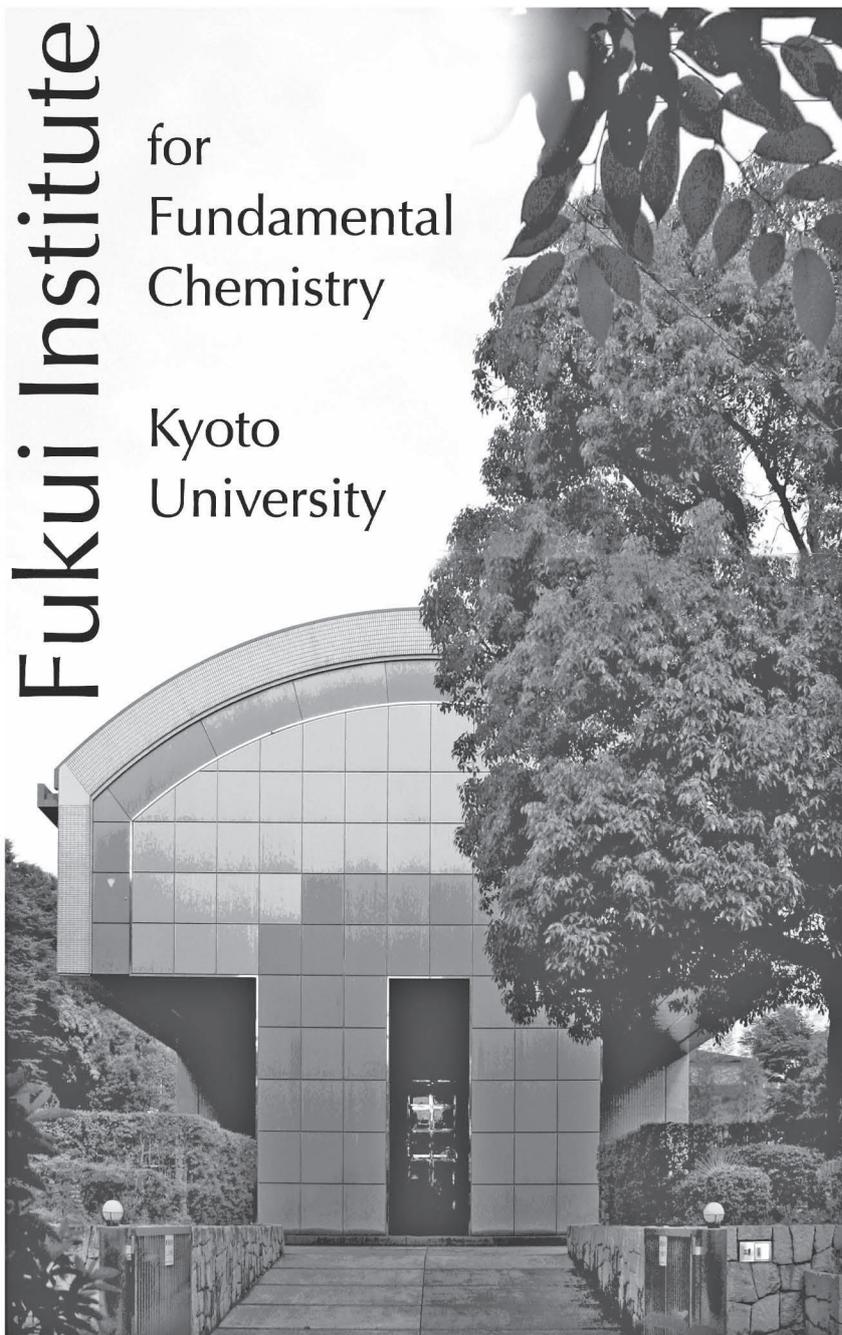


年報 2020



Fukui Institute

for
Fundamental
Chemistry

Kyoto
University

京都大学
福井謙一記念研究センター

はじめに

2020年度の京都大学福井謙一記念研究センターの活動をまとめた年報をお届けします。本センターは、京都大学本部構内の北、約1キロの高野川沿いの静かな住宅街に独立して位置しております。専任教員は理論研究部門と総合研究部門に1名ずつを持っているに過ぎませんが、センター長のほか副センター長とスーパーバイザーとして工学研究科、理学研究科、化学研究所所属の13名の教員にご協力頂いており、このメンバーが運営委員会を構成しています。そして優れた博士研究員に研究活動の機会を与える制度を持っており、若手研究者が国際的な雰囲気の中で日夜研究にいそしんでいます。福井センターフェローと呼ばれる博士研究員はセンターの雇用で、自分自身のアイデアで一定期間、自由闊達に研究できる身分を保証しています。

福井謙一先生の生誕百年にあたる2018年度より、記念事業の一環として企業研究者のための基礎化学研修プログラム（喜多-福井プロジェクト）を開設しました。喜多源逸先生は、福井謙一先生が“終生の師”と呼び、「応用をやるなら、基礎をやれ」、「数学が得意なら化学をやれ」という言葉で福井先生が化学の道に進むきっかけを作られた方であり、また本学工学部化学系における基礎重視の学風を築かれた方です。このプロジェクトは、喜多先生に源を発するこの伝統を再認識し、産業への応用も見据えた基礎化学・理論化学を広く展開できる技術者・研究者の育成に貢献しようとするものです。2019年度は第一期生を迎えました。

本センターの歴史を簡単にご紹介しま

す。ご承知のように故福井謙一京都大学名誉教授はフロンティア軌道理論を提案したご功績により、1981年にわが国で最初のノーベル化学賞を受賞されました。福井先生が京都大学ご退官後に研究を続けられるため、京都市と産業界などのご支援で1985年に財団法人「基礎化学研究所」が設立されました。専任研究員数名の規模でしたが、研究のレベルは高く、当時の研究員は、東京大学、名古屋大学、分子科学研究所の教授になるなど、理論化学分野でトップクラスの研究者として活躍しています。この基礎化学研究所は1998年の福井先生のご逝去の後、2002年に京都大学に寄贈され、福井謙一記念研究センターとなり、現在に至っております。本学の部局となった後、森島 績、中辻 博、榊 茂好、田中 功、田中 一義、赤木 和夫、田中 勝久の各先生にセンター長としてご指導を頂きました。

本センターでは、2006年9月に福井謙一記念研究部第一のリサーチリーダーとして諸熊奎治先生を米国エモリー大学から招聘しました。諸熊先生は、2012年にシニアリサーチフェローに就任され、この年の11月には、複雑分子系の理論研究の発展に多大な貢献をしたとして、文化功労者の顕彰を受けられました。また、2015年からはFIFC リサーチフェローとして研究ならびに若手人材育成にご尽力下さいました。諸熊先生は理論化学・計算化学の領域で多くの学術的業績を挙げられるとともに、我が国の量子化学の分野を牽引され、多数の研究者を育成されました。

2009年度には福井謙一記念研究部第二を設置し、名古屋大学名誉教授（前副学長）の大峯巖先生をリサーチリーダーとして招

聘し、研究体制を拡大しました。大峯先生は2010年4月に分子科学研究所長に転出され、その後任として、2011年4月に京都大学物質—細胞統合システム拠点 (iCeMS) 特任教授の榊茂好先生を研究部第二のリーダーとして招聘しました。榊先生は、遷移金属化合物や類縁化合物に関する研究で顕著な業績を挙げられ、d 電子複合系の理論化学に関する研究を推進されたのち、2020年4月に京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点へ転出されました。

2012年にはシニアリサーチフェローとして永瀬茂先生(分子科学研究所名誉教授)を招聘しました。永瀬先生は、望む構造、物性、機能を持つ分子を自在に組み立てて思うように反応させる理論と計算およびコンピューターシミュレーションの開発において顕著な業績を挙げられました。2015年からはFIFC リサーチフェローとして高周期典型元素と遷移金属元素化学種の理論化学に関する研究を進めておられます。同じ年に、シニアリサーチフェローとして田中一義先生(京都大学名誉教授)を招聘しました。田中一義先生は導電性や磁性を有する有機化合物など量子機能材料に関する物理化学的研究において優れた多くの業績を挙げておられ、現在は元素ブロックを有する分子・高分子の理論化学に関する研究を展開されています。

さらに2016年には、化学反応電子動力学の基礎理論研究において著名な高塚和夫先生(東京大学名誉教授)をリーダーとして招聘しました。センターでは非断熱電子動力学理論による化学反応の解析に関する研究を推進しておられます。

2018年2月には理論研究部門の専任教授

として、佐藤徹先生が着任されました。佐藤徹先生は振電相互作用に関する研究、特に動的ヤーンテラー効果や振電相互作用を解析・制御する振電相互作用密度を用いた有機 EL 素子などの機能性分子材料の理論設計を行っています。佐藤徹先生の研究室は、工学研究科分子工学専攻の協力講座(分子材料科学講座 量子分子科学分野)としても位置付けられ、大学院生、学部4回生が配属されて、研究を進めています。10月には、リサーチダイレクターとして平尾公彦先生(国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター上級研究員)を招聘いたしました。

私共は、センターが若手研究者の登竜門となることを期待しています。実際に、センターの博士研究員であった多くの方々が、現在、国内外の大学、研究機関で活躍しておられます。2016年には、化学の将来の発展のために若手研究者の育成の大切さを説いておられた福井博士の遺志を汲み、基礎化学・理論化学の分野で顕著な研究業績を挙げた若手研究者を顕彰する「福井謙一奨励賞」を創設し、「理論化学研究に立脚した量子干渉現象の分子エレクトロニクスへの展開に関する研究」に対して辻雄太先生(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助教)に第1回同奨励賞が授与されました。第2回(2017年)は、「第一原理波動関数理論の固体への展開:量子化学と固体電子論の融合」で越智正之先生(大阪大学大学院理学研究科助教)に、第3回(2018年)は「縮退と擬縮退の包括的理解に向けた新たな数理科学の開拓に関する研究」で春田直毅先生(東京工業大学化学技術創成研究特任助教)に授与されました。第4回(2019年)は「高

精度計算と大規模計算の発展－解析的エネルギー微分の視点から」で、西本佳央先生（京都大学福井謙一記念研究センター特定助教）に、第5回（2020年）は「水の界面物性計算理論の構築と疎水性界面における帯電メカニズムの解明」で、植松祐輝先生（九州大学大学院理学研究院物理学部門助教）に授与されました。また次世代を担う若手研究者の育成を図るため、福井センター基金を2018年に開設いたしました。

本センターは、国際活動も活発で、2005年よりチェコおよびスロバキアと理論化学・計算化学シンポジウムを定期的で開催しております。2011年には国内外（主にドイツ、東欧、中国、韓国）から第一線の研究者を招き、第1回福井センター理論化学・計算化学国際シンポジウムを開催しました。こうした国際連携活動をさらに活性化するという観点から、2016年2月に国際学術連携研究室（2016年12月に国際連携インターディシプリナリー研究推進室と改組）を設置し、その運営上必要となるコーディネーター役として、特定助教1名を配置しました。本センターは、今後も理論化学・計算化学分野におけるわが国の研究拠点の役割を果たし、国際連携活動を展開して行きたいと考えております。

また、例年初冬に福井センターシンポジウムを開催しており、国内外のトップクラスの研究者による特別講演、運営委員の講演、並びに京都大学内外からのポスター発表を行っております。研究発表のレベルは高く、特別講演に来られた講師からも毎年高い評価を得ております。残念ながら、新型コロナウイルス感染拡大防止のため今年度のシンポジウムの開催及び奨励賞授与式は、延期となりましたが、「京都大学福井

謙一記念研究センターオンラインシンポジウム」を2021年1月25日に開催することができました。遠隔地や企業からも多数の参加があり、今後の開催方法に新たな展開が開けました。

さらに社会貢献活動の一環として、2011年が福井先生のノーベル化学賞受賞30周年にあたるため、これを節目として本センター玄関ロビーに先生ゆかりの文物の展示コーナーを設置しました。コーナーでは先生が使用された机、椅子、ノーベル賞メダル・賞状（複製）、研究ノート・メモ、写真などを展示し、常設展示として一般に公開しています。2018年には、前年にご逝去された諸熊先生のゆかりの文物の展示コーナーも加わりました。

本センターは、上述のように規模は大きくありませんが、研究活動は極めて活発です。今後も、京都大学あるいは国内外との共同研究を積極的に進めて行きたいと考えております。とくに実験科学者との共同研究は重要であり、そのような連携研究をさらに活発化したいと考えております。

この年報により、本センターの活動に興味をお持ち頂ければ幸甚です。そして、それが共同研究の契機となり、時間をかけて大きな成果に結実していくことを願っています。最後になりましたが、本センターの順調な活動はひとえに工学研究科、理学研究科、化学研究所のご協力、ご援助の賜物であり、ここに心から御礼申し上げる次第です。

2021年 10月

京都大学福井謙一記念研究センター長
佐藤 啓文

目 次

はじめに	京都大学福井謙一記念研究センター長 佐藤啓文	i
I	専任教員・スーパーバイザー	
1.	教員組織	1
2.	教員プロフィール	
(1)	センター長	2
(2)	副センター長	3
(3)	スーパーバイザー	5
(4)	専任教員	15
(5)	リサーチダイレクター	17
(6)	FIFC リサーチフェロー	18
(7)	リサーチリーダー	23
(8)	研究員	24
II	博士研究員等	
1.	博士研究員組織	26
2.	博士研究員プロフィール	27
III	研究広報活動	
1.	福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム	30
2.	セミナー	30
(1)	福井センターセミナー	
(2)	その他のセミナー	
3.	国際交流	31
4.	社会へのアウトリーチ活動	31
5.	福井謙一奨励賞の創設及び奨励賞の授与	31
IV	研究業績	
1.	専任教員	32
2.	リサーチダイレクター	39
3.	FIFC リサーチフェロー	44
4.	リサーチリーダー	56
5.	研究員	61
6.	博士研究員	65

V 資料

1. 研究業績一覧	76
2. 共同研究者受入れ状況	79
3. 海外渡航一覧	79
4. 福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム ポスター・プログラム …	80

(本冊子は下記アドレス (URL) にて、ウェブ上でも閲覧いただけます。)

<http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/publication/AnnualReport2020.pdf>)

I 専任教員・スーパーバイザー

1. 教員組織

2020(令和2)年度

職 名	氏 名	備 考	
センター長	佐藤 啓文	工学研究科 分子工学専攻	
副センター長	林 重彦	理学研究科 化学専攻	
副センター長	渡辺 宏	化学研究所 分子レオロジー	
協 議 員	工学研究科長	大嶋 正裕	工学研究科 化学工学専攻
	理学研究科長	平島 崇男 ～2020.9.30	理学研究科 地球惑星科学専攻
		國府 寛司 2020.10.1～	理学研究科 数学・数理解析専攻
	化学研究所長	辻井 敬亘	化学研究所 材料機能化学研究系
総合研究部門 スーパーバイザー	教 授	古賀 毅	工学研究科 高分子化学専攻
	教 授	跡見 晴幸	工学研究科 合成・生物化学専攻
	教 授	佐々 真一	理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻
	教 授	山本 潤	理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻
	教 授	田中 勝久	国際高等教育院 (工学研究科併任)
理論研究部門 スーパーバイザー	教 授	宇田 哲也	工学研究科 材料工学専攻
	教 授	田中 庸裕	工学研究科 分子工学専攻
	教 授	山本 量一	工学研究科 化学工学専攻
	教 授	高田 彰二	理学研究科 生物科学専攻
	教 授	渡邊 一也	理学研究科 化学専攻
総合研究部門	准教授	(欠員中)	
理論研究部門	教 授	佐藤 徹	専任 (工学研究科分子工学専攻協力講座)
	特定助教	春田 直毅	専任
国際連携インター ディシプリナリー 研究推進室	特定助教	(欠員中)	
平尾グループ	リサーチ ダイレクター	平尾 公彦	研究員
永瀬グループ	FIFC リサーチ フェロー	永瀬 茂	研究員
田中グループ	FIFC リサーチ フェロー	田中 一義	研究員
高塚グループ	リサーチリーダー	高塚 和夫	研究員
平尾グループ	研究員	北浦 和夫	研究員
佐藤グループ	研究員	加藤 立久	研究員

2. 教員プロフィール

(1) センター長

【氏名 (ふりがな)】	Hirofumi Sato
【職名】	Professor
【所属】	Department of Molecular Engineering, Graduate School of Engineering
【研究室】	A4-026
【直通電話】	075-383-2548
【FAX】	075-383-2799
【電子メールアドレス】	hirofumi@moleng.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.riron.moleng.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	Theoretical Chemistry, Quantum chemistry, Statistical mechanics
【現在の研究課題】	Theoretical Chemistry, Physical Chemistry
【研究内容キーワード】	Chemical reaction, Self-assembly, Solvation
【学歴】	March 1993, Master of Sci., Graduate School of Science, Kyoto University May 1996, Doctor of Sci., Graduate School of Science, Kyoto University
【学位】	Doctor of Science from Kyoto University
【略歴】	August 1996, Research Associate (Assistant Professor), Institute for Molecular Science, Okazaki National Research Institutes May 2002, Lecturer, Graduate School of Engineering, Kyoto University May 2004, Associate Professor, Graduate School of Engineering, Kyoto University July 2010, Professor, Graduate School of Engineering, Kyoto University June 2004-December 2004, Academic Visitor, with Prof. Paul A. Madden, PTCL, Oxford University
【在外研究歴】	University
【所属学会】	The Chemical Society of Japan, Japanese Association for Molecular Science, The Japanese Association of Theoretical Chemists, The Japan Association of Solution Chemistry
【学会活動】	TIC division, The Chemical Society of Japan (2011-2021) Executive Director (2012-2014, 2020-), Committee member, Japanese Association for Molecular Science (2012-2016, 2018-) Vice president, Japan Society of Theoretical Chemistry (2019-) Committee member, The Japan Association of Solution Chemistry (2015-)
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. Yuichiro Yoshida, Satoru Iuchi, and Hirofumi Sato, "A quantum chemical model for a series of self-assembled nanocages: the origin of stability behind the coordination-driven formation of transition metal complexes up to $[M_{12}L_{24}]^{24+}$ ", Phys. Chem. Chem. Phys., 23, 866-877 (2021). 2. Tomoaki Yagi and Hirofumi Sato, "Density functional theory for molecular liquids based on interaction site model and self-consistent integral equations for site-site pair correlation functions", J. Chem. Phys., 153, 164102 (2020). 3. Satoshi Takahashi, Yuya Sasaki, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, "A stochastic model study on the self-assembly process of a Pd", Phys. Chem. Chem. Phys., 21, 6341-6347 (2019). 4. Yoshihiro Matsumura, Satoru Iuchi, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, "Chiral effects on the final step of an octahedron-shaped coordination capsule self-assembly" Phys. Chem. Chem. Phys., 20, 7383-7386 (2018). 5. Kento Kasahara and Hirofumi Sato, "Dynamics theory for molecular liquids based on an interaction site model" Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 27917-27929 (2017).
【学術関係の受賞など】	The Academic Award, The Japan Association of Solution Chemistry 2009 Morino Foundation for Molecular Science 2008 The Award for the Young Distinguished Scientist of the Japan Society for Molecular Science 2006 The Chemical Society of Japan Award for Young Chemists 2002

(2) 副センター長

【氏名 (ふりがな)】	林 重彦 (はやし しげひこ)
【職名】	教授
【所属】	理学研究科 化学専攻
【研究室】	理学研究科 6 号館 154 号室
【直通電話】	075-753-4006
【FAX】	075-753-4000
【電子メールアドレス】	hayashig@kuchem.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/riron/hayashig/
【研究分野】	理論化学・生物物理学
【現在の研究課題】	タンパク質分子機能の理論的研究
【研究内容キーワード】	タンパク質機能・分子シミュレーション
【学歴】	1997 年 11 月 京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了
【学位】	1997 年 11 月 博士 (理学) (京都大学)
【略歴】	1998 年 4 月 日本学術振興会特別研究員 (名古屋大学) 2000 年 4 月 米国イリノイ大学ベックマン研究所博士研究員 2003 年 6 月 京都大学福井謙一記念研究センター博士研究員 2003 年 10 月 科学技術振興機構さきがけ研究員 2005 年 5 月 京都大学大学院理学研究科准教授 2013 年 7 月 同教授
【所属学会】	分子科学会、生物物理学会、蛋白質科学会、日本化学会
【学会活動】	日本生物物理学会理事
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	1. Time-resolved serial femtosecond crystallography reveals early structural changes in channel rhodopsin. Kazumasa Oda et al., <i>eLife</i> , 10 , e62389 (2021) 2. Ab Initio evaluation of the redox potential of cytochrome c. Cheng Cheng and Shigehiko Hayashi*, <i>J. Chem. Theory Comput.</i> , 17 , 1194-1207 (2021). 3. A computational method to simulate global conformational changes of proteins induced by cosolvent. Shoichi Tanimoto, Koichi Tamura, Shigehiko Hayashi, Norio Yoshida*, and Haruyuki Nakano, <i>J. Comput. Chem.</i> , 42 , 552-563 (2021). 4. An atomistic model of a precursor state of light-induced channel opening of channel rhodopsin. Cheng Cheng, Motoshi Kamiya, Mizuki Takemoto, Ryuichiro Ishitani, Osamu Nureki, Norio Yoshida*, and Shigehiko Hayashi*, <i>Biophys. J.</i> , 115 , 1281-1291 (2018). 5. Atomistic modeling of alternating access of a mitochondrial ADP/ATP membrane transporter with molecular simulations. Koichi Tamura and Shigehiko Hayashi*, <i>PLoS ONE</i> , 12 , e0181489 (2017). 6. Photoactivation intermediates of a G-protein coupled receptor rhodopsin investigated by hybrid molecular simulation. Motoshi Kamiya and Shigehiko Hayashi*, <i>J. Phys. Chem. B</i> , 121 , 3842-3852 (2017).

【氏名 (ふりがな)】	渡辺 宏 (わたなべ ひろし)
【職名】	教授
【所属】	京都大学化学研究所
【研究室】	化学研究所本館 N542-C
【直通電話】	0774-38-3135
【FAX】	0774-38-3139
【電子メールアドレス】	hiroshi@scl.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://rheology.minority.jp/jp/
【研究分野】	分子レオロジー
【現在の研究課題】	高分子ダイナミクス
【研究内容キーワード】	絡み合い, 動的不均一性, 粗視化
【最終学歴】	1985.3月 大阪大学 理学博士
【学位】	阪大理博
【略歴】	1983.4-1994.7: 大阪大学理学研究科 助手 1994.8-2002.12: 京都大学化学研究所 助教授 2003.1: 京都大学化学研究所 教授
【在外研究歴】	1987.4-1989.3: 米国 Minnesota 大学化学工学科 博士研究員
【所属学会】	日本レオロジー学会 ; The Society of Rheology (USA); The Korean Society of Rheology; The American Chemical Society; The American Physical Society
【学会活動】	2015.5-2017.5: 日本レオロジー学会 会長 2016.8-2020.8: President, <i>The International Committee on Rheology</i> 2011.3- 現在 : Associate Editor of <i>Macromolecules (ACS)</i>
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	H. Watanabe, Y. Matsumiya, and T. Sato, "Revisiting Nonlinear Flow Behavior of Rouse Chain: Roles of FENE, Friction-Reduction, and Brownian Force Intensity Variation", <i>Macromolecules</i> , 54(8), 3700-3715 (2021). Y. Matsumiya and H. Watanabe, "Non-Universal Feature in Uniaxially Extensional Rheology of Linear Polymer Melts and Concentrated Solutions: A Review", <i>Prog. Polym. Sci.</i> , 112, 101325 (2021) Y. Matsumiya and H. Watanabe, "ENTANGLEMENT-LOOSENING DYNAMICS RESOLVED THROUGH COMPARISON OF DIELECTRIC AND VISCOELASTIC DATA OF TYPE-A POLYMERS: A REVIEW", <i>Rubber Chemistry and Technology</i> , 93, 22-62 (2020). Y. Matsumiya, H. Watanabe, O. Urakawa, T. Inoue, Y. Kwon, "Effect of Head-to-Head Association/Dissociation on Viscoelastic and Dielectric Relaxation of Entangled Linear Polyisoprene: An Experimental Test", <i>Macromolecules</i> , 53, 1070-1083 (2020). S. L. Morelly, L. Palmese, H. Watanabe, and N. J. Alvarez, "Effect of Finite Extensibility on Nonlinear Extensional Rheology of Polymer Melts", <i>Macromolecules</i> , 52, 915-922 (2019). Y. Matsumiya, H. Watanabe, Y. Masubuchi, Q. Huang, and O. Hassager, "Nonlinear Elongational Rheology of Unentangled Polystyrene and Poly(p-tert-butyl styrene) Melts", <i>Macromolecules</i> , 51, 9710-9729 (2018). H. Watanabe, Y. Matsumiya, and Y. Kwon, "Viscoelastic and Dielectric Relaxation of Reptating Type-A Chains Affected by Reversible Head-to-Head Association and Dissociation", <i>Macromolecules</i> , 51, 6476-6496 (2018). S. Wu, X. Cao, Z. Zhang, Q. Chen, Y. Matsumiya, and H. Watanabe, "Molecular Design of Highly-Stretchable Ionomers", <i>Macromolecules</i> , 51, 4735-4746 (2018). K. I. S. Mongcopa, M. Tyagi, J. P. Mailoa, G. Samsonidze, B. Kozinsky, S. A. Mullin, D. A. Gribble, H. Watanabe and N. P. Balsara, "Relationship between Segmental Dynamics Measured by Quasi-Elastic Neutron Scattering and Conductivity in Polymer Electrolytes", <i>ACS Macro Lett.</i> , 7, 504-508 (2018). H. Watanabe, Y. Matsumiya, and Y. Kwon, "Dynamics of Rouse Chains undergoing Head-to-Head Association and Dissociation: Difference between Dielectric and Viscoelastic Relaxation", <i>J. Rheol.</i> , 61, 1151-1170 (2017). Y. Doi, A. Matsumoto, T. Inoue, T. Iwamoto, A. Takano, Y. Matsushita, Y. Takahashi, and H. Watanabe, "Re-examination of terminal relaxation behavior of high-molecular-weight ring polystyrene melts", <i>Rheol. Acta</i> , 56, 567-581 (2017). O. M. Kwon, H. Watanabe, K. H. Ahn, and S. J. Lee, "Interplay between structure and property of graphene nanoplatelet networks formed by an electric field in a poly(lactic acid) matrix", <i>J. Rheol.</i> , 61, 291-303 (2017)
【学術関係の受賞】	2008.5: 高分子学会賞 2012.5: 日本レオロジー学会賞 2015.10: Bingham Award, The Society of Rheology (USA).

(3) スーパーバイザー

【氏名 (ふりがな)】	古賀 毅 (こが つよし)
【職名】	教授
【所属】	工学研究科 高分子化学専攻
【研究室】	桂キャンパス A3 棟 115 号室
【直通電話】	075-383-2705
【FAX】	075-383-2706
【電子メールアドレス】	tkoga@phys.polym.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.phys.polym.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	高分子系の統計力学・計算科学
【現在の研究課題】	高分子系の構造形成とダイナミクス
【研究内容キーワード】	高分子・ゲル・レオロジー
【学歴】	1993 年 3 月九州大学大学院理学研究科物理学専攻博士後期課程修了
【学位】	1993 年 3 月九州大学博士 (理学)
【略歴】	1993 年 4 月 日本学術振興会特別研究員 1994 年 4 月 新技術事業団 ERATO 橋本相分離構造プロジェクト研究員 1998 年 5 月 京都大学工学研究科助手 2009 年 4 月 京都大学工学研究科准教授 2012 年 8 月 京都大学工学研究科教授
【所属学会】	高分子学会, 日本レオロジー学会, The American Chemical Society
【学会活動】	2016.6-2018.5: 高分子学会理事 2014.5-2020.4: 高分子学会関西支部常任幹事
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	1. Thermoresponsive Gelation of Amphiphilic Random Copolymer Micelles in Water, M. Shibata, T. Terashima, T. Koga, <i>MACROMOLECULES</i> , 54 , 5241-5248 (2021) 2. Theory of transient networks with a well-defined junction structure, H. Ozaki, T. Koga, <i>J. Chem. Phys.</i> , 152 , 184902 (2020) 3. Molecular simulation of structures and mechanical properties of nanocomposite networks consisting of disk-shaped particles and polymers, T. Furuya, T. Koga, <i>SOFT MATTER</i> , 41 , 8293-8305 (2018) 4. Theoretical study of inclusion complex formation of cyclodextrin and single polymer chain, T. Furuya, T. Koga, <i>POLYMER</i> , 131 , 193-201 (2017) 5. Physical gelation of supramolecular hydrogels cross-linked by metal-ligand interactions: Dynamic light scattering and microrheological studies, H. Ozaki, T. Indei, T. Koga, T. Narita, <i>POLYMER</i> , 128 , 363-372 (2017)

【氏名 (ふりがな)】	跡見 晴幸 (あとみ はるゆき)
【職名】	教授
【所属】	工学研究科 合成・生物化学専攻
【研究室】	桂キャンパス A4 棟 217 号室
【直通電話】	075-383-2777
【FAX】	075-383-2778
【電子メールアドレス】	atomi@sbchem.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/atomi-lab/en/
【研究分野】	応用微生物学・応用生物化学、基礎ゲノム科学、生体関連化学、生物・生体工学、生物系、構造生物化学
【現在の研究課題】	アーキアや極限環境微生物の代謝生理
【研究内容キーワード】	微生物、微生物代謝、生合成、アーキア、極限環境微生物、ゲノム、超好熱菌、炭酸固定、遺伝子発現制御、合成生物学
【最終学歴】	1992 年 3 月 京都大学大学院工学研究科工業化学専攻博士課程単位認定退学
【学位】	1992 年 3 月 工学博士 (京都大学)
【略歴】	1992 年 4 月 京都大学工学部工業化学科助手 1997 年 5 月 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻助教授 2009 年 3 月 京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻教授
【在外研究歴】	1994 年 4 月 ~1995 年 9 月 ドイツ Stuttgart 大学 博士研究員
【所属学会】	生物工学会、日本化学会、農芸化学会、ゲノム微生物学会、環境バイオテクノロジー学会、極限環境生物学会、生化学会、酵素工学研究会、バイオインダストリー協会、分子生物学会、マリンバイオテクノロジー学会、日本アーキア研究会、International Society for Extremophiles、American Society for Microbiology
【学会活動】	酵素工学研究会 会長、日本化学会バイオテクノロジー部会 部会長、近畿化学協会バイオ部会 部会長、ゲノム微生物学会 評議員、環境バイオテクノロジー学会 理事、日本アーキア研究会 幹事、極限環境生物学会 幹事、International Society for Extremophiles、President
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Yamamoto Y, Kanai T, Kaneseke T, Atomi H. "The TK0271 protein activates transcription of aromatic amino acid biosynthesis genes in the hyperthermophilic archaeon <i>Thermococcus kodakarensis</i>". <i>Mbio.</i> 10, e01213-19, (2019). 2. Shimosaka T, Makarova KS, Koonin EV, Atomi H. "Identification of dephospho-coenzyme A (dephospho-CoA) kinase in <i>Thermococcus kodakarensis</i> and elucidation of the entire CoA biosynthesis pathway in Archaea". <i>Mbio.</i> 10, e01146-19, (2019). 3. Nagata R, Fujihashi M, Sato T, Atomi H, Miki K. "Identification of a pyrophosphate-dependent kinase and its donor selectivity determinants". <i>Nature Commun.</i> 9, 1765, (2018). 4. Nunoura T, Chikaraishi Y, Izaki R, Suwa T, Sato T, Harada T, Mori K, Kato Y, Miyazaki M, Shimamura S, Yanagawa K, Shuto A, Ohkouchi N, Fujita N, Takaki Y, Atomi H, Takai K. "A primordial and reversible TCA cycle in a facultatively chemolithoautotrophic thermophile". <i>Science</i> 359, 559-563, (2018). 5. Zheng RC, Hachisuka SI, Tomita H, Imanaka T, Zheng YG, Nishiyama M, Atomi H. "An ornithine ω-aminotransferase required for growth in the absence of exogenous proline in the archaeon <i>Thermococcus kodakarensis</i>". <i>J. Biol. Chem.</i> 293, 3625-3636, (2018). 6. Makino Y, Sato T, Kawamura H, Hachisuka SI, Takeno R, Imanaka T, Atomi H. "An archaeal ADP-dependent serine kinase involved in cysteine biosynthesis and serine metabolism". <i>Nature Commun.</i> 7, 13446, (2016). 7. Aono R, Sato T, Imanaka T, Atomi H. "A pentose bisphosphate pathway for nucleoside degradation in Archaea". <i>Nature Chem. Biol.</i> 11(5):355-360, 2015.
【学術関係の受賞】	極限環境微生物学会 研究奨励賞 (2004 年)

【氏名 (ふりがな)】	佐々 真一 (ささ しんいち)
【職名】	教授
【所属】	京都大学 大学院理学研究科 物理学宇宙物理学専攻
【研究室】	理学部 5号館 424号室
【直通電話】	075-753-3743
【FAX】	075-753-3819
【電子メールアドレス】	sasa@scphys.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.ton.scphys.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	統計物理学
【現在の研究課題】	マクロダイナミクスの創発
【研究内容キーワード】	エントロピー、ダイナミクス、統計力学
【学歴】	1991年3月 京都大学大学院理学研究科博士後期課程物理学第一専攻修了
【学位】	1991年3月 理学博士 (京都大学)
【略歴】	1991年4月 京都大学理学部助手 1994年8月 東京大学大学院総合文化研究科助教授 2007年4月 東京大学大学院総合文化研究科准教授 2009年4月 東京大学大学院総合研究科教授 2012年11月 京都大学大学院理学研究科教授
【在外研究歴】	1995.9 - 1996.8 米国イリノイ大学 客員研究准教授
【所属学会】	日本物理学会
【学会活動】	2017.4 - 2018.3 日本物理学会領域11代表
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. "Stochastic order parameter dynamics for phase coexistence in heat conduction" Shin-ichi Sasa, Naoko Nakagawa, Masato Itami, Yohei Nakayama Physical Review E 103(6) 062129 (2021) 2. "Long-Range Phase Order in Two Dimensions under Shear Flow" Hiroyoshi Nakano, Yuki Minami, Shin-ichi Sasa Physical Review Letters 126(16) 160604 (2021) 3. "Fluctuation-response inequality out of equilibrium" Andreas Dechant, Shin-ichi Sasa Proceedings of the National Academy of Sciences 117(12) 6430 - 6436 (2020) 4. "Global Thermodynamics for Heat Conduction Systems" Naoko Nakagawa, Shin-ichi Sasa Journal of Statistical Physics 177(5)825-888 (2019) 5. "Liquid-gas transitions in steady heat conduction" Naoko Nakagawa, Shin-ichi Sasa Phys. Rev. Lett. 119, 260602/1-6(2017) 6. "Thermodynamic entropy as a Noether invariant" S.-I. Sasa, Yuki Yokokura Phys. Rev. Lett 116 140601/1-140601/6 (2016)

【氏名 (ふりがな)】	山本 潤 (やまもと じゅん)
【職名】	教授 副研究科長 評議員
【所属】	大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻
【研究室】	理学研究科 5号館 218号室
【直通電話】	075-753-3788
【FAX】	075-753-3788
【電子メールアドレス】	junyama@scphys.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://softmatter.scphys.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	ソフトマター物理学
【現在の研究課題】	超界面とソフトマター
【研究内容キーワード】	ダイナミクス、揺らぎ、粘弾性
【学歴】	1987年7月東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻博士課程中退
【学位】	1990年6月工学博士 (東京大学)
【略歴】	1987年8月東京大学工学部物理工学科助手、1991年6月東京大学生産技術研究所助手、1999年10月ERATO横山液晶微界面プロジェクトGL、2005年8月京都大学大学院理学研究科教授
【所属学会】	日本物理学会、日本液晶学会
【学会活動】	2020-2024年国際液晶学会副会長、2015-2017年日本物理学会京都支部長、2014-2016年日本液晶学会財務理事
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<p>1) K. W. Lee, T. Araki, J. Yamamoto, Dynamic control of an in-plane-switching liquid crystal cell using heterogeneous substrates, <i>Soft Matter</i>, 16, 348-356 (2020).</p> <p>2) M. Saito, J. Yamamoto, R. Masuda, M. Kurokuzu, Y. Onodera, Y. Yoda, and M. Seto, Direct observation of interlayer molecular translational motion in a smectic phase and determination of the layer order parameter, <i>Phys. Rev. Res.</i> 1, 012008(R) (6 pages) (2019).</p> <p>3) K. Hata, Y. Takanishi, I. Nishiyama and J. Yamamoto, Softening of twist elasticity in the swollen smectic C liquid crystal, <i>Euro. Phys. Lett.</i> 120, 56001(5P) (2017).</p> <p>4) S. Bono, Y. Takanishi and J. Yamamoto, Effects of layer order on the mobility of mesogenic molecules in SmA liquid-crystalline emulsions, <i>Europhys. Lett.</i>, 113, 56004 (5P) (2016).</p> <p>5) E. Gorecka, N. Vaupotic, A. Zep, D. Pocięcha, J. Yoshioka, J. Yamamoto, and H. Takezoe, A Twist-Bend Nematic (NTB)Phase of Chiral Materials, <i>Angew. Chem.</i> 127, (2015) 10293-10297.</p>
【学術関係の受賞など】	2015年日本液晶学会業績賞

【氏名 (ふりがな)】	田中 勝久 (たなか かつひさ)
【職名】	教授
【所属】	工学研究科 材料化学専攻・国際高等教育院
【研究室】	桂キャンパス A3 クラスター 018
【直通電話】	075-383-2801
【FAX】	075-383-2420
【電子メールアドレス】	tanaka.katsuhisa.4n@kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://dipole7.kuic.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	無機固体化学
【現在の研究課題】	新規無機固体・材料の合成と磁氣的・誘電的・光学的性質
【研究内容キーワード】	酸化物、金属、磁氣的性質、誘電的性質、光学的性質
【学歴】	1984年3月 京都大学工学部工業化学科卒業 1986年3月 京都大学大学院工学研究科工業化学専攻修士課程修了
【学位】	1991年3月 京都大学工学博士
【略歴】	1986年4月 三重大学工学部助手 1989年4月 京都大学工学部助手 1999年7月 京都工芸繊維大学工芸学部助教授 2004年4月 京都大学大学院工学研究科教授 2019年4月 京都大学国際高等教育院教授 (工学研究科併任) 2020年10月 京都大学理事補
【所属学会】	日本セラミックス協会、日本化学会、応用物理学会、日本物理学会、粉体粉末冶金協会、日本材料学会、日本金属学会、Materials Research Society、The Optical Society
【学会活動】	日本セラミックス協会理事・関西支部副支部長、粉体粉末冶金協会理事
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	(1) Y. Nakatsuka, K. Pollok, T. Wieduwilt, F. Langenhorst, M. A. Schmidt, K. Fujita, S. Murai, K. Tanaka, and L. Wondraczek, "Giant Faraday rotation through Fe^n states in superparamagnetic FeO-SiO ₂ vitreous films", <i>Adv. Sci.</i> (2017) 1600299. (2) T. Sawai, Y. Yamaguchi, N. Kitamura, T. Date, S. Konishi, K. Taga, and K. Tanaka, "Pulse-based electron spin transient nutation measurement of BaTiO ₃ fine particle: Identification of controversial signal around $g=2.00$ ", <i>Appl. Phys. Lett.</i> 112 (2018) 202902. (3) S. Yoshida, H. Akamatsu, R. Tsuji, O. Hernandez, H. Padmanabhan, A. S. Gupta, A. Gibbs, K. Mibu, S. Murai, J. M. Rondinelli, V. Gopalan, K. Tanaka, and K. Fujita, "Hybrid improper ferroelectricity in (Sr,Ca) ₃ Sn ₂ O ₇ and beyond: universal relationship between ferroelectric transition temperature and tolerance factor in $n = 2$ Ruddlesden-Popper phases", <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 140 (2018) 15690. (4) R. Kamakura, S. Murai, Y. Yokobayashi, K. Takashima, M. Kuramoto, K. Fujita, and K. Tanaka, "Enhanced photoluminescence and directional white light generation by plasmonic array", <i>J. Appl. Phys.</i> 124 (2018) 213105. (5) H. Akamatsu, K. Fujita, T. Kuge, A. S. Gupta, J., M Rondinelli, I. Tanaka, K. Tanaka, and V. Gopalan, "Unexpected A-site cation size effect on oxygen octahedral rotations in acentric Ruddlesden-Popper alkaline rare-earth titanates", <i>Phys. Rev. Mater.</i> 3 (2019) 065001. (6) S. Murai, E. Cabello-Olmo, R. Kamakura, M. E. Calvo, G. Lozano, T. Atsumi, H. Miguez, and K. Tanaka, "Optical responses of localized and extended modes in a mesoporous layer on plasmonic array to isopropanol vapor", <i>J. Phys. Chem. C</i> 124 (2020) 5772. (7) K. Agata, S. Murai, and K. Tanaka, "Stick-and-play metasurfaces for directional light outcoupling", <i>Appl. Phys. Lett.</i> 118 (2021) 021110.
【学術関係の受賞など】	ACS/CJS Joint Ceramic Award (1997年)、日本セラミックス協会学術賞 (2005年)、Award of the Outstanding Papers Published in the JCSerSJ in 2013 (2013年度)、日本セラミックス協会フェロー表彰 (2019年度)、粉体粉末冶金協会研究功績賞 (2019年度)、工学教育賞 文部科学大臣賞 (2020年度)

【氏名 (ふりがな)】	宇田 哲也 (うだ てつや)
【職名】	教授
【所属】	大学院工学研究科 材料工学専攻
【研究室】	物理系校舎 6 階
【直通電話】	075-753-5439
【FAX】	075-753-5284
【電子メールアドレス】	uda.tetsuya.5e@kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	https://www.aqua.mtl.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	材料工学
【現在の研究課題】	固体イオニクス・金属生産工学
【研究内容キーワード】	プロトン伝導性酸化物・非鉄金属製錬・資源循環
【最終学歴】	1999 年 3 月 東北大学大学院 工学研究科金属工学専攻博士後期課程 修了
【学位】	1999 年 3 月 博士 (工学) (東北大学)
【略歴】	1999 年 4 月 東北大学素材工学研究所助手 2002 年 5 月 カリフォルニア工科大学ポストドクトラルスカラー 2005 年 4 月 京都大学工学研究科材料工学専攻 助手 2006 年 8 月 同 助教授 2007 年 4 月 同 准教授 2014 年 8 月 同 教授
【在外研究歴】	2002 年 5 月 -2005 年 3 月 米国カリフォルニア工科大学 (Sossina M. Haile 教授)
【所属学会】	資源・素材学会、日本金属学会、電気化学会、日本固体イオニクス学会
【学会活動】	資源・素材学会 会報誌 編集幹事長など
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	Thermodynamic maximum of Y doping level in Barium Zirconate in co-sintering with NiO, Katsuhiko Ueno, Naoyuki Hatada, Donglin Han, and Tetsuya Uda <i>Journal of Materials Chemistry A</i> , 7 , (2019), 7232-7241 Characteristic Microstructure Underlying the Fast Hydration-dehydration Reaction of β -La ₂ (SO ₄) ₃ : "Fine Platy Joints" with "Loose Grain Boundaries", Kunihiko Shizume, Naoyuki Hatada, Kazuaki Toyoura, Tetsuya Uda <i>Journal of Materials Chemistry A</i> , 6 , (2018), 24956-24964 The Best Composition of an Y-doped BaZrO ₃ Electrolyte: Selection Criteria from Transport Properties, Microstructure, and Phase Behavior, Donglin Han and Tetsuya Uda, <i>Journal of Materials Chemistry A</i> , 6 , (2018), 18571-185824 Preferential Proton Conduction along Three-Dimensional Dopant Network in Yttrium-Doped Barium Zirconate: A First-Principles Study, Kazuaki Toyoura, Weijie Meng, Donglin Han, and Tetsuya Uda, <i>Journal of Materials Chemistry A</i> , 6 , (2018), 22721-22730 Discovery of Rapid and Reversible Water Insertion in Rare Earth Sulfates: A New Process for Thermochemical Heat Storage, Naoyuki Hatada, Kunihiko Shizume, Tetsuya Uda, <i>Advanced Materials</i> , 29 , (2017), 1606569
【学術関係の受賞】	2014 第 10 回 (平成 25 年度) 日本学術振興会賞 など

【氏名 (ふりがな)】	田中 庸裕 (たなか つねひろ)
【職名】	教授
【所属】	工学研究科 分子工学専攻
【研究室】	桂キャンパス A4 棟 126 号室
【直通電話】	075-383-2558
【FAX】	075-383-2561
【電子メールアドレス】	tanakat@moleng.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng_04/
【研究分野】	触媒化学・固体物理化学
【現在の研究課題】	固体と接触したナノ粒子・光触媒による人工光合成
【研究内容キーワード】	元素戦略・ナノ粒子・X線分光法
【学歴】	1987年3月 京都大学工学研究科博士後期課程修了
【学位】	1987年7月 京都大学工学博士
【略歴】	1987年10月 北海道大学理学部助手 1990年4月 京都大学工学部助手 1997年7月 京都大学工学研究科助教授 2004年12月 同教授
【所属学会】	触媒学会, 日本化学会, 石油学会, アメリカ化学会, 日本 XAFS 研究会, 英国王立化学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<ol style="list-style-type: none"> Shift of Active Sites via In-situ Photodeposition of Chromate Achieving Highly Selective Photocatalytic Conversion of CO₂ by H₂O over ZnTa₂O₆ X. Xu, K. Teramura, H. Asakura, S. Hosokawa, T. Tanaka, <i>Appl. Catal. B, Environmental</i> 2021, 298, 120508. Strong Metal-Support Interaction in Pd/Ca₂AlMnO_{5+δ} : Catalytic NO Reduction over Mn-doped CaO Shell S. Hosokawa, Y. Oshino, T. Tanabe, H. Koga, K. Beppu, H. Asakura, K. Teramura, T. Motohashi, M. Okumura, T. Tanaka, <i>ACS Catalysis</i>, 2021, 11(13), 7996-8003. Dynamics of the Lattice Oxygen in a Ruddlesden-Popper-type Sr₃Fe₂O_{7-δ} Catalyst during NO Oxidation K. Tamai, S. Hosokawa, K. Ohnishi, C. Watanabe, K. Kato, H. Okamoto, H. Asakura, K. Teramura, T. Tanaka, <i>ACS Catalysis</i>, 2020, 10(4), 2528-2537. NO_x Oxidation and Storage Properties of a Ruddlesden-Popper Type Sr₃Fe₂O_{7-δ} Layered Perovskite Catalyst K. Tamai, S. Hosokawa, H. Okamoto, H. Asakura, K. Teramura, T. Tanaka, <i>ACS Appl. Mater. Interfaces</i>, 2019, 11(30), 26985-26993. In Situ Spectroscopy-guided Engineering Rhodium Single-Atom Catalysts for CO Oxidation M. J. Hülsey, B. Zhang, Z. Ma, H. Asakura, D. N. Do, W. Chen, T. Tanaka, P. Zhang, Z. Wu, N. Yang, <i>Nature Communications</i>, 2019, 10:1330. Efficient Oxygen Storage Property of Sr-Fe Mixed Oxide as Automotive Catalyst Support K. Beppu, S. Hosokawa, H. Asakura, K. Teramura, T. Tanaka <i>J. Mater. Chem. A</i>, 2019, 7, 1013-1021. Photocatalytic Conversion of Carbon Dioxide by A₂BTa₅O₁₅ (A= Sr, Ba; B= K, Na) Using Ammonia as an Efficient Sacrificial Reagent Z. Huang, S. Yoshizawa, K. Teramura, H. Asakura, S. Hosokawa, T. Tanaka <i>ACS Sustainable Chem. Eng.</i>, 2018, 6(7), 8247-8255. Catalytic Amino Acid Production from Biomass-derived Intermediates W. Deng, Y. Wang, S. Zhang, K. M. Gupta, M. J. Hülsey, H. Asakura, L. Liu, Y. Han, E. M. Karp, G. T. Beckham, P. J. Dyson, J. Jiang, T. Tanaka, Y. Wang, N. Yan, <i>PNAS</i>, 2018, 115(20), 5093-5098. Dynamic Behavior of Rh Species in Rh/Al₂O₃ Model Catalyst during Three-Way Catalytic Reaction: An Operando Xray Absorption Spectroscopy Study H. Asakura, S. Hosokawa, T. Tanaka <i>et al.</i>, <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 2018, 140, 176-184.

【氏名 (ふりがな)】	山本 量一 (やまもと りょういち)
【職名】	教授
【所属】	工学研究科 化学工学専攻
【研究室】	桂キャンパス A棟 118号室
【直通電話】	075-383-2661
【電子メールアドレス】	ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	ソフトマター / アクティブマターの計算科学
【現在の研究課題】	生体組織の物理モデリング / 自己泳動する微生物のシミュレーション
【研究内容キーワード】	ソフトマター、アクティブマター、シミュレーション、移動現象
【最終学歴】	1992年3月神戸大学大学院 工学研究科修士課程化学工学専攻修了
【学位】	1996年3月博士 (工学) 京都大学
【略歴】	1994年9月 神戸大学大学院自然科学研究科物質科学専攻助手 1996年3月 京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻助手、 2000年1月 同講師 2004年10月 京都大学大学院工学研究科化学工学専攻助教授 2007年4月 同准教授 2008年10月 同教授
【在外研究歴】	2000年9月 -2001年8月 英国ケンブリッジ大学化学教室 (J-P. Hansen 教授) (文部省 在外研究員 (若手))
【所属学会】	日本物理学会、化学工学会、分子シミュレーション研究会
【学会活動】	化学工学会理事
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. J. Li, S. K. Schnyder, M. S. Turner, and R. Yamamoto, The role of the cell cycle in collective cell dynamics, <i>Physical Review X</i> , in print. 2. R. Yamamoto, J. J. Molina, and Y. Nakayama, Smoothed profile method for direct numerical simulations of hydrodynamically interacting particles, <i>Soft Matter</i> 17, 4226 (2021). 3. F. Fadda, J. J. Molina, and R. Yamamoto, Dynamics of a chiral swimmer sedimenting on a flat plate, <i>Phys. Rev. E</i> 101, 052608 (2020). 4. S. K. Schnyder, J. J. Molina, and R. Yamamoto, Control of cell colony growth by contact inhibition, <i>Scientific Report</i> 10, 6713-6726 (2020). 5. G. Lecrivain, T. B. Pacheco, R. Yamamoto, U. Hampel, and T. Taniguchi, Eulerian/Lagrangian formulation for the elasto-capillary deformation of a flexible fibre, <i>J. Comput. Phys.</i> 409, 109324-109339 (2020). 6. M. Campo, S. K. Schnyder, J. J. Molina, T. Speck and R. Yamamoto, Spontaneous Spatiotemporal Ordering of Shape Oscillations Enhances Cell Migration, <i>Soft Matter</i> 15, 4939-4946 (2019). 7. J. J. Molina, and R. Yamamoto, Mechanosensitivity of Crawling Cells under Periodically Stretching Substrates, <i>Soft Matter</i> 15, 683 (2019).
【学術関係の受賞】	2007年1月 ホソカワ研究奨励賞、2002年12月 分子シミュレーション研究会学術賞

【氏名 (ふりがな)】	高田 彰二 (たかだ しょうじ)
【職名】	教授
【所属】	理学研究科 生物科学専攻 生物物理学教室
【研究室】	理学部 1 号館 205 号室
【直通電話】	075-753-4220
【FAX】	075-753-4222
【電子メールアドレス】	takada@biophys.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://theory.biophys.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	理論生物物理学
【現在の研究課題】	生体分子の構造機能についての理論およびコンピュータシミュレーション研究
【研究内容キーワード】	分子モーター、遺伝子動態、生体分子モデリング
【最終学歴】	1991 年 9 月総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻博士後期課程退学
【学位】	1994 年 3 月理学博士 (総合研究大学院大学)
【略歴】	1991 年～1995 年 岡崎国立共同研究機構技官 (分子科学研究所) 1995 年～1998 年 日本学術振興会研究員 (イリノイ大学化学科) 1998 年～2001 年 神戸大学理学部化学科講師 2001 年～2007 年 同助教授 2007 年～2013 年 京都大学理学研究科生物科学専攻生物物理教室准教授 2013 同教授
【在外研究歴】	1995 年 5 月 -1998 年 3 月 米国イリノイ大学化学科 (日本学術振興会研究員)
【所属学会】	日本生物物理学会
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	1. C. Tan and <u>S. Takada</u> *, 2020. Nucleosome Allosterity in Pioneer Transcription Factor Binding, <i>Proc. Nat. Acad. Sci. USA</i> 117: 20586-20596. 2. <u>S. Takada</u> *, G.B. Brandani, and C. Tan, 2020. Nucleosomes as allosteric scaffolds for genetic regulation, <i>Curr. Opinion Struct. Biol.</i> 62: 93-101. 3. W. Li*, J. Wang, J. Zhang, <u>S. Takada</u> *, W. Wang*, 2019. Overcoming the Bottleneck of the Enzymatic Cycle by Steric Frustration, <i>Phys. Rev. Lett.</i> 122: 238102. 4. G.B. Brandani, T. Niina, C. Tan, and <u>S. Takada</u> *, 2018. DNA sliding in nucleosomes via twist defect propagation revealed by molecular simulations, <i>Nuc. Acids Res.</i> , 46: 2788-2801. 5. M. Shimizu, Y. Noguchi, Y. Sakiyama, H. Kawakami, T. Katayama*, S. Takada*, Near-atomic structural model for bacterial DNA replication initiation complex and its functional insights, <i>Proc. Nat. Acad. Sci. USA</i> , 113 • E8021-E8030 • 2016 6. C. Tan, T. Terakawa, S. Takada*, Dynamic Coupling among Protein Binding, Sliding, and DNA Bending Revealed by Molecular Dynamics, <i>JACS.</i> , 138 • 8512-8522 • 2016 7. S. Takada*, R. Kanada, C. Tan, T. Terakawa, W. Li, H. Kenzaki, Modeling Structural Dynamics of Biomolecular Complexes by Coarse-Grained Molecular Simulations, <i>Acc. Chem. Res.</i> , 48 • 3026-3035 • 2015

【氏名 (ふりがな)】	渡邊 一也 (わたなべ かずや)
【職名】	教授
【所属】	京都大学大学院理学研究科化学専攻
【研究室】	分子分光学研究室
【電子メールアドレス】	kw@kuchem.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://molspec.kuchem.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	物理化学, 表面科学
【現在の研究課題】	界面・不均一系の超高速現象
【研究内容キーワード】	非線形分光, 界面分光, 時間分解分光
【最終学歴】	1997年3月大阪大学大学院工学研究科博士後期課程修了
【学位】	博士 (工学)
【略歴】	1997年 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 助手 1999年 総合研究大学院大学先導科学研究科 助手 2004年 自然科学研究機構分子科学研究所 助手 (2007年4月より助教) 2007-2010年 独立行政法人科学技術振興機構さきがけ研究員 (兼任) 2007年 京都大学大学院理学研究科化学専攻 准教授 2019年4月より現職
【所属学会】	分子科学会、日本分光学会、日本化学会、表面真空学会、日本物理学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. “Decoupling from a Thermal Bath via Molecular Polariton Formation”, Shota Takahashi and Kazuya Watanabe, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> , 2020, 11 , 1349-1356. 2. “Singlet fission of amorphous rubrene modulated by polariton formation”, Shota Takahashi, Kazuya Watanabe and Yoshiyasu Matsumoto, <i>J. Chem. Phys.</i> 151 , 074703 (2019). 3. “Enhanced Structural Disorder at Nanocrystalline Ice Surface”, Yuji Otsuki, Kazuya Watanabe, Toshiki Sugimoto and Yoshiyasu Matsumoto, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , 2019, 21 , 20442 – 20453. 4. “Coherent singlet fission activated by symmetry breaking”, K. Miyata, Y. Kurashige, K. Watanabe, T. Sugimoto, S. Takahashi, S. Tanaka, J. Takeya, T. Yanai, and Y. Matsumoto, <i>Nature Chemistry</i> , 9 , 983–989 (2017). 5. “Disentangling Multidimensional Nonequilibrium Dynamics of Adsorbates: CO Desorption from Cu(100)” K.-I. Inoue, K. Watanabe, T. Sugimoto, Y. Matsumoto & T. Yasuike, <i>Phys. Rev. Lett.</i> , 117 , 186101 (2016).

(4) 専任教員

【氏名 (ふりがな)】	佐藤 徹 (さとう とおる)
【職名】	教授
【所属】	理論研究部門
【研究室】	210
【直通電話】	075-711-7849
【FAX】	なし
【電子メールアドレス】	tsato@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	準備中
【研究分野】	理論化学
【現在の研究課題】	振電相互作用理論、機能性分子の理論設計
【研究内容キーワード】	振電相互作用, 有機 EL, Jahn-Teller 効果
【学歴】	平成 9 年 3 月 京都大学大学院工学研究科 分子工学専攻博士後期課程修了
【学位】	博士 (工学)
【略歴】	平成 9 年 4 月 日本学術振興会特別研究員 (PD) (財団法人基礎化学研究所) 平成 10 年 1 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻助手 平成 15 年 10 月 文部科学省在外研究員 (若手) (ルーヴァンカトリック大学) 平成 16 年 3 月 京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門助教授 平成 23 年 1 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻准教授 平成 30 年 2 月 京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門教授 現在に至る
【所属学会】	日本コンピュータ化学会, 日本化学会, フラーレン・ナノチューブ・グラフェン学会, 日本物理学会, 応用物理学会, 有機 EL 討論会, 化学史学会
【学会活動】	Jahn-Teller Steering Committee (2009-)
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	“A Theoretical Investigation into the Role of Catalyst Support and Regioselectivity of Molecular Adsorption on a Metal Oxide Surface: NO Reduction on Cu/ γ -Alumina”, Wataru Ota, Yasuro Kojima, Saburo Hosokawa, Kentaro Teramura, Tsunehiro Tanaka, Tohru Sato*, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 23 , 2575-2585 (2021). “Origin of Aggregation-Induced Enhanced Emission: A Role of Pseudo-Degenerate Electronic States of Excimers Formed in Aggregation Phases”, Wataru Ota, Ken Takahashi, Kenji Higashiguchi, Kenji Matsuda, Tohru Sato*, <i>J. Mater. Chem. C</i> 8 , 8036-8046 (2020). “Fluorescence via Reverse Intersystem Crossing from Higher Triplet States in a Bisanthracene Derivative”, Tohru Sato*, Rika Hayashi, Naoki Haruta, Yong-Jin Pu, <i>Sci. Rep.</i> 7 4820 1-9 (2017). “Thermodynamical vibronic coupling constant and density: Chemical potential and vibronic coupling in reactions”, Tohru Sato*, Naoki Haruta, and Kazuyoshi Tanaka, <i>Chem. Phys. Lett.</i> 652 , 157-161 (2016). “A Light-Emitting Mechanism for Organic Light-Emitting Diodes: Molecular Design for Inverted Singlet-Triplet Structure and Symmetry-Controlled Thermally Activated Delayed Fluorescence”, Tohru Sato*, Motoyuki Uejima, Kazuyoshi Tanaka, Hironori Kaji, and Chihaya Adachi, <i>J. Mater. Chem. C</i> 3 , 870-878 (2015).
【学術関係の受賞など】	2016 年度日本コンピュータ化学会学会賞 平成 23 年 3 月 欧州委員会 Erasmus Mundus Scholar

【氏名 (ふりがな)】	春田 直毅 (はるた なおき)
【職名】	特定助教
【所属】	京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門
【研究室】	福井謙一記念研究センター 202 号室
【直通電話】	075-711-7843
【電子メールアドレス】	haruta@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	https://sites.google.com/site/nharuta1987/
【研究分野】	理論化学
【現在の研究課題】	縮退と擬縮退の包括的理解に向けた新たな理論化学の開拓
【研究内容キーワード】	量子化学、振電相互作用、ヤーン・テラー効果、群論の応用
【最終学歴】	2016 年 3 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士後期課程修了
【学位】	2016 年 3 月 京都大学 博士 (工学)
【略歴】	2016 年 4 月 東京工業大学科学技術創成研究院 研究員 2018 年 2 月 東京工業大学科学技術創成研究院 特任助教 2019 年 4 月 京都大学福井謙一記念研究センター 特定助教
【所属学会】	日本化学会、日本コンピュータ化学会、理論化学会、分子科学会
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	1. N. Haruta, P. F. M. Oliveira, T. Sato, K. Tanaka, M. Baron, "Force-induced dissolution of imaginary mode in mechanochemical reaction: dibenzophenazine synthesis", <i>J. Phys. Chem. C</i> 123 , 21581 (2019). 2. A. Kuzume, M. Ozawa, Y. Tang, Y. Yamada, N. Haruta, K. Yamamoto, "Ultrahigh sensitive Raman spectroscopy for subnanoscience: Direct observation of tin oxide clusters", <i>Science Adv.</i> 5 , eaax6455 (2019). 3. T. Tsukamoto, N. Haruta, T. Kambe, A. Kuzume, K. Yamamoto, "Periodicity of molecular clusters based on symmetry-adapted orbital model", <i>Nature Commun.</i> 10 , 3727 (2019). 4. N. Haruta, T. Tsukamoto, A. Kuzume, T. Kambe, K. Yamamoto, "Nanomaterials design for super-degenerate electronic state beyond the limit of geometrical symmetry", <i>Nature Commun.</i> 9 , 3758 (2018). 5. T. Kambe, N. Haruta, T. Imaoka, K. Yamamoto, "Solution-phase synthesis of Al_{13}^- using a dendrimer template", <i>Nature Commun.</i> 8 , 2046 (2017). 6. T. Imaoka, Y. Akanuma, N. Haruta, S. Tsuchiya, K. Ishihara, T. Okayasu, W.-J. Chun, M. Takahashi, K. Yamamoto, "Platinum clusters with precise numbers of atoms for preparative-scale catalysis", <i>Nature Commun.</i> 8 , 688 (2017).
【学術関係の受賞】	2021 年 02 月 英国王立化学会 第 15 回 PCCP Prize 2020 年 03 月 日本化学会 第 34 回若い世代の特別講演会 講演者 2019 年 06 月 第 22 回理論化学討論会 優秀講演賞 2019 年 04 月 日本化学会 第 99 春季年会 (2019) 優秀講演賞 (学術) 2019 年 02 月 福井謙一奨励賞 (第 3 回) 2013 年 11 月 第 3 回 CSJ 化学フェスタ 2013 優秀ポスター発表賞

(5) リサーチダイレクター

【氏名 (ふりがな)】	平尾 公彦 (ひらお きみひこ)
【職名】	リサーチダイレクター
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	105
【直通電話】	075-711-7796
【電子メールアドレス】	hirao.kimihiko.2n@kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	https://researchmap.jp/read0180590/research_experience
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	電子状態理論、波動関数理論、密度汎関数法
【研究内容キーワード】	電子相関・相対論的分子理論・LC 汎関数
【学歴】	1974年3月京都大学工学 研究科燃料化学専攻博士課程単位取得退学
【学位】	1974年5月工学博 (京都大学)
【略歴】	1974年-1975年 カナダ・アルバータ大学博士研究 1988年-1993年 教養部教授 1993年-1995年 東京大学工学部工業化学科教授 1995年-2009年 東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻教授 (改組により) 2004年-2006年 東京大学大学院工学系研究科研究科長・工学部長 2007年-2009年 東京大学副学長 2009年4月-2010年6月 理化学研究所特任顧問 2010年7月-2018年3月 理化学研究所計算科学研究機構・機構長 2018年4月-2021年3月 理化学研究所顧問 2018年10月-京都大学福井謙一記念研究センターリサーチダイレクター
【所属学会】	日本化学会、アメリカ化学会
【学会活動】	2006年-2012年 International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS, Menton) Secretary General 2004年-2012年 Asia Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists (APATCC) President
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. Koopmans-Type Theorem in Kohn–Sham Theory with Optimally Tuned Long-Range Corrected (LC) Functionals Kimihiko Hirao, Han-Seok Bae, Jong-Won Song, and Bun Chan, <i>J. Phys. Chem. A</i> 2021 , <i>125</i> , 16, 3489–3502. 2. Rapid prediction of ultra-visible spectra from conventional (non-time-dependent) density functional theory calculations, Bun Chan and Kimihiko Hirao, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 2020 , <i>11</i> , 7882. 3. Charge-transfer Excitation Energies Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals Kimihiko Hirao, Bun Chan, Jong-Won Song, and Han-Seok Bae <i>J. Phys. Chem. A</i> 2020 <i>124</i> , 8079-8087. 4. Core level Excitation Energies of Nucleic Acid Bases Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan, Jong-Won Song, and Han-Seok Bae <i>J. Phys. Chem. A</i> , 2020 <i>124</i> , 10482–10494. 5. Application of Accelerated Long-range Corrected Exchange Functional [LC-DFT(2Gau)] to Periodic Boundary Condition Systems: CO Adsorption on Cu(111) Surface Kenji Mishima, Masanori Kaneko, Jong-Won Song, Hiroki Kawai, Koichi Yamashita and Kimihiko Hirao, <i>J. Chem. Phys.</i> , 2020 <i>152</i> , 104105. 6. Excitation energies expressed as orbital energies of KS-DFT with LC functionals, Kimihiko Hirao, Bun Chan, Jong-Won Song, Kamala Bhattarai, and Subrata Tewary, <i>J. Comput. Chem.</i> , 2020 <i>41</i> , 1368-1383. 7. A Simple Model for Relative Energies of All Fullerenes Reveals the Interplay Between Intrinsic Resonance and Structural Deformation Effects in Medium-Sized Fullerenes, Bun Chan, Yukio Kawashima, William Dawson, Michio Katouda, Takahito Nakajima, Kimihiko Hirao, <i>J. Chem. Theory and Computat.</i> 2019 <i>5</i> , 1255–1264. 8. Importance of van der Waals descriptions on accurate isomerization energy calculations of thiourea compounds: LCgau-BOP+LRD method Dae-Hwan Ahn, Takeshi Sato, Jong-Won Song, and Kimihiko Hirao <i>J. Phys. Chem. A</i> 2019 <i>123</i> 7034-7041. 9. Accelerated Long-range Corrected Exchange Functional Using a Two-Gaussian Operator combined with One-parameter Progressive Correlation Functional [LC-BOP(2Gau)], Jong-Won Song and Kimihiko Hirao <i>J. Comput. Chem. (Memorial Festschrift for Keiji Morokuma)</i> , 2019 <i>40</i> , 104-112. (Award, Fellowship) 2002 International Academy of Quantum Molecular Science (Menton, France) 2005 Chemical Society of Japan Award 2007 Fukui Medal, Asia Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists 2008 Mukai Award 2010 ICCMSE Award, European Society of Comp. Methods in S&E 2018 Hyogo Prefectural Uplifting Award

(6) FIFC リサーチフェロー

【氏名 (ふりがな)】	永瀬 茂 (ながせ しげる)
【職名】	FIFC リサーチフェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	104 室
【直通電話】	075-711-7792
【FAX】	075-711-4757
【電子メールアドレス】	nagase@ims.ac.jp, nagase@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	元素の特性とナノ構造を利用した分子開発の理論と計算
【研究内容キーワード】	高周期典型元素、遷移金属、ナノカーボン、機能性分子
【最終学歴】	1975 年 3 月大阪大学大学院基礎工学研究科博士課程了
【学位】	1975 年 3 月工学博士 (大阪大学)
【略歴】	ロチェスター大学博士研究員、オハイオ州立大学博士研究員、 日本学術振興会奨励研究員、分子科学研究所文部技官等を経て 1980 年 4 月 横浜国立大学助教授 1991 年 4 月 同教授 1995 年 4 月 東京都立大学教授 2001 年 4 月 分子科学研究所教授、総合研究大学院大学教授 2012 年 3 月 同名誉教授 2012 年 4 月 京都大学福井謙一記念研究センターシニア リサーチフェロー 2015 年 4 月 同 FIFC リサーチフェロー
【所属学会】	日本化学会、理論化学会、ケイ素化学協会、アメリカ化学会
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	1. S. Nagase, "Theory and Calculations of Molecules Containing Heavier Main Group Elements and Fullerenes Encaging Transition Metals: Interplay with Experiment", <i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i> , (<i>Award Accounts</i>), 87 , 167-195 (2014) 2. X. Lu, L. Bao, T. Akasaka, and S. Nagase, "Recent Progress in the Chemistry of Endohedral Metallofullerenes", <i>Chem. Commun. (Feature Article)</i> , 50 , 14701-14715 (2015) 3. J. -D. Guo, D. J. Liptrot, S. Nagase, and P. P. Power, "The Multiple Bonding in Heavier Group 14 Element Alkene Analogues is Stabilized Mainly by Dispersion Force Effects", <i>Chem. Sci.</i> , 6 , 6235-6244 (2015) 4. Y. Takano, R. Tashita, M. Suzuki, S. Nagase, H. Imahori, and T. Akasaka, "Molecular Location Sensing by Anisotropic Magnetism of a Endohedral Metallofullerene", <i>J. Am. Chem. Soc.</i> , 138 , 8000-8005 (2016) 5. 赤阪健, 山田道夫, 前田優, 永瀬茂, 化学の要点シリーズ 17 「フラーレンの化学」 (日本化学会編), 共立出版 (2016) 6. R. Zhao, K. Yuan, S. Zhao, M. Ehara, S. Nagase, J. M. Poblet, and X. Zhao, "Deciphering the Role of Long-Range Interaction in endohedral Metallofullerenes: Revisit to Sc ₂ C ₇₀ ", <i>J. Phys. Chem. C</i> , 121 , 20481-20488 (2017) 7. M. Yamada, T. Alaska, and S. Nagase, "Salvaging Reactive Fullerenes from Soot by Exohedral Derivatization", <i>Angew. Chem. Int. Ed. (Review)</i> , 57 , 13394-13405 (2018) 8. T. Sugahara, J. -D. Guo, T. Sasamori, S. Nagasae, T. Tokitoh, "Regioselective Cyclotrimerization of Terminal Alkynes Using a Digermyne", <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , 57 , 3499-3503 (2018)
【学術関係の受賞など】	2008 年国際量子分子科学アカデミー会員、平成 23 年度文部科学大臣表彰科学技術賞 (研究部門)、2012 年度 福井メダル (Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists)、平成 24 年度第 65 回日本化学会賞

【氏名 (ふりがな)】	田中 一義 (たなか かずよし)
【職名】	FIFC リサーチフェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	福井謙一記念研究センター 206
【直通電話】	075-711-7867
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	tanaka.kazuyoshi.4r@kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/members_ja
【研究分野】	物理化学、量子化学
【現在の研究課題】	元素ブロックを有する分子、高分子の理論化学
【研究内容キーワード】	分子・高分子の電子物性、量子機能材料、量子統計力学
【学歴】	1978年3月 京都大学工学研究科石油化学専攻博士課程修了
【学位】	1978年3月 工学博士 (京都大学)
【略歴】	1979年6月 米国エネルギー・コンバージョン・デバイズ社リサーチケミスト 1981年12月 京都大学工学部助手 1988年12月 同 助教授 1996年11月 京都大学大学院工学研究科教授 2012年4月 京都大学福井謙一記念研究センター長併任 2015年4月 京都大学名誉教授ならびに京都大学福井謙一記念研究センターシニアリサーチフェロー 2019年4月から 京都大学福井謙一記念研究センター FIFC リサーチフェロー
【所属学会】	日本化学会・日本物理学会
【学会活動】	該当なし
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. ボール物理化学 第2版 (下) (監訳ならびに共訳, 化学同人, 2016) 2. New Polymeric Materials Based on Element-Blocks (共著, Springer Nature, Singapore, 2019) 3. Theoretical Chemistry for Experimental Chemists – Pragmatics and Fundamentals” (単著, Springer Nature, Singapore, 2020). <p>(以上著書)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. スズ版グラフェン”スタネン”がつくられた! (単著) 化学, 71, No. 1, 21-26 (2016). 2. 元素ブロックの機能発現・電子化物を与える無機元素ブロック (共著) セラミックス, 51, No. 11, 739-742 (2016). 3. 2016年ノーベル賞を読み解く 物理学賞 ささまざまな可能性を秘めたエキゾチックな状態とは? (単著) 化学, 71, No. 12, 24-27 (2016). 4. 化学つれづれ草 第一回 理屈っぽい化学? (単著) 化学 72, No. 5, 55 (2017). 5. 化学つれづれ草 第二回 福井研究室の日常 (単著) 化学 72, No. 6, 31 (2017). 6. 化学つれづれ草 第三回 博士課程考 (単著) 化学 72, No. 7, 29 (2017). 7. 化学つれづれ草 第四回 米国のベンチャー企業 (単著) 化学 72, No. 8, 27 (2017). 8. 化学つれづれ草 第五回 米国の研究資金事情 (単著) 化学 72, No. 9, 18 (2017). 9. 化学つれづれ草 第六回 日本の大学と研究資金 (単著) 化学 72, No. 10, 29 (2017). 10. 化学つれづれ草 第七回 妄想と基礎研究資金 (単著) 化学 72, No. 11, 46 (2017). 11. 化学つれづれ草 第八回 企業と大学の研究 (単著) 化学 72, No. 12, 28 (2017).

12. 化学つれづれ草 第九回 オリジナルな研究 (単著) 化学 73, No. 1, 59 (2018).
13. 化学つれづれ草 第十回 理論化学と計算化学 (単著) 化学 73, No. 2, 29 (2018).
14. 化学つれづれ草 第十一回 分割統治と化学 (単著) 化学 73, No. 3, 24 (2018).
15. 化学つれづれ草 第十二回 論文不正 (単著) 化学 73, No. 4, 19 (2018).
16. 化学つれづれ草 第十三回 教育と研究 (単著) 化学 73, No. 5, 39 (2018).
17. 化学つれづれ草 第十四回 無用の用 (単著) 化学 73, No. 6, 20 (2018).
18. 化学つれづれ草 第十五回 フロンティア軌道理論 (単著) 化学 73, No. 7, 49 (2018).
19. 化学つれづれ草 第十六回 頭がよいということ? (単著) 化学 73, No. 8, 41 (2018).
20. 化学つれづれ草 第十七回 面白そうな研究テーマ? (単著) 化学 73, No. 9, 27 (2018).
21. 化学つれづれ草 第十八回 サイエンスと野暮 (単著) 化学 73, No. 10, 41 (2018).
22. 化学つれづれ草 第十九回 海外留学のすゝめ (単著) 化学 73, No. 11, 40 (2018).
23. 化学つれづれ草 第二十回 ロアルド・ホフマンさん (前編) (単著) 化学 73, No. 12, 37 (2018).
24. 化学つれづれ草 第二十一回 ロアルド・ホフマンさん (後編) (単著) 化学 74, No. 1, 25 (2019).
25. 化学つれづれ草 第二十二回 伝統と効率 (単著) 化学 74, No. 2, 28 (2019).
26. 化学つれづれ草 第二十三回 思い出の研究 (単著) 化学 74, No. 3, 55 (2019)
27. ロアルド・ホフマン博士に聞く 分野を超えて挑み続けるには (単著) 現代化学 No. 1, 24-27 (2019).
28. シミュレーションか理解か ー量子化学分野だけにとどまらない緊張関係ー
Roald Hoffmann (訳) 現代化学 No. 1, 28-32 (2019).
29. 化学つれづれ草 第二十四回 人にわかってもらうこと (単著) 化学 74, No. 4, 45 (2019).
30. 化学つれづれ草 第二十五回 量子力学三題噺 (単著) 化学 74, No. 5, 59 (2019).
31. 化学つれづれ草 第二十六回 プレゼン能力と研究能力 (単著) 化学 74, No. 6, 43 (2019).
32. 化学つれづれ草 第二十七回 専門書籍を書き残すこと (単著) 化学 74, No. 7, 53 (2019).
33. 化学つれづれ草 第二十八回 外国の研究者との交流 (単著) 化学 74, No. 8, 26 (2019).
34. 化学つれづれ草 第二十九回 お気に入りの教科書 (単著) 化学 74, No. 9, 19 (2019).
35. 化学つれづれ草 第三十回 理論と実験の研究 (単著) 化学 74, No. 10, 35 (2019).
36. 化学つれづれ草 第三十一回 先生の師匠のこと (単著) 化学 74, No. 11, 35 (2019).
37. 化学つれづれ草 第三十二回 リチウムイオン二次電池 (単著) 化学 74, No. 12, 40-41 (2019).
38. 化学つれづれ草 第三十三回 平成時代の回顧 (単著) 化学 75, No. 1, 25 (2020).
39. 化学つれづれ草 第三十四回 統計学の逆襲 (単著) 化学 75, No. 2, 21 (2020).
40. 化学つれづれ草 第三十五回 応用的研究の具体化 (単著) 化学 75, No. 3, 39 (2020).
41. 分子軌道法 (単著) 接着学会誌 56, No. 11, 431-440 (2020).
42. 吉野 彰氏のノーベル化学賞受賞に思う (単著) 京都大学工学広報, 73 (4月), 18-20 (2020).
43. 量子コンピュータの仕組み (単著) 現代化学 No. 6, 38-44 (2020).
44. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 1 序論および波動関数の性質の理解 (単著) 現代化学, No. 4, 66-69 (2020).

45. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 2 対象となるシュレーディンガー方程式 (単著) 現代化学, No. 5, 70-73 (2020).
46. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 3 おもな分子軌道法について (単著) 現代化学, No. 6, 70-73 (2020).
47. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 4 基底関数の選び方と性質 (単著) 現代化学, No. 7, 64-67 (2020).
48. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 5 分子構造の最適化 (単著) 現代化学, No. 8, 67-70 (2020).
49. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 6 分子の電子状態からの情報 (単著) 現代化学, No. 9, 54-59 (2020).
50. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 7 分子のもつスピン状態についての情報 (単著) 現代化学, No. 10, 70-74 (2020).
51. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 8 分子の電子物性とその特徴 (単著) 現代化学, No. 11, 66-70 (2020).
52. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 9 NMR スペクトルについての理論的解析 (単著) 現代化学, No. 12, 55-59 (2020).
53. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 10 光吸収と発光について (1) (単著) 現代化学, No. 1, 59-64 (2021).
54. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 11 光吸収と発光について (2) (単著) 現代化学, No. 2, 55-59 (2021).
55. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 12 化学反応性の予測に用いる軌道相互作用 (単著) 現代化学, No. 3, 73-77 (2021).
56. 化学つれづれ草 第三十六回 変わりゆく「学び」のカタチ (単著) 化学 75, No. 4, 36 (2020).
57. 化学つれづれ草 第三十七回 お隣さんの業界事情 (単著) 化学 75, No. 5, 57 (2020).
58. 化学つれづれ草 第三十八回 新型コロナウイルス感染症と自触媒反応 (単著) 化学 75, No. 6, 23 (2020).
59. 化学つれづれ草 第三十九回 プレゼンに思うこと (単著) 化学 75, No. 7, 39 (2020).
60. 化学つれづれ草 第四十回 日本の化学産業界の事情 (単著) 化学 75, No. 8, 35 (2020).
61. 化学つれづれ草 第四十一回 女性研究者について (単著) 化学 75, No. 9, 29 (2020).
62. 化学つれづれ草 第四十二回 応用開発研究にまつわる思い出 (単著) 化学 75, No. 10, 47 (2020).
63. 化学つれづれ草 第四十三回 CNT 関連のウラ話 (単著) 化学 75, No. 11, 37 (2020).
64. 化学つれづれ草 第四十四回 研究人生での激ヤバニアミス二題断 (単著) 化学 75, No. 12, 48 (2020).
65. 化学つれづれ草 第四十五回 経済学賞 (単著) 化学 76, No. 1, 33 (2021).
66. 化学つれづれ草 第四十六回 アーカイブというもの (単著) 化学 76, No. 2, 41 (2021).
67. 化学つれづれ草 第四十七回 昔の先生がた (単著) 化学 76, No. 3, 47 (2021).
- (以上和文総説)
1. Isolation and Characterization of Persistent Radical Cation and Dication of 2,7-Bis(dianisylamino) pyrene (R. Kurata, K. Tanaka, and A. Ito) *J. Org. Chem.*, 81, 137-145 (2016).
2. (Z) -1,2-Di (1-pyrenyl) disilene: Synthesis, Structure, and Intramolecular Charge-Transfer Emission (M. Kobayashi, N. Hayakawa, T. Matsuo, B. Li, T. Fukunaga, D. Hashizume, H. Fueno, K. Tanaka, and K. Tamao) *J. Am. Chem. Soc.*, 138, 758-761 (2016).
3. Synthesis and Characterization of 6,13-Diamino-Substituted Pentacenes (A. Ito, M. Uebe, K. Takahashi, H. Ishikawa, D. Sakamaki, H. Sato, T. Matsumoto, and K. Tanaka) *Chem. Eur. J.*, 22, 2165-2170 (2016).

4. O₂-Triggered Directional Switching of Photocurrent in Self-Assembled Monolayer Composed of Porphyrin- and Fullerene-Terminated Helical Peptides on Gold (H. Uji, K. Tanaka, and S. Kimura) *J. Phys. Chem. C*, 120, 3684-3689 (2016).
5. Synthesis and Magnetic Properties of Linear Two-coordinate Monomeric Diaryliron (II) Complexes Bearing Fused-ring Bulky "Rind" Groups (S. Goda, M. Nikai, M. Ito, D. Hashizume, K. Tamao, A. Okazawa, N. Kojima, H. Fueno, K. Tanaka, Y. Kobayashi, and T. Matsuo) *Chem. Lett.*, 45, 634-636 (2016).
6. Thermodynamical Vibronic Coupling Constant and Density: Chemical Potential and Vibronic Coupling in Reactions (T. Sato, N. Haruta, and K. Tanaka) *Chem. Phys. Lett.*, 652, 157-161 (2016).
7. Color Tuning of Alternating Conjugated Polymers Composed of Pentaazaphenanthrene by Modulating Their Unique Electronic Structures Involving Isolated-LUMOs (H. Watanabe, M. Hirose, K. Tanaka, K. Tanaka, and Y. Chujo) *Polym. Chem.*, 7, 3674-3680 (2016).
8. Arsole-Containing p-Conjugated Polymer by the Post-Element-Transformation Technique (Y. Matsumura, M. Ishidoshiro, Y. Irie, H. Imoto, K. Naka, K. Tanaka, S. Inagi, and I. Tomita) *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55, 15040-15043 (2016).
9. Radical Cation of an Oligoarylamine Having a Nitroxide Radical Substituent: A Coexistent Molecular System of Localized and Delocalized Spins (A. Ito, R. Kurata, Y. Noma, Y. Hirao, and K. Tanaka) *J. Org. Chem.*, 81, 11416-11420 (2016).
10. Borophosphonate Cages as Element-blocks: Ab Initio Calculation of the Electronic Structure of a Simple Borophosphonate, [HPO₃BH]₄, and Synthesis of Two Novel Borophosphonate Cages with Polymerizable Groups (J. Zapico, M. Shirai, R. Sugiura, N. Idota, H. Fueno, K. Tanaka, and Y. Sugahara) *Chem. Lett.*, 46, 181-184 (2017).
11. Stereoisomerization of 1,4-Dihydroarsinetetracarboxylic Acid Diimides under Non-acidic Condition from cis- to trans-Forms (K. Naka, T. Kato, K. Abe, M. Ishidoshiro, S. Nishiyama, S. Tanaka, H. Imoto, S. Watase, K. Matsukawa, H. Fueno, and K. Tanaka) *Heterocycles*, 94, 923-937 (2017).
12. Studies of Spherically Distributed LUMO and Electron-Accepting Properties of Caged Hexakis (germasquioxanes) (J. Ohshita, T. Tsuchida, K. Komaguchi, K. Yamamoto, Y. Adachi, Y. Ooyama, Y. Harima, and K. Tanaka) *Organometallics*, 36, 2536-2540 (2017).
13. Induced-Dipole-Directed, Cooperative Self-Assembly of a Benzotrithiophene (T. Ikeda, H. Adachi, H. Fueno, K. Tanaka, and T. Haino) *J. Org. Chem.*, 82, 10062-10069 (2017).
14. A Stable Free Tetragermacyclobutadiene Incorporating Fused-ring Bulky EMind Groups (K. Suzuki, Y. Numata, N. Fujita, N. Hayakawa, T. Tanikawa, D. Hashizume, K. Tamao, H. Fueno, K. Tanaka, and T. Matsuo) *Chem. Commun.*, 54, 2200-2203 (2018).
15. Force-Induced Dissolution of Imaginary Mode in Mechanochemical Reaction: Dibenzophenazine Synthesis (N. Haruta, P. F. Marques de Oliveira, T. Sato, K. Tanaka, and M. Baro) *J. Phys. Chem. C*, 123, 21581-21587 (2019).
16. Tellurophene-Containing π -Conjugated Polymers with Unique Heteroatom-Heteroatom Interactions by Post-Element-Transformation of an Organotitanium Polymer (H. Nishiyama, F. Zheng, S. Inagi, H. Fueno, K. Tanaka, and I. Tomita) *Polym. Chem.*, 11, 4693-4698 (2020).
17. Hydrogen Adsorption/Desorption Properties of Anhydrous Metal Oxalates; Metal = Mg²⁺ and Ca²⁺ (M. Matsumoto, T. Kita, and K. Tanaka) *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 93, 985-987 (2020).

(以上学術論文)

【学術関係の受賞など】

2002-2007年 科学技術振興機構 (JST) の戦略的創造研究推進事業 (CREST) 「精密分子設計に基づくナノ電子デバイス構築」研究代表者

2004-2005年 文部科学省知的クラスター創成事業「京都ナノテククラスター」のナノテク共同研究テーマ「mRNAの数理学的特異性抽出ソフトの開発と解析サービスの事業化展開」研究代表者

(7) リサーチリーダー

【氏名 (ふりがな)】	高塚 和夫
【職名】	リサーチリーダー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	209
【直通電話】	075-711-7902
【FAX】	075-711-7902
【電子メールアドレス】	kaztak@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://mns2.fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	理論化学, 分子科学基礎論
【現在の研究課題】	非断熱電子動力学による化学反応論, 超高速励起状態化学, 化学動力学理論, 多体量子動力学理論
【研究内容キーワード】	化学動力学・電子波束動力学・非断熱現象の科学・レーザー化学
【学歴】	1978年3月 大阪大学大学院基礎工学研究科化学系専攻学位取得卒業
【学位】	工学博士
【略歴】	1978年8月 ノースダコタ州立大学 博士研究員 1979年9月 カルフォルニア工科大学博士研究員 1982年1月 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所理論研究系助手 1987年4月 名古屋大学教養部助教授 (名古屋大学大学院工学研究科および理学研究科を担当) 1992年4月 名古屋大学大学院人間情報学研究科教授 1997年10月 - 2016年3月 東京大学大学院総合文化研究科教授 1998年4月 - 2016年3月 東京大学教授 理学系研究科化学専攻 (兼任) 2001年4月 - 2016年3月 自然科学研究機構分子科学研究所教授 (兼任) 2016年4月 - 現職
【所属学会】	日本化学会, 日本物理学会, アメリカ化学会, 分子科学会, 理論化学会
【学会活動】	計算分子科学研究拠点長 (2016年3月まで), 各種評価委員会委員 (非公開), Chem. Phys. 誌等編集委員
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	論文 1. Kazuo Takatsuka "Lorentz-like force emerging from kinematic interactions between electrons and nuclei in molecules. A quantum mechanical origin of symmetry breaking that can trigger molecular chirality." J. Chem. Phys. 146 , 084312 (10 pages) (2017). 2. Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka "Chemical bonding and nonadiabatic electron wavepacket dynamics in densely quasi-degenerate excited state manifold of boron clusters" J. Chem. Phys. 150 , 114101 (18 pages) (2019). 3. Kazuo Takatsuka, "Maupertuis-Hamilton least action principle in the space of variational parameters for Schrödinger dynamics; A dual time-dependent variational principle" J. Phys. Comm. 4 , 035007 (16 pages) (2020) 4. Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka "Charge separation and successive reconfigurations of electrons and protons driving water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex. On the mechanism of water splitting in PSII." Phys. Chem. Chem. Phys., 22 , 7912-7934 (2020) 5. Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki, "Energy Natural Orbitals" J. Chem. Phys. 154 , 094103 (2021). (14 pages). 6. Kazuo Takatsuka "Electron dynamics in molecular elementary processes and chemical reactions" Bull. Chem. Soc. Jpn. 94 , 1421-1477 (2021). Monograph 1. Kazuo Takatsuka, Takehiro Yonehara, Kota Hanasaki, and Yasuki Arasaki, Chemical Theory beyond the Born-Oppenheimer Paradigm (World Scientific, Singapore, 2014) 2. 高塚和夫, 田中秀樹 「分子熱統計力学」 (東京大学出版会, 2014)
【学術関係の受賞など】	分子科学会賞 (2013年), 日本化学会賞 (2014年), Mizushima-Raman Lectureship Award (2016年), Fukui メダル (2019年)

(8) 研究員

【氏名 (ふりがな)】	北浦 和夫 (きたうら かずお)
【職名】	研究員
【所属】	福井謙一記念研究センター 平尾グループ
【電子メールアドレス】	kazuo.kitaura@riken.jp
【研究分野】	計算化学
【現在の研究課題】	巨大分子系の電子状態計算法
【研究内容キーワード】	巨大分子・タンパク質・電子状態
【最終学歴】	1976年3月大阪市立大学理学研究科化学専攻博士課程修了
【学位】	1976年3月理学博士 (大阪市立大学)
【略歴】	1979年8月 分子科学研究所理論研究系助手 1981年9月 大阪市立大学理学部助手 1989年7月 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助教授 (電子計算機センター) 1993年4月 大阪府立大学総合科学部教授 2001年7月 産業技術総合研究所計算科学研究部門グループ長 2007年4月 京都大学薬学研究科教授 2011年12月 神戸大学システム情報学研究科特命教授 2016年4月 京都大学福井謙一記念研究センター研究員
【所属学会】	日本化学会、日本薬学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. Tomomi Shimazaki, Kazuo Kitaura, Dmitri G. Fedorov, Takeshi Nakajima, "Group molecular orbital approach to solve Huzinaga subsystem self-consistent-field equations", J. Chem. Phys. 146(8) 084109(2017). 2. Dmitri G. Fedorov, Kazuo Kitaura, "Many-body expansion of the Fock matrix in the fragment molecular orbital method", J. Chem. Phys. 147(10) 104106 (2017). 3. Abe, Yukihiro; Shoji, Mitsuo; Nishiya, Yoshiaki; Aiba, Hiroshi; Kishimoto, Takahiro; Kitaura, Kazuo, "The reaction mechanism of sarcosine oxidase elucidated using FMO and QM/MM methods", PhysChemChemPhys. 19, 9811-9822 (2017). 4. Fedorov, Dmitri G.; Kitaura, Kazuo; "Pair Interaction Energy Decomposition Analysis for Density Functional Theory and Density-Functional Tight-Binding with an Evaluation of Energy Fluctuations in Molecular Dynamics", J. Phys. Chem. A 122, 1781-1795(2018).

【氏名 (ふりがな)】	Tatsuhisa Kato
【職名】	Part-time Researcher
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 202
【直通電話】	075-711-7843
【FAX】	075-711-7838
【電子メールアドレス】	kato.tatsuhisa.4c@kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Molecular Spectroscopy
【現在の研究課題】	Spin Chemistry of Radical Molecules
【研究内容キーワード】	Spin chemistry, Radical molecule, Electron spin resonance
【学歴】	March 1979, Master of Sci., Graduate School of Science, Kyoto University
【学位】	July 1984, Doctor of Science from Kyoto University
【略歴】	April 2010, Professor, Institute for Liberal Arts and Sciences Kyoto University
【所属学会】	Chemical Society of Japan, Society of Molecular Science Japan, Society of Electron Spin Science and Technology Japan
【主な著書、学術論文 (過去5年以内)】	<ol style="list-style-type: none"> 1. T. Kato, N. Haruta, and T. Sato, “ Vibronic Coupling Density (Understanding Molecular Deformation) “, <i>SpringerBriefs in Molecular Science</i>, Springer Nature, Singapore, 2021, ISBN 978-981-16-1795-9. 2. X. Li, T. Ogihara, T. Kato, Y. Nakamura, and S. Yamago, “ Evidence for Polarity-and Viscosity-Controlled Pathways in the Termination Reaction in the Radical Polymerization of Acrylonitrile “, <i>Macromolecules</i>, 54, pp. 4497-4506 (2021). 3. X. Li, T. Kato, Y. Nakamura, and S. Yamago, “ The Effect of Viscosity on the Coupling and Hydrogen-Abstraction Reaction between Transient and Persistent Radicals “, <i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>, 94, pp. 966-972 (2021). 4. K-P Dinse, T. Kato, S. Hasegawa, Y. Hashikawa, Y. Murata, and R. Bittl, “EPR study of NO radicals encased in modified open C₆₀ fullerenes “, <i>Magn. Reson.</i> 1, pp. 197-207(2020).
【学術関係の受賞など】	The Society Award from the Society of Electron Spin Science and Technology Japan in 2017.

Ⅱ 博士研究員等

1. 博士研究員組織

2020(令和2)年度

職 名		氏 名
福井センターフェロー		Schnyder, Simon Kaspar -2020.12.31
高塚グループ	研究フェロー	新 崎 康 樹
		花 崎 浩 太 -2020.8.24

2. 博士研究員プロフィール

【氏名 (ふりがな)】	Simon Kaspar Schnyder (サイモン カスパー シュニーダー)
【職名】	FIFC Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 204
【直通電話】	075-711-7863
【電子メールアドレス】	schnyder@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Soft matter physics, Biophysics, Computational physics
【現在の研究課題】	Structure and dynamics of cellular tissues, anomalous transport in heterogeneous media
【研究内容キーワード】	Cell migration, Epithelial tissues, Lorentz model, Porous media, Percolation, Anomalous diffusion
【学歴】	January 2010, Diploma in Physics, University of Konstanz, Konstanz, Germany May 2014, Doctor of Science, University of Düsseldorf, Düsseldorf, Germany
【学位】	Doctor of Science from University of Düsseldorf
【略歴】	Jun. 2014 – Nov. 2014, Postdoctoral Fellow, University of Düsseldorf Dec. 2014 – Dec. 2016, Postdoctoral Fellow, Department of Chemical Engineering, Kyoto University Jan. 2017 – Dec 2020, FIFC Fellow, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University Jan 2021 – now, Project Specific Assistant Professor, Graduate School of Engineering, Department of Chemical Engineering, Kyoto University
【所属学会】	German Physical Society (DPG)
【主な著書、学術論文】	1. Rees, D. G., Yeh, S.-S., Lee, B.-C., Schnyder, S. K., Williams, F. I. B., Lin, J.-J., and Kono, K., Dynamical decoupling and recoupling of the Wigner solid to a liquid helium substrate, <i>Physical Review B</i> 102, 075439 (2020). 2. Schnyder, S. K., Molina, J. J., Yamamoto, R., Control of cell colony growth by contact inhibition, <i>Scientific Reports</i> 10, 6713 (2020). 3. Campo, M., Schnyder, S. K., Molina, J. J., Speck, T. & Yamamoto, R. “Spontaneous spatiotemporal ordering of shape oscillations enhances cell migration”. <i>Soft Matter</i> 15, 4939–4946 (2019). 4. S. K. Schnyder, & J. Horbach, “Crowding of interacting fluid particles in porous media through molecular dynamics: breakdown of universality for soft interactions”, <i>Physical Review Letters</i> , 120(7), 78001 (2018). 5. J. Horbach, N. H. Siboni, & S. K. Schnyder, “Anomalous transport in heterogeneous media”, <i>The European Physical Journal Special Topics</i> , 226(14), 3113–3128 (2017). 6. S. K. Schnyder, J. J. Molina, Y. Tanaka, R. Yamamoto, “Collective motion of cells crawling on a substrate: roles of cell shape and contact inhibition”, <i>Scientific Reports</i> 7, 5163 (2017). 7. S. K. Schnyder, T. O. E. Skinner, A. Thorneywork, D. G. A. L. Aarts, J. Horbach, R. P. A. Dullens, “Dynamic heterogeneities and non-Gaussian behaviour in 2D randomly confined colloidal fluids”, <i>Physical Review E</i> (2017).

【氏名 (ふりがな)】	新崎 康樹 (あらかさき やすき)
【職名】	研究フェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター 高塚グループ
【研究室】	東京大学駒場キャンパス 16 号館 525A
【電子メールアドレス】	yasuki_arasaki@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://mns2.fukui.kyoto-u.ac.jp/~arasaki/
【研究分野】	理論化学
【現在の研究課題】	非断熱動力学理論による化学反応
【研究内容キーワード】	非断熱相互作用、クラスター、励起状態動力学
【学歴】	2000 年 9 月 東京大学大学院総合文化研究科博士課程修了
【学位】	2000 年 9 月 博士 (学術) (東京大学)
【略歴】	2000 年 10 月 東京大学インテリジェント・モデリング・ラボラトリー研究員 2002 年 10 月 東京大学大学院総合文化研究科 研究員 2017 年 4 月 福井謙一記念研究センター 研究フェロー
【所属学会】	分子科学会
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Y. Arasaki, Y. Mizuno, S. Scheit, and K. Takatsuka, Stark-assisted quantum confinement of wavepackets. A coupling of nonadiabatic interaction and CW-laser, <i>J. Chem. Phys.</i> 144, 044107 (2016, 10 pages). 2. Y. Arasaki and K. Takatsuka, Time-resolved photoelectron signals from bifurcating electron wavepackets propagated across conical intersection in path-branching dynamics, <i>Chem. Phys.</i> 493, 42-48 (2017). 3. Andres Tehlar, Aaron von Conta, Yasuki Arasaki, Kazuo Takatsuka, and Hans Jakob Wörner, Ab initio calculation of femtosecond-time-resolved photoelectron spectra of NO₂ after excitation to the A-band, 149, 034307 (2018, 13 pages). 4. Y. Arasaki and K. Takatsuka, Chemical bonding and nonadiabatic electron wavepacket dynamics in densely quasi-degenerate excited electronic state manifold of boron clusters, <i>J. Chem. Phys.</i> 150, 114101 (2019, 18 pages). 5. K. Takatsuka and Y. Arasaki, Energy natural orbitals, <i>J. Chem. Phys.</i> 154, 094103 (2021, 14 pages).

【氏名 (ふりがな)】	花崎 浩太 (はなさき こうた)
【職名】	研究フェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	高塚研究室
【直通電話】	075-711-7907
【電子メールアドレス】	hanasaki@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	計算化学・理論化学
【現在の研究課題】	分子における非断熱電子動力学の研究
【研究内容キーワード】	非断熱力学、電子力学、相対論効果
【学歴】	2014年3月東京大学大学院総合文化研究科博士課程修了
【学位】	2014年3月学術博士 (東京大学)
【略歴】	2014年 博士研究員 (Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY), The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI), Center for Free-electron Laser Science (CFEL) theory group) 2016年 研究支援者 (東北大学大学院理学研究科化学専攻物理化学講座数理化学研究室) 2018年 研究フェロー (京都大学福井謙一記念研究センター) 2020年 University of California, Riverside, Department of Chemical and Environmental Engineering
【所属学会】	分子科学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. A. Rudenko, L. Inhester, K. Hanasaki, <i>et al.</i> “Femtosecond response of polyatomic molecules to ultra-intense hard X-rays”, <i>Nature</i> 546 , 129 (2017). 2. K. Hanasaki, M. Kanno, T. A. Niehaus and H. Kono, “An efficient approximate algorithm for nonadiabatic molecular dynamics”, <i>J. Chem. Phys.</i> 149 , 244117 (2018). 3. K. Hanasaki and K. Takatsuka, “Relativistic theory of electron-nucleus-radiation coupled dynamics in molecules: Wavepacket approach”, <i>J. Chem. Phys.</i> 151 , 084102 (2019). 4. K. Hanasaki and K. Takatsuka, “Relativistic formalism of nonadiabatic electron-nucleus-radiation dynamics in molecules: Path-integral approach”, <i>Phys. Rev. A</i> 100 , 052501 (2019). 5. K. Hanasaki and K. Takatsuka, “On the molecular electronic flux: Role of nonadiabaticity and violation of conservation” <i>J. Chem. Phys.</i> 154 , 164112 (2021).

Ⅲ 研究広報活動

1. 福井謙一記念研究センターシンポジウム

第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウムは、新型コロナウイルス感染拡大防止のため延期となった。

京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム

日 時 2021年1月25日 (月) 13:00 – 17:55

場 所 京都大学 福井謙一記念研究センター (オンライン)

講 演 13:05–13:55

岸 亮平 (大阪大学大学院 基礎工学研究科)

「開殻縮環分子系の光・磁場応答制御の分子設計：モデル構築と量子化学計算」

14:05–14:55

中 寛史 (京都大学大学院 薬学研究科)

「水で有機物質をつくる」

15:05–15:55

飯田 健二 (北海道大学 触媒科学研究所)

「ナノ物質系の界面の光や電圧に対する応答の理論計算研究」

ポスターセッション 16:05–17:55

2. セミナー

(1) 福井センターセミナー

2020年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、開催されなかった。

(2) その他のセミナー

Contact	Speaker	Title	Affiliation	Date
Shigeyoshi Sakaki	Ben Slater	Molecular Level Resolution of Defects MOFs and Their Catalytic Activity	University College London	Nov.13 (Wed.), 2019*

*2019年報未記載

2020年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、開催されなかった。

3. 国際交流

2020年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、WEB等を通じた交流が行われた。

4. 社会へのアウトリーチ活動

＜学術講演＞

田中 一義 FIFC リサーチフェロー 2021 (令和3) 年2月16日 (火)

演 題：計算化学によって分かること

行事名：京都グリーンケミカル・ネットワーク令和2年度人材育成事業

場 所：公益財団法人京都高度技術研究所からのオンライン講義

5. 福井謙一奨励賞の創設及び奨励賞の授与

福井謙一博士の生誕百年を控え、日頃から、化学の将来の発展のためには若手研究者の育成の大切さを説いておられた福井博士の意志を汲み、基礎化学、理論化学の分野で顕著な研究業績を挙げた若手研究者を顕彰する福井謙一奨励賞を平成29年度に創設した。

令和2年秋に公募し、応募のあった中から委員会で選考の結果、次のとおり選考された。表彰式は、福井謙一記念研究センターシンポジウムの中で行う予定であったが、新型コロナウイルス感染拡大防止に鑑み、シンポジウムの開催が見送られたため、次年度もしくは次回開催のセンターシンポジウムにて受賞者に表彰状と記念楯を授与し、受賞題目に関する講演が行われることとなった。

受 賞 者：植松 祐輝 (九州大学 大学院理学研究院 物理学部門 助教)

受賞題目：水の界面物性計算理論の構築と疎水性界面における帯電メカニズムの解明

IV 研究業績

1. 専任教員

佐藤 徹

教授

1. 今年度の研究の要約

カルバゾール-ベンゾニトリル誘導体を用いた OLED における高効率有機 EL の発光機構: 高次三重項経由蛍光

有機発光ダイオード(OLED)において高効率なエレクトロルミネセンス(EL)を実現するためには、電流励起によって生じる一重項励起子だけでなく三重項励起子を効率良く利用する必要がある。そのため、最低三重項励起状態である T_1 と S_1 のエネルギー差 ΔE_{ST} を小さくすることで、熱的に T_1 から S_1 へ逆系間交差(RISC)する熱活性型遅延蛍光(TADF)が注目されている[1]。しかしながら、近年、室温での熱エネルギーよりはるかに大きい ΔE_{ST} を有するにもかかわらず、高効率な RISC を示す分子が報告されている。その要因として、局所励起(LE)型の三重項励起状態 3LE から電荷分離(CT)型の S_1 への RISC が考えられている[2]。

一方、我々は内部転換が抑制された高次三重項励起状態を経由した RISC による fluorescence via higher triplets (FvHT)機構を提案している[3]。FvHT 機構では、一重項への熱的な RISC が可能である高次三重項とそれよりエネルギーが低い三重項との内部転換が抑制されることにより、励起状態が CT 型か LE 型かに関係なく高効率発光が可能となる。カルバゾール-ベンゾニトリル誘導体である 5CzBN は 0.2 eV 程度の非常に大きな T_1 と S_1 の ΔE_{ST} を有するにもかかわらず、高い発光効率を示すことが報告されている[4]。本研究では、5CzBN に対して振電相互作用密度(VCD)解析を行うことで、 T_3 から T_1 及び T_2 への内部転換が抑制されており、 T_3 から S_1 への RISC が起こりうること、また、 T_3 が CT 型励起状態であることを示した。

DFT 計算による結果、 T_1 と S_1 のエネルギー差は 0.67eV であり、熱励起による T_1 から S_1 への RISC は起こりにくいと予想された。一方、 T_3 と S_1 のエネルギー差は 0.01eV であった。したがって、 T_3 から T_1 及び T_2 への内部転換が抑制されていれば、 T_3 から S_1 への RISC が生じると考えられる。内部転換の速度定数を評価するため、VCC の計算を行った。 T_3 - T_1 及び T_3 - T_2 間の非対角 VCC は比較的小さな値が得られた(Fig. 1)。同様に、 T_1 及び T_2 の対角 VCC も小さな値を有することがわかった。したがって、 T_3 から T_1 と T_2 への内部転換は抑制されていると考えられる。非対角 VCC が小さな値をもつ理由を明らかにするため、VCD 解析を行った。その結果、 T_3 - T_1 間の重なり密度は二つのカルバゾール上で、 T_3 - T_2 間の重なり密度は三つのカルバゾール上で消失していることがわかった(Fig. 2)。このような重なり密度の消失が非対角 VCC の減少に寄与しているといえる。

励起状態の性質を明らかにするため、 T_3 - S_0 間の差電子密度を計算した(Fig. 2)。差電子密度の正はベンゾニトリルに、負はカルバゾールに局在している。したがって、電子励起に伴い、電子はカルバゾールからベンゾニトリルへと遷移することがわかった。つまり、 T_3 は LE 型ではなく CT 型の励起状態であることが示された。FvHT 機構では、候補分子はドナー-アクセプター型に限定されないため、高効率深青色 EL の有望な機構であると考えられる。

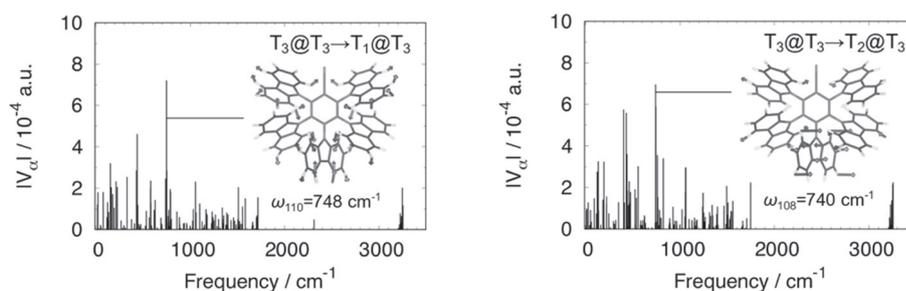


Fig. 1 Off-diagonal VCC of $T_3@T_3 \rightarrow T_1@T_3$ and $T_3@T_3 \rightarrow T_2@T_3$.

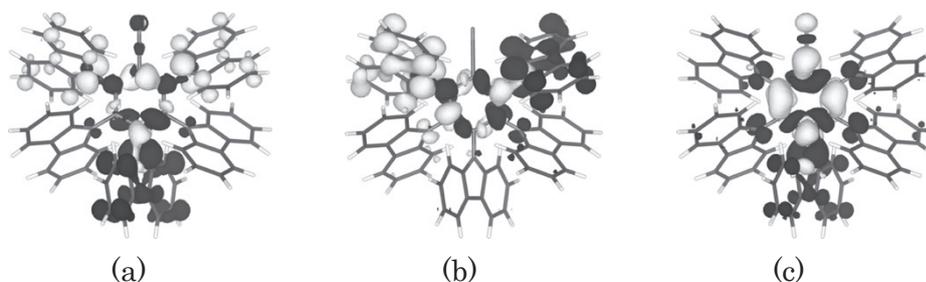


Fig. 2 Overlap density between (a) $T_3@T_3-T_1@T_3$ and (b) $T_3@T_3-T_2@T_3$. (c) Electron density difference between $T_3@T_3-S_0@T_3$. White region is positive while blue region is negative.

【文献】 1) C. Adachi, Jpn. J. Appl. Phys., 53, 060101 (2014). 2) F. B. Dias et. al., Adv. Sci., 3, 1600080 (2016). 3) T. Sato et. al., Sci. Rep., 7, 4820 (2017). 4) T. Hosokai et al., Sci. Adv., 3, 1603282 (2017).

有機薄膜太陽電池材料 ITIC の光電変換過程における自発的対称性の破れ

有機薄膜太陽電池(OPV)は、光電変換過程において電荷が再結合するのを防ぐために、活性層がドナー分子とアクセプター分子の 2 種類の有機化合物で構成されている。OPV の光電変換過程において、光吸収により生じる励起子は電子と正孔がクーロン相互作用によって強く結びついた状態である。このクーロン相互作用を打ち破って励起子から正負の電荷が生じるためには、ドナー分子とアクセプター分子の HOMO もしくは LUMO 同士のエネルギー差(エネルギーオフセット)が必要であると考えられてきた [1]。しかし、近年、エネルギーオフセットが小さいオフセットレス系においても電荷分離が生じることが報告されている [2]。このようなオフセットレス系において何が電荷分離の駆動力になっているかは未解明である。

非フラレン系アクセプター分子 ITIC を用いたオフセットレス系は高い光電変換効率を実現することが報告されている [3]。これは ITIC の凝集相で生じる電荷分離(CT)状態が光電変換を促進するためだと考えられている [4]。ITIC の溶液と薄膜で吸収スペクトルの線形が異なることから、凝集相では溶液中の 1 分子とは異なる励起状態の生成が示唆される。このような励起状態としてはエキシマー状態が考えられる。エキシマー状態には対称的なエキシマー状態と非対称的なエキシマー状態の 2 つのが考えられる。後者は分子間 CT 状態となる可能性がある。非対称的な分子間 CT 型のエキシマー状態は対称的なエキシマー状態から対称性が破れることで生じる可能性がある (Fig. 1)。この対称性の破れは振電相互作用によって説明でき、振電相互作用密度 (VCD)解析によ

ってその起源を明らかにできると考えられる [5]。本研究では、オフセットレス系の例である ITIC 凝集相における電荷分離の駆動力を明らかにし、その起源となる振電相互作用を VCD 解析により示した。

凝集相中の ITIC 同士は互いに末端部分でスタッキングしており、末端部分の間で電子が移動すると考えられている [6]。よって、末端でスタッキングした、2 分子により凝集相中の ITIC をモデル化した。また、この 2 分子モデルには C_i 対称性を課した。基底状態及び励起状態計算の計算レベルはそれぞれ、B3LYP/3-21G 及び TD-B3LYP/3-21G とした。

Fig. 3 (a)と(b)に二量体モデルの計算で得られた、Franck-Condon (FC) S_1 状態及び断熱(AD) S_1 状態での S_1 - S_0 間の差電子密度を示す。それぞれの構造の対称性は C_i と C_1 であった。これは、2 分子が光を吸収して生じた FC S_1 状態から、AD S_1 状態へと振動緩和する際に自発的に対称性が破れることを意味する。FC S_1 状態の差電子密度は 2 分子に対称的に非局在化しており、FC S_1 状態は対称的なエキシマーである。一方、AD S_1 状態の差電子密度では正の値が左側、負の値が右側の分子に局在していることから、AD S_1 状態は非対称的な CT 型のエキシマー状態である。従って、対称的なエキシマー状態から自発的対称性の破れが駆動力となり、分子間 CT 状態が発現することが示された。

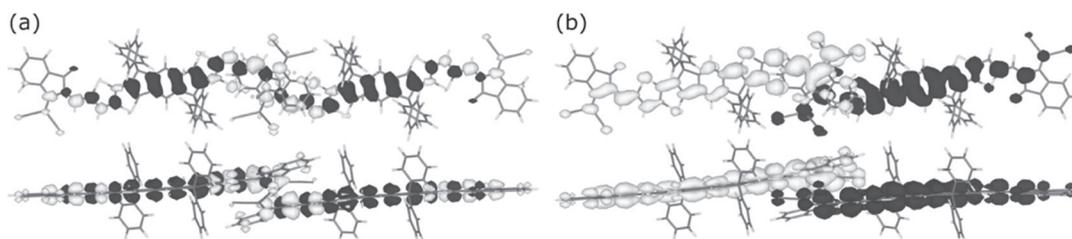


Fig. 3 Electron density differences of (a) $S_1@S_0-S_0@S_0$ and (b) $S_1@S_1-S_0@S_1$. The white region is positive, whereas the blue region is negative.

分子間 CT 状態を生成する自発的対称性の破れは S_1 状態における pJT 効果によるものである。 S_2 状態と S_1 状態は擬縮退しており、エネルギー差が小さい。また、 S_1 状態の C_i 対称性を持つ鞍点において S_2 - S_1 間の非対角 VCC が大きな値を持つ。このような S_2 - S_1 間の微小なエネルギー差と大きい非対角 VCC が S_1 状態において pJT 効果を引き起こす。非対角 VCC の起源を明らかにするために VCD 解析を行った。Fig. 4 (a)-(c)に重なり密度、ポテンシャル導関数、非対角 VCD をそれぞれ示す。重なり密度は 2 分子に非対称的に広がった π 軌道由来の分布を持つ。一方、ポテンシャル導関数はスタッキング部分において 2 分子間で非対称的に分布している。このようなポテンシャル導関数の分布は、振動緩和に伴う対称性の破れが非対称的な分子間振動によるものであることを示す。大きい非対角 VCC の値はこれらの強いカップリングによる。従って、 π 軌道由来の 2 分子に広がった非対称的な重なり密度と、非対称的な分子間振動との強い振電相互作用が、分子間 CT 状態を生成する自発的対称性の破れの起源であることが明らかになった。

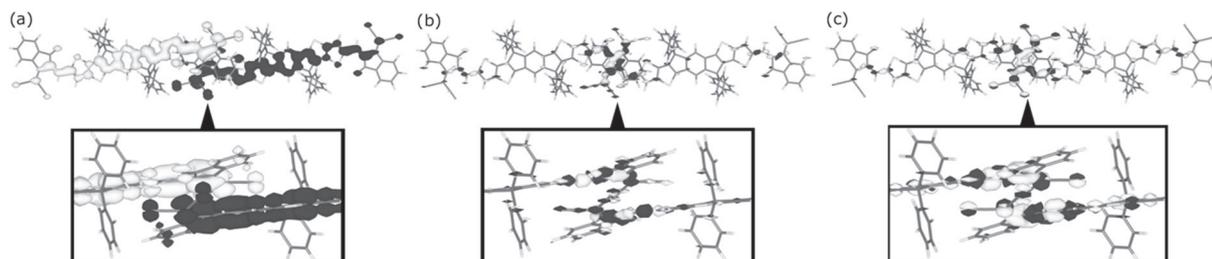


Fig. 4 (a) VCD analysis of ITIC. The white region is positive, whereas the blue region is negative.

【文献】 1) P. Peumans et al., *J. Appl. Phys.* 2003, 93, 3693. 2) K. Kawashima et al., *Nat. Commun.* 2015, 6, 1. 3) W. Zhao et al., *Adv. Mater.* 2016, 28, 4734. 4) L. Zhu et al., *J. Phys. Chem. C* 2018, 122, 22309. 5) T. Sato et al., *J. Phys. Chem. A* 2008, 112, 758. 6) G. Han et al., *J. Mater. Chem. C* 2017, 5, 4852.

2. 著書

- (1) W. Ota, K. Takahashi, K. Higashiguchi, K. Matsuda, and T. Sato, *J. Mater. Chem. C*, **8**, 8036 (2020).
- (2) W. Ota, Y. Kojima, S. Hosokawa, K. Teramura, T. Tanaka, and T. Sato, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **23**, 2575 (2021).
- (3) S. Kimura, M. Uejima, W. Ota, T. Sato, S. Kusaka, R. Matsuda, H. Nishihara, and T. Kusamoto, *J. Am. Chem. Soc.*, **143**, 4329 (2021).

3. 学会発表

- (1) 矢田 達寛, 春田 直毅, 佐藤 徹
「化学反応における領域同位体効果」
日本化学会第 101 春季年会, オンライン, 2021/03/19
- (2) 春田 直毅, Paulo Filho Marques de Oliveira, Alain Chamayou, 佐藤 徹, 田中一義, Michel Baron
「ジベンゾフェナジンのメカノケミカル合成における特異な反応経路の発現メカニズム」
日本化学会第 101 春季年会, オンライン, 2021/03/21

4. その他

- (1) 佐藤 徹, 大田 航, 平 翔太, 上島 基之, 藤原 絵美子, 坂上 恵
「化合物、発光材料および有機発光素子」
特願 2020-135008, 出願日 2020/08/07
- (2) 佐藤 徹, 坂本 雅典, 春田 直毅, 大田 航, 平岡 拓
「発光材料、有機無機ハイブリッド発光素子およびディスプレイ」
特願 2020-144967, 出願日 2020/08/28

春田 直毅

特定助教

1. 今年度の研究の要約

【化学反応における領域同位体効果】

化学反応速度は同位体置換によって変化することが知られており、こうした同位体効果は合成収率の向上¹⁾や医薬分子の分解抑制²⁾に利用されている。同位体効果は分子のどの領域で同位体置換を行うかに依存し³⁾、特にヒドリド転位反応では転位する水素の重水素化が効果的である。しかし、一般の反応では効果的な置換の仕方は明らかでないため、同位体効果の利用は一部に限られてきた。分子のどの領域で同位体置換を行うと、どれほど反応が促進、抑制されるのか、すなわち領域同位体効果を解明できれば、同位体効果を利用した反応制御が可能になると考えられる。

同位体効果は、主にゼロ点エネルギー (ZPE) と対角補正 (DC) に由来する。しかし、これまで多くの解析は ZPE に着目して議論され、DC は考慮されてこなかった。また、従来の ZPE 評価法は置換前後での振動解析に基づくため、同位体効果の置換位置依存性を明らかにするには、膨大な置換パターンの振動解析が必要であった。本研究の目的は、化学反応において、ZPE と DC の両方を考慮し、同位体置換前に領域同位体効果を理論的に明らかにすることである。

領域同位体効果を議論するため、本研究では核Aに関する核ゼロ点運動エネルギー ζ_A^{00} と原子対角補正 τ_A を新たに導入し、その和として原子同位体効果係数 κ_A を定める。

$$\zeta_A^{00} := \left\langle \chi_0 \left| \frac{\hat{P}_A^2}{2M_A} \right| \chi_0 \right\rangle, \quad \tau_A := \left\langle \varphi \left| \frac{\hat{P}_A^2}{2M_A} \right| \varphi \right\rangle \quad (1)$$

$$\kappa_A := \zeta_A^{00} + \tau_A \quad (2)$$

κ_A は原子Aを同位体置換した際に生じる同位体効果の大きさを表す。ここで、 M_A と \hat{P}_A は核Aの質量と運動量演算子、 χ_0 は置換前の振動基底状態の核波動関数、 φ は電子波動関数である。同位体置換による核運動エネルギー演算子の変化を摂動として、1次摂動論を適用すると、活性化障壁に対する同位体効果 $\Delta E_{a(A)}$ は、次のように原子ごとの寄与 $\Delta E_{a(A)}$ に分割することができる。

$$\Delta E_{a(A)} = \left(\frac{M_A}{M_A'} - 1 \right) [\kappa_A(\mathbf{R}^{\text{TS}}) - \kappa_A(\mathbf{R}^{\text{re}})] \quad (3)$$

ここで、 M_A' は同位体置換後の核Aの質量、 \mathbf{R}^{TS} と \mathbf{R}^{re} はそれぞれ遷移状態と反応物の核配置を表す。式(3)が示すように、 $\Delta E_{a(A)}$ は同位体置換前の κ_A の差と置換前後の核の質量比で決まる。同位体置換前に κ_A を評価しておけば、置換される全ての核について $\Delta E_{a(A)}$ の和をとるだけで、その置換パターンにおける活性化障壁に対する同位体効果を予測することができる。

本手法を Fig. 1 に示す 3 つの有機反応に対して適用し、領域同位体効果を議論する。反応プロファイルは密度汎関数理論によって決定し、計算レベルは B3LYP/6-311G(d,p)とした。反応 1, 2 は、それぞれ重水素化による反応速度の低下、向上が実験で報告されている^{4),5)}。また反応 3⁶⁾は、本研究により、DC の寄与が ZPE の寄与より大きいことが明らかとなったため、これについても合わせて報告する。

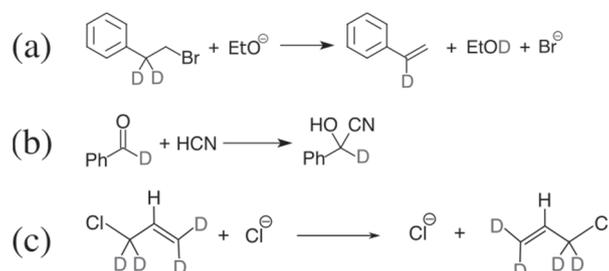


Fig. 1 The target reactions: (a) the elimination of bromine anion from deuterated 2-phenylethyl bromide⁴ (reaction 1), (b) the nucleophilic addition of hydrogen cyanide to deuterated benzaldehyde⁵ (reaction 2), and (c) the substitution reaction of deuterated 3-chloropropene by chloride anion⁶ (reaction 3).

3 つの反応について、各水素を重水素化した際に生じる活性化障壁に対する同位体効果 ΔE_a の原子ごとの寄与 $\Delta E_{a(A)}$ を Fig. 2 に示す。反応 1 で、実験で報告されている置換位置⁴⁾で重水素化すると、反応速度の低下が再現される ($\Delta E_a = 20.5$ meV)。また、反応分子間を移動する水素で特に大きな寄与が見られ ($\Delta E_{a(A)} = 19.1$ meV)、反応に直接関与する水素の重水素化が同位体効果に大きく寄与することが分かった (一次同位体効果)。

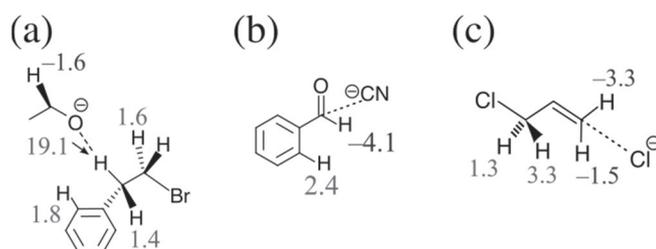


Fig. 2. The atomic contributions to the isotope effect on the activation barrier, $\Delta E_{a(A)}$, in meV, on the assumption that each hydrogen is replaced by deuterium for the reactions (a) 1, (b) 2 and (c) 3. The values less than 1.0 meV are ignored.

反応 2 で、実験で報告されている置換位置⁵⁾で重水素化したところ、反応速度の向上が再現された ($\Delta E_a = -4.1$ meV)。同位体効果に大きく寄与するのは、求核攻撃を受ける炭素に結合した水素であり、その重水素化により活性化障壁が減少する ($\Delta E_{a(A)} = -4.1$ meV)。このように、反応に直接関与しない水素の重水素化による同位体効果も説明することができた (二次同位体効果)。

反応 3 では、Fig. 2(c)に値を示す 4 つの水素を重水素化した際、活性化障壁の変化は小さな負の値となった ($\Delta E_a = -0.2$ meV)。これは、この置換パターンにおいて、ZPE 成分 ($\Delta E_a^{ZP} = 0.8$ meV) と DC 成分 ($\Delta E_a^{DC} = -1.0$ meV) が競合し、相殺したことが原因である。

最後に、3 つの反応について、活性化障壁の減少に寄与する水素のみ、増加に寄与する水素のみをそれぞれ全て重水素化し、置換前後での振動解析を必要とする従来法によって活性化障壁の変化

を求めた。そうしたところ、本手法で予測された通り、活性化障壁は減少、増加し、最も効果的に反応を促進、抑制する置換パターンを得ることができた。

【文献】

- 1) M. Miyashita *et al.*, *Science* **305**, 495 (2004).
- 2) M. Dean and V. W. Sung, *Drug Des. Dev. Ther.* **12**, 313 (2018).
- 3) K. T. Leffek *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **82**, 6315 (1960).
- 4) W. H. Saunders, Jr. and D. H. Edison, *J. Am. Chem. Soc.* **82**, 138 (1960).
- 5) V. Okano *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **98**, 4201 (1976).
- 6) R. D. Bach and G. J. Wolber, *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 1352 (1985).

2. 総説

(1) 春田 直毅

「飛翔する若手研究者 縮退と擬縮退の包括的理解に向けた新たな理論化学 — 視座を変えれば、明日の分子が姿を現す」
化学と工業 第73巻第9号, 702-703 (2020).

3. 学会発表

(1) 春田 直毅

「縮退と擬縮退の数理に立脚した新たな化学理論の構築」
第301回分子工学コロキウム オンライン 2020/12/21

(2) 矢田 達寛、春田 直毅、佐藤 徹

「化学反応における領域同位体効果」
日本化学会第101春季年会(2021) オンライン 2021/3/19 A18-1am-01

(3) 春田 直毅

「対称性の数理が拓く現代化学の新たな局面」
30年後の夢をかなえる理論化学 オンライン 2021/3/20

(4) 春田 直毅、Paulo Filho Marques de Oliveira、Alain Chamayou、佐藤 徹、田中 一義、Michel Baron

「ジベンゾフェナジンのメカノケミカル合成における特異な反応経路の発現メカニズム」

日本化学会第101春季年会(2021) オンライン 2021/3/21 A21-3am-01

(5) Naoki Haruta

「Group Theoretical Insights into Metal Clusters: Their Potentials and Design Principles」

International Symposium on Molecular Science オンライン 2021/3/22 S07-4am-02

2. リサーチダイレクター

Kimihiko Hirao

Research Director

(1) Summary of the research of the year

Koopmans-Type Theorem in DFT and Excitation Energies in Terms of Orbital Energies

The Hartree-Fock (HF) molecular orbital theory, which describes the behavior of electrons in a molecule based on the independent-particle model, has provided a powerful means for computation in theoretical chemistry. An attractive feature of the HF theory is the interpretation inspired by Koopmans' theorem that negative orbital energies approximate ionization potentials (IP) of atoms and molecules,

$$-\varepsilon_i \approx IP_i \quad (1)$$

where ε_i is the i -th occupied orbital energy and IP_i is the vertical ionization potential. Koopmans' theorem is not only related to ionization processes but also it gives the justification to the concept of "orbitals". However, HF does not include electron correlation effect and in this regard is a semi-quantitative theory. HF orbital energies tend to overestimate IP. If we want a quantitative understanding of chemical phenomena, we need to consider the correlation between electrons. Electron correlation effect can be described with a two-particle density matrix or quantitative wave function theories such as the coupled cluster method, the configuration interaction method, and the many-body perturbation method, which are all two-body theories based on one-electron orbitals. In general, these methods require the use of a large one-electron basis set and are computationally expensive.

For these reasons, an effective one-electron orbital theory that includes electron correlation is highly attractive, and this has led to the popularity of density functional theory (DFT). Currently, the most widely used method of this kind is based on the Kohn-Sham (KS) theory. The KS equation replaces the complicated treatment of the two-electron problem with a functional of the density and an associated one-electron exchange–correlation potential. By doing so, a calculation that is comparable to HF is formally able to incorporate electron correlation.

A characteristic of such a method, and more generally, a one-electron orbital theory, is that the calculated energy spectrum corresponds to experimental photoelectron spectra and excitation spectra. Conversely, these observables provide a tangible basis for conceptual quantities such as HOMO–LUMO gaps and the frontier molecular orbital theory. In the context of solid-state physics, the eigenvalues correspond to IP and the electron affinities (EA) for the infinite system that are relevant to the energy bands and the resulting band gaps. At this point, we note that, while the exact KS

equation satisfies Koopmans' theorem, but an approximate KS method with an approximate functional does not. In other words, the KS solution obtained with conventional GGA and hybrid functionals does not satisfy Koopmans' theorem; they significantly underestimate IP.

Among the many approximate functionals, long-range corrected (LC) functionals provide KS orbital energies that represent reasonable approximations to all principal IP, i.e., instead of just for the HOMO, as formally proven within Koopmans' theorem.

Let us now consider how does LC functionals satisfy the KS Koopmans-type theorem in order to provide the context for the present study. In the LC scheme the electron repulsion operator, $1/r_{12}$, is divided into short-range and long-range components using a standard error function:

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1 - \text{erf}(\mu r_{12})}{r_{12}} + \frac{\text{erf}(\mu r_{12})}{r_{12}} \quad (2)$$

The range separation parameter μ determines the weight of the two ranges as a function of r_{12} , i.e., the interelectronic distance. The DFT exchange functional is included through the first term, and the long-range orbital–orbital exchange interaction is described using the HF exchange integral. In other words, an LC functional is a form of hybrid between DFT and the wavefunction theory. If μ is 0, the LC scheme reduces to a pure DFT; if μ is infinity, its exchange component becomes the wavefunction theory.

Another piece in our argument is that the solution of the KS equation satisfies Janak's theorem, which states that the derivative of the total electronic energy E with respect to the occupation number n_i of an orbital i is identical to the orbital energy ε_i :

$$\frac{\partial E}{\partial n_i} = \varepsilon_i \quad (3)$$

In this regard, the total energy of LC functionals has a nearly ideal behavior, in that it varies almost linearly as a function of the fractional occupation number between the integer electron points. This is not the case of conventional exchange–correlation functionals, which possess the derivative discontinuity that originates mainly from the self-interaction errors in the long-range region. In contrast, LC has no or small self-interaction error due to the inclusion of HF exchange in the long-range, leading to minimal derivative discontinuity and thus the satisfaction of the energy linearity theorem. Combining Janak's theorem and the energy linearity theorem for fractional occupations, one then deduces that the solution of the KS equation obtained with LC functionals would adhere to Koopmans-type theorem.

A new theoretical scheme is proposed for estimating one-electron excitation energies using KS solutions. It is simple and conceptual. One-electron transitions that are dominated by the promotion

from an initially occupied orbital to an unoccupied orbital of molecular systems can be expressed in a two-step process, ionization and electron attachment. The solution of the exact KS equation satisfies Janak's theorem and the energy linearity theorem for fractional occupations; thus, the solution of the exact KS equation satisfies Koopmans-type theorem and the vertical ionization potential and electron affinity can be obtained from KS solutions. One electron excitation energies are expressed as the difference between occupied orbital energies of a neutral molecule and corresponding unoccupied orbital energies of its cation. Two such expressions can be used, with one employing the orbital energies for the neutral and cationic systems, while the other utilizes orbital energies of just the cation. The electron affinity of a molecule is the ionization energy of its anion. If we utilize this identity two expressions coincide and give the same excitation energies. There is no need for integral evaluation or matrix diagonalization.

The proposed theoretical schemes for estimating one-electron excitation energies using KS solutions with LC functionals are applied to the charge transfer (CT) excitations of an aromatic donor (Ar=benzene, toluene, o-xylene, naphthalene, anthracene and various meso substituted anthracenes) and the tetracyanoethylene (TCNE) acceptor. The CT excitation energies can be obtained as differences between occupied orbital energies of a neutral parent and/or unoccupied orbital energies of its cation. Calculated CT excitation energies of Ar-TCNE are compared with those of TD-DFT and Δ SCF methods. Scheme with the optimal range-separation parameter μ reproduces excellent CT excitation energies for all Ar-TCNE systems and gives a good agreement with the best TD-DFT calculations.

The core electron binding energies (CEBE) and core level excitation energies of thymine, adenine, cytosine and uracil are also studied. The CEBE are estimated according to Koopmans-type theorem for density functional theory. The excitation energies from the core to the valence π^* and Rydberg states are calculated as the orbital energy differences between core level orbitals of a neutral parent/cation and unoccupied π^* or Rydberg orbitals of its cation. The model is intuitive and the spectra can easily be assigned. Core excitation energies from oxygen 1s, nitrogen 1s and carbon 1s to π^* and Rydberg states, and the chemical shifts, agree well with previously reported theoretical and experimental data. The straightforward use of KS orbitals in this scheme carries the advantage that it can be applied efficiently to large systems such as biomolecules and nanomaterials.

We have also investigated the applicability of LC functionals to KS Koopmans-type theorem. Specifically, we have examined the performance of optimally tuned LCgau-core functionals (in combination with BOP and PW86-PW91 exchange-correlation functionals) by calculating ionization potential (IP) within the context the Koopmans' prediction. In the LC scheme, the electron repulsion operator, $1/r_{12}$, is divided into short-range and long-range components using a standard error function,

with a range separation parameter μ determining the weight of the two ranges. For each system that we have examined (H_2O , CO , N_2 , HF , H_2CO , C_2H_4 , and five-membered ring compounds cyclo- $\text{C}_4\text{H}_4\text{X}$, with $\text{X} = \text{CH}_2$, NH , O , and S), the value of μ is optimized to minimize the deviation of the negative HOMO energy from experimental IP. Benzene and pyridine are also studied. The accuracy is comparable to that of highly accurate *ab initio* theory. However, Koopmans prediction is less accurate for the inner valence and core levels. Overall, our results support the notion that orbitals in KS-DFT, when obtained with LC functional, incorporate correlation effect in a reasonably manner; they provide an accurate one-electron energy spectrum for valence excitations. This method represents a one-electron orbital theory that is attractive in its simple formulation and effective in its practical application.

Orbitals provide an intuitive language for the complex reality of molecules rather than being merely a convenient concept. Notably, through Koopmans' theorem, they provide a simple and natural connection between orbital energies and an experimental observable (the ionization energy). The solutions of KS equation with LC functionals adhere strongly to Koopmans' theorem, and they thus include such a strict physical meaning. In addition, LC functionals provides an accurate one-electron energy spectrum through the inclusion of correlation effect as well as adhering to Koopmans' theorem. It represents an attractive and effective one-electron orbital theory, which can also be considered a good approximation to the correlated orbital theory.

(2) Original papers

1. Koopmans-Type Theorem in Kohn–Sham Theory with Optimally Tuned Long-Range Corrected (LC) Functionals
Kimihiro Hirao, Han-Seok Bae, Jong-Won Song, and Bun Chan, *J. Phys. Chem. A*, **2021**, *125*, 16, 3489–3502.
2. Attenuation of redox switching and rectification in Azulenequinones/ Hydroquinones after B and N doping: a first-principles investigation
El-Abed Haidar, Sherif Abdulkader Tawfik, Catherine Stampfl, Kimihiro Hirao, Kazunari Yoshizawa, Takahito Nakajima, Kamal A. Soliman, and Ahmed M. El-Nahas
Advanced Theory and Simulations, **2021** *4*, 2000203 (1-18).
3. Rapid prediction of ultra-visible spectra from conventional (non-time-dependent) density functional theory calculations,
Bun Chan and Kimihiro Hirao, *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*, 7882.
4. Charge-transfer Excitation Energies Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals
Kimihiro Hirao, Bun Chan, Jong-Won Song, and Han-Seok Bae, *J. Phys. Chem. A*, **2020** *124*, 8079-8087.
5. Core level Excitation Energies of Nucleic Acid Bases Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals
Kimihiro Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan, Jong-Won Son, and Han-Seok Bae
J. Phys. Chem. A, **2020** *124*, 10482–10494.
6. A Computational Study on the Kinetics of Pyrolysis of Isopropyl Propionate as a Biodiesel Model: DFT and Ab Initio Investigation
Abolfazl Shiroudi; Kimihiro Hirao; Kazunari Yoshizawa; Mohammednoor Altarawneh; Mohamed Abdel-Rahman; Asmaa El-Meligy; Ahmed El-Nahas
Fuel, **2020** *281* 118798.
7. NWChem: Past, Present, and Future
Edoardo Apra, Eric Bylaska, Wibe De Jong, Kimihiro Hirao, et al.
J. Chem. Phys. **2020** *152*, 184102.

3. FIFC リサーチフェロー

Shigeru Nagase**FIFC Research Fellow****1. Summary of the Research of the Year****(a) Theoretical Investigation of the Key Roles of Enantiomer and Enthalpy in the Formation of Fullerenes**

Fullerenes are important zero-dimensional materials in photoelectric, antioxidant, pharmaceutical, and single-molecular-magnet fields. However, the formation mechanism of fullerenes has been elusive since the discovery of C_{60} in 1985, because of the missing key links and low yield. Therefore, experimental and theoretical researches are required to explore fundamental questions of the fullerene-formation mechanism. By considering the temperature effects, we investigated two representative fullerene-formation mechanisms, bottom-up and top-down models, for C_{2n} ($50 \leq 2n \leq 70$) containing optical enantiomers, heptagons, and tetragons using density functional theory calculations and transition state theory. The thermodynamically and kinetically preferred pathway for the formation of C_{2n} ($50 \leq 2n \leq 70$) was explained by the bottom-up model instead of the top-down model. Furthermore, it is remarkable that the enantiomer and enthalpy play key roles in forming fullerenes C_{2n} ($50 \leq 2n \leq 70$), because these have been neglected in the previous research. The key roles in the formation of fullerenes will be helpful for the synthesis and applications of fullerenes in materials science, photovoltaics, electronics, and biomedicine.

(b) Potential Molecular Semiconductor Devices: Cyclo- C_n with High Stability and Aromaticity

The thermodynamic stabilities of cyclo- C_n ($4 \leq n \leq 34$) were explored with density functional theory, and the results revealed that cyclo- C_n ($10 \leq n \leq 34$, $n = 4N + 2$) is thermodynamically stable, as indicated by the well-known Huckel $4N+2$ rule. Cyclo- C_{10} and cyclo- C_{14} possess higher thermodynamic, kinetic, optical, and dynamic stabilities under 500 K than the recently synthesized cyclo- C_{18} . It is predicted that cyclo- C_{10} and cyclo- C_{14} can be prepared in future experiments. Equal double bonds exist in cyclo- C_{10} , while alternating abnormal single bonds and triple bonds exist in cyclo- C_{14} and cyclo- C_{18} . These geometrical aspects are also confirmed by Mayer bond orders between two adjacent carbon atoms. Cyclo- C_{18} , cyclo- C_{10} , and cyclo- C_{14} have large aromaticities because these have two perpendicular delocalized π orbitals, including out-of plane and in-plane π orbitals. The number of π electrons on the out-of-plane and in-plane π orbitals satisfies the Huckel $4N+2$ rule. Furthermore, the large aromaticities of cyclo- C_{10} and cyclo- C_{14} explained that cyclo- C_{10} and cyclo- C_{14} are more stable than cyclo- C_{18} . In addition, cyclo- C_{10} and cyclo- C_{14} show semiconductor characteristics similar to cyclo- C_{18} , and will be respected as a new generation of molecular semiconductor devices. The UV-vis-NIR spectra of cyclo- C_n ($n = 10, 14$, and 18) were simulated as a

reference for further experimental study. In the light of the fact that the recent successful synthesis and characterization of cyclo-C₁₈ has encouraged many researchers to study cyclo-C_n homologues, we suggest that cyclo-C₁₀ and cyclo-C₁₄ are also interesting candidates for zero-dimensional allotropes of carbon atoms and molecular semiconductor devices.

(c) New Horizons in Chemical Functionalization of Endohedral Metallofullerenes

Endohedral metallofullerenes are hybrid molecules of spherical nanocarbons, known as fullerenes, with atomic metal(s) or metal-containing clusters encaged inside. Unique molecular structures of this kind have fascinated many researchers in many fields, including chemistry, physical science. The chemical reactivities of endohedral metallofullerenes differ from those of empty fullerenes, because of their different carbon-cage geometries and their different redox properties. Comparison of the chemical reactivities of endohedral metallofullerenes with those of empty fullerenes is expected to provide deeper understanding of how endohedral metal-atom doping affects the chemical reactivity of fullerenes. However, the difficulty of pursuing this subject experimentally is that most carbon cages of endohedral metallofullerenes are not available in their pristine forms. This review has highlighted the unique chemical reactivity of endohedral metallofullerenes, which differs from that of empty fullerenes. The structural diversity of endohedral metallofullerenes has provided extreme variation in chemical reactivities. The resulting derivatives exhibited interesting properties derived from the combination of the cage structures, encaged metal species, and the functional groups bonded to the carbon cages. For instance, recent results have demonstrated clearly that the site of addition in the carbon cage is governed by metal-atom doping. This is also the case for the second addition. Particularly, the location of the internal metal atoms strongly affects the site-selectivity of EMFs. Selective bisfunctionalization of endohedral metallofullerenes is expected to be valuable for the construction of functional materials based on endohedral metallofullerenes. In this respect, further efforts are anticipated to address selective trifunctionalization using the triangular structures of trimetallic nitride clusters. Cage opening of endohedral metallofullerenes to modulate the internal, untouchable metal species has remained challenging. However, recent studies of this aspect have led to remarkable progress in the first step of the molecular surgery of endohedral metallofullerenes. The discovery of air-stable endohedral metallofullerenes-based fullereryl radicals featuring confinement of an unpaired electron on the internal orbital paves the way to endohedral metallofullerenes-based single molecular magnets bearing giant exchange interactions. In addition, exploring the use of the π -Lewis acidity of carbon cages of endohedral metallofullerenes by combining with heterocyclic carbenes provides novel zwitterionic derivatives of endohedral metallofullerenes. Studies of endohedral metallofullerenes will continue to gain importance in achieving the construction of multifunctional molecules for applications.

(d) Covalent Interactions Depend on the Distances between Metals and fullerenes for Thermodynamically Stable M@C₇₈ (M = La, Ce and Sm)

Thermodynamically stable La@C_{2v}(24 107)-C₇₈, La@D_{3h}(24 109)-C₇₈, La@C₁(22 595)-C₇₈,

Ce@D_{3h}(24 109)-C₇₈, Sm@C_{2v}(24 107)-C₇₈, and Sm@D_{3h}(24 109)-C₇₈ are studied using density functional theory and statistical thermodynamic analysis. C₁(22 595)-C₇₈, violating the isolated pentagon rule, is a second novel isomer stabilized by encaging a La atom. In addition, three- and two-electron transfers occur in M@C₇₈ (M = La and Ce) and Sm@C₇₈. For Sm@C₇₈, two electrons transferred to the surface of C_{2v}(24 107)-C₇₈ are unpaired. Therefore, the surface displays diradical character. The spin states of the two electrons transferred from Sm to D_{3h}(24 109)-C₇₈ are different from those on C_{2v}(24 107)-C₇₈, leading to different spin ground states. Furthermore, the natural bond orders and bond critical point analyses on thermodynamically stable M@C₇₈ (M = La, Ce, and Sm) reveal that the distance between the metal and carbon atom plays an important role in the covalent interaction between the inner metal atoms and C₇₈. Because of the strong ionic interaction, the studies on the magnetic character of M@C₇₈ (M = La, Ce, and Sm) show that Sm@C₇₈ is a promising candidate for single-molecule magnets with high isotropic susceptibility. The infrared spectra are simulated to facilitate further experimental study on the stable M@C₇₈ (M = La, Ce, and Sm). We hope that this work will provide a good guidance and assistance for the further study of mono-metallofullerenes and coordination compounds in both experiment and theory.

(e) Lithium-Bromine Exchange Reaction on C₆₀: First Theoretical Proposal of a Stable Singlet Fullerene Carbene without heteroatoms

All the stable singlet carbenes consist of a central carbon atom, and electron donor or withdrawing substituents containing heteroatoms such as N, P, O, and S. The carbenes were generated by the lithium–bromine exchange reaction to functionalize C₆₀. The reaction mechanisms were studied using density functional theory. The interaction between LiBr and the central carbon atom was characterized as a mainly ionic interaction, combined with the coordinate interaction and hyperconjugation. A novel stable singlet fullerene carbene without the heteroatom was primitively generated via lithium–bromine exchange and carbene addition reactions; it exhibited a remarkable stability with large singlet–triplet energy gap and HOMTO–LUMO energy gap. This computational survey indicates that fullerene carbene will be a potential ligand in the coordinated compounds, and is useful for further functionalization and applications of fullerenes. Furthermore, theoretical results show that the lithium–bromine exchange reaction is powerful and feasible to functionalize the double bonds in some aliphatic and aromatic olefins, including anthracene, benzene, propylene, ethylene, 1-butene, propanal, and 3-pentanone. Based on the carbene reaction mechanisms and nature of corresponding bonds in their products, two indexes, bond length and the hybridization state of atoms, are suggested to distinguish the carbene addition and insertion to the double bond.

(f) 1,2-Insertion Reactions of Alkynes into Ge-C bonds of a Arylbromogermylene

Transition metals such as palladium and rhodium exhibit ligand-dependent oxidation states, which enable the facile catalytic transformation of small inert molecules such as CO or C₂H₄. Representative reactions include insertion reactions of an organic π -bond into M–X bonds (M = transition metal; X = halogen or organic group). Recent developments in the main-group-element chemistry have allowed

using low-coordinated heavier group 14 elements instead of transition-metal complexes to activate unsaturated small molecules. Herein, we report the reactions of alkynes with a stable bromogermylene, $\text{Tbb}(\text{Br})\text{Ge}$: (Tbb = 2,6-bis[CH(SiMe₃)₂]-4-t-butylphenyl), generated from the corresponding dibromodigermene in solution. Monomeric bromovinylgermylenes were synthesized via the 1,2-insertion of alkynes into the Ge–C bond of dibromodigermene or bromogermylene, which proceeds in an analogous manner to those of transition-metal complexes including Pd or Rh. The theoretical calculations indicated that bromovinylgermylenes are thermodynamic control products, while germirenes are the kinetic control products in all cases, irrespective of starting from a dibromodigermene (via di([²-bromo]digermylene intermediate) or a bromogermylene. In contrast, silirenes were found to be the most favorable products both kinetically and thermodynamically in the reaction of the dibromodisilene with alkynes.

2. Original Papers

- (1) M. -Y Li, Y. -X. Zhao, Y. -B. Han, K. Yuan, S. Nagase, M. Ehara, and X. Zhao,
"Theoretical Investigation of the Key Roles in the Fullerene-Formation Mechanisms: Enantiomer and Enthalpy"
ACS Appl. Nano. Mater., **3**, 547-554 (2020).
- (2) M. Li, Z. Gao, Y. Han, Y. Zhao, K. Yuan, S. Nagase, M. Ehara, and X. Zhao,
"Potential Molecular Semiconductor Devices: Cyclo-C_n (n = 10 and 14) with Higher Stabilities and Aromaticities than Acknowledged Cyclo-C₁₈"
Phys. Chem. Phys. Chem., **22**, 4823-4831 (2020).
- (3) T. Sugahara, A. E. Ferao, A. R. Ferao, J. -D. Guo, S. Aoyama, K. Igawa, K. Tomooka, T. Sasamori, D. Hashizume, S. Nagase, and N. Tokitoh,
"1,2-Insertion Reactions of Alkynes into Ge-C Bonds of Arylbromogermylene"
Dalton Trans., **49**, 7189-7196 (2020).
- (4) M. -Y. Li, Y. -X. Zhao, Y. -B. Han, K. Yuan, K. Zhang, Y. Chen, M. Ehara, S. Nagase, and X. Zhao,
"Covalent Interactions Depend on the Distances between Metals and Fullerenes for Thermodynamically Stable M@C₇₈ (M = La, Ce, and Sm)"
Inorg. Chem. Front, **7**, 2538-2547 (2020).
- (5) M. Yamada, M. T. H. Liu, S. Nagase, and T. Akasaka,
"New Horizons in Chemical Functionalization of Endohedral Metallofullerenes"
Molecules (Review), **25**, 3620 (14 pages) (2020).
- (6) M. -Y. Li, Y. -X. Zhao, K. Yuan, Y.-B. Han, J. Zhang, Y. Wu, M. Ehara, S. Nagase, and X. Zhang,
"Lithium-Bromine Exchange Reaction on C₆₀: First Theoretical Proposal of Stable Singlet Fullerene Carbene without Heteroatom"
Org. Chem. Front., **8**, 1551-1562 (2021).

田中 一義

FIFC リサーチフェロー

1. 今年度の研究の要約

本報告者の当センターにおける主たる研究課題は「元素ブロックを有する分子、高分子の理論化学」である。また必要に応じて実験的研究も合わせて行っている。この課題における一つのターゲットとして、15 族や 16 族に属する典型重元素の活用によりそれらを π 骨格中に含む新奇な高分子の合成と物性解析がある。この研究の一環として、今年度はチオフェン分子のイオウ原子をテルル原子に変換したテルロフェンを骨格中に含む π 共役高分子の合成と電子状態解析に関する研究を行った¹⁾。この高分子を目的として、チタンシクロペンタジエンを含む有機チタン高分子を前駆体としてその元素変換による方法も確立した。

【はじめに】

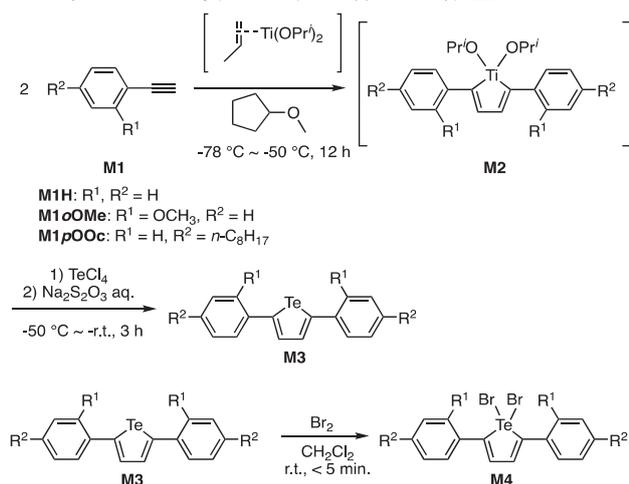
ヘテロ芳香環分子としてよく知られているものにチオフェンがあり、これを含む π 共役高分子は、発光ダイオード(LED)、電界効果トランジスタ(FET)、あるいは太陽電池(PSC)などのエレクトロニクスや光エレクトロニクスデバイスへの潜在的な可能性を持つ有用な電子材料である²⁾。特に PSC では動作光の長波長吸収端を得るために、バンドギャップの狭い π 共役高分子が要求される。チオフェンを含む π 共役高分子は HOMO 準位が高くてこの目的に好都合ではあるが、なおバンドギャップが広いという欠点がある。

この点の改善のために、より重い 16 族元素であるセレン原子から成るセレノフェンを含む π 共役系高分子も開発されている³⁾。さらにテルル原子を含むヘテロ芳香環分子であるテルロフェンを含む π 共役高分子にも興味を持たれているが⁴⁻⁶⁾、その単量体の入手は必ずしも容易でないという難点がある。そこで本研究では、まず有機チタン高分子の合成を行い、ついでチタンをテルルに一挙に変換することによる含テルロフェン π 共役高分子の合成を試みると同時に、その高分子の物性解析を行った。また合わせてその高分子のモデル低分子も合成して構造や物性の比較検討を行った。

【合成法と分子構造解析】

まず Scheme 1 に示す方法で、数通りのベンゼン置換体 M1 を出発物質としてチタンシクロペンタジエン誘導体を骨格内に含む M2 を準備した。次にチタン原子をテルル原子に変換してテルロフェンを含むモデル低分子 M3、およびさらにそのジブromo体 M4 も作成した。M3 誘導体については ¹H-NMR, ¹³C-NMR, high-MS スペクトル解析によって構造を確認した。特に M3*o*OMe の単結晶 X 線解析から、この分子は Fig. 1 に示すように共平面性が高く、ベンゼン環についているメトキシ基の酸素原子はテルル原子に近く (Te(1) ··· O(1) = 2.815(7) Å, Te(1) ··· O(2) = 2.803(5) Å)、その距離はこれらの原子の van der Waals 半径の和 (3.6 Å) よりも顕著に小さいが、一方で Te-O 結合の長さ (2.0 – 2.1 Å) よりもはかなり大きい。さらに M3*o*OMe の ¹²⁵Te-NMR からは 895 ppm にテルルのピークがあり、これは M3H や M3*p*OOC のピーク (748 ppm, 730 ppm) よりも低磁場側にあ

って、Te-O の分子内相互作用の存在を示している。



Scheme 1 Synthesis of tellurophene (M3) and 1,1-dibromotellurophene derivative (M4).

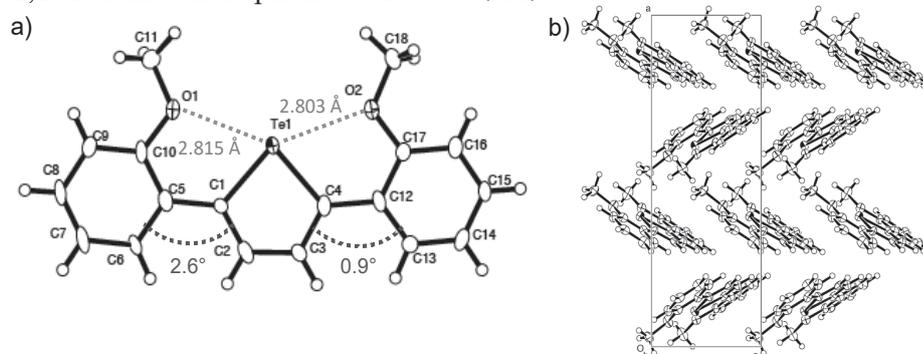


Fig. 1 Results of single-crystal X-ray diffraction analysis of M3oOMe: (a) front view and (b) packing structures with ellipsoids at 50 % probability.

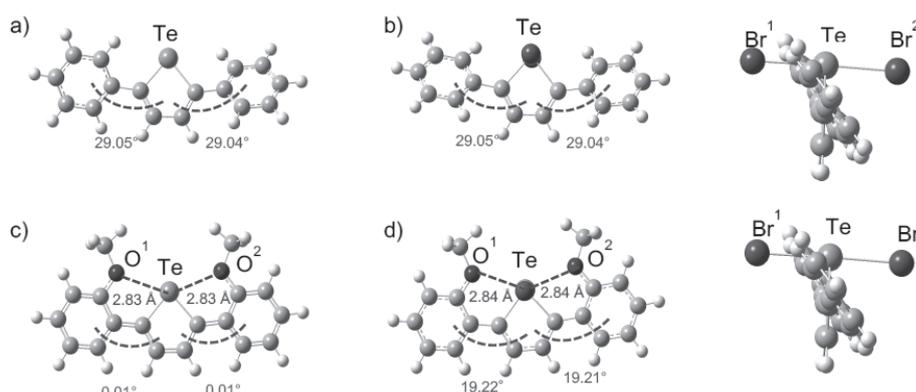


Fig. 2 Optimized structures of (a)M3H, (b)M4H, (c)M3oOMe, and (d) M4oOMe. Note that M4 derivatives, (b) and (d), have two Br atoms attached above and beneath the Te atom.

ク比 4.0:2.0:2.0 に近い。

モデル低分子である M3H では、そのジブromo誘導体が低い HOMO および LUMO 準位を示すことと同時に狭い HOMO-LUMO ギャップを示すことが報告されており⁸⁾、含テルロフェン高分子においても同様の効果が期待できる可能性がある。この考え方に基づいて、Scheme 2 において

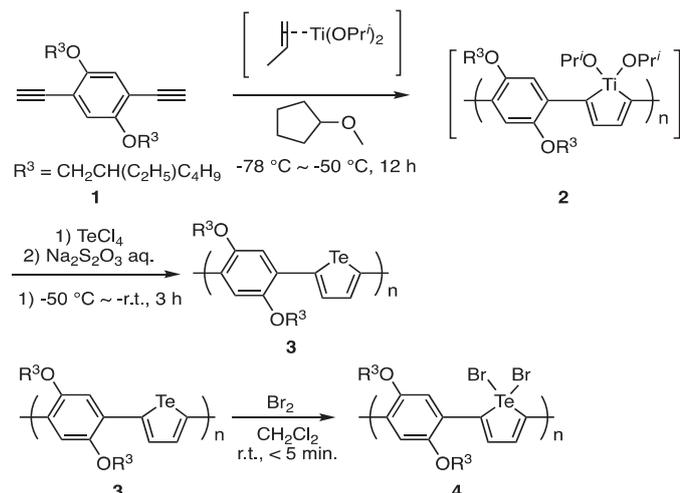
M3oOMe に対する DFT/B3LYP/6-31G** (Te には LANL2DZ 使用) 計算 による構造解析からは、Te-O 間の距離は 2.83 Å となり、Fig. 1 の実験結果に近い。以上のようなモデル低分子の合成とその構造解析を参考にしながら、次のステップでは高分子合成に進んだ。

Scheme 2 に示すように、ベンゼン環の両端にアルキン基を導入した出発物質を用いることによりまずチタンシクロペンタジエン誘導体高分子 2 を得ることにより、このチタン原子をテルル原子に変換してテルロフェンを含む高分子 3 とそのジブromo体 4 を得た。

高分子 3 は 68 % の収率で得られた赤色固体であり、ポリスチレン基準で得られた平均分子量 M_n は 5100、分子量分布 M_w/M_n は 2.4 であった。モデル低分子である M3oOMe のテルロフェン環の 3,4 位の $^1\text{H-NMR}$ ピークは 8.30 ppm に現れたが、高分子 3 では 8.25 ppm に現れた。

さらにメトキシ基のプロトンおよびテルロフェン環のプロトンについての $^1\text{H-NMR}$ ピークは 4.13 ppm, 7.47 ppm, 8.25 ppm に現れた。これらのピーク比は 4.3: 2.0:1.9 であり、期待される構造でのピーク比 4.0:2.0:2.0 に近い。

ジブromo化した高分子 4 も合成した。得られた高分子 4 の平均分子量 M_n は 4800、分子量分布 M_w/M_n は 2.4 であった。高分子 4 におけるテルロフェン環の 3,4 位の $^1\text{H-NMR}$ ピークは 7.64 ppm に現れた。これは高分子 3 の同様のピーク (8.30 ppm) よりも高磁場にシフトしているが、モデル低分子 M3oOMe および M4oOMe におけるそれら (8.30 ppm と 7.63 ppm) との一致は非常によい。



Scheme 2 Synthesis of tellurophene-containing polymers 3 and 4.

OMe 基のある方が大きく出ている (0.83 と 1.44)。このことは $\text{Te}^{\delta+} \cdots \text{O}^{\delta-}$ の静電的相互作用の存在によるテルロフェン環とベンゼン環の間の短い結合距離と高い共平面性の発現を示唆する。

Fig. 3 には高分子 3, 4 およびモデル低分子の UV-Vis の吸収スペクトルを示す。高分子 3 のバンドギャップ値は、UV-Vis の吸収端から 2.1 eV と見積もられた。これは対応するセレンフェンおよびチオフェン含有高分子についての値 (それぞれ 2.3 および 2.4 eV) よりも小さい。同時にまたモデル低分子の M3oOMe の原子置換体の HOMO-LUMO ギャップの実験値 $3.0 (\text{Te}) < 3.1 (\text{Se}) < 3.2 (\text{S})$

Table 1 Wiberg bond indices (WBI) and natural charges (NC)

	Molecule	Bond or atom	Value
WBI	M3oOMe (M4oOMe)	Te-O1, Te-O2	0.039 (0.042)
		Te-Br1	0.530
	M4oOMe	Te-Br2	0.536
		M3H(M4H)	Te
NC	M3oOMe (M4oOMe)	Te	0.83 (1.44)
		O	-0.54 (-0.54)
	M4H (M4oOMe)	Br1	-0.44 (-0.47)
		Br2	-0.48 (-0.47)

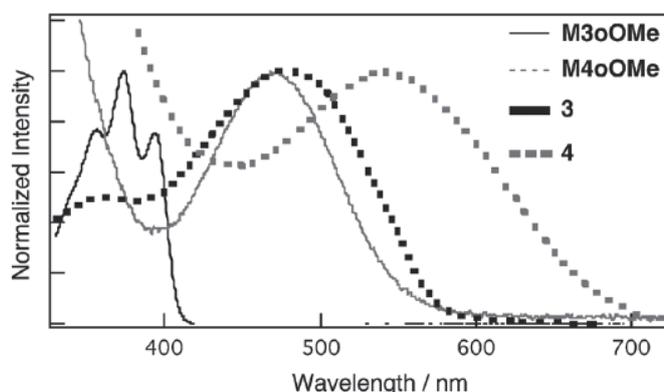


Fig. 3 UV-vis absorption spectra of the polymers 3 and 4 and their model compounds (M3oOMe and M4oOMe) in CHCl_3 solutions.

eV と同じ傾向を示しており、分子設計が妥当であったことを示している。ジブromo化高分子 4 の吸収極大は 541 nm にあり、3 と比較して 66 nm の長波長シフトを起こしている。さらに吸収端の値 (685 nm) から 4 のバンドギャップ値は 1.8 eV であり、3 よりも 0.3 eV 小さくて所望の結果となっている。高分子 3, 4 とそのモデル低分子 (M3oOMe と M4oOMe) の光学的特性を電気化学的特性とともに Table 2 に示した。光学的に得られた含テルロフェン高分子 3 のバンドギャップ E_g は 2.1 eV であり、対

Table 2 Optical and electrochemical properties of M3oOMe, M4oOMe, 3, and 4.

Compounds	λ_{\max} ^a (nm)	λ_{onset} ^a (nm)	$E_{g(\text{opt})}$ ^b (eV)	HOMO ^c (eV)	LUMO (eV)	$E_{g(\text{CV})}$ (eV)
M3oOMe	393, 373, 356	412	3.0	-5.2	-2.2 ^d	–
M4oOMe	468	555	2.2	-5.5	-3.3 ^d	–
3	475	577	2.1	-5.2	-3.2 ^e	2.0 ^f
4	541	685	1.8	-5.6	-3.8 ^e	1.8 ^f

^aMeasured in CHCl₃. ^bEstimated from λ_{onset} . ^c $E(\text{HOMO}) = -(E_{\text{ox}} + 4.80)$ (eV), where E_{ox} is the onset potential of oxidation obsd. from the CV analyses. ^dEstimated from the HOMO levels and optical band gaps. ^e $E(\text{LUMO}) = -(E_{\text{red}} + 4.80)$ (eV), where E_{ox} is the onset potential of oxidation obsd. from the CV analyses. ^fEstimated by the equation: $E_{g(\text{CV})} = (E_{\text{red}} - E_{\text{ox}})$ eV.

応する含チオフェンおよび含セレンフェン高分子の E_g (それぞれ 2.4 および 2.3 eV) よりも小さい。この順はそれぞれのモデル分子⁹⁾とも同傾向である。 λ_{onset} (685 nm) から見積もった 4 のバンドギャップは 1.8 eV であり、3 よりも 0.3 eV 小さい。同じく Table 2 に示した電気化学測定 (サイクリックボルタモグラム) による 3 と 4 のバンドギャップ値も上記の光学的に得られた値とほとんど同じである。このようなジブロム化高分子における HOMO–LUMO ギャップの減少は、Fig. 4 に示すようなジブロモテルロフェンのブタジエン部分の π^* -MO と Te–Br 部分の σ^* -MO の軌道相互作用による結果と考えることができる。

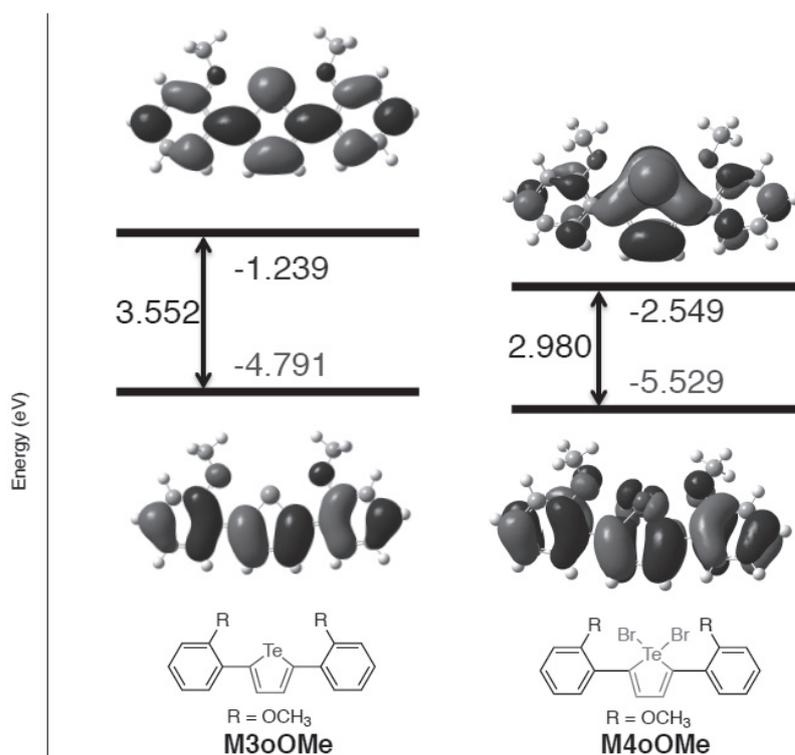


Fig. 4 The HOMO and the LUMO energy levels with their patterns of M3oOMe and M4oOMe. The MO calculations employed are the same with those for Fig. 2.

以上、16 族に属する典型重元素である Te 原子を π 骨格中に含む高分子の合成と物性解析を行い、従来の S 原子や Se 原子を含む高分子に較べて狭いバンドギャップを実現することができた。これは FET や PSC の動作範囲を拡大できる可能性がある。今後の有用なデバイス化に向けて、計算化学と実験解析の両面からの共同作業による解析が一層重要になると考えられる。

【文献】 1) H. Nishiyama, F. Zheng, S. Inagi, H. Fueno, K. Tanaka, and I. Tomita, *Polym. Chem.*, **11**, 4693-4698

(2020). 2) See, e. g., F. Padinger, R. S. Rittberger, and N. S. Sariciftci, *Adv. Funct. Mater.*, **13**, 85-88 (2003). 3) See, e. g., L. Lv, X. Wang, X. Wang, L. Yang, T. Dong, Z. Yang, and H. Huang, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **8**, 34620-34629 (2016). 4) H. Saito, S. Ukai, S. Iwatsuki, T. Itoh, and M. Kubo, *Macromolecules*, **28**, 8363-8367 (1995). 5) A. A. Jahnke, G. W. Howe, and D. S. Sefros, *Angew. Chem., Intern. Ed.*, **49**, 10140-10144 (2010). 6) G. He, L. Kang, W. T. Delgado, O. Shynkaruk, M. J. Ferguson, R. McDonald, and E. Rivard, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 5360-5363 (2013). 7) Gaussian 16, Revision A.03, M. J. Frisch et al., Gaussian Inc., Wallingford, CT (2016). 8) P. -F. Li, E. I. Carrera, and D. D. Seferos, *ChemPhysChem*, **81**, 917-921 (2016). 9) H. Nishiyama, T. Kino, and I. Tomita, *Macromol. Rapid Commun.*, **33**, 545-562 (2012).

2. 論文

(1) Hiroki NISHIYAMA, Feng ZHENG, Shinsuke INAGI, Hiroyuki FUENO, Kazuyoshi TANAKA, and Ikuyoshi TOMITA,

“Tellurophene-containing π -conjugated polymers with unique heteroatom–heteroatom interactions by post-element-transformation of an organotitanium polymer”

Polym. Chem. 11(29), 4693-4698 (2020).

(2) Mitsuru MATSUMOTO, Takuji KITA, and Kazuyoshi TANAKA,

“Hydrogen adsorption/desorption properties of anhydrous metal oxalates; metal = Mg^{2+} and Ca^{2+} ”

Bull. Chem. Soc. Jpn. 93(8), 985-987 (2020).

3. 著書

(1) Kazuyoshi TANAKA and Hiroyuki FUENO,

“Electronic structure of element-block material As_4S_6 with cage shape toward “soft electrider”, in “New polymeric materials based on element-blocks” Yoshiki CHUJO ed., pp. 189-197 (Springer Nature, Singapore, 2019). (註：2019年報未記載)

(2) Kazuyoshi TANAKA,

“Theoretical chemistry for experimental chemists – pragmatics and fundamentals” (Springer Nature, Singapore, 2020).

4. 総説

(1) 田中一義

「吉野 彰氏のノーベル化学賞受賞に思う」
京都大学工学広報, 73(4月), 18-20 (2020).

(2) 田中一義

「分子軌道法」
接着学会誌 56, No. 11, 431-440 (2020).

(3) 田中一義

「量子コンピュータの仕組み」
現代化学, No. 6, 38-44 (2020).

(4) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 1 序論および波動関数の性質の理解」

現代化学, No. 4, 66-69 (2020).

(5) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 2 対象となるシュレーディンガー方程式」

現代化学, No. 5, 70-73 (2020).

(6) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 3 おもな分子軌道法について」

現代化学, No. 6, 70-73 (2020).

(7) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 4 基底関数の選び方と性質」

現代化学, No. 7, 64-67 (2020).

(8) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 5 分子構造の最適化」

現代化学, No. 8, 67-70 (2020).

(9) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 6 分子の電子状態からの情報」

現代化学, No. 9, 54-59 (2020).

(10) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 7 分子のもつスピン状態についての情報」

現代化学, No. 10, 70-74 (2020).

(11) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 8 分子の電子物性とその特徴」

現代化学, No. 11, 66-70 (2020).

(12) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 9 NMR スペクトルについての理論的解析」

現代化学, No. 12, 55-59 (2020).

(13) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 10 光吸収と発光について(1)」

現代化学, No. 1, 59-64 (2021).

(14) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 11 光吸収と発光について(2)」

現代化学, No. 2, 55-59 (2021).

(15) 田中一義

「計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 12 化学反応性の予測に用いる

軌道相互作用」

現代化学, No. 3, 73-77 (2021).

(16) 田中一義

「化学つれづれ草 第三十六回 変わりゆく「学び」のカタチ」

化学 75, No. 4, 36 (2020).

(17) 田中一義

「化学つれづれ草 第三十七回 お隣さんの業界事情」

化学 75, No. 5, 57 (2020).

(18) 田中一義

「化学つれづれ草 第三十八回 新型コロナウイルス感染症と自触媒反応」

化学 75, No. 6, 23 (2020).

(19) 田中一義

「化学つれづれ草 第三十九回 プレゼンに思うこと」

化学 75, No. 7, 39 (2020).

(20) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十回 日本の化学産業界の事情」

化学 75, No. 8, 35 (2020).

(21) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十一回 女性研究者について」

化学 75, No. 9, 29 (2020).

(22) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十二回 応用開発研究にまつわる思い出」

化学 75, No. 10, 47 (2020).

(23) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十三回 CNT 関連のウラ話」

化学 75, No. 11, 37 (2020).

(24) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十四回 研究人生での激ヤバニアミス二題噺」

化学 75, No. 12, 48 (2020).

(25) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十五回 経済学賞」

化学 76, No. 1, 33 (2021).

(26) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十六回 アーカイブというもの」

化学 76, No. 2, 41 (2021).

(27) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十七回 昔の先生がた」

化学 76, No. 3, 47 (2021).

5. その他

田中一義「計算化学によって分かること」

京都グリーンケミカル・ネットワーク令和2年度人材育成事業、京都（公益財団法人京都高度技術研究所からのオンライン講義）2021/2/16（講演番号なし）

（註：これは企業の研究者向けのアウトリーチ活動です）

4. リサーチリーダー

Kazuo Takatsuka**Research Leader****Summary of the research of the year**

The main objective of our research here in FIFC is to develop a basic framework of theoretical chemistry, which we call the theory of nonadiabatic electron wavepacket dynamics, or time-domain quantum chemistry, to explore new fields of theoretical chemistry beyond the framework of the Born-Oppenheimer approximation. Outcomes of such theoretical developments in the academic year of 2020 are as follows.

(1) Dynamical mechanism of water splitting in Photo System II (PSII) in plant.[1]

The present results were partly described in the annual report 2019. Yet, the achievement is very critical in the dynamical mechanism of water splitting in PSII, to my belief, we emphasize the essential content here again.

Theoretical studies on the nonadiabatic electron dynamical mechanism of water splitting in photoexcited states catalyzed by binuclear Mn oxo complex, and tetra Mn oxo complex Mn_4CaO_5 in its electronic ground state in Photo System II (PSII) in plant (with Dr. Kentaro Yamamoto) have been performed. In particular, the latter process is known to initiate the energy-metabolism of almost all the living bodies on the globe, both plants and animals. We propose a 4-node catalytic cycle for water splitting, corresponding to the so-called Kok-cycle, in which 4 subprocesses of charge separation work to create 4 protons and 4 electrons from 2 water molecules into acceptor molecules. We have identified three elementary processes that make the entire catalytic cycle possible, namely, (i) charge separation due to what we call coupled proton and electron-wavepacket transfer (CPEWT), which are followed by (ii) electron and proton reloading to the catalytic center so as to resume the next step of charge separation and (iii) the reduction process of oxidized Mn atoms. A complete cycle of these processes ends up with generation of an oxygen molecule and has the catalytic system reset to the initial stage. We have also highlighted how nature makes very nice use of the strange looking molecular structure of Mn_4CaO_5 , involving a reaction field in it.

Much insight into the basic mechanisms of photoexcited and collision-induced ground-state water splitting has been accumulated in our nonadiabatic electron wavepacket dynamics studies based on a building-block approach reaching up to systems of binuclear Mn oxo complexes. We here extend the study to a ground-state water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex Mn_4CaO_5 , or $\text{Mn}_3\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{OH})_4\text{-OH-Mn(4)(H}_2\text{O)}_2$, where $\text{Mn}_3\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{OH})_4$ is fixed to a skewed cubic structure by μ -hydroxo bridges (not simply μ -oxo) and is tied to the terminal group $\text{Mn(4)(H}_2\text{O)}_2$, which stay outside of the cubane-like structure by $\text{Mn}_3\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{OH})_4$. We show

using the method of real-time nonadiabatic electron wavepacket dynamics that four steps of charge separation steps always take place only through the terminal group $\text{Mn}(4)(\text{H}_2\text{O})_2$ alone, thereby producing 4 electrons and 4 protons which are transported to the acceptors. Each of the three charge separation steps is followed by a reloading process from the skewed cubic structure, by which electrons and protons are refilled to the vacant terminal group so that the next charge separation dynamics can resume. After the fourth charge separation an oxygen molecule is generated. It is emphasized that the mechanisms of O_2 generation should depend on the multiple channels of reloading. [1]

The above analysis is one of the outcomes of our long-standing studies on excited-state water splitting, and the very basic mechanism of coupled proton and electron-wavepacket transfer (CPEWT) typically found in excited-state proton transfer, some of which are summarized in Paper[1]. In particular, the analysis of water splitting in PSII and proposed mechanism could be made only after we have shown quantum mechanically that charge-separation dynamics is possible even in the electronic ground-state through conical intersections. This mechanism is referred to as chemi-charge-separation.[1]

(ii) Energy Natural Orbitals [2]

I and Dr. Yasuki Arasaki have proposed and numerically demonstrated that highly correlated electronic wavefunctions such as those of configuration interaction (CI), the cluster expansion, and so on and electron wavepackets superposed thereof can be analyzed in terms of one-electron functions, which we call energy natural orbitals (ENO). As the name suggests, ENO is a member of the broad family of natural orbitals defined by P.-O. Löwdin [Phys. Rev. **97**, 1474 (1955)]. One of the major characteristics is that the (orbital) energy of all the ENOs is summed up exactly equal to the total electronic energy of a wavefunction under study. Another outstanding feature is that the population of each ENO varies as chemical reaction proceeds, keeping the total population constant though. The study of ENO has been driven by the need of new methods to analyze extremely complicated nonadiabatic electron wavepackets such as those embedded in highly quasi-degenerate excited-state manifolds. We have presented the theoretical background of ENO and their basic properties along with a case study about the mechanism of nonadiabatic electron transfer.

The year of 2021 is **the 70th anniversary of the first paper of the frontier orbital theory** [K. Fukui, T. Yonezawa, and H. Shingu, J. Chem. Phys. **20**, 722 (1952)], the Nobel prize being awarded to this work and related in 1981. The frontier orbital theory stands on the molecular orbital (MO) theory and inter-molecular perturbation theory thereof. After 70 years from the birth of the frontier orbital theory though, electronic wavefunctions treated in current quantum chemistry are often highly correlated and consist of extensive scales of electronic configurations to be more accurate and to cope with far more complicated reactions than concerted reactions. Under such circumstances, the MO approximation itself readily loses its validity, let alone the utter dominance

of the HOMO-LUMO interaction. The frontier orbital theory is among those that seemingly lose their theoretical ground. The Energy Natural Orbitals state above can discuss chemical sciences on the basis of orbital concept taken out of very complicated and accurate electronic wavefunctions. Since the topological (symmetry) properties of a total wavefunction are represented by the relative phases of ENOs along with the continuity and crossing (avoided and conical intersection) among them, and only a small number of ENOs often dominate and characterize chemical reactions, ENO is conceived to best analyze chemical reactions not only the elementary reactions like the HOMO-LUMO allowed reactions, Woodward-Hoffman forbidden reactions, and much more. In particular, in the studies of nonadiabatic reactions, we have established the notion of "internal conical intersection" among ENOs that leads to Jahn-Teller effect, pseudo-Jahn-Teller effect, and so on. We dare to explain the primary origin of elementary conical intersections and multidimensional avoided crossing in chemical reactions with use of the notion of orbital crossing between those of HOMO-HOMO and LUMO-LUMO interactions, and so on. The relevant paper is now in review for publication.

(iii) **Electron dynamics in molecular elementary processes and chemical reactions [3]**

Only this year I could published an Award Account in Bulletin of Chemical Society of Japan, after a long-time struggling with active publication of the original papers since the year of Award 2014.

This account places a particular emphasis on a recent progress of the theory and its applications of nonadiabatic electron dynamics in chemical science. After a brief description about the fundamental relevance of the breakdown of the Born-Oppenheimer approximation, we show examples of our extensive and systematic application of electron dynamics to highlight the significance and necessity of beyond-Born-Oppenheimer chemistry. The chemical subjects presented herewith cover (1) characteristic phenomena arising from nonadiabatic dynamics, (2) flow of electrons during chemical reactions and ionization dynamics, (3) symmetry breaking and its possible control in chemical reactions emerging from multi-dimensional nonadiabatic interactions, a special example of which can cause possible breakdown of molecular mirror symmetry, (4) physical mechanism of charge separation in organic compounds and biomolecules, (5) essential roles of charge separation and elementary chemical reaction mechanisms in catalytic cycles of Mn oxo complexes up to Mn_4CaO_5 in water splitting dynamics ($2\text{H}_2\text{O} \rightarrow 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- + \text{O}_2$), (6) chemical bonds and huge electronic state fluctuation in densely quasi-degenerate electronic manifolds, which make chemistry without the notion of potential energy surfaces, and so on. All these materials and issues have been chosen because they are not directly resolved by the method of energetics based on time-independent quantum chemistry. We thus have been exploring, developing, and cultivating the new chemical realm beyond the Born-Oppenheimer paradigm. This account is closed with a scope about the theory of simultaneous electronic and nuclear quantum wavepacket dynamics.

I think this account serves as a review article of very recent progress in nonadiabatic reactions and chemical elementary process. Indeed, the account includes many of our works carried out in FIFC since I move from the University of Tokyo.

Last but not least I thank all my former postdocs, graduate students, and FIFC staff, who have made the account published.

(iv) **On the molecular electronic flux: Roles of nonadiabaticity and violation of conservation [4]**

We have published a series of electron flux induced by nonadiabatic interaction in chemical events like chemical reactions. [“Electronic and nuclear flux analysis on nonadiabatic electron transfer reaction: A view from single-configuration adiabatic Born-Oppenheimer representation” Rei Matsuzaki and Kazuo Takatsuka, *J. Comput. Chem. (Morokuma memorial issue)*, **40**, 148-163 (2019). “Electronic and nuclear fluxes induced by quantum interference in the adiabatic and nonadiabatic dynamics in the Born-Huang representation.” Rei Matsuzaki and Kazuo Takatsuka, *J. Chem. Phys.* **150**, 014103 (2019). (22 pages) and much more.]

Here is the latest one worked out with Dr. Kota Hanasaki. Analysis of electron flux within and in between molecules is crucial in the study of real-time dynamics of molecular electron wavepacket evolution such as those in attosecond laser chemistry and ultrafast chemical reaction dynamics. We here address two mutually correlated issues on the conservation law of molecular electronic flux, which serves as a key consistency condition for electron dynamics. The first one is about a close relation between ‘weak’ nonadiabaticity and the electron dynamics in low-energy chemical reactions. We show that the electronic flux in adiabatic reactions can be consistently reproduced by taking account of nonadiabaticity. Such nonadiabaticity is usually weak in the sense it does not have a major effect on nuclear dynamics whereas it plays an important role in electronic dynamics. Our discussion is based on a nonadiabatic extension of the electronic wavefunction similar in idea to the complete adiabatic formalism developed by Nafie [L. A. Nafie, *J. Chem. Phys.* **79**, 4950 (1983)], which has also recently been reformulated by Patchkovskii [S. Patchkovskii, *J. Chem. Phys.* **137**, 084109 (2012)]. We give a straightforward proof of the theoretical assertion presented by Nafie using a time-dependent mixed quantum-classical framework and a standard perturbation expansion. Explicitly taking account of the flux conservation, we show that the nonadiabatically induced flux realizes the adiabatic time evolution of the electronic density. In other words, the divergence of the nonadiabatic flux equals the time derivative of the electronic density along an adiabatic time evolution of the target molecule. The second issue is about the accurate computationability of the flux. The calculation of flux needs accurate representation of (relative) quantum phase, in addition to the amplitude factor, of a total wavefunction and demands special attention for practical calculations. This paper is the first one to approach this issue directly and show how the difficulties arise explicitly. In doing so, we reveal that a number of widely accepted truncation techniques for static property calculations are potential sources of numerical flux non-conservation. We also theoretically propose alternative strategies to realize better flux conservation. Our analyses are then numerically validated through *ab initio* calculations. We then numerically calculate fluxes in *ab initio* chemical dynamics using the standard real-base expansion scheme and validate our analysis.

We also discuss favorable choices of basis set and configuration interaction expansion schemes that better conserves flux.

We believe that this kind of fundamental works will end up with forming a bold pillar of the framework of theoretical chemistry, far beyond the short-sighted appreciation.

2. Original papers

[1] Charge separation and successive reconfigurations of electrons and protons driving water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex. On the mechanism of water splitting in PSII.

Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 7912-7934 (2020) DOI: 10.1039/d0cp00443j

[2] Energy Natural Orbitals

Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki, *J. Chem. Phys.* **154**, 094103 (2021). (14 pages)

DOI: 10.1063/5.0034810

[3] Electron dynamics in molecular elementary processes and chemical reactions

Kazuo Takatsuka

Bull. Chem. Soc. Jpn. **94**, 1421–1477 (2021) (open)

doi:10.1246/bcsj.20200388

[4] On the molecular electronic flux: Roles of nonadiabaticity and violation of conservation.

Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka

J. Chem. Phys. **154**, 164112. (2021) . (18 pages)

10.1063/5.0049821

3. Presentation at academic conferences

[国際研究集会]

Pandemic のため, なし

[国内研究集会]

Pandemic のため, なし

5. 研究員

Kazuo Kitaura

Research Fellow

1. List of books

1) Ikuno Fujino, Dmitri G. Fedorov, Kazuo Kitaura, "Application of the Fragment Molecular Orbital Method to Organic Charge Transport Materials in Xerography: A Feasible Study and a Charge Mobility Analysis" in "Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method: Enhanced Performance and Applicability", Youji Mochizuki, Shigenori Tanaka, Kazori Fukuzawa Eds. Springer Nature Singapore Pte Ltd, 2021, pp. 567-588.

Tatsuhisa Kato

Title (part-time researcher)

1. Summary of the research of the year

Publication of monograph for giving the concept of "Vibronic Coupling Density" to students

The vibronic coupling density (VCD) and the vibronic coupling constant (VCC) analyses start from the ab initio molecular Hamiltonian and systematic, rational ways to understand chemical phenomena, giving the quantitative evaluation of the force applied under the chemical deformation process. On the other hand, many plausible explanations have been proposed to clarify chemical phenomena and visualize molecular structures. The conventional descriptions have provided students with considerable familiarity with the electronic state's molecular structure. In the newly published monograph, as shown in **Figure 1**, we would like to offer the guidelines to integrate the traditional "hand-waving" approach of chemistry with rational and general VCD and VCC alternatives. Thus the study of chemistry by molecular orbital theory is brought into the domain of substantial science through the visualization by VCD and the evaluation by VCC, where qualitative concepts can be rendered quantitatively and tested rigorously against the quantum theory.

Starting from the valence bond (VB) picture and valence shell electron pair repulsion principle (VSEPR), several well-known issues are discussed, such as the bond elongation of ethylene under the anionization bent structure of water. VB picture is the historic landmark for modern chemistry, which is based on the valence bond. It invests each atom with the valence according to the number of the electron, which is the basic concept for chemical bonds of the molecule; however, it has the fatal fault in which hybridization of the bonding orbital is determined after empirically knowing the molecular structure. VSEPR is more applicable to elucidate various molecular structures but is still an empirical picture. Both have no proper way to explain molecular structure in the excited state.

On the other hand, molecular orbital (MO) theory is the approach based on delocalized electrons. It starts from the molecular Hamiltonian and is a more systematic and rational way to understand molecular structures. Many textbooks have given explanations for the molecular deformation, for example, the nonplanar structure of NH_3 , the tautomerism between benzenoid and quinoid forms of organic molecule, the triangle structure of C_3H_3 , and the chemical process of Diels–Alder reactions. We designed the monograph to offer students the newly organized chemical concept based on the VCD and VCC to explain several well-known issues.

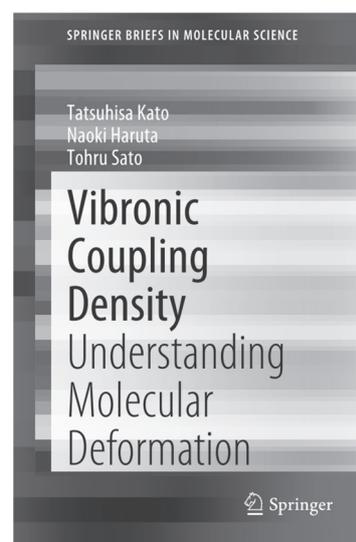
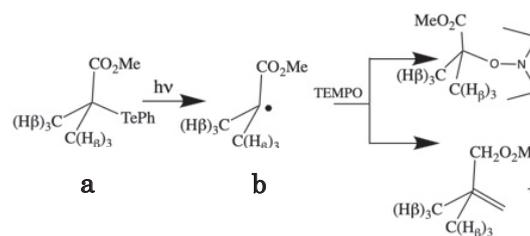


Figure 1. Front cover of the monograph.

Spectroscopic evidence of the radical species terminating polymer reaction

We examined the effect of viscosity on the radical termination reaction between a transient radical and a persistent radical undergoing a coupling reaction or hydrogen abstraction. We selected the reaction between the polymer-end and its mimetic radicals shown in **Scheme 1**. Because of this reaction's importance in nitroxide-mediated radical polymerization and the functionalization of polymers. Transient, carbon-centered radicals were generated from organotellurium compounds by photoirradiation. The organotellurium compound was used as precursors of radicals, which performed the clean generation of radical species. The generation of radical **b** was



Scheme 1.

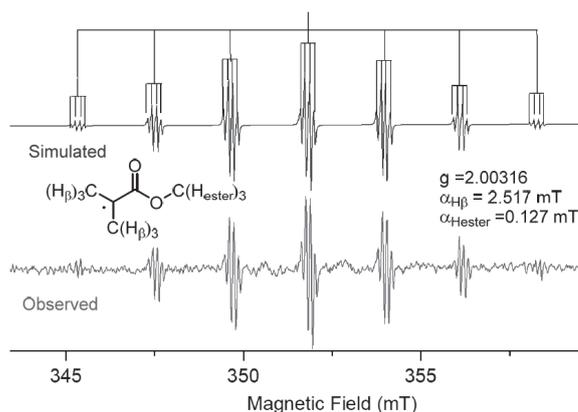


Figure 2. Observed (red) and simulated (blue) ESR spectra of 2a. The signal resonated at $g = 2.00316$ with the hyperfine coupling constant $A_{H\beta}$ and A_{H_T} of 2.157 mT and 0.127 mT, respectively.

unambiguously determined by ESR spectroscopy measured for a solution of **a** in C_6D_6 under continuous irradiation of a 500W Hg lamp through a 390 nm cutoff filter. Clear ESR signals of **b** were observed at $g = 2.00316$ as quartets of heptets with hyperfine coupling constants of 2.517 and 0.127mT with hydrogens at β (H_β) to the radical center and the ester group (Hester), as respectively shown in **Figure 2**. The result was identical to the spectra obtained for the same radical generated by the thermolysis or UV-photolysis.

Measurements assigning the electronic spin resonance parameters of NO@C₆₀

Using pulsed electron paramagnetic resonance techniques, the low-temperature magnetic properties of the NO radical being confined in two different modified open C_{60} -derived cages are determined, as shown in **Figure 3**. It is found that the smallest principal g value, being assigned to the axis of the radical, deviates strongly from the free-electron value. This behavior results from partial compensation of the spin and orbital contributions to the value. The measured value in the range of 0.7 yields information about the deviation of the locking potential for the engaged NO from axial symmetry. The estimated 17 meV asymmetry is quite tiny compared to the situation found for the same radical in polycrystalline or amorphous matrices ranging from 300 to 500 meV. The analysis of the temperature dependence of spin relaxation times resulted in an activation

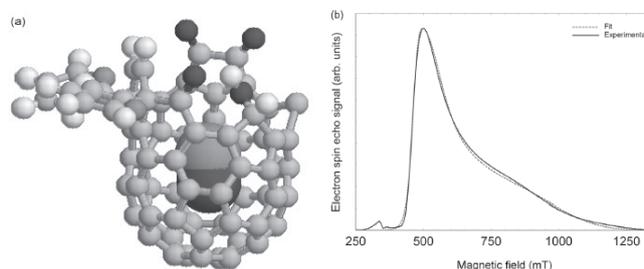


Figure 3. (a) Ball-and-stick representation of the DFT-optimized structure of NO@ C_{60} -OH with N "up". (b) Field scanning electron spin echo spectra of NO@ C_{60} -OH obtained by X-band (9.7 GHz,) spectrometer at 5 K (2.5mM/CS₂), solid blue line, with best fit of simulation, dotted red line.

temperature of about 3 K, assigned to the temperature-activated motion of the NO within the modified open C₆₀-derived cages with coupled rotational and translational degrees of freedom in a complicated three-dimensional locking potential.

2. Original papers

- (1) **K-P Dinse, T. Kato, S. Hasegawa, Y. Hashikawa, Y. Murata, and R. Bittl**, "EPR study of NO radicals encased in modified open C₆₀ fullerenes ", *Magn. Reson.* **1**, pp. 197-207(2020).
- (2) **X. Li, T. Kato, Y. Nakamura, and S. Yamago**, "The Effect of Viscosity on the Coupling and Hydrogen-Abstraction Reaction between Transient and Persistent Radicals ", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **94**, pp. 966-972 (2021).
- (3) **X. Li, T. Ogihara, T. Kato, Y. Nakamura, and S. Yamago**, "Evidence for Polarity-and Viscosity-Controlled Pathways in the Termination Reaction in the Radical Polymerization of Acrylonitrile ", *Macromolecules*, **54**, pp. 4497-4506 (2021).

3. Presentation at academic conferences

4. Others

T. Kato, N. Haruta, and T. Sato, "Vibronic Coupling Density (Understanding Molecular Deformation) ", *SpringerBriefs in Molecular Science*, Springer Nature, Singapore, 2021, ISBN 978-981-16-1795-9.

6. 博士研究員

Simon K. Schnyder

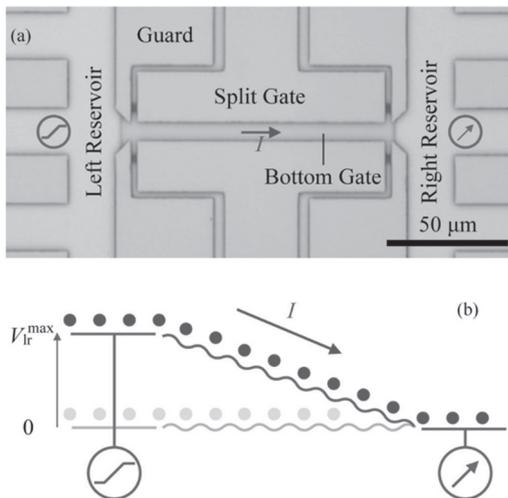
FIFC FELLOW

1. Summary of the research of the year

Dynamical decoupling and recoupling of the Wigner solid to a liquid helium substrate

At low temperatures, surface-state electrons (SSEs) trapped above liquid helium substrates self-organize to form a triangular lattice, the classical Wigner solid (WS). One intriguing result of this spatial ordering is a spontaneous deformation of the helium surface below, as the electrostatic pressure exerted by each electron on the liquid results in the formation of an array of shallow ‘dimples’ (dimple lattice, DL) commensurate with the electron lattice. The coupled electron-dimple system is analogous to polaronic states formed in crystal lattices in which electrons deform the surrounding lattice structure and become self-trapped. Just as the polaron state can be viewed as an electron dressed by virtual phonons, the surface electron lattice can be described as being dressed by quantized capillary waves, or ‘rippions;’ the complex formed by each surface electron and its accompanying dimple is therefore termed as a ‘ripplopolaron’. Upon applying an electric field parallel to the helium surface, the electron and dimple lattices move together. However, when the force is sufficiently strong, the electrons can decouple from the dimples and move freely across the helium surface.

Similar decoupling processes can be observed for solid-state polarons, although at picosecond timescales. In contrast, ripplopolaron dynamics can be investigated in real time using straightforward transport measurements because the timescale of the helium surface response is naturally much longer than that of an ordinary solid; for capillary waves with wavelength comparable to the spacing between electrons in the Wigner solid, the inverse of the ripplon frequency is typically 10–100 ns. We have previously reported a novel ‘stick-slip’ type of electron motion in which the electron solid repeatedly decouples from, and then recouples to, the dimple lattice. When the driving voltage is smoothly ramped, the velocity of the electron solid is initially limited by Bragg-Cherenkov (BC) ripplon

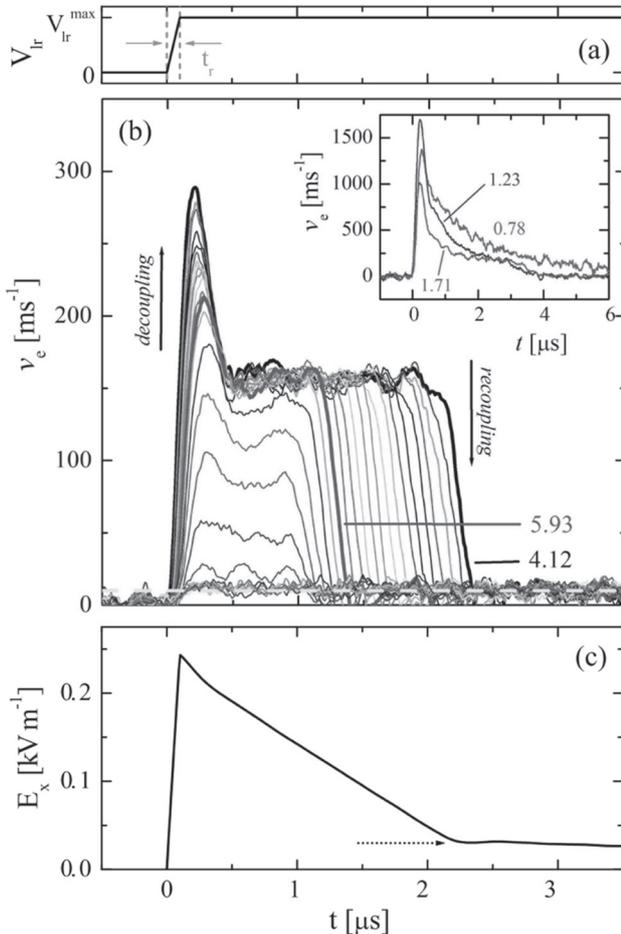


scattering, in which rippions generated by the moving electrons interfere constructively with the dimple lattice, resonantly increasing the dimple depth and the drag force

FIG. 1. (a) False-color optical image of the central microchannel. (b) Schematic of the transport measurement. V_r is ramped quickly to V_r^{\max} establishing a potential gradient E_x along the channel. Current then flows, inducing a displacement current in the right reservoir electrode, until electrostatic equilibrium is restored. If E_x is large enough the electrons can escape the dimple surface profile.

exerted on the electron solid. Because the electron velocity becomes fixed to the coherent ripplon phase velocity during this resonant scattering phase, the driving electric field acting on the electron system grows over time, eventually reaching the threshold for WS-DL decoupling. The electron lattice then escapes the trapping potential formed by the dimples and moves with low resistance. However, the resultant sudden flow of charge causes a rapid reduction in the driving force, allowing the electron solid to recouple to the surface dimples. If the driving voltage is ramped continuously this stick-slip cycle is repeated, leading to spontaneous oscillations in the electron current.

This stick-slip behavior was investigated for surface electrons confined in a microchannel device, see Fig. 1. By confining the electron system in a long, narrow channel, the driving electric field and the surface electron density (and so the current density) can be precisely controlled and are highly homogeneous. The channel confinement was typically several tens of the electron lattice constant in width. For the classical quasi-1D electron lattices investigated here, in which the system width is comparable with the interparticle spacing, the positional order of the electron system can fluctuate rapidly due to the thermally-driven formation of lattice defects. This results in the increased motion of electrons about their equilibrium lattice sites and so fluctuations in the strength of the WS-DL coupling. For repeated measurements, the decoupling of the electron lattice from the dimple lattice is therefore found to occur over a range of values of the driving force and so at different points in time as the driving voltage is ramped. This behavior is analogous to thermally activated escape from the zero-voltage state in current-biased Josephson junctions.



For slow voltage ramps, the stochasticity in the WS-DL decoupling can smooth the observed average current signal, obscuring the true transport behavior. In this report however, this effect is negated by the use of rapid, steplike voltage ramps that pre-empt the escape by thermal fluctuation and synchronize it with the applied stimulus, see Fig. 2. This technique allows accurate measurement of the surface electron current during the WS-DL decoupling and recoupling processes. Thus we are able to study in detail the dynamical increase of the DL

FIG. 2. (a) Schematic of the driving voltage pulses used to investigate the ripplon decoupling and recoupling. V_{lr} is stepped from 0 to V_{lr}^{\max} in a time t_r . (b) v_e against t for values of V_{bg} from 1.6 to 3.0 V ($n_s = 4.12 \times 10^{13}$ to $7.48 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$) increased in 50 mV steps. Curves for $n_s = 4.12 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ and $n_s = 5.93 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ are labeled. Here $V_{lr}^{\max} = 25 \text{ mV}$ and $t_r = 100 \text{ ns}$. The dashed line indicates the typical electron velocity for BC scattering $v_e = 10 \text{ m s}^{-1}$. The apparent smooth decrease of the height of the velocity plateau, between the high velocity and BC scattering regimes, is an artifact of averaging over many measurements in which the WS-DL decoupling occurs probabilistically, as explained in the text. The inset shows v_e against t for lower values of n_s , as labeled in units of 10^{13} m^{-2} . (c) E_x against t for $n_s = 4.12 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$. The arrow marks the value of E_x^{rc} .

depth when the electron system is driven at the resonant velocity, the electron motion in the decoupled state, and the conditions under which the moving electron system can recouple to the helium surface.

Control of cell colony growth by contact inhibition

Cells move collectively and proliferate as the embryo develops during morphogenesis, as cancer spreads or as wounds close. The way in which migration and proliferation interact with each other is complex. Essential for the regulation of these processes is contact inhibition of locomotion (CIL), which describes the tendency of cells to stop migration or change direction when coming into contact with other cells. CIL has been shown to enable cells to collectively migrate, follow chemical gradients and disperse. It is now believed that CIL helps the control of collective tissue migration, tissue growth, morphogenesis, wound healing and tumour development. Potentially distinct from CIL is contact inhibition of proliferation (CIP) which refers to the suppression of cell divisions in dense regions of tissues, which in turn regulates their growth. There is evidence that CIP does not require direct cell contact and as a consequence the effect is also called “density dependent inhibition of cell growth”. Modelling approaches for cell migration are manifold, ranging from strongly idealised models for single cells crawling on substrates to cells in confluent tissues to continuum theories. The collective behaviour of cells is under intense study and many questions about contact inhibition are still open. In order to reduce the complexity of the systems under study, it is valuable to investigate well controlled model systems. One such model system deals with the crawling and proliferation of a monolayer of cells seeded onto a substrate. How a few cells develop into an extended colony has been investigated in a recent experiment, as well as in simulations. The colony in said experiment consists of of Madin-Darby canine kidney epithelial (MDCK) cells and exhibits two growth regimes. In the beginning the colony’s area grows exponentially with time, followed by sub-exponential growth. Similar growth stages are also found in tumour growth dynamics. In the former regime, cells are highly mobile and divide frequently, while in the latter, both the motion and proliferation of the cells becomes suppressed, linking the transition to contact inhibition. Such a transition is readily found in simulations if the proliferation rate of cells is locally coupled to density or available space, or stress. Previously, we developed a minimal, mechanical model for crawling cells in which contact inhibition of locomotion arises from the internal mechanics of the cells. Our model focuses purely on the cell mechanics, since mechanical forces inside of and between cells are now understood to be of crucial importance for the understanding of cell dynamics. Our model differs from previous models in that it incorporates a coupling of motility to cell polarisation, and asymmetric cell shapes into a minimal model; both of which influence mechanical interactions between cells. We found that the model naturally exhibits a range of realistic behaviours, including the emergence of collective migration, without including an explicit alignment term. Our model is thus a natural candidate to investigate colony growth.

Here, we extend our model to include cell proliferation in such a way that the motility and division dynamics are entirely governed by the internal dynamics of the cells. The cells cycle between a motile

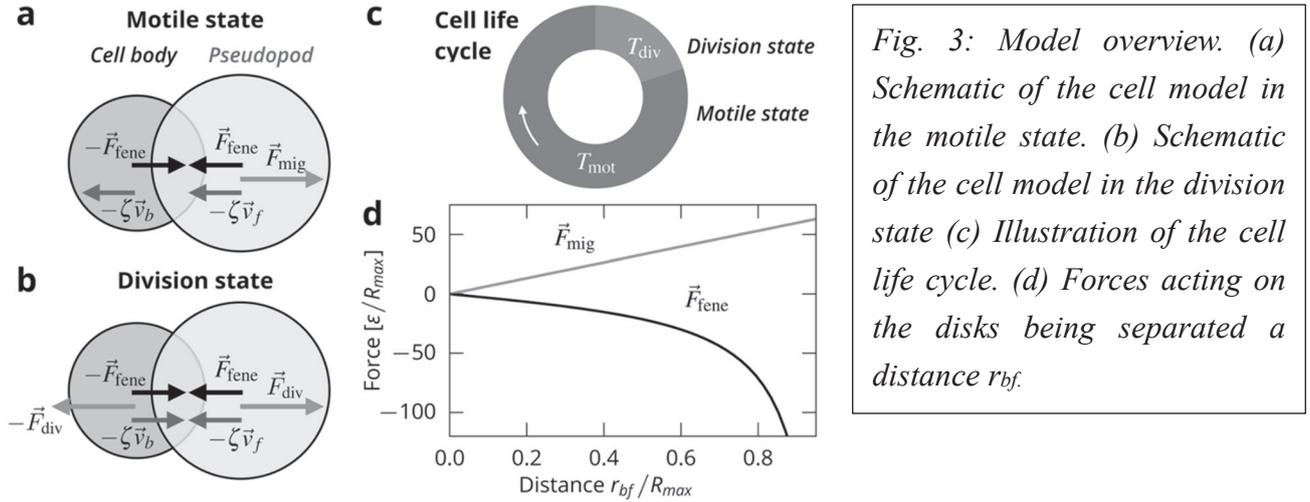


Fig. 3: Model overview. (a) Schematic of the cell model in the motile state. (b) Schematic of the cell model in the division state (c) Illustration of the cell life cycle. (d) Forces acting on the disks being separated a distance r_{bf} .

phase and a division state, see Fig. 3. In the division state, the cells attempt to proliferate by making space for two cells; otherwise, the cell division is aborted. This naturally gives rise to a form of contact inhibition of proliferation. We find that our model reproduces the typical colony dynamics, see Fig. 4; with exponential growth at short times turning into sub-exponential growth with a constant boundary speed at long times. Coinciding with this transition, the average cell speed decreases strongly, because of CIL occurring in the inside of the colony. As a result of contact inhibition, cells close to the boundary have higher speeds and proliferation rates. By varying the proliferation rate over a wide range, we then identify simple scaling relations for both regimes and the crossover between them. We had previously found that cell shape has a strong effect on cell collisions and that cells with large fronts align and coherently migrate. In this work, we now demonstrate that cell with large fronts orient themselves away from the colony, which enhances the speed of colony expansion.

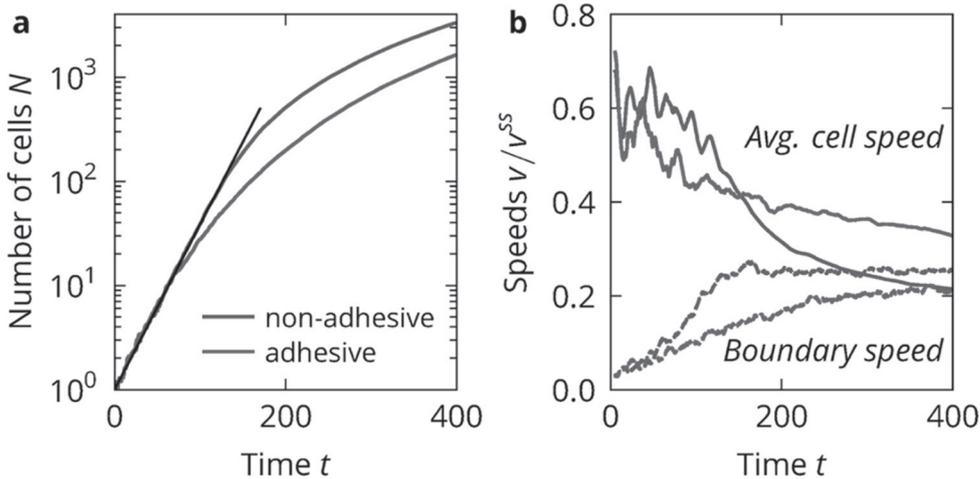


Fig. 4: Colony growth for non-adhesive and adhesive cells. (a) Size of the colony in number of particles n against time T for $T_{mot} = 16$ and $T_{div} = 3$. The black line marks exponential growth, assuming that all cell division attempts are successful. (b) Speed of the colony boundary and average cell speed of the same simulations.

Original papers

- (1) D. G. Rees, S.-S. Yeh, B.-C. Lee, S. K. Schnyder, F. I. B. Williams, J.-J. Lin, and K. Kono, Dynamical decoupling and recoupling of the Wigner solid to a liquid helium substrate, *Physical Review B* 102, 075439 (2020).
- (2) S. K. Schnyder, J. J. Molina, R. Yamamoto, Control of cell colony growth by contact inhibition, *Scientific Reports* 10, 6713 (2020).

新崎 康樹

研究フェロー (高塚グループ)

1. 今年度の研究の要約

今年度は昨年引き続き個々の断熱状態が意味をなくすほど強く非断熱相互作用する電子状態に発生する動力学的性質の記述、特徴の抽出に関する理論研究を行い、特にエネルギー自然軌道と呼ぶべき新しい表現について研究した。

【概要】 これまで電子状態の断熱描像、その描像における非断熱相互作用は化学反応の解釈に重要な役割を果たしてきた。一方で分子に内在する非断熱相互作用や外場によるその制御の研究が進むにつれて、従来の個別の断熱電子状態という描像ではとらえきれないような場合を考えるようになっており、従来の描像が与えた直感的な解釈が適用できなくなっている。そこで、高度な電子相関、非断熱相互作用系からも特徴を抽出できる方法が必要となる。

【方法論】 昨年度は原子核基底に情報を集約する研究を行った[1]が、今年はさらにそれと相補的な情報を得ることが期待できる、電子状態を「軌道」基底で抽出することを考える。ただし、従来からの分子軌道では電子相関係での直感的な解釈が困難となる。より一般的な系に適用可能な軌道としてエネルギー自然軌道というべき軌道を導入する。

式(1)のように電子エネルギー E_e (核核反発エネルギーは別に考える)が計算できているとする。ただし 1 次、2 次の縮約密度行列 ρ 、 Γ は非断熱相互作用の非常に大きい、励起状態等の高度な電子相関による記述から得られるものとする。ここでは添え字 i, j 等識別される分子軌道には基底関数系以上の意味を見出すことは難しい。しかし 2 電子部分を実効的に 1 電子に縮約して行列 $H^{(1)}$ で表すことにすれば、式 (2) のようにその固有関数、固有値を考えることができる。

$$E_e = \sum_{ij} h_{ij} \rho_{ij} + \sum_{ijkl} g_{ijkl} \Gamma_{ijkl} = \text{Tr } H^{(1)} \quad (1)$$

$$H^{(1)} |\zeta_k\rangle = \epsilon_k |\zeta_k\rangle \quad (2)$$

これはよく知られた電子密度行列 ρ の対角化による自然軌道と同様な考え方であるが、エネルギーの情報を含む点で異なる。つまり、全電子エネルギーは各固有関数のエネルギー ϵ_k の単純な和となり

$$E_e = \sum_k \epsilon_k \quad (3)$$

それぞれの固有関数を波動関数のエネルギー全体の一部を担う「軌道」ととらえることができる。これをエネルギー自然軌道 (ENO) と呼ぶことにする。ENO はまたそれぞれにポピュレーション

$$n_k = \langle \zeta_k | \rho | \zeta_k \rangle \quad (4)$$

を持ち ($0 \leq n_k \leq 2$) それぞれの軌道の占有数ととらえることもできる。エネルギー表現の実効的な 1 電子行列への縮約は式 (5) で計算されることが示される [2]。

$$G_{ji} = \sum_k \sum_{lm} g(j^{(1)l^{(2)}}; k^{(1)m^{(2)}}) \Gamma(k^{(1)m^{(2)}}; i^{(1)l^{(2)}}) \quad (5)$$

【エネルギー自然軌道による解析】 図 1 に、 H_2 分子電子基底状態 (aug-cc-pVDZ 基底、full CI) の ENO のエネルギーとポピュレーションを示す。計算上、ENO の数は分子軌道数と同じであるが、そのうち有意なポピュレーションを持つ軌道は系により決まり、その系を特徴付ける。 H_2 基底状態では $1\sigma_g$ と $1\sigma_u$ である (図の 1 と 2)。他の ENO はポピュレーション、エネルギーともに 0 となり波動関数に寄与しない。核間距離が離れている領域ではそれぞれの水素の同じ軌道に 1 電子ずつ格納されているのが、結合領域では分子の $1\sigma_g$ に 2 電子格納されるよく知られた描像が再現される。ENO の特徴は、その両極端の描像の中間の領域でポピュレーション、またエネルギーが滑らかに変化する様子が得られるところにある。電子相関を含む複雑な記述の波動関数であっても、ある核間距離で、系の電子エネルギーがどのような「軌道」(1 電子関数) に由来するのかが直感的に明らかとなる。

より複雑な例として LiF 分子の $^1\Sigma$ 基底状態、第 1 励起状態 (以下 S1、S2) の場合を見る。図 2 にそのポテンシャル曲線を示す。これは cc-pVDZ 基底で 7 軌道に 8 電子の活性空間による 2 状態平均 CASSCF からの CISD 計算の結果である。両断熱状態は 7.5 Å 付近でわずかに擬交差を形成する。この系に対する ENO を図 3 に示す。系の記述に使う分子軌道は 28 あるが、有意な ENO は図にあるように少数である (図では 1π を省いた)。異なる断熱状態に対して、それぞれの電子密度分布の違いを反映して異なる ENO の組が求まる。 1σ 、 2σ 、 1π 、 3σ ENO は図示した全空間で S1、S2 共にポピュレーションがほぼ 2 で、状態間で ENO エネルギーや空間分布に大きな違いは

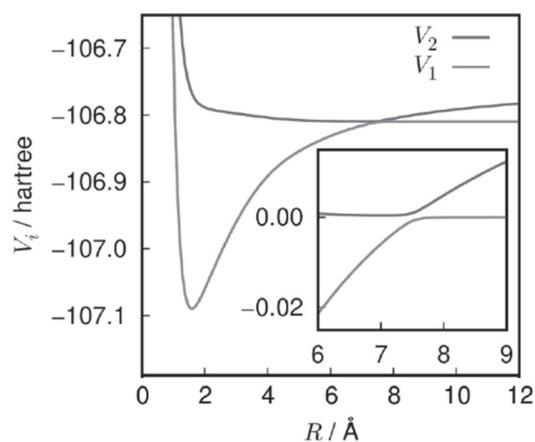


図 2. LiF 分子 $^1\Sigma$ 状態電子基底、第 1 励起状態間の擬交差とその拡大図。

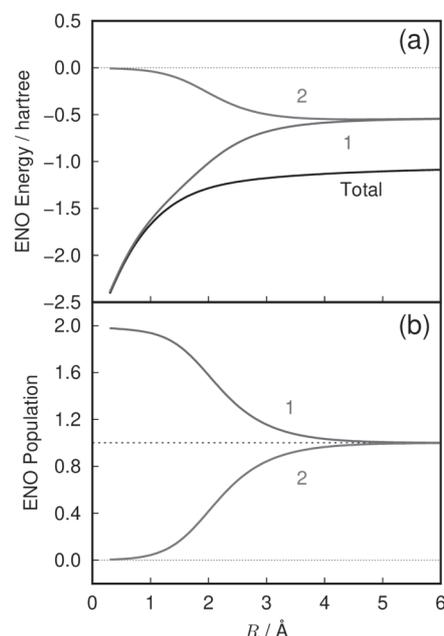


図 1. H_2 分子電子基底状態の ENO エネルギーとポピュレーション。

なく、これらの軌道は両断熱状態の違いには関わらないことがわかる。S1、S2 の違いおよび相互作用は主に 4σ 、 5σ ENO に格納される 2 電子が決定している。S1 では核間距離が離れているところでは 4σ 、 5σ ENO どちらもポピュレーションは 1 で、近づいて擬交差を超える際に 5σ の電子は 4σ に移る [図 3(c)]。このとき 4σ の ENO エネルギーが大きく変化する [図 3(a)] のは、このポピュレーションの変化を反映している。S2 状態ではおよそ逆で、離れているところで 4σ に 2 電子あったのが、近づいて擬交差を超える付近で 1 電子が 5σ に移る。図 3 の右側ではこれらの変化が分子内の電子のどのような空間分布の再配置に対

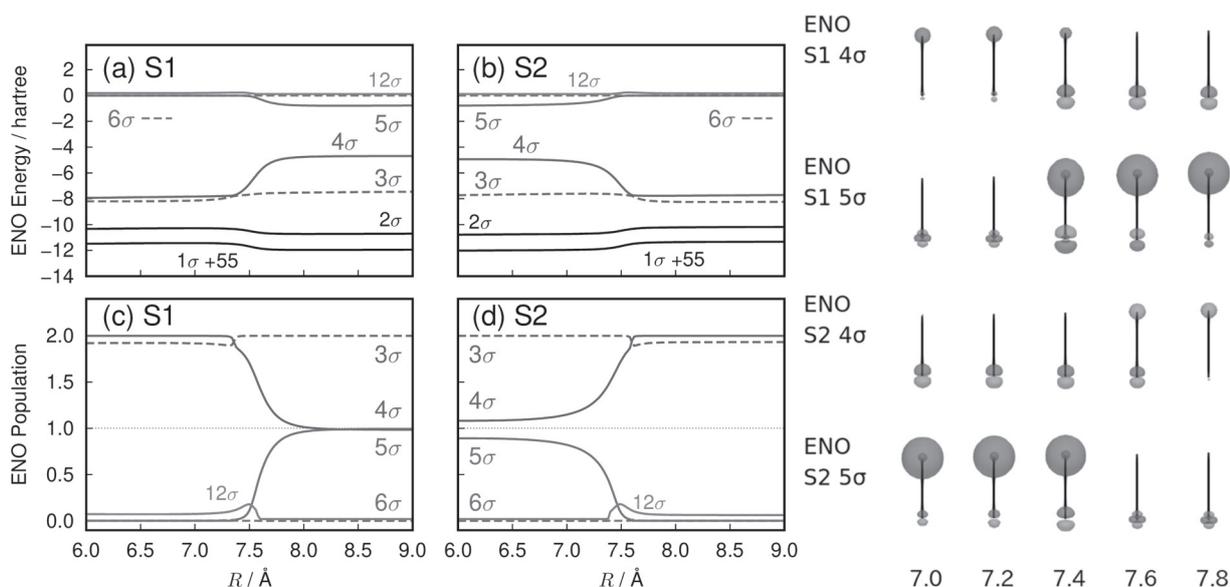


図 3. LiF 擬交差付近の断熱基底状態と第 1 励起状態 (S1、S2) の ENO。左は ENO エネルギーとポピュレーション。右は各断熱状態の 4 σ 、5 σ ENO の空間分布。黒い棒が核間距離を表し、上側が Li、下側が F。赤と青は軌道関数の符号の違いを示す。

応するかが見て取れる。

【まとめと展望】 以上見てきたように ENO は複雑な波動関数から直感的な特徴を引き出すのに有効な手段と期待できる。例えば LiF の例の 7 軌道に 8 電子の CAS 空間で得られた、擬交差に関する 2 軌道 2 電子の結果は、より正確に電子相関を取り入れたより大きな計算でも本質的には変わらないと考えられる。また、上では断熱状態ごとの例を見たが、複数あるいは多数の断熱状態が混ざった系では直接に混合系の ENO を見ることで有用な示唆が得られると期待できる。ここでの例では ENO ポピュレーションの変化に注目したが、ENO の変化は系の電子エネルギーの内訳の変化と直接に関係していることが最も大きな特徴である。現在 H₂+H₂、B₂+B₂ のような反応系での ENO の利用の研究を進めており、その後は従来の方法では解析が困難な高縮重状態のダイナミクス[1]への適用を予定している。

【文献】

- [1] Y. Arasaki and K. Takatsuka, J. Chem. Phys. **150**, 114101 (2019).
 [2] K. Takatsuka and Y. Arasaki, J. Chem. Phys. **154**, 094103 (2021).

2. 論文

- (1) Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki,
“Energy natural orbitals,”
J. Chem. Phys. 154, 094103 (2021, 14 pages).

Kota Hanasaki

Research Fellow

1. Summary of the research of the year

Role of nonadiabaticity in electronic dynamics

– electronic flux in chemical dynamics and its conservation

Quantum-mechanical dynamics of electrons accompanies flux. The flux conservation law, which naturally follows from the time-dependent Schrödinger equation, requires that the time-derivative of the electronic density should equal the minus of the divergence of the electronic flux. Any non-trivial chemical dynamics therefore accompanies finite electronic flux. It is however known that the electronic flux vanishes in molecular dynamics in the adiabatic approximation, even though the time-dependent electronic densities in slow chemical reactions are often successfully reproduced in the same level of approximation. Barth *et al.* [1] proposed a phenomenological approach which reproduces a flux-like quantity within the adiabatic approximation, however, we do not take this approach. We consider that *ab initio* reproduction of the electronic dynamics to be critically important in theoretical study of chemical reactions, taking account of rapid progress in electronic state controlling techniques. We analyzed the quantum-mechanical origin of the electronic flux as a step to this goal.

A number of *ab initio* studies on the electronic flux in chemical dynamics [2,3,4] suggest critical roles of nonadiabaticity in occurrence of finite electronic flux. However, there has been no clear proof of non-adiabatic induction of the electronic flux that satisfies the continuity equation. For clarity of discussion, we focus on so-called adiabatic reactions, or slow field-free reactions through which the excited state populations stay negligibly small compared to that of the ground electronic state. Such adiabatic reactions are undoubtedly of fundamental importance in the study of chemical reactions. We applied a perturbation analysis and derived an expression of the electronic flux,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\gamma} \left(F_g^* F_{\gamma}^{(1)} - F_{\gamma}^{(1)*} F_g \right) \langle \Xi_g | \hat{\mathbf{j}} | \Xi_{\gamma} \rangle, \quad (1)$$

where $|\Xi_g\rangle$ ($|\Xi_{\gamma}\rangle$) is the ground (excited) adiabatic electronic state with energy E_g (E_{γ}) and amplitude F_g (F_{γ}) whereas $\hat{\mathbf{j}}$ is the flux operator. The excited state amplitude F_{γ} is evaluated up to the first order in the

non-adiabatic interaction as $F_{\gamma}^{(1)} = i\hbar \frac{\mathbf{R} \cdot \mathbf{X}_{\gamma g}}{E_{\gamma} - E_g} (e^{-iE_g t/\hbar} - e^{-iE_{\gamma} t/\hbar})$ with $\mathbf{X}_{\gamma g} \equiv \langle \Xi_{\gamma} | \partial / \partial \mathbf{R} | \Xi_g \rangle$ being the

nonadiabatic coupling between the adiabatic states g and γ . Substitution of Eq. (1) into the continuity equation yields

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\gamma} \left(F_g^* F_{\gamma}^{(1)} - F_{\gamma}^{(1)*} F_g \right) \left\langle \Xi_g \left| \frac{[\hat{\rho}, H^{el}]}{i\hbar} \right| \Xi_{\gamma} \right\rangle \\ &= 2 \dot{\mathbf{R}} \cdot \sum_{\gamma} \mathbf{X}_{\gamma g} (1 - \cos(E_{\gamma g} t/\hbar)) \langle \Xi_g | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Xi_{\gamma} \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Taking account of the fact that the oscillating cosine term reflects the simplified initial condition we adopted

here (we assumed that the system is in the adiabatic ground state at $t = 0$ when the nonadiabatic coupling turns on abruptly) and vanishes by dephasing, the right-hand side of Eq. (2) essentially equals $2\dot{\mathbf{R}} \cdot \sum_{\gamma} \mathbf{X}_{\gamma g} \langle \Xi_g | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Xi_{\gamma} \rangle = \dot{\mathbf{R}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \langle \Xi_g | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Xi_g \rangle$, which is the expected time derivative of the *adiabatic* ground state density induced by the nuclear motion. In Ref. 5, we have also shown that we can indeed eliminate the awkward oscillating term in Eq. (2) by a different choice of the initial/boundary conditions. We then further investigated flux conservation in *ab initio* numerical simulations taking account of finiteness of the expansion basis set. We derived an explicit expression of numerical flux non-conservation (i.e. deviation of $\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ from $-d\rho(\mathbf{r}, t)/dt$) and proposed a realistic scheme that reduces such numerical deviations^[5]. We have also performed numerical calculations to validate our analysis.

Our analysis hence leads to a paradoxical conclusion, “*non-adiabaticity* plays a critical role in quantum-mechanical electronic dynamics in *adiabatic* chemical reactions”. This apparently contradictory statement arises from the fact that the excited state populations are so small in those reactions that the force fields for the nuclear dynamics (and many of relevant observables including the total electronic density as well) are essentially the same as their ground-state expectation values, whereas *ab initio* reproduction of the electronic flux, which is an excited state property with its ground-state expectation value being zero, requires analysis of excited states. Indeed, our numerical results in Ref. 5 show that the excited state amplitude of order 10^{-2} reproduces the flux consistent with the adiabatic density time evolution. Our study also sheds light on the role of nonadiabaticity in *adiabatic* reactions, which has been considered as an uninteresting subject in the study of non-adiabatic dynamics.

References

- [1] I. Barth, H.-C. Hege, H. Ikeda, A. Kenfack, M. Koppitz, J. Manz, F. Marquardt, and G. K. Paramonov, Chem. Phys. Lett. **481**, 118 (2009).
- [2] M. Okuyama and K. Takatsuka, Chem. Phys. Lett. **476**, 109 (2009).
- [3] L. A. Nafie, J. Chem. Phys. **79**, 4950 (1983). *ibid.* J. Phys. Chem. **101**, 7826 (1997).
- [4] S. Patchkovskii, J. Chem. Phys. **137**, 084109 (2012).
- [5] K. Hanasaki and K. Takatsuka, J. Chem. Phys. **154**, 164112 (2021).

original paper (published on April 29, 2021)

Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka, “On the molecular electronic flux: Role of nonadiabaticity and violation of conservation” J. Chem. Phys. **154**, 164112 (2021).

2. Original papers

3. Presentation at academic conferences

4. Others

V 資料

1. 研究業績一覧

2020(令和2)年度

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
佐藤 徹					
1	W. Ota, K. Takahashi, K. Higashiguchi, K. Matsuda, T. Sato	Origin of Aggregation-Induced Enhanced Emission: A Role of Pseudo-Degenerate Electronic States of Excimers Formed in Aggregation Phases	<i>J. Mater. Chem. C</i>	8, 8036-8046	2020
2	W. Ota, Y. Kojima, S. Hosokawa, K. Teramura, T. Tanaka, T. Sato	A Theoretical Investigation into the Role of Catalyst Support and Regioselectivity of Molecular Adsorption on a Metal Oxide Surface: NO Reduction on Cu/ γ -Alumina	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>	23, 2575-2585	2021
3	S. Kimura, M. Uejima, W. Ota, T. Sato, S. Kusaka, R. Matsuda, H. Nishihara, T. Kusamoto	An Open-shell, Luminescent, Two-dimensional Coordination Polymer with a Honeycomb Lattice and Triangular Organic Radical	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	143, 4329-4338	2021
平尾 公彦					
1	Edoardo Apra, Eric Bylaska, Wibe De Jong, Niranjana (Niri) Govind, Karol Kowalski, T.P. Straatsma, Marat Valiev, Hubertus van Dam, Yuri Alexeev, James Anchell, Victor Anisimov, Fredy Aquino, Raymond Atta-Fynn, Jochen Autschbach, Nicholas Bauman, Jeffrey Becca, David Bernholdt, Kiran Bhaskaran-Nair, Stuart Bogatko, Piotr Borowski, Jeffery Boschen, Jiri Brabec, Adam Bruner, Emilie Cauët, Ying Chen, Gennady Chuev, Christopher Cramer, Jeffrey Daily, Miles Deegan, Thom Dunning, Michel Dupuis, Kenneth Dyll, George Fann, Sean Fischer, Alexander Fonari, Herbert Fruchtl, Laura Gagliardi, Jorge Garza, Nitin Gawande, Soumen Ghosh, Kurt Glaesemann, Andreas Goetz, Jeff Hammond, Volkhard Helms, Eric Hermes, Kimihiko Hirao, [et al.]	NWChem: Past, Present, and Future	<i>J. Chem. Phys.</i>	152, 184102	2020
2	Abolfazl Shiroudi; Kimihiko Hirao; Kazunari Yoshizawa; Mohammednoor Altarawneh; Mohamed Abdel-Rahman; Asmaa El-Meligy; Ahmed El-Nahas	A Computational Study on the Kinetics of Pyrolysis of Isopropyl Propionate as a Biodiesel Model: DFT and Ab Initio Investigation	<i>Fuel</i>	281, 118798	2020
3	Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan, Jong-Won Son, and Han-Seok Bae	Core level Excitation Energies of Nucleic Acid Bases Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals	<i>J. Phys. Chem. A</i>	124, 104802-10494	2020
4	Kimihiko Hirao, Bun Chan, Jong-Won Song, and Han-Seok Bae	Charge-transfer Excitation Energies Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals	<i>J. Phys. Chem. A</i>	124, 8079-8087	2020
5	Bun Chan, Kimihiko Hirao	Rapid prediction of ultra-visible spectra from conventional (non-time-dependent) density functional theory calculations	<i>J. Phys. Chem. Lett.</i>	11, 7882	2020

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
6	El-Abed Haidar, Sherif Abdulkader Tawfik, Catherine Stampfl, Kimihiko Hirao, Kazunari Yoshizawa, Takahito Nakajima, Kamal A. Soliman, and Ahmed M. El-Nahas	Attenuation of redox switching and rectification in Azulenequinones/Hydroquinones after B and N doping: a first-principles investigation	<i>Advanced Theory and Simulations</i>	4, 2000203 (1-18)	2021
7	Kimihiko Hirao, Han-Seok Bae, Jong-Won Song, and Bun Chan,	Koopmans-Type Theorem in Kohn–Sham Theory with Optimally Tuned Long-Range Corrected (LC) Functionals	<i>J. Phys. Chem. A</i>	125, 3489-3502	2021
永瀬 茂					
1	M. -Y Li, Y. -X. Zhao, Y. -B. Han, K. Yuan, S. Nagase, M. Ehara, and X. Zhao	Theoretical Investigation of the Key Roles in the Fullerene-Formation Mechanisms: Enantiomer and Enthalpy	<i>Appl. Nano. Mater.</i>	3, 547-554	2020
2	M. Li, Z. Gao, Y. Han, Y. Zhao, K. Yuan, S. Nagase, M. Ehara, and X. Zhao	Potential Molecular Semiconductor Devices: Cyclo-C _n (n = 10 and 14) with Higher Stabilities and Aromaticities than Acknowledged Cyclo-C ₁₈	<i>Phys. Chem. Phys. Chem</i>	22, 4823-4831	2020
3	T. Sugahara, A. E. Ferao, A. R. Ferao, J. -D. Guo, S. Aoyama, K. Igawa, K. Tomooka, T. Sasamori, D. Hashizume, S. Nagase, and N. Tokitoh	1,2-Insertion Reactions of Alkynes into Ge-C Bonds of Arylbromogermylene	<i>Dalton Trans.</i>	49, 7189-7196	2020
4	M. -Y. Li, Y. -X. Zhao, Y. -B. Han, K. Yuan, K. Zhang, Y. Chen, M. Ehara, S. Nagase, and X. Zhao	Covalent Interactions Depend on the Distances between Metals and Fullerenes for Thermodynamically Stable M@C ₇₈ (M = La, Ce, and Sm)	<i>Inorg. Chem. Front</i>	7, 2538-2547	2020
田中 一義					
1	Hiroki Nishiyama, Feng Zheng, Shinsuke Inagi, Hiroyuki Fueno, Kazuyoshi Tanaka, and Ikuyoshi Tomita	Tellurophene-Containing π -Conjugated Polymers with Unique Heteroatom–Heteroatom Interactions by Post-Element-Transformation of an Organotitanium Polymer	<i>Polym. Chem.</i>	11(29), 4693-4698	2020
2	Mitsuru Matsumoto, Takuji Kita, and Kazuyoshi Tanaka	Hydrogen Adsorption/Desorption Properties of Anhydrous Metal Oxalates; Metal = Mg ²⁺ and Ca ²⁺	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	93(8), 985-987	2020
高塚 和夫					
1	Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka	Charge separation and successive reconfigurations of electrons and protons driving water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex. On the mechanism of water splitting in PSII.	<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>	22, 7912-7934	2020
2	Kazuo Takatsuka	Maupertuis-Hamilton least action principle in the space of variational parameters for Schrödinger dynamics; A dual time-dependent variational principle	<i>J. Phys. Comm.</i>	4, 035007 (16 pages)	2020
3	Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki	Energy Natural Orbitals	<i>J. Chem. Phys.</i>	154, 094103 (14 pages)	2021
4	Kazuo Takatsuka	Electron dynamics in molecular elementary processes and chemical reactions	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	94, 1421-1477	2021
5	Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka	On the molecular electronic flux: Roles of nonadiabaticity and violation of conservation.	<i>J. Chem. Phys.</i>	154, 164112 (18 pages)	2021

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
北浦 和夫					
1	Ikuno Fujino, Dmitri G. Fedorov, Kazuo Kitaura	Application of the Fragment Molecular Orbital Method to Organic Charge Transport Materials in Xerography: A Feasible Study and a Charge Mobility Analysis" in "Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method: Enhanced Performance and Applicability	<i>Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method</i>	pp.567-587	2021
加藤 立久					
1	Klaus-Peter Dinse, Tatsuhisa Kato, Shota Hasegawa, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata, and Robert Bittl	ESR study of NO radicals encased in modified open C60 fullerenes	<i>Magn. Reson.</i>	1, 197-207	2020
2	Xiaopei Li, Tatsuhisa Kato, Yasuyuki Nakamura, and Shigeru Yamago	The Effect of Viscosity on the Coupling and Hydrogen-Abstraction Reaction between Transient and Persistent Radicals	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	94, 966-972	2021
3	Xiaopei Li, Tasuku Ogihara, Tatsuhisa Kato, Yasuyuki Nakamura, and Shigeru Yamago	Evidence for Polarity-and Viscosity- Controlled Pathways in the Termination Reaction in the Radical Polymerization of Acrylonitrile	<i>Macromolecules</i>	54, 4497-4506	2021
4	Tatsuhisa Kato, Naoki Haruta, and Tohru Sato	Vibronic Coupling Density (Understanding Molecular Deformation)	<i>SpringerBriefs in Molecular Science</i>	Springer Nature, Singapore, ISBN 9789811617959	2021
Schnyder, Simon K.					
1	Simon Kaspar Schnyder, John Jairo Molina, Ryoichi Yamamoto	Control of cell colony growth by contact inhibition	<i>Scientific Reports</i>	10, 6713, 1-14	2020
2	David G. Rees, Sheng-Shiuan Yeh, Ban-Chen Lee, Simon Kaspar Schnyder, Francis I. B. Williams, Juhn- Jong Lin, Kimitoshi Kono	Dynamical decoupling and recoupling of the Wigner solid to a liquid helium substrate	<i>Physical Review B</i>	102 (7), 75439, 1-6	2020
新崎 康樹					
1	Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki	Energy natural orbitals	<i>J. Chem. Phys.</i>	154, 094103 (14 pages)	2021
花崎 浩太					
1	Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka	On the molecular electronic flux: Roles of nonadiabaticity and violation of conservation.	<i>J. Chem. Phys.</i>	154, 164112 (18 pages)	2021

2. 共同研究者受入れ状況

2020(令和2)年度

受入れ教員	共同研究者名	受入れ身分	受入れ期間	所属機関・職	研究内容
令和2年度は 新型コロナウイルス感染拡大防止のため、共同研究者を受け入れなかった。					

3. 海外渡航一覧

2020(令和2)年度

職 名	氏 名	期間(自)	期間(至)	目的地
令和2年度は、新型コロナウイルス感染拡大防止のため、海外渡航は実施されなかった。				

4. 福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム ポスター・プログラム



FUKUI INSTITUTE FOR
FUNDAMENTAL CHEMISTRY

京都大学
福井謙一

記念研究センター

オンラインシンポジウム

開会式 (Opening)

[開会の辞] 13:00-13:05

講演会 (Lecture Session)

岸 亮平 (大阪大学大学院 基礎工学研究科) 13:05-13:55
開殻縮環分子系の光・磁場応答制御の分子設計：
モデル構築と量子化学計算

中 寛史 (京都大学大学院 薬学研究科) 14:05-14:55
水で有機物質をつくる

飯田 健二 (北海道大学 触媒科学研究所) 15:05-15:55
ナノ物質系の界面の光や電圧に対する応答の理論計算研究

ポスターセッション (Poster Session) 16:00-17:50

[閉会の辞] 17:50-17:55

開催日

2021年1月25日(月)

申込締切：2021年1月15日(金)

参加費：無料

会場：オンライン (Zoom)

京都大学福井謙一記念研究センター

〒606-8103 京都市左京区高野西開町34-4

お申し込みは下記 Web ページをご参照ください

問合せ先：春田直毅 / E-mail: sympo2020@fukui.kyoto-u.ac.jp

事務室 / Tel: 075-711-7708 Fax: 075-781-4757

<http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/>



京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム

プログラム

日時 2021年1月25日(月) 13:00~17:55

場所 オンライン (Zoom)

開会式 (Opening)

[開会の辞] 春田 直毅 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 13:00 – 13:05

講演会 (Lecture Session)

● 岸 亮平 (大阪大学大学院 基礎工学研究科) 13:05 – 13:55

「開殻縮環分子系の光・磁場応答制御の分子設計：モデル構築と量子化学計算」

座長：春田 直毅 (京都大学 福井謙一記念研究センター)

● 中 寛史 (京都大学大学院 薬学研究科) 14:05 – 14:55

「水で有機物質をつくる」

座長：佐藤 徹 (京都大学 福井謙一記念研究センター)

● 飯田 健二 (北海道大学 触媒科学研究所) 15:05 – 15:55

「ナノ物質系の界面の光や電圧に対する応答の理論計算研究」

座長：西本 佳央 (京都大学大学院 理学研究科)

閉会式 (Closing)

[閉会の辞] 佐藤 啓文 (京都大学 福井謙一記念研究センター長) 15:55 – 16:00

ポスターセッション (Poster Session) 16:05 – 17:55

ポスターリスト (ブレイクアウトルーム 16:05~17:55)

- ✓ 番号が奇数の方は前半 (16:05-17:00)、番号が偶数の方は後半 (17:00-17:55) には、各自の番号のブレイクアウトルーム内で発表するようにしてください。Zoom での発表方法の詳細については、参加の手引きをご覧ください。
- ✓ Authors with odd and even poster numbers should be present at the corresponding breakout rooms during the first half (16:05-17:00) and the second half (17:00-17:55) of the session, respectively. You can find how to make a presentation on Zoom in the participation guide “参加の手引き”.

1. アヌレンの単分子電気伝導特性に関する理論研究

○甘水 君佳[1]、佐藤 宏賢[1]、池永 和輝[1]、北河 康隆[1,2,3]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、阪大 QIQB[3])

2. ピレン色素を持つ発光性液体のレオロジーの解析

○山本裕生、Lu Fengniu、中西尚志、林重彦

3. 3 サイト 2 電子原子価配置間相互作用(VBCI)モデルを用いたホールドーピングジラジカロイドにおける開殻性と三次非線形光学物性の相関の解析

○吉田 航[1]、松井 啓史[2]、宮本 孟[1]、岸 亮平[1,3]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、大安研[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 CSRN[4])

4. 非制限密度汎関数法を用いたラジカル間交換相互作用の減衰定数の評価によるアームチェア型グラフェンナノリボン (AGNRs) の電子輸送特性評価

○篠塚 智仁、西澤 尚平、清水 大貴、松田 建児 (京大院工)

5. 対称ヘテロ直鎖状ペンタセン集合系の一重項分裂ダイナミクスの理論研究

○中野雅由[1,3,4]、宮本孟[1]、徳山和明[2] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])

6. DFTB 法を用いた電極電解液界面の定電圧シミュレーション法の開発

○押木 淳[1]、中農 浩史[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])

7. 多変量解析法を用いたトリス(2,2'-ビピリジン)ルテニウム(II)錯体の LUMO のエネルギーと置換基種との関連性についての理論研究

○佐藤 宏賢[1]、甘水 君佳[1]、池永 和輝[1]、北河 康隆[1,2,3]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、阪大 QIQB[3])

8. **非直交スピン軌道の第二量子化演算子による共鳴構造の解析**
 ○中谷 佳萌[1]、東 雅大[1,2]、福田 良一[2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大 福井セ[3])
9. **ドナーおよびアクセプター分子からなる金属有機構造体 (MOF) の吸蔵分子による磁性変化に関する理論研究**
 ○北河 康隆[1,2,3]、Jun Zhang[4]、高坂 亘[4]、宮坂 等[4]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CNRS[2]、阪大 QIQB[3]、東北大金研[4])
10. **Hubbard 模型と量子化学計算に基づいた TMTTF 系の超伝導-金属量子相転移の解析**
 ○北村直大、倉重佑輝 (京大院理)
11. **Dicyclopenta-fused acene の 2 電子酸化還元状態およびホウ素・窒素置換系における開殻性の鎖長依存性についての理論研究**
 ○清水 陽介[1]、岸 亮平[1,4]、吉田 航[1]、池内 雅登[2]、正田 迅己[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])
12. **Origin of aggregation-induced enhanced emission: role of pseudo-degenerate electronic states of excimers formed in aggregation phases**
 Wataru Ota[1,2], Ken Takahashi[3], Kenji Higashiguchi[2], Kenji Matsuda[2], and Tohru Sato[1,2,4] (FIFC[1], Graduate School of Eng. Kyoto Univ.[2], Undergraduate School of Industrial Chemistry, Kyoto Univ. [3], ESICB, Kyoto Univ.[4])
13. **非平衡グリーン関数法を用いた電流によるカイラル誘起スピン選択性の起源の研究**
 ○島田 隆史、瀬波 大土 (京大院工)
14. **A theoretical investigation into the role of catalyst support and regioselectivity of molecular adsorption on a metal oxide surface: NO reduction on Cu/c-alumina**
 Tohru Sato[1,2,3], Wataru Ota[1,2], Yasuro Kojima[2], Saburo Hosokawa[2,3], Kentaro Teramura[2,3], Tsunehiro Tanaka[2,3] (FIFC[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2], ESICB, Kyoto Univ.[3])
15. **ペンタセン一次元集合系モデルにおけるシングレットフィッシュンダイナミクス : slip-stack 型配置と herringbone 型配置の比較**
 ○徳山 和明[1]、宮本 孟[2]、永海 貴識[2]、中野 雅由[2,3,4] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 CSRN[4])

16. **バクテリオクロロフィル a の励起状態緩和ダイナミクスに配位子が与える効果の解析**
○高林 侑示[1]、佐藤 啓文[1,2,3]、東 雅大[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井センター[3])
17. **3つのアセチルアセトナト配位子を持つジスプロシウム(III)錯体の磁気異方性に関する理論研究**
○長 奎吾[1]、池永 和輝[2]、北河 康隆[2,3,4]、中野 雅由[2,3,4] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])
18. **電極電解液界面酸化還元反応に対する定電位平均場 QM/MM 法の開発**
○高橋 健[1]、中農 浩史[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])
19. **テトラシクロペンタテトラフェニレン二量体の芳香族性、開殻性、光・磁気物性の相関に関する理論研究**
○杉浦 亮介[1]、岸 亮平[1,5]、清水 陽介[1]、池内 雅登[1]、吉田 航[1]、正田 迅己[1]、永海 貴識[1]、戸部 義人[2,3]、中野 雅由[1,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大産研[2]、台湾国立交通大[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 QIQB[5])
20. **相互作用点モデルによる分子液体の古典密度汎関数理論**
○矢木 智章[1]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])
21. **湾曲 π 共役分子系のシングレットフィッション：ペリレン/ペロピレン骨格の屈曲効果**
○岡田 健治[1]、坂井 亮太[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])
22. **diagonal CASPT2 の解析的勾配**
○西本 佳央[1] (京大院理)
23. **分子の電気伝導現象における電子テンション密度のスピン依存成分に関する理論的研究**
○吉田如寛[1]、瀬波大士[1] (京大院工[1])
24. **量子化学計算に基づく溶媒和ヒドリドイオンの化学シフト推定**
○今村 洗輔[1]、東 雅大[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井センター[3])
25. **高効率一重項分裂材料設計に向けた分子内電荷分極を有する縮環共役分子系のエネルギー整合条件についての理論研究**
○坂井 亮太[1]、岡田 健治[2]、永海 貴識[2]、中野 雅由[2,3,4] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])

26. 3D-RISM 理論を用いた表面吸着分子系の溶媒和構造に関する研究

○高松 晃彦[1]、福田 良一[1,2]、東 雅大[1,2]、佐藤 啓文[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2])

27. バタフライ型アセンの一重項分裂誘起非線形光学特性に関する理論研究

○當波 孝凱[1]、杉森 亮太[1]、坂井 亮太[1]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、阪大 QIQB[3])

28. 振電相互作用解析を用いたアザボリン骨格深青色蛍光分子の開発

大田 航[1]、平 翔太[1]、○上島 基之[1]、藤原 絵美子[1]、佐藤 忠久[2]、坂上 恵[1]、佐藤 徹[1] (京大福井セ[1]、(株)NIL[2])

29. ペンタセン環状分子集合系の一重項分裂ダイナミクスにおける分子配向及び集合系サイズ依存性

○宮本 孟[1]、徳山 和明[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])

京都大学福井謙一記念研究センター 年報 2020

2021年10月発行

発行人 佐藤啓文

編者 佐藤啓文

発行所 京都大学福井謙一記念研究センター
(京都市左京区高野西開町34-4)

印刷所 株式会社 エヌジーピー
(京都市右京区太秦森ヶ東町21-10)

(無断転載を禁ず)