

# 第16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 2019年2月8日(金) 9:50~19:00

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] 田中 勝久 (京都大学 福井謙一記念研究センター長) 9:50 – 9:55

[ご挨拶] 大嶋 正裕 (京都大学 工学研究科長) 9:55 – 10:05

### 講演会 (Lecture Session) : 3階大会議室

---

● 佐藤 徹 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 10:05 – 11:05

「振電相互作用密度とその応用—発光、キャリア輸送、化学反応—」

座長：田中 一義 (福井センター)

● 平尾 公彦 (京都大学 福井謙一記念研究センター・理化学研究所) 11:20 – 12:20

「長距離補正密度汎関数法(LC-DFT)の最近の進展」

座長：高塚 和夫 (福井センター)

— 昼食 —

● 跡見 晴幸 (京都大学 大学院工学研究科) 13:50 – 14:50

「第3の生物アーキアの特異な代謝」

座長：林 重彦 (京大院理)

### 「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：春田 直毅 (東京工業大学 科学技術創成研究院)

「縮退と擬縮退の包括的理解に向けた新たな数理化学の開拓」

### 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 (16:25-17:20) of the session, respectively.

### 1. Quantitative analysis of QM/MM artifacts and its correction in adaptive QM/MM

○Hiroshi C. Watanabe[1,2] (Quantum Computing Center, Keio University[1], JST PRESTO[2])

### 2. DABNA を用いた OLED の発光機構に関する理論的研究

○伊藤 俊介[1]、佐藤 徹[2,3]、畠山 琢次[4] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、関西学院理工[4])

### 3. Theoretical study on the fluorescence of azaperylenes derivatives.

Akitsu Hirono[1], Hayato Sakai[1], ○Shuntaro Kochi[2,3], Tomo Sakanoue[5], Taishi Takenobu[5], Tohru Sato[2,3,4] and Taku Hasobe[1] (Faculty of Science and Technology, Keio University[1], FIFC[2], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[3], ESICB, Kyoto Univ.[4], Department of Chemistry, Department of Applied Physics, Nagoya University[5])

### 4. Growth Mechanism of (6,5) Carbon Nanotube: Edge Structures and their Regioselectivities

○Tomohiro Nishikawa[1,2], Tohru Sato[1,2,3], Naoki Haruta[2], Takeshi Kodama[4] and Yohji Achiba[4] (FIFC[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2], ESICB[3], Grad. School. of Sci. Tokyo Metropolitan Univ.[4])

### 5. Vibronic Coupling Density and Fragment Analyses of NO on Cu/ $\gamma$ -alumina Using Hydrogen Terminated Models

○Wataru Ota[1,2], Yasuro Kojima[2], Saburo Hosokawa[2,3], Kentaro Teramura[2,3], Tsunehiro Tanaka[2,3], and Tohru Sato[1,2,3] (FIFC [1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ. [2], ESICB [3])

### 6. 自己無撞着点電荷 QM/MM 法に基づく分子結晶構造の最適化

○青野 信治、榊 茂好 (京大福井セ)

### 7. 相対論的な電子動力学理論の定式化

○花崎 浩太、高塚 和夫 (京大福井セ)

8. **Singular behaviour of time-averaged stress fluctuations on surfaces**  
○Masato Itami[1] and Shin-ichi Sasa[2] (FIFC[1], Dept. of Phys. Kyoto Univ.[2])
9. **Theoretical Study on C–X  $\sigma$ -Bond Activation by Rh(PAIP) Complexes**  
○Qiao-Zhi Li[1], Yoshiaki Nakao[2] and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], iCeMS, Kyoto Univ.[2])
10. **ニッケル(II)-キノノイド錯体のスピン転移を伴うバイポクロミズムの理論研究:結晶中の分子選択性**  
○中垣 雅之[1]、青野 信治[1]、吉田 将己[2]、小林 厚志[2]、加藤 昌子[2]、榊 茂好[1] (京大福井セ[1]、北大院理[2])
11. **時間依存長距離補正密度汎関数強束縛法と分極誘電体モデルを用いた理論開発 (TD-LC-DFTB/PCM)**  
○西本 佳央 (京大福井セ)
12. **Collective motion of cells on a substrate**  
○Simon K. Schnyder, John J. Molina, Ryoichi Yamamoto
13. **Theoretical understanding and rational design of aggregation induced emission molecule**  
○Satoshi Suzuki (FIFC)
14. **Modelling crawling cells: From simple mechanical model to mechano-chemical model**  
○M Tarama, K Mori, and R Yamamoto
15. **一方向的なプロトン移動の化学的な機構について: 非断熱電子動力学による研究**  
○山本 憲太郎、高塚 和夫 (京大福井セ)
16. **Theoretical Study on Diffusion-Regulated Gas Adsorption into Porous Coordination Polymer**  
○Jia-Jia Zheng[1,2], Susumu Kitagawa[2] and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], iCeMS, Kyoto Univ.[2])
17. **Borylation of  $sp^3$  C–H Bond Catalyzed by Ir(III) Complex: Theoretical Study of Regioselectivity**  
○Rong-Lin Zhong, Shigeyoshi Sakaki (FIFC)
18. **Mechanistic Study of Hydrocarbon Oxidation on  $M_{55}$  Cluster (M = Pt, Pd, Rh)**  
○Bo Zhu, Shigeyoshi Sakaki (FIFC)

**19. ナノシリンダーアレイにおける紫外領域での協同プラズモニックモード励起と希土類錯体の発光増強**

○河内谷 佑季[1]、村井 俊介[1,2]、田中 勝久[1] (京大院工[1]、JST さきがけ[2])

**20. Coarse-grained model of nanocube based on the analysis of all atom molecular dynamics simulation**

○Kosuke Imamura[1] and Hirofumi Sato[2,3] (Fac. of Eng. Kyoto Univ.[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2], ESICB, Kyoto Univ.[3])

**21. Free energy calculation of a proton transfer reaction in condensed phase including nuclear quantum effects**

○Kento KOSUGI[1], Hiroshi NAKANO[1,2], Hirofumi SATO[1,2] (Department of Molecular Engineering, Kyoto University[1], ESICB, Kyoto University[2])

**22. DFTB3 parametrization for Pt(II) complexes**

○Jun OSHIKI[1], Kento KOSUGI[2], Hiroshi NAKANO[2,3] and Hirofumi SATO [2,3] (Kyoto Univ.[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2], ESICB. Kyoto Univ. [3])

**23. 広域的構造探索法を用いた含炭素アルミニウムアニオンクラスターの理論的研究**

○勅使河原 翔[1]、吉田 悠一郎[1]、佐藤 啓文[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2])

**24. ハロロドプシン Cl<sup>-</sup>イオンポンプの光活性化の分子機構に関する理論的研究**

○小山 糧、長谷川 太佑、林 重彦 (京大院理)

**25. 分子シミュレーションによる AsLOV2 光受容タンパク質の光活性化中間状態**

○田口 真彦、成 鍼、東村 智佳、内田 芳裕、林 重彦 (京大理)

**26. 液体ピレンの MD シミュレーションと理論的解析**

○山本 裕生[1]、中西 尚志[2]、林 重彦[3] (京大院理[1]、物質・材料研究機構[2])

**27. ヨウ素結合、水素結合を利用した電荷移動錯体における分子間相互作用と物性**

○石田 耕大[1]、高橋 佑輔[1]、中野 義明[1,2]、石川 学[2]、大塚 晃弘[1,2]、矢持 秀起[1,2]、賣市 幹大[3]、春木 理恵[4]、熊井 玲児[4]、足立 伸一[4] (京大院理[1]、京大環安保[2]、分子研[3]、高エネ研[4])

**28. Dissociative Adsorption or Dimerization? A Theoretical Study for Reaction of NO on Mn Cluster (M = Ru, Rh, Pd, Ag; n = 13, 55)**

○Nozomi TAKAGI[1], Ryoichi FUKUDA[1], Masahiro EHARA[1,2], Shigeyoshi SAKAKI[1,3] (ESICB, Kyoto Univ. [1], IMS [2], FIFC Kyoto Univ.[3])

**29. [2Fe-2S] Ferredoxin における活性中心周囲の水素結合とタンパク場がイオン化ポテンシャルに及ぼす影響**

○江良 伊織[1]、多田 隼人[1]、藤井 琢也[1]、池永 和輝[1]、北河 康隆[1]、中野 雅由[1,2] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])

**30. ピラゾール架橋二核金属錯体における金属イオン間の磁氣的相互作用の理論研究**

○藤井 琢也[1]、江良 伊織[1]、多田 隼人[1]、池永 和輝[1]、北河 康隆[1]、中野 雅由[1,2] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])

**31. 2層積層型イットリウム(III)-フタロシアン錯体の磁氣的な分子間相互作用に関する理論研究**

○池永 和輝[1]、北河 康隆[1]、加藤 恵一[2]、山下 正廣[2]、中野 雅由[1,3] (阪大院基礎工[1]、東北大院理[2]、分子研[3])

**32. 配位子で保護された 25 核金クラスターの電子状態についての理論研究**

○川尻 真広[1]、藤井 琢也[1]、北河 康隆[1]、中野 雅由[1,2] (阪大基礎工[1]、分子研[2])

**33. 開殻分子からなる一次元周期系の電子構造と非線形光学特性についての理論研究**

○岸 亮平[1]、鎌田 賢司[2]、久保 孝史[3]、中野 雅由[1,4] (阪大院基礎工[1]、産総研[2]、阪大院理[3]、分子研[4])

**34. 五員環および六員環からなるカーボンナノベルトの開殻性、芳香族性、第二超分極率のリングサイズ依存性の理論研究**

山根 正暉[1]、○岸 亮平[1]、當波 孝凱[1]、岡田 健治[1]、永海 貴識[1]、中野 雅由[1,2] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])

**35. 一次元 3 核ならびに 5 核ニッケル錯体の分子構造・電子状態と電気伝導性の相関に関する理論研究**

○北河 康隆[1]、多田 隼人[1]、江良 伊織[1]、藤井 琢也[1]、池永 和輝[1]、中野 雅由[1,2] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])

**36. 対称および非対称ピアントロン誘導体の開殻性、電荷の非対称性、非線形光学特性の立体構造依存性についての理論研究**

○北野 奨実[1]、岸 亮平[1]、平尾 泰一[2]、久保 孝史[2]、中野 雅由[1,3] (阪大院基礎工[1]、阪大院理[2]、分子研[3])

**37. テリレン二量体のシングレットフィッションにおける振電相互作用の理論的研究**

○永海 貴識[1]、當波 孝凱[1]、岡田 健治[1]、伊藤 聡一[2]、中野 雅由[1,2] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])

**38. 摂動論的アプローチと量子マスター方程式アプローチによるペンタセン二量体モデルのシングレットフィッション速度配置依存性の比較**

○岡田 健治[1]、當波 孝凱[1]、永海 貴識[1]、中野 雅由[1,2] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])

**39. 反芳香族環状縮環共役分子テトラシクロペンタテトラフェニレンの中性および二電子酸化還元状態における芳香族性、開殻性、非線形光学特性の理論研究**

○杉浦 亮介[1]、岸 亮平[1]、戸部 義人[2,3]、中野 雅由[1,4] (阪大院基礎工[1]、阪大産研[2]、台湾国立交通大[3]、分子研[4])

**40. 多変量解析に基づいたビピリジン配位子のフロンティア軌道エネルギー設計指針の構築とルテニウム(II)錯体への適用**

○富永 萌[1]、寺本 玲奈[1]、青木 笙悟[1]、北河 康隆[1]、中野 雅由[1,2] (阪大基礎工[1]、分子研[2])

**41. 超重元素 Rf の化学研究に向けた Zr, Th を含む錯体の量子化学計算**

○渡邊 瑛介[1]、北河 康隆[2]、中野 雅由[2,3]、笠松 良崇[1]、篠原 厚[1] (阪大院理[1]、阪大院基礎工[2]、分子研[3])