30-16:25)、番号が偶数の方は後半 (16:25-17:20) には、ポスターボードの前で発表するようにしてください。
- ✓ Authors with odd and even poster numbers should be present at the poster during the first half (15:30-16:25) and the second half (16:25-17:30) of the session, respectively.

- 1. A computational study on luminescent [Cu(POP)(dmp)]⁺ and [Cu(xantphos)(dmp)]⁺ complexes**
Sae Yanagida, O.W. M. C. Sameera, Masaki Yoshida, Atsushi Kobayashi, and Masako Kato (Dept. of Chem., Faculty of Sci., Hokkaido Univ.)
- 2. レナードジョーンズクラスター LJ7 における固液転移とカオス**
○馬場 朋広、清水 寧 (立命館理工)
- 3. 開殻性を持つ反芳香族ポルフィリンの光学物性に関する理論研究**
○藤吉 純也[1]、福田 幸太郎[1]、永海 貴識[1]、吉田 拓矢[2]、忍久保 洋[2]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]、名大院工[2])
- 4. Universal Form of Stochastic Evolution for Slow Variables in Equilibrium Systems**
○伊丹 将人[1]、佐々 真一[2] (京大福井セ[1]、京大理[2])
- 5. Collective Dynamics of Migrating Cells**
○Simon K. Schnyder[1], John J. Molina[2], and Ryoichi Yamamoto[2] (FIFC[1], Grad. School of Eng., Kyoto Univ.[2])
- 6. 化学反応で自己推進運動する液滴の衝突**
○藪中 俊介[1]、義永 那津人[2] (京大福井セ[1]、東北大 AIMR[2])
- 7. Aggregation-induced Emission of bis(dialkylamino)anthracene**
○鈴木 聡、諸熊 奎治 (京大福井セ)
- 8. DFT investigations for activation process of dioxygen by a model of [NiFe] hydrogenase**
○伊勢川 美穂[1]、W. M. C. Sameera[2]、A. K. Sharma[1]、小江 誠司[3]、諸熊 奎治[1] (京大福井セ[1]、北大院理[2]、九大 PCNER[3])
- 9. Theoretical study on ring opening and closing mechanism of diarylethene derivatives**
○Kimichi Suzuki[1], Satoshi Maeda[1], and Keiji Morokuma[2] (Grad. School of Sci., Hokkaido Univ.[1],

FIFC[2])

10. The Biginelli reaction is a urea-catalyzed organocatalytic multicomponent reaction

○ Maneeporn Puripat[1], Romain Ramozzi[1], Miho Hatanaka[2,3], Waraporn Parasuk[4], Vudhichai Parasuk[5], and Keiji Morokuma[1] (FIFC[1], Kindai Univ.[2], JST PRESTO[3], Kasetsart Univ.[4], Chulalongkorn Univ.[5])

11. Computational Insights on Iron-Catalyzed Enantioselective Carbometalation of Azabicyclic Alkenes

○ Akhilesh K. Sharma[1], W. M. C. Sameera[1], M. Nakamura[2], and K. Morokuma[1] (FIFC[1], Dept. of Energy and Hydrocarbon Chem., Grad. School of Eng., Kyoto Univ.[2])

12. Theoretical Study on Oxidative Addition of Nitrobenzene to Palladium(0)-Brettphos Complex

○ Rong-Lin Zhong[1], Masahiro Nagaoka[2], Yoshiaki Nakao[2], and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], Grad. School of Eng., Kyoto Univ.[2])

13. Rational design of phenoxazine-based thermally activated delayed fluorescent materials with high performance

○ Jing Lu[1,2], Yiying Zheng[2], and Jingping Zhang [2] (FIFC[1], Northeast Normal Univ.[2])

14. Characteristic Features Transmetalation of Pd(II)-Ph Complex with Cu(I)-alkyl Complexes: Theoretical Study

○ Hong Zheng[1], Kazuhiko Semba[2], Yoshiaki Nakao[2], and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], Dept. of Mat. Chem., Kyoto Univ.[2])

15. 三中心多重金属結合を持つクロム(II)三核錯体の構造と電子状態

○ 中垣 雅之[1]、中谷 直輝[2]、長谷川 淳也[2]、榊 茂好[1] (京大福井セ[1]、北大触媒研[2])

16. 金(I)-イソシアニド錯体の吸収・発光スペクトル：QM/MM 法による分子結晶効果の研究

○ 青野 信治、榊 茂好 (京大福井セ)

17. 高強度パルスレーザー場中のイオン化過程の非断熱電子ダイナミクス

○ 松岡 貴英、高塚 和夫 (京大福井セ)

18. 浮動ガウシアン基底を用いた水素分子の原子核-電子波動関数における非断熱ダイナミクスの研究

○ 市川 雄一[1]、加藤 毅[2]、山内 薫[2] (京大福井セ[1]、東大院理[2])

19. Photoinduced Charge Separation Catalyzed by Mn-Oxides onto a Y-shaped Branching Acceptor Efficiently Preventing Charge Recombination

○Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka (FIFC)

20. 液体の統計力学と原子間力顕微鏡で見るカルサイト上の三次元水和構造

○天野 健一[1]、宮澤 佳甫[2]、西 直哉[1]、福間 剛士[2]、作花 哲夫[1] (京大院工[1]、金大院自然[2])

21. キラルネマチック相を示す液晶性イオン液体の合成と不斉電解重合への応用

○和田 浩平、山川 勝平、赤木 和夫 (京大院工)

22. キラル側鎖を有するポリジフェニルアセチレン誘導体の合成と光学特性

○松山 大起、大田 冬木、赤木 和夫 (京大院工)

23. π - π 相互作用と水素結合を利用した芳香族共役系ポリマー凝集体の構築とその光学特性

○原田 恭佑、野津 賢祐、赤木 和夫 (京大院工)

24. メソポーラスシリカで被覆したアルミニウムナノ粒子アレイのプラズモン特性と薄膜内への光閉じ込め

○阪本 浩之[1]、村井 俊介[1,2]、藤田 晃司[1]、田中 勝久[1] (京大院工[1]、JST さきがけ[2])

25. Why Na Cannot Be Intercalated into Graphite

○大田 航[1]、Maxim Shishkin[2]、佐藤 啓文[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2])

26. HIV-1 protease に関する理論的研究

○金曾 将弘、林 重彦 (京大院理)

27. 液体ピレンの分子動力学シミュレーションと理論的解析

○山本 裕生[1]、Lu Fengniu[2]、中西 尚志[2]、林 重彦[1] (京大院理[1]、国際ナノアーキテクニクス研究拠点[2])

28. 光誘起チャネルロドプシンに関する理論研究

○成 せい[1]、神谷 基司[2]、吉田 紀生[3]、林 重彦[1] (京大院理[1]、理研[2]、九大院理[3])

29. LOV 光受容タンパク質の光活性化機構の理論的研究

○田口 真彦、成 鍼、東村 智佳、林 重彦 (京大院理)

30. Theoretical study on molecular mechanism of a light-driven ion transport of Halorhodopsin

○小山 糧、長谷川 太祐、林 重彦 (京大院理)

31. 周期的静電ポテンシャルを考慮した埋め込みクラスターモデルの開発

○松井 正冬[1]、榊 茂好[1,2] (京大 ESICB[1]、京大福井セ[2])

32. Theoretical Study of NO-CO Reaction on Cu₃₈ Cluster

○Nozomi Takagi[1], Kazuya Ishimura[2], Ryoichi Fukuda[1], Masahiro Ehara[1,2], and Shigeyoshi Sakaki[1,3] (ESICB, Kyoto Univ.[1], IMS[2], FIFC[3])

33. Adsorption of CO₂ and C₂H₂ in a Flexible Porous Coordination Polymer: QM and Classical Monte-Carlo Study

○Jia-Jia Zheng[1,2], Shinpei Kusaka[1], Ryotaro Matsuda[1,3], Susumu Kitagawa[1], and Shigeyoshi Sakaki[2] (iCeMS[1], FIFC[2], Grad. School of Eng., Nagoya Univ.[3])

34. 光駆動イオン輸送型ロドプシンのイオン輸送メカニズムの解明

○宮原 友夫、中辻 博 (量子化学研究協会研究所)

35. 太陽電池設計のための非断熱分子動力学シミュレーションの実装

○嶺澤 範行 (理研 AICS)

36. TD-DFT 法を用いた Ir(ppy)₃ 錯体およびその類縁体の光吸収特性に関する理論研究

○名取 圭紀、浅岡 瑞稀、北河 康隆、中野 雅由 (阪大院基礎工)

37. Theoretical study on third-order nonlinear optical property of carbon-bridged oligo para-phenylenevinylene (COPV)

○Yusuke Nishigaki[1], Hiroshi Matsui[1], Tsuji Hayato[2], and Masayoshi Nakano[1] (Grad. School of Eng. Sci., Osaka Univ.[1], Faculty of Sci., Kanagawa Univ.[2])

38. イリジウム二核錯体を用いる第一級アルコールの酸化反応に関する理論的研究

○瀬川 実礼[1]、畑中 美穂[1,2]、中井 英隆[1]、若林 知成[1] (近大理工[1]、JST さきがけ[2])

39. 不斉亜鉛錯体を触媒とするアルドール反応の立体選択性発現機構の解明

○日下部 彩[1]、畑中 美穂[1,2]、若林 知成[1] (近大理工[1]、JST さきがけ[2])

40. P=P double bond cleavage by N-heterocyclic carbenes

Naoki Hayakawa[1], Kazuya Sadamori[1], Shota Tsujimoto[1], ○Miho Hatanaka[1,2], Tomonari Wakabayashi[1], and Tsukasa Matsuo[1] (Kindai Univ.[1], JST PRESTO[2])

41. 小数軌道占有数を用いた解析的微分法の開発

○西本 佳央 (京大福井セ)