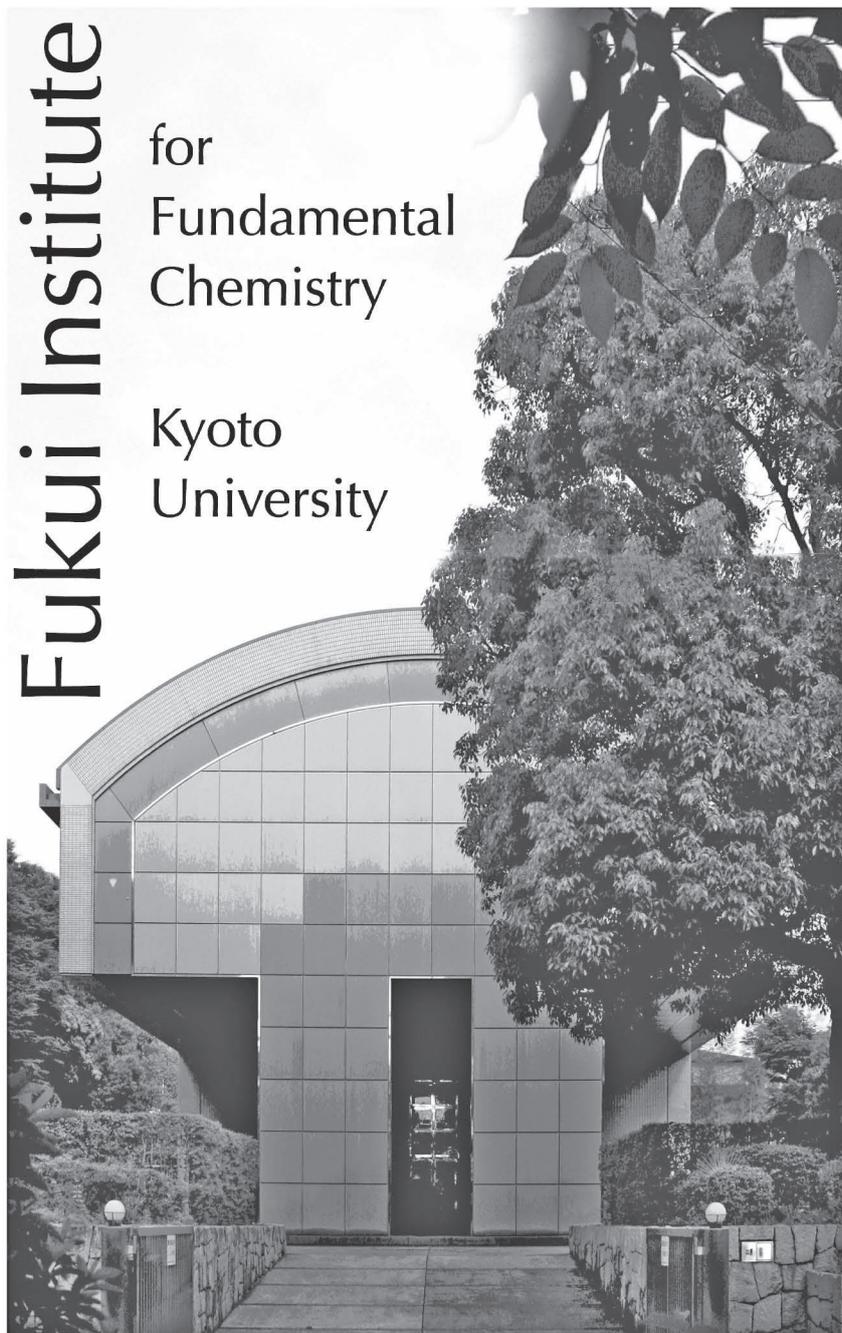


年報 2021



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

2021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。

本センターは理念として、最先端の基礎化学と応用化学や関連する諸分野の科学を融合し、次世代の化学理論の構築を行い、独創的な研究を展開するとともに、若い研究者による発展的な研究を支援、助成することを掲げています。その歴史は財団法人「基礎化学研究所」に遡ります。ご承知のように故福井謙一博士はフロンティア軌道理論を提案したご功績により、1981年にアジアで最初のノーベル化学賞を受賞されました。1985年に京都市と産業界などのご支援で財団法人「基礎化学研究所」が設立されました。その後2002年に京都大学に寄付移管され、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。理論研究部門と総合研究部門に1名ずつ専任教員を配置し、現在は理論研究部門に佐藤徹教授が在籍しています。

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」を創設しております。また福井博士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、福井博士が“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」という言葉で福井博士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。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。

例年初冬に開催しているセンターシンポジウムは、残念ながら新型コロナウイルス感染拡大防止のため、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2022年1月26日に開催し、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）に第5回福井謙一奨励賞受賞講演をお願いすることができました。遠隔地や企業からも多数の参加を頂くことができました。

さらに本年度は、福井博士の論文に関して、米国化学会より「歴史的化学論文大賞」をアジアで初めて受賞いたしました。また先生の功績を将来へ引き継ぐため「福井博士記念室」を設置しました。特別協力経費として「福井謙一博士講義録アーカイブ事業実施経費」が措置され、先生の講義録の収録を進めています。

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、化学研究所をはじめとする皆様のご協力、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。

2022年4月

京都大学福井謙一記念研究センター長
佐藤啓文

沿 革

| 年 | 月 | 成 立 と 動 向 |
|----------------|-------|---|
| 1981 (昭和56) | 12 | 福井謙一博士、コーネル大学の R. Hoffmann 博士とともに、 化学反応の経路に関する研究にて ノーベル化学賞受賞 |
| 1984 (昭和59) | 9 | 福井謙一博士のノーベル化学賞受賞を記念し、 財団法人基礎化学研究所設立 |
| 1988 (昭和63) | 6 | 福井謙一博士所長就任、本格的な業務開始 |
| 1998 (平成10) | 1 | 福井謙一研究所長逝去 |
| 2002 (平成14) | | 基礎化学研究所 京都大学へ寄附移管 |
| | 4 | 京都大学福井謙一記念研究センターとして再発足 「総合研究部門」「理論研究部門」を設置 |
| 2003 (平成15) | 11 | 「第1回福井謙一記念研究センターシンポジウム」を開催 |
| 2016 (平成28) | 10 | 福井謙一奨励賞を創設 |
| 2018 (平成30) | 9 | 福井謙一記念研究センター基金を開設 |
| | 10~12 | 福井謙一博士生誕百年記念行事 |
| | 11 | 企業研究者のための基礎化学研修プログラム 産学連携喜多-福井プロジェクト開設 |
| 2019 (令和1) | 10 | 企業向け研修プログラム 産業応用のための基礎化学講座開設 |

目 次

| | | |
|------------------------|-------------------------|----|
| はじめに | 京都大学福井謙一記念研究センター長 | i |
| 沿 革 | | ii |
| 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 | 6 |
| (4) | 専任教員 | 16 |
| (5) | リサーチダイレクター | 18 |
| (6) | シニアリサーチフェロー | 19 |
| (7) | 研究員 | 20 |
| 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 | 26 |
| 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 | 27 |
| 2. | セミナー | 27 |
| (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 | 28 |
| 4. | 社会へのアウトリーチ活動 | 28 |
| 5. | 福井謙一奨励賞の創設及び奨励賞の授与 | 28 |
| 6. | 福井博士記念室の設置 | 28 |
| 7. | その他 | 29 |
| IV 研究業績 | | |
| 1. | 専任教員 | 30 |
| 2. | リサーチダイレクター | 39 |
| 3. | シニアリサーチフェロー | 44 |

| | |
|----------------|----|
| 4. 研究員 | 49 |
| 5. 博士研究員 | 59 |

V 資料

| | |
|--|----|
| 1. 研究業績一覧 | 63 |
| 2. 共同研究者受入れ状況 | 65 |
| 3. 海外渡航一覧 | 65 |
| 4. 留学生受入れ一覧 | 65 |
| 5. 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 | 66 |

(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/AnnualReport2021.pdf>)

I 専任教員・スーパーバイザー

1. 教員組織

2021（令和3）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 | |
| 副センター長 | 佐藤 徹 | 福井謙一記念研究センター 理論化学 | |
| 協 議 員 | 工学研究科長 | 榎木 哲夫 | 工学研究科 機械工学専攻 |
| | 理学研究科長 | 國府 寛司 | 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iplinary 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 |
| 高塚グループ | シニアリサーチフェロー | 高塚 和夫 | 研究員 |
| 喜多-福井プロジェクト | 研究員 | 田中 一義 | 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, July 2010, Professor, Graduate School of Engineering, Kyoto University April 2019, Director, Fukui Institute for Fundamental Chemistry |
| 【在外研究歴】 | June 2004-December 2004, Academic Visitor, with Prof. Paul A. Madden, PTCL, Oxford University |
| 【所属学会】 | The Chemical Society of Japan, Japanese Association for Molecular Science, Japanese Society of Theoretical Chemistry, The Japan Association of Solution Chemistry |
| 【学会活動】 | TIC division chair, 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 (2019-2021) Committee member, The Japan Association of Solution Chemistry (2015-) |
| 【主な著書、学術論文】 (過去5年以内) | <ol style="list-style-type: none"> 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. 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). 4. 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) | <ol style="list-style-type: none"> 1. Time-resolved serial femtosecond crystallography reveals early structural changes in channelrhodopsin. 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 channelrhodopsin. 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 a 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). |

| | |
|-------------------------|---|
| 【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) | “An Open-shell, Luminescent, Two-dimensional Coordination Polymer with a Honeycomb Lattice and Triangular Organic Radical”, Shun Kimura, Uejima Motoyuki, Wataru Ota, Tohru Sato*, Shinpei Kusaka, Ryotaro Matsuda, Hiroshi Nishihara, and Tetsuro Kusamoto, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 143 , 4329-4338 (2021). “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). |
| 【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 |

(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】 | koga.tsuyoshi.6m@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・データ科学 |
| 【現在の研究課題】 | 高分子系の構造形成とダイナミックス |
| 【研究内容キーワード】 | 両親媒性高分子・圧力可塑性プラスチック・分子シミュレーション |
| 【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. Effects of Added Physical Cross-Linkers on Mechanical Properties of Polymer Networks, T. Furuya, K. Yamamoto, and T. Koga, <i>MACROMOLECULAR THEORY AND SIMULATIONS</i> , 28 , 1800042(1-14) (2019) 4. 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) 5. Molecular simulation of structure formation and rheological properties of mixtures of telechelic and monofunctional associating polymer, T. Furuya, and T. Koga, <i>JOURNAL OF POLYMER SCIENCE PART B-POLYMER PHYSICS</i> 56 , 1251-1264 (2018) |
| 【学術関係の受賞など】 | |

| | |
|---------------------------|--|
| 【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, Kaneseki 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1 1代表 |
| 【主な著書、学術論文】 (過去5年以内) | 1. “Improving thermodynamic bounds using correlations” Andreas Dechant, Shin-ichi Sasa Phys. Rev. X 11(4) 041061 (2021) 2. “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) 3. “Long-Range Phase Order in Two Dimensions under Shear Flow” Hiroyoshi Nakano, Yuki Minami, Shin-ichi Sasa Physical Review Letters 126(16) 160604 (2021) 4. “Fluctuation–response inequality out of equilibrium” Andreas Dechant, Shin-ichi Sasa Proceedings of the National Academy of Sciences 117(12) 6430 - 6436 (2020) 5. “Global Thermodynamics for Heat Conduction Systems” Naoko Nakagawa, Shin-ichi. Sasa Journal of Statistical Physics 177(5)825-888 (2019) 6. “Liquid-gas transitions in steady heat conduction “ Naoko Nakagawa, Shin-ichi Sasa Phys. Rev. Lett. 119, 260602/1-6(2017) |
| 【学術関係の受賞など】 | |

| | |
|-------------------------|---|
| 【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】 | yamamoto.jun.4r@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】 | ナノ力学とソフトマター |
| 【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) | 1)Chiao-Ying Chien and Jun Yamamoto, Photo-induced recovery of liquid-crystalline order with azobenzene-containing copolymer in nematic liquid crystal, Euro. Phys. Lett., 26001(2021). 2) K. W. Lee, T. Araki, J. Yamamoto, Dynamic control of an in-plane-switching liquid crystal cell using heterogeneous substrates, Soft Matter, 16, 348-356 (2020). 3) 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, Phys. Rev. Res. 1, 012008(R) (6 pages) (2019). 4) K. Hata, Y. Takanishi, I. Nishiyama and J. Yamamoto, Softening of twist elasticity in the swollen smectic C liquid crystal, Euro. Phys. Lett. 120, 56001(5P) (2017). 5)S. Bono, Y. Takanishi and J. Yamamoto, Effects of layer order on the mobility of mesogenic molecules in SmA liquid-crystalline emulsions, Europhys. Lett., 113 , 56004 (5P) (2016). |
| 【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 |
| 【研究室】 | 桂キャンパス A3 クラスタ 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関西支部副支部長、粉体粉末冶金協会副会長 |
| 【主な著書、学術論文】 (過去5年以内) | (1) 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. (2) 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. (3) 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. (4) 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. (5) 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. (6) K. Agata, S. Murai, and K. Tanaka, "Stick-and-play metasurfaces for directional light outcoupling", <i>Appl. Phys. Lett.</i> 118 (2021) 021110. (7) L. Liu, F. Zhang, S. Murai, and K. Tanaka, "Loss control with annealing and lattice Kerker effect in silicon metasurfaces", <i>Adv. Photon. Res.</i> 3 (2022) 2100235 |
| 【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 JCSJ 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 X-ray 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 |
| 【FAX】 | |
| 【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) | <ol style="list-style-type: none"> 1. K. Kanayama, T. Hoshino, and R. Yamamoto, Relation between dynamic heterogeneities observed in scattering experiments and four-body correlations, <i>Phys. Rev. Res.</i> 4, L022006 (2022). 2. 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> 11, 031025. 3. 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). 4. 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). 5. 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). 6. 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). 7. 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). |
| 【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) | <ol style="list-style-type: none"> 1. “Anomalous Temperature Dependence of Exciton Spectral Diffusion in Tetracene Thin Film”, Tatsuya Yoshida, Kazuya Watanabe*, Marin Petrović, and Marko Kralj, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 11, 5248–5254 (2020). 2. “Linewidth Narrowing with Ultimate Confinement of an Alkali Multipole Plasmon by Modifying Surface Electronic Wave Functions with Two-Dimensional Materials”, Shunsuke Tanaka, Tatsuya Yoshida, Kazuya Watanabe, Yoshiyasu Matsumoto, Tomokazu Yasuike, Marin Petrović, and Marko Kralj, <i>Phys. Rev. Lett.</i> 125, 126802 (2020). 3. “Decoupling from a Thermal Bath via Molecular Polariton Formation”, Shota Takahashi and Kazuya Watanabe, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i>, 2020, 11, 1349-1356. 4. “Singlet fission of amorphous rubrene modulated by polariton formation”, Shota Takahashi, Kazuya Watanabe and Yoshiyasu Matsumoto, <i>J. Chem. Phys.</i> 151, 074703 (2019). 5. “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). |

(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) (ルーヴェンカトリック大学) 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) | “An Open-shell, Luminescent, Two-dimensional Coordination Polymer with a Honeycomb Lattice and Triangular Organic Radical”, Shun Kimura, Uejima Motoyuki, Wataru Ota, Tohru Sato*, Shinpei Kusaka, Ryotaro Matsuda, Hiroshi Nishihara, and Tetsuro Kusamoto, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 143 , 4329-4338 (2021). “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). |
| 【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) | <ol style="list-style-type: none"> 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】 | <p>2021年 5月 第2回理論化学会奨励賞 2021年 2月 英国王立化学会 第15回 PCCP Prize 2020年 3月 日本化学会 第34回若い世代の特別講演会 講演者 2019年 6月 第22回理論化学討論会 優秀講演賞 2019年 4月 日本化学会 第99春季年会 (2019) 優秀講演賞 (学術) 2019年 2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</p> |

(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 工学博士(京都大学) |
| 【略歴】 | 1974-1975年 カナダ・アルバータ大学・博士研究員 1988年-1993年 名古屋大学教養部・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 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) | <ol style="list-style-type: none"> Higher-Order Transition State Approximation, Takahito Nakajima, Kimihiko Hirao, and Bun Chan, <i>J.Chem.Phys.</i> 2022 156 114112. Is charge-transfer excitation through a polyalkane single-bond chain an intramolecular charge-transfer? EOM-CCSD and LC-BOP study Jong-Won Song and Kimihiko Hirao, <i>Chem.Phys.Lett.</i> 2022 796 139563 (6 pages) Vertical Ionization Potential Benchmarks from Koopmans Prediction of Kohn-Sham Theory with Long-Range Corrected (LC) Functional. Kimihiko Hirao, Han-Seok Bae, Jong-Won Song, and Bun Chan, <i>JPCM (Enrico Clementi Memorial Issue) J. Phys.: Condens. Matter</i> 2022 34 194001 (9 pages) Taking Advantage of a Systematic Energy Non-linearity Error in Density Functional Theory for the Calculation of Electronic Energy Levels, Bun Chan, William Dawson, Takahito Nakajima, Kimihiko Hirao, <i>J. Phys. Chem. A</i> 2021 125 (49), 10507-10513 An Improved Slater's Transition State Approximation Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, and Bun Chan, <i>J.Chem.Phys.</i> 2021 155 034101. 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, 125, 16, 3489-3502. Rapid prediction of ultra-visible spectra from conventional (non-time-dependent) density functionak theory calculations, Bun Chan and Kimihiko Hirao, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 2020, 11, 7882. 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 124, 8079-8087. 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 Son, and Han-Seok Bae <i>J.Phys.Chem. A</i>, 2020 124, 10482-10494. 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 41, 1368-1383. |
| | (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) シニアリサーチフェロー

| | |
|-------------------------|---|
| 【氏名 (ふりがな)】 | 高塚 和夫 (たかつか かずお) |
| 【職名】 | シニアリサーチフェロー |
| 【所属】 | 福井謙一記念研究センター |
| 【研究室】 | 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, 化学動力学理論, 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, 励起状態における化学結合論 |
| 【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-2021年3月 福井謙一記念研究センター リサーチリーダー 2021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. 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). 2. 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) 3. 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) 4. Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki, “Energy Natural Orbitals” J. Chem. Phys. 154 , 094103 (2021). (14 pages). 5. Kazuo Takatsuka “Electron dynamics in molecular elementary processes and chemical reactions” Bull. Chem. Soc. Jpn. 94 , 1421-1477 (2021). 6. Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki “An orbital picture extracted from correlated electronic wavefunctions for symmetry-forbidden and nonadiabatic chemical reactions: 70 years of Fukui frontier orbital theory and beyond.” J. Chem. Phys. 155 , 064104 (2021). (18pages) 7. Kazuo Takatsuka “Time-dependent variational dynamics for nonadiabatically coupled nuclear and electronic quantum wavepackets in molecules” Eur. Phys. J. D 75 , 252 (2021). |
| 【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) |

(7) 研究員

| | |
|-------------------------|--|
| 【氏名 (ふりがな)】 | 田中 一義 (たなか かずよし) |
| 【職名】 | 研究員 |
| 【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・デバイス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 2021年4月から 京都大学福井謙一記念研究センター研究員 |
| 【所属学会】 | 該当なし |
| 【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. New Polymeric Materials Based on Element-Blocks (共著, Springer Nature, Singapore, 2019) 2. Theoretical Chemistry for Experimental Chemists – Pragmatics and Fundamentals” (単著, Springer Nature, Singapore, 2020) . 3. Organic Semiconductors for Optoelectronics (共著, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, West Sussex, UK, 2021) <p>(以上著書)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 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). 2. 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). 3. 化学つれづれ草 第三回 博士課程 考 (単著) 化学 72, No. 7, 29 (2017). 4. 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). 5. 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). 6. 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). 7. 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). 8. 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). 9. 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). 10. 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). 11. 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). 12. 化学つれづれ草 第十二回 論文不正 (単著) 化学 73, No. 4, 19 (2018). 13. 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). 14. 化学つれづれ草 第十四回 無用の用 (単著) 化学 73, No. 6, 20 (2018). 15. 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). |

| | | |
|-----|----------------|--|
| 16. | 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) |
| 17. | 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). |
| 18. | 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). |
| 19. | 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). |
| 20. | 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). |
| 21. | 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). |
| 22. | 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). |
| 23. | 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) |
| 24. | 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). |
| 25. | シミュレーションか理解か | —量子化学分野だけにとどまらない緊張関係— Roald Hoffmann (訳) 現代化学 No. 1, 28-32 (2019). |
| 26. | 化学つれづれ草 第二十四回 | 人にわかってもらおうこと (単著) 化学 74, No. 4, 45 (2019). |
| 27. | 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). |
| 28. | 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). |
| 29. | 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). |
| 30. | 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). |
| 31. | 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). |
| 32. | 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). |
| 33. | 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). |
| 34. | 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). |
| 35. | 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). |
| 36. | 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). |
| 37. | 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). |
| 38. | 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). |
| 39. | 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). |
| 40. | 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). |
| 41. | 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). |
| 42. | 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). |
| 43. | 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). |
| 44. | 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). |
| 45. | 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). |
| 46. | 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 (単著) 化学 75, No. 12, 48 (2020). |
| 47. | 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). |

| |
|--|
| 48. 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). |
| 49. 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). |
| 50. 化学つれづれ草 第四十八回 書いてみたい論文 (単著) 化学 76, No. 4, 23 (2021) |
| 51. 化学つれづれ草 第四十九回 論文の査読 (単著) 化学 76, No. 5, 31 (2021) |
| 52. 化学つれづれ草 第五十回 思い出の研究 2 (単著) 化学 76, No. 6, 41 (2021) |
| 53. 化学つれづれ草 第五十一回 非晶質材料 more (単著) 化学 76, No. 7, 37 (2021) |
| 54. 化学つれづれ草 第五十二回 国際的標準化 (単著) 化学 76, No. 8, 29 (2021) |
| 55. 化学つれづれ草 第五十三回 波動関数の一乗 (単著) 化学 76, No. 9, 49 (2021) |
| 56. 化学つれづれ草 第五十四回 気になる用語三つ (単著) 化学 76, No. 10, 35 (2021) |
| 57. 化学つれづれ草 第五十五回 蒙亨 (単著) 化学 76, No. 11, 41 (2021) |
| 58. 化学つれづれ草 第五十六回 今年のノーベル物理学賞 (単著) 化学 76, No. 12, 59 (2021) |
| 59. 化学つれづれ草 第五十七回 専門書を書き残すこと more (単著) 化学 77, No. 1, 33 (2022) |
| 60. 化学つれづれ草 第五十八回 一味違うエントロピー (単著) 化学 77, No. 2, 35 (2022) |
| 61. 化学つれづれ草 第五十九回 歴史的化学論文大賞って何? (単著) 化学 77, No. 3, 41 (2022) |
| 62. 分子軌道法 (単著) 接着学会誌 56, No. 11, 431-440 (2020). |
| 63. 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). |
| 64. 量子コンピュータの仕組み (単著) 現代化学 No. 6, 38-44 (2020). |
| 65. 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). |
| 66. 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). |
| 67. 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). |
| 68. 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). |
| 69. 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). |
| 70. 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). |
| 71. 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). |
| 72. 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). |
| 73. 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). |
| 74. 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). |
| 75. 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). |
| 76. 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). |
| 77. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 13 化学反応経路を調べる (単著) 現代化学, No. 4, 62-65 (2021) |
| 78. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 14 分子間力の考慮 (単著) 現代化学, No. 5, 71-75 (2021) |
| 79. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 15 数学補講 (単著) 現代化学, No. 6, 56-60 (2021) |

| | |
|--------------------|---|
| <p>【学術関係の受賞など】</p> | <p>80. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 16 分子シミュレーション (単著) 現代化学, No. 7, 56-61 (2021)</p> <p>81. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 17 大きな分子 (単著) 現代化学, No. 8, 54-57 (2021)</p> <p>82. 計算化学入門 理論化学とのスムーズな接続を目指して 18 1次元結晶や2次元結晶の扱い方 (単著) 現代化学, No. 9, 56-61 (2021)</p> <p>83. 化学のための数学入門 1 熱力学と偏微分 (単著) 現代化学, No. 1, 64-67 (2022)</p> <p>84. 化学のための数学入門 2 量子力学と偏微分 (単著) 現代化学, No. 2, 64-68 (2022)</p> <p>85. 化学のための数学入門 3 常微分方程式 (単著) 現代化学, No. 3, 63-67 (2022)</p> <p>(以上和文総説)</p> <p>1. Borophosphonate Cages as Element-blocks: Ab Initio Calculation of the Electronic Structure of a Simple Borophosphonate, $[\text{HPO}_3\text{BH}]_4$, 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).</p> <p>2. 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).</p> <p>3. 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).</p> <p>4. 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).</p> <p>5. 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).</p> <p>6. 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).</p> <p>7. 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).</p> <p>8. Hydrogen Adsorption/Desorption Properties of Anhydrous Metal Oxalates; Metal = Mg^{2+} and Ca^{2+} (M. Matsumoto, T. Kita, and K. Tanaka) Bull. Chem. Soc. Jpn. 93, 985-987 (2020).</p> <p>9. How to Explain an SN_2 Reaction ? (M. Murakami and K. Tanaka) J. Synth. Org. Chem., Jpn, 79, 1073-1076 (2021).</p> <p>(以上学術論文)</p> <p>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</p> <p>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 の数理工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</p> |
|--------------------|---|

| | |
|-------------------------|---|
| 【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, “Gropup 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. M. Tanaka, T. Kato, and M. Oda, “Conformational changes of α-helical peptides with different hydrophobic residues induced by metal-ion binding”, <i>Biochemical Chemistry</i>, 277, 106661(2021). 2. Y. Yamada, H. Iida, S. Shibano, N. Mihara, T. Kato, and K. Tanaka, “Significant Effect of Flexibility of Bridging Alkyl Chains on the Proximity of Stacked Porphyrin and Phthalocyanine Conjugated with Fourfold Rotaxane Linkage”, <i>Chemistry – A European Journal</i>, e202200819 (2022). |
| 【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

2021 (令和3) 年度

| 職 名 | 氏 名 |
|------------------|---------|
| 高塚グループ 研究フェロー | 新 崎 康 樹 |

2. 博士研究員プロフィール

| | |
|-------------------------|--|
| 【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, J. Chem. Phys. 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, Chem. Phys. 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, J. Chem. Phys. 150, 114101 (2019, 18 pages). 5. K. Takatsuka and Y. Arasaki, Energy natural orbitals, J. Chem. Phys. 154, 094103 (2021, 14 pages). |

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

日 時 2022年1月26日 (水) 13:00 – 18:30

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

水上 渉 (大阪大学量子情報・量子生命研究センター)

「確率的手法を用いた量子化学計算: ニューラルネットワークと量子コンピュータの利用」

座長: 西本 佳央 (京都大学大学院理学研究科)

14:05 – 14:55

石井 史之 (金沢大学ナノマテリアル研究所)

「固体中のスピン軌道相互作用とエネルギー変換」

座長: 春田 直毅 (京都大学福井謙一記念研究センター)

15:05 – 15:55

森 俊文 (九州大学先導物質化学研究所)

「生体分子の動的構造と機能発現機構の理論的解明」

座長: 中農 浩史 (京都大学大学院工学研究科)

受賞講演 16:05 – 16:30

福井謙一奨励賞 (第5回) 受賞講演

受賞者: 植松 祐輝 (九州大学大学院理学研究院)

「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」

座長: 佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)

ポスターセッション 16:40 – 18:30

2. セミナー

(1) 福井センターセミナー

2021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

2021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

2021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。留学生1名を受け入れた。（資料編を参照）

4. 社会へのアウトリーチ活動

<学術講演>

（1） 田中一義 研究員 2022（令和4）年1月31日（月）

演 題： 計算化学の役立てかた

行事名： 京都グリーンケミカル・ネットワーク令和3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。

今年度のセンターオンラインシンポジウムにて、令和2年度の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た。（資料編を参照）

6. 福井博士記念室の設置

本センターは、前身である財団法人基礎化学研究所時代を含む福井博士の多数の資料を保有しており、これらの維持管理に加え、近年では外部からの取材依頼なども多くなっている。こうしたことから福井博士の理念・業績に関わる情報発信をより組織化・強化することを目的とし、センター内に新たに福井博士記念室を設置し、体制の整備に着手することとなった。また、全学特別協力経費として「福井謙一博士講義録アーカイブ事業実施経費」が措置され、講義録の収録を進めている。

7. その他

福井博士のフロンティア電子理論に関する論文、野依良治博士の不斉触媒反応に関する論文およびギブズ博士の論文が、2021年米国化学会「歴史的化学論文大賞」に選出された。

この賞は、18世紀の後半から今日に至る自然科学研究における膨大な数の論文の中から、人類の発展に著しく貢献した歴史的な化学論文が選定され、その研究が行われた研究機関を顕彰するものである。これまで、アボガドロの分子説に関する論文 (1811年)、パスツールの光学活性体の発見に関する論文 (1848年)、メンデレーエフの元素の周期律に関する論文 (1869年)、キュリー夫妻の放射性元素発見に関する論文 (1898年)、ワトソンとクリックのDNA二重螺旋に関する論文 (1953年) など、画期的な約80篇の論文が選出され、歴史を塗り替えた研究の現場として、それぞれの研究機関が顕彰されてきた。

福井博士および野依博士の業績はアジアから初めての受賞となった。2022年1月20日に、京都大学、名古屋大学、分子科学研究所および高砂香料工業株式会社による受賞オンライン共同発表・記者会見を行い、福井博士の業績を田中一義研究員が紹介した。また、本センター展示コーナーに記念銘板が設置された。

<https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/news/2858.html>

[Citations for Chemical Breakthroughs - 2021 Awardees \(illinois.edu\)](#)



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

内部転換過程における振電相互作用とエネルギーギャップ

励起状態と基底状態間や励起状態間の遷移は、それが光子またはフォノンのどちらにより引き起こされるかに応じて、輻射遷移と無輻射遷移に分類される。分子における核の運動を扱う表現として Born-Oppenheimer (BO) 表現と Crude Adiabatic (CA) 表現がある。本研究では、CA 表現に基づき、多モードを考慮した内部転換速度定数の表式を導出し、9-フルオレノン为例として計算を行った。また、振電相互作用の密度形式である振電相互作用密度 (VCD) および、振動双極子モーメントで重み付けした終振電状態の状態密度により、内部転換過程における振電相互作用とエネルギーギャップの役割について明らかにした。

CA 近似における、電子状態 m から n への内部転換の速度定数は

$$k_{n \leftarrow m}^{\text{IC}} = \sum_{\alpha} k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$$

$k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$ は振動モード α のフォノンの放出・吸収を伴う内部転換速度定数であり、

$$k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}} = \frac{1}{\hbar} |V_{nm, \alpha}|^2 \times \Theta_{\alpha \alpha}$$

ここで、 $V_{nm, \alpha}$ は電子状態 n と m の間の非対角振電相互作用定数 (VCC)、 $\Theta_{\alpha \alpha}$ は振動双極子モーメントで重み付けした終状態の状態密度である。非対角 VCD は非対角 VCC の被積分関数として与えられる [1]。

$$V_{nm, \alpha} = \int dx \eta_{nm, \alpha}(\mathbf{x})$$

ここで、

$$\eta_{nm, \alpha}(\mathbf{x}) = \rho_{nm}(\mathbf{x}) \times v_{\alpha}(\mathbf{x})$$

$\rho_{nm}(\mathbf{x})$ は電子状態 n と m の間の重なり密度、 $v_{\alpha}(\mathbf{x})$ は振動モード α のポテンシャル導関数である。

9-フルオレノンの S_1 - S_0 間の内部転換速度定数を計算した。その計算値は $8.8 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ であり、実験値 ($8.6 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$) [2] を再現した。Fig. 1 に各振動モードごとの $k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$, $V_{nm, \alpha}$, $\Theta_{\alpha \alpha}$ を示す。 $\alpha = 34, 48$ に対する $k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$ が大きな値を持つ。Fig. 2 に $\alpha = 34$ の非対角 VCD 解析の結果を示す。重なり密度は C1-C2 の伸縮振動により生じる $\alpha = 34$ のポテンシャル導関数と強くカップルし、この結合上に大きな非対角 VCD を与える。その結果、 $\alpha = 34$ の非対角 VCC は主に C1, C2 から生じることがわかった。Fig. 3 に $\alpha = 34$ の振動双極子モーメントで重み付けした終振電状態の状態密度を示す。重み付け状態密度は励起エネルギーに関して指数関数的に減衰し、その減衰の程度は対角 VCC と振動数に依存することがわかった。本研究の手法により、内部転換速度定数を振電相互作用とエネルギーギャップの寄与に分割して理解し、さらにその起源を特定することが可能となった。

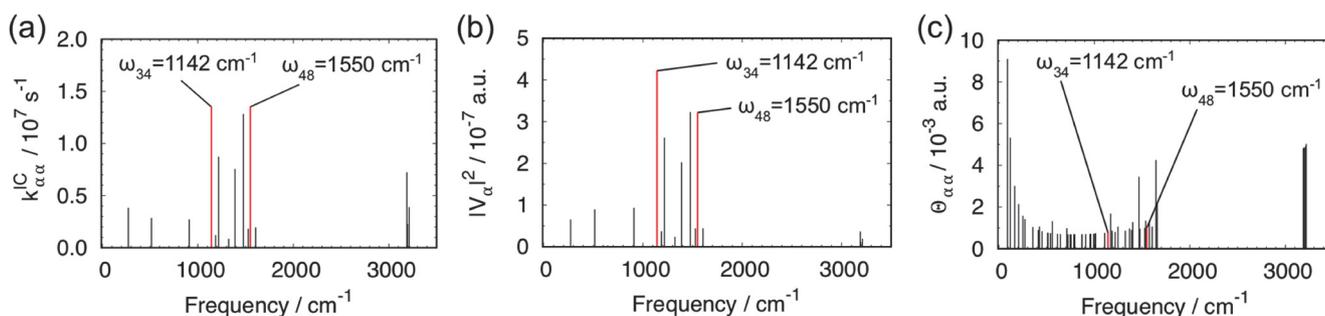


Fig. 1. (a) $k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$, (b) $|V_{nm, \alpha}|^2$, and (c) $\theta_{\alpha \alpha}$ of each vibrational mode.

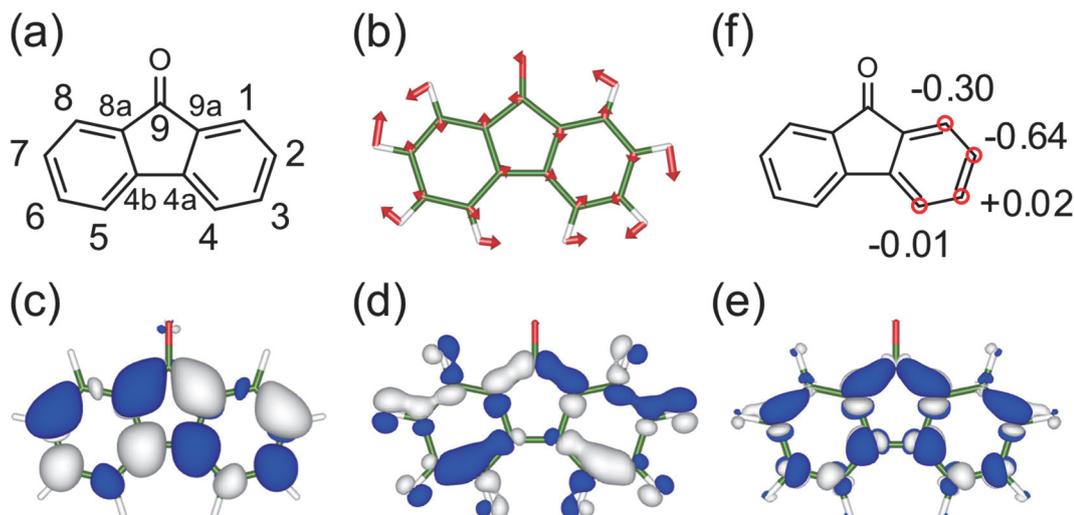


Fig. 2 (a) Structure of 9-fluorenone, (b) vibrational mode $\alpha = 34$, (c) overlap density between S_1 and S_0 , ρ_{nm} , (d) potential derivative, v_{α} , (e) off-diagonal VCD, $\eta_{nm, \alpha}$, and (f) atomic VCC in 10^{-4} a.u.

【文献】 [1] T. Kato et al., Vibronic Coupling Density: Understanding Molecular Deformation (Springer, Singapore, 2021). M. Uejima et al., Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 14244 (2014). [2] R. S. Murphy, C. P. Moerland, W. H. Green, C. Bohne, J. Photochem. Photobiol. 1997, 110, 123.

Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の超周期構造と担体効果

$\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$ 表面に担持した PdO 触媒(PdO/ST-32)は、自動車用排ガス浄化触媒として高い触媒活性を示し、アンカー効果により触媒金属の凝集が抑制されることが報告されている 1)。さらに、STEM により、PdO は疎密の縞模様が周期的に繰り返される超周期構造を持つことが観測されている 1)。PdO/ST-32 における超周期構造は、触媒としての優れた性能と関連性があると考えられるが、この超周期構造の発現メカニズム、およびアンカー効果の由来は明らかになっていない。本研究では、PdO/ST-32 におけるこの特徴的な超周期構造の発現メカニズムと、アンカー効果について理論的に検討した。

PdO/ST-32 の触媒表面をスラブモデルによりモデル化し、密度汎関数法に基づく第一原理計算パッケージ(Quantum ESPRESSO)を用いて、触媒表面の電子状態計算を行った。本研究では、常温・常圧下で安定な構造として知られている空間群 P42/mmc の PdO 結晶ではなく、岩塩型構造であ

る $Fm\bar{3}m$ の PdO 結晶 2) が ST-32 上に成長していると予測し、後者の岩塩型 PdO 結晶を触媒金属モデルに用いた。また、岩塩層で切断した Sr-rich な面が最表面として現れる ST-32 の結晶構造を触媒担体モデルに用いた。

作成した触媒表面モデルの構造最適化計算を行った結果、実験で観測されている超周期構造を再現した (Fig. 1)。初期構造に用いた岩塩型構造の PdO 結晶は、中心の Pd^{2+} イオンに 6 つの O^{2-} イオンが配位した正八面体金属錯体が側面を共有することで連なった構造とみせる。ここで、この PdO 正八面体金属錯体は、高スピン型 d8 配置であり、Jahn-Teller 変形は生じない。しかし、Bader 電荷解析によると、PdO は Fig. 1(c) のユニットセル全体として約 1 個分の電子を ST-32 から得ており、ST-32 上の PdO 正八面体金属錯体は高スピン型 d8 配置とは異なる電子配置になっていると考えられる。この電荷移動によって、PdO 正八面体構造において Jahn-Teller 変形が生じると考えられる。実際、変形前後の各 Pd イオンの 4d 軌道の状態密度を計算すると、Jahn-Teller 変形に伴って、二重に縮退する eg 軌道の一方の軌道は安定化し、もう一方の軌道は不安定化するという結果が得られた。以上のことから、超周期構造は、ST-32 からの電荷移動によって生じた PdO の Jahn-Teller 変形によって引き起こされたものと考えられる。構造最適化後のスラブモデルにおいて、PdO と ST-32 の接合面における Pd と O の間の COHP (Crystal Orbital Hamilton Population) およびその積分である ICOHP を計算した。その結果、-COHP をエネルギーに対してフェルミ準位まで積分した値である -ICOHP が正の値 (1.02) となった。これは Pd-O 間の結合が結合性であることを示している。また、この結合において、Pd の dz^2 軌道と O の p_z 軌道との間の σ 結合による寄与が大きいことが分かった。アンカー効果はこの強い σ 結合性に起因していると予測された。

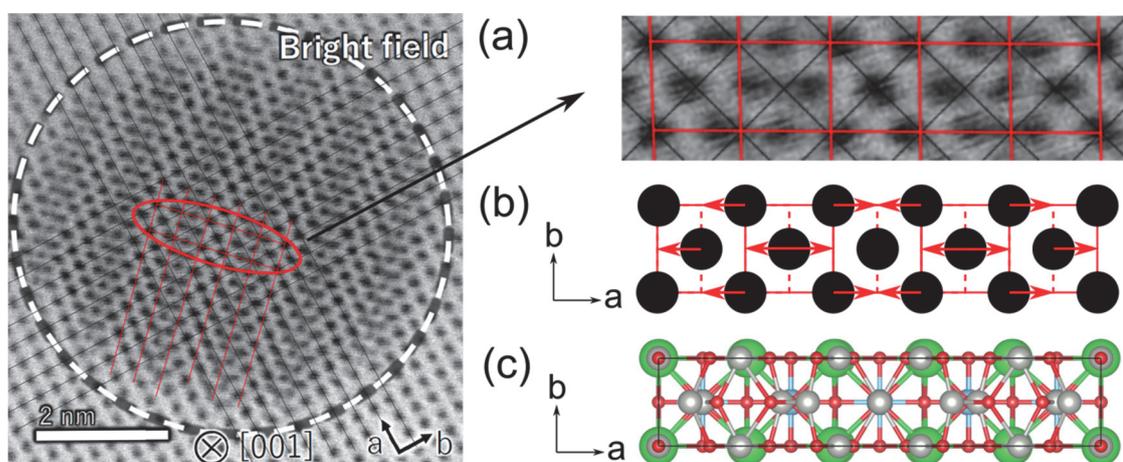


Fig. 3 (a) STEM image of the PdO/ST-32 surface, (b) schematic diagram of Pd particles on the PdO/ST-32 surface, and (c) geometry optimized structure of the PdO/ST-32 surface.

【文献】 1) 新開, 細川, 朝倉, 寺村, 田中, 第 128 回触媒討論会, 1H08 (2021)

2) J. Kumar et al., *J. Less-Common Metals*, 147, 59 (1989)

3) R. Dronskowski, et al., *J. Phys. Chem.*, 97, 8617 (1993)

2. 著書

(1) S. Kimura, M. Uejima, W. Ota, T. Sato, S. Kusaka, R. Matsuda, H. Nishihara, and T. Kusamoto,

J. Am. Chem. Soc., **143**, 4329 (2021).

(2) M. Takahashi, Nozomu Ito, Naoki Haruta, Hayato Ninagawa, Kohei Yazaki, Yoshihisa Sei, T. Sato, and M. Obata, *Commun. Chem.*, **4**, 168 (2021).

(3) Z. Huang, M. D. Albaqami, T. Sato, N. Iwahara, and L. F. Chibotaru, *Phys. Rev. B*, **103**, 134102 (2021).

3. 学会発表

(1) 在間 嵩朗, 大田 航, 大北 英生, 佐藤 徹

「有機薄膜太陽電池材料 ITIC の自発的対称性の破れによる電荷分離状態の生成」

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, オンライン, 2022/01/26

(2) 大西駿也, 大田 航, 高倉 陸, 春田 直毅, 細川 三郎, 寺村 謙太郎, 田中 庸裕, 佐藤 徹

「Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の超周期構造と NO 吸着の領域選択性」

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, オンライン, 2022/01/26

(3) 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」

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, オンライン, 2022/01/26

(4)

4. その他

(1) 佐藤 徹, 大田 航, 藤原 絵美子, 平 翔太, 平岡 拓, 坂上 恵, 坂本 雅典

「化合物、発光材料および有機発光素子」

特願 2021-125999, 出願日 2021/07/30

春田 直毅

特定助教

1. 今年度の研究の要約

【Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd の CO 酸化に対する触媒活性】

近年、Pd を $\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$ (ST-32) に担持させることで、CO 酸化などに対して高い触媒活性を示すことが報告された¹⁾。このとき、担持 Pd は酸化されているが、STEM 観察により、通常の PdO 結晶では見られない縞状の超周期構造を示すことが分かっている。しかし、超周期構造と高い触媒活性の関連性は未解明であった。本研究では、この触媒において、超周期構造が CO 酸化に対する触媒活性に与える影響を理論的に解明することを目的とする。

岩塩型 PdO を ST-32 (001) 面に載せた (5×1) スラブモデルを構造最適化することで、超周期構造を有するスラブモデルを得た²⁾。このモデルの各表面 Pd, O 原子上に CO を配置し、構造最適化を行うことで、吸着エネルギーを求めた。さらに、吸着 CO 近傍の表面 O 原子と Pd 原子の間の距離を変化させながら relaxed scan を行うことで、 $\text{CO} + \text{O} \rightarrow \text{CO}_2$ の活性化障壁を求めた。比較のため、超周期構造を形成する前の (5×1) スラブモデルでも活性化障壁を求めた。計算レベルは PBE+U (U of Pd = 8.75 eV) / 平面波基底 (カットオフ : 60.0 Ry) とし、Quantum Espresso 6.3 を使用した。

超周期構造における CO 吸着エネルギーは、Pd1 上で 1.9 eV、Pd2 上で 3.0 eV、Pd3 上で 4.2 eV、O 原子上ではいずれも 50 meV 以下となった (Fig. 1)。Pd3 上で安定となったのは、超周期構造を形成した際に、吸着時の反応性指標となるアニオン状態と中性状態の間の差電子密度が Pd3 上で局在するためと考えられる (Fig. 2)。また、 $\text{CO} + \text{O} \rightarrow \text{CO}_2$ の活性化障壁は、CO が表面 O 原子を直接引き抜くよりも、表面 Pd 原子に吸着した後に表面 O 原子を引き抜く方が 1.0 eV 以上低かった。Pd3 吸着後の活性化障壁は、超周期構造で 0.77 eV、均一表面で 1.1 eV であり、超周期構造を形成することで CO 酸化に対する触媒活性が向上することが分かった。

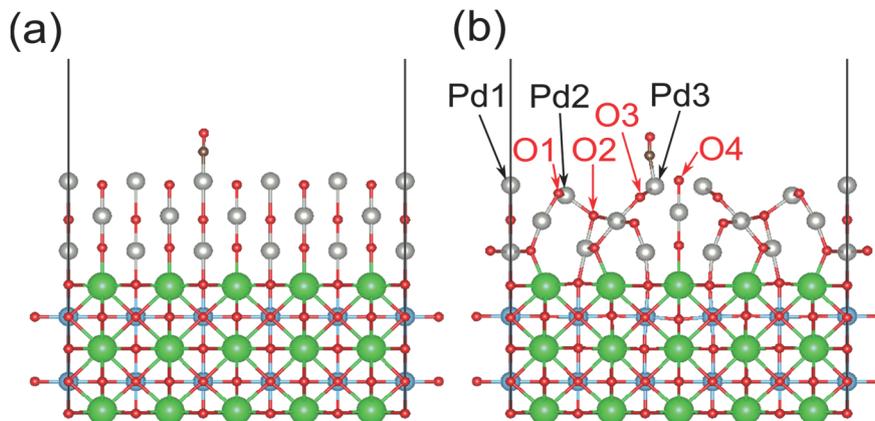


Fig. 1 CO adsorption on PdO/ST-32: (a) uniform and (b) superperiodic structures.

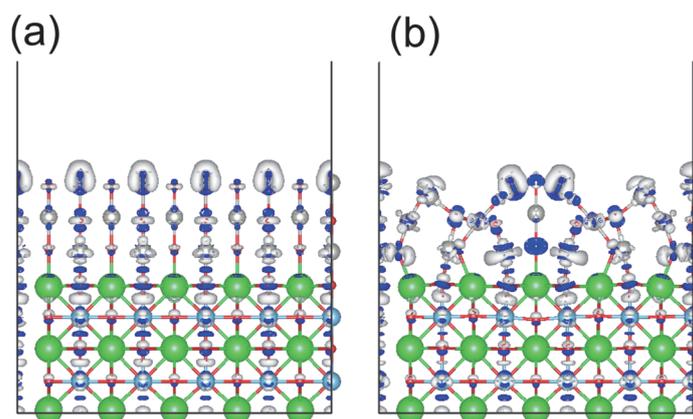


Fig. 2 Electron density difference of Pd0/ST-32 between neutral and anionic states: (a) uniform and (b) superperiodic structures.

【Sn ドープ亜鉛リン酸塩ガラスの発光機構】

リン酸塩ガラスは半導体素子保護用の封止材などに広く用いられている。こうしたガラス材料に発光性を付与できれば、透明性と化学的耐久性を併せ持つ新たな発光デバイスの創製につながる。近年、Masai らにより、亜鉛リン酸塩ガラスに低濃度の Sn をドープすると、青色発光が高い量子収率で生じることが報告された^{3), 4)}。しかし、この SnO-ZnO-P₂O₅ ガラス (SZP) の発光に寄与する局所構造は特定されておらず、その発光メカニズムも未解明であった。本研究は、実験で観測される SZP の吸収・発光スペクトルを再現するモデルクラスターを構築し、その電子構造を解析することで、SZP の高効率発光メカニズムを理論的に解明することを目的とする。

まず、Sn²⁺の励起状態計算を行った。次に、酸化スズ (II) の基本ユニット SnO₄ に、亜鉛、ピロリン酸の基本ユニットを結合してモデルクラスター SnZn₂P₈O₃₆ を構築した。Sn, Zn, P, O, H の各形式酸化数が +2, +2, +5, -2, +1 となるように末端酸素を水素終端し、基底状態で構造最適化、振動解析、励起状態で一点計算、構造最適化、振動解析を行った。計算レベルは (TD-)B3LYP/SDD (Sn, Zn), 6-311G(d,p) (P, O, H) とし、Gaussian 16 Rev. B.01 を使用した。

Sn²⁺の s→p 遷移の励起エネルギーは 10 eV と計算され、SZP で観測される吸収ピーク位置 (5.0 eV) よりも高エネルギーであった。これは、SZP 中では Sn の周囲にまで波動関数が非局在化するためと考えられる。そこで、酸化スズ (II) の基本ユニット SnO₄ に、亜鉛、ピロリン酸の基本ユニットを結合することで、より大きなモデル SnZn₂P₈O₃₆ を構築した。その際、Sn の s 軌道と p 軌道を含む分子軌道が非局在化するように、軌道相互作用を考慮しながら、基本ユニットを結合した。得られたモデルを水素終端し、SnZn₂P₁₀O₄₀H₂₄ を得た (Fig. 3(a))。

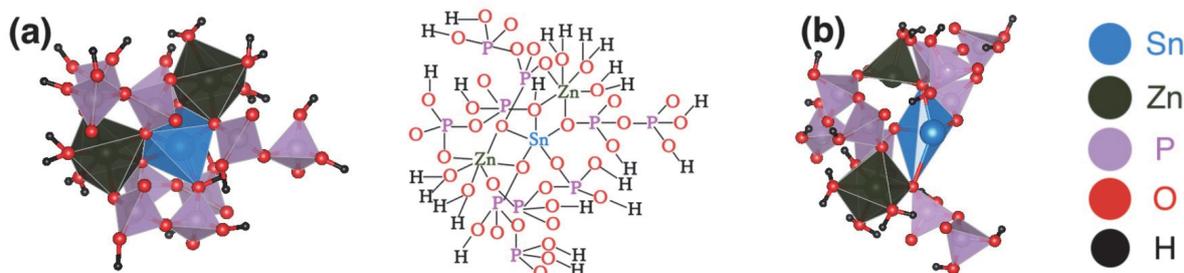


Fig. 3 (a) SnZn₂P₁₀O₄₀H₂₄ and (b) its S₀-optimized structure.

このモデルに対して、基底状態で構造最適化を行い (Fig. 3(b))、さらに励起状態一点計算を行ったところ、Sn の $s \rightarrow p$ 遷移に対応する $S_0 \rightarrow S_2$ が大きな振動子強度を有することが分かった (Fig. 4)。また、その励起エネルギー (6.3 eV) は Sn^{2+} の $s \rightarrow p$ 遷移よりも低エネルギーであり、観測されるピーク位置 (5.0 eV) に近い値となった。

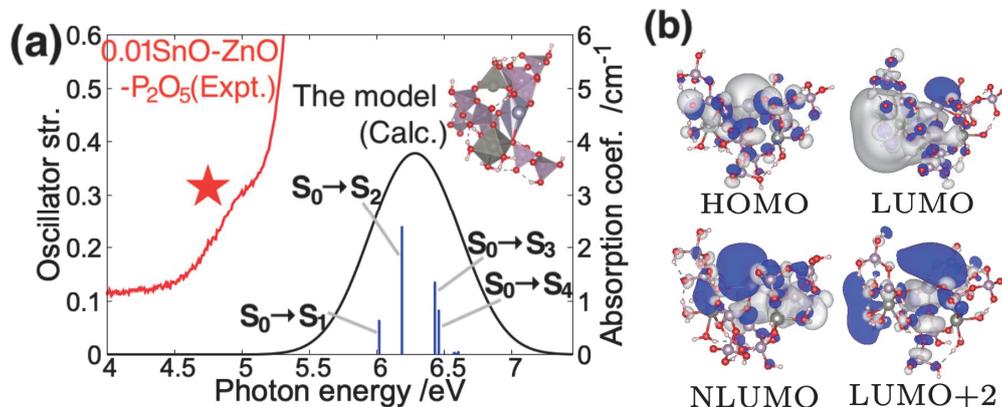


Fig. 4 (a) The absorption spectra of $0.01\text{SnO-ZnO-P}_2\text{O}_5$ ⁵⁾ and the model with the linewidth of 500 cm^{-1} and (b) its MOs.

T_3 , T_4 の準位が S_2 に近いことから (Fig. 5)、 S_2 への光励起の後、 T_4/T_3 に項間交差が起こり、内部転換を経て T_1 からリン光を発する可能性が考えられる。励起状態で構造最適化を行ったところ、 S_1 断熱状態及び T_1 断熱状態での S_0 への垂直遷移エネルギーは 0.4 eV, 1.6 eV となり、観測される発光ピーク位置 (3.0 eV) よりも低エネルギーとなった。この不一致は、モデル周囲のパッキング効果が無視されたことによる振動緩和の過大評価が原因であると考えられる。

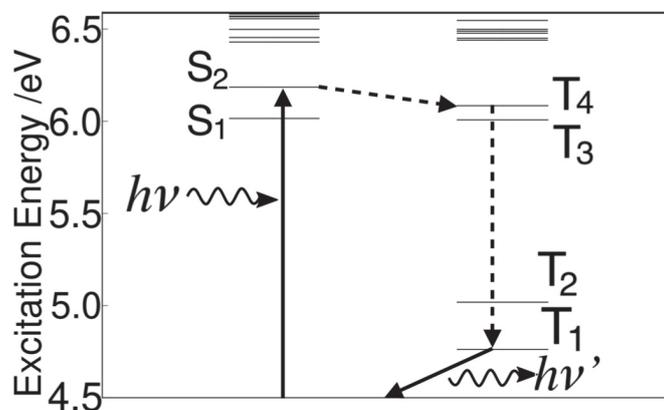


Fig. 5 Excitation energies of the model at its S_0 -optimized structure.

【文献】

- 1) 渡邊力, 令和元年度京都大学大学院工学研究科分子工学専攻修士論文審査会, 2020年3月5日.
- 2) 大西駿也, 大田航, 高倉陸, 春田直毅, 細川三郎, 寺村謙太郎, 田中庸裕, 佐藤徹, 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, 39, 2022年1月26日.
- 3) H. Masai *et al.*, Opt. Lett. 36, 2868 (2011).
- 4) H. Masai *et al.*, Opt. Express 20, 27319 (2012).
- 5) H. Masai, unpublished result.

2. 論文

- (1) Yuansen Tang, Naoki Haruta, Akiyoshi Kuzume, and Kimihisa Yamamoto,
“Development of Highly Sensitive Raman Spectroscopy for Subnano and Single-Atom Detection”
Molecules 26, 5099 (2021).
- (2) Masaki Takahashi, Nozomu Ito, Naoki Haruta, Hayato Ninagawa, Kohei Yazaki, Yoshihisa Sei, Tohru Sato, and Makoto Obata,
“Environment-sensitive emission of anionic hydrogen-bonded urea-derivative-acetate-ion complexes and their aggregation-induced emission enhancement”
Commun. Chem. 4, 168 (2021).

3. 書籍

- (1) Tatsuhisa Kato, Naoki Haruta, and Tohru Sato,
“Vibronic Coupling Density: Understanding Molecular Deformation”
Springer, Singapore, 2021.

4. 総説

- (1) 塚本 孝政、春田 直毅、山元 公寿
「対称適合軌道モデルを基盤とした原子クラスターの電子状態予測」
The Bulletin of the Nano Science and Technology 20(2), 45-50 (2022).

5. 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」
第 23 回理論化学討論会 オンライン 2021/5/13 1P16
- (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」
第 23 回理論化学討論会 オンライン 2021/5/15 3L14
- (3) 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」
日本コンピュータ化学会 2021 春季年会 オンライン 2021/6/5 1005
- (4) 春田 直毅、Paulo Filho、Marques de Oliveira、Alain Chamayou、佐藤 徹、田中

一義、Michel Baron

「メカノケミカル条件に特有な反応経路の発現機構」

第 15 回分子科学討論会 2021 札幌 オンライン 2021/9/20 3D02

(5) 矢田 達寛、春田 直毅、佐藤 徹

「置換位置に依存した同位体効果の理論予測」

第 15 回分子科学討論会 2021 札幌 オンライン 2021/9/21 4P019

(6) 矢田 達寛、春田 直毅、佐藤 徹

「置換位置に依存した同位体効果の理論予測」

第 11 回 CSJ 化学フェスタ 2021 オンライン 2021/10/19 P1-067

(7) 春田 直毅

「縮退と擬縮退の数理に立脚した新たな金属クラスターの科学」

第 17 回分子性固体オンラインセミナー オンライン 2021/12/23

(8) 春田 直毅

「金属クラスターの理論化学から高密度共役の科学に向けて」

高密度共役の科学 第 2 回公開シンポジウム オンライン 2022/1/28

6. その他

(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」

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 オンライン
2022/1/26 18

(2) 大西 駿也、大田 航、高倉 陸、春田 直毅、細川 三郎、寺村 謙太郎、田中 庸裕、
佐藤 徹

「Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の超周期構造と NO 吸着の領域選択性」

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 オンライン
2022/1/26 39

2. リサーチダイレクター

Kimihiro Hirao

Research Director

(1) Summary of the research of the year

Vertical Ionization Potential Benchmarks from Koopmans Prediction of Kohn-Sham Theory with Long-Range Corrected (LC) Functional

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. 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". 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.

Kohn–Sham theory (KS) with the long-range corrected (LC) functional is applied to the benchmark dataset of 401 valence ionization potentials (IP) of 63 small molecules of Chong, Gritsenko and Baerends (referred to as the CGB set). The vertical ionization potentials of the CGB set are calculated as negative orbitals energies within the context of the Koopmans’ prediction using LCgau-core functional in combination with PW86-PW91 exchange-correlation functional. The range separation parameter μ of the LC functional is optimized to minimize the error of the negative HOMO orbital energy from experimental IP. The present results are compared with literature data such as *ab initio* IP variant of equation of motion coupled cluster theory with singles and doubles (IP-EOM-CCSD) and negative orbital energies calculated by KS with the statistical averaging of orbitals potential (SAOP), and QTP family of functionals. The optimally tuned LC functional performs better in estimating the valence level IP than any other functionals. The mean absolute deviations (MAD) from experiment and from IP-EOM-CCSD are 0.31 eV and 0.25 eV, respectively. Even if we use the fixed μ (not system-dependent), LCgau-core performs quite well. The μ around 0.36 bohr⁻¹ gives MAD of 0.40 eV and 0.33 eV relative to experiment and IP-EOM-CCSD, respectively. The present LCgau-core-PW86-PW91 is efficient and reasonably accurate at least for outer valence

orbitals alternative to IP-EOM-CCSD. The scheme is also applied to the core ionization energies of C(1s), N(1s), O(1s) and F(1s). The C(1s) core ionization energies are reproduced reasonably accurate (MAD of 46 cases is 0.76 eV) but N(1s), O(1s) and F(1s) core ionization energies are predicted less accurately.

An Improved Slater's Transition State Approximation

We have extended Slater's transition state concept for the approximation of the difference in total energies of the initial and final states by three orbital energies of the initial, final, and half-way Slater's transition states of the system. Let us define ΔE using three orbital energies, namely the initial, final and half-way states

$$\begin{aligned}\Delta E_{Present} &= \frac{1}{3} \left\{ 2F\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}[F(0) + F(1)] \right\} = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=1/2} + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=0} + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=1} \\ &= \frac{2}{3} \varepsilon_i^{Half-way} + \frac{1}{6} \varepsilon_i^{Neutral} + \frac{1}{6} \varepsilon_i^{Cation} \\ &= E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + \frac{25}{24} E_5 + \frac{27}{24} E_6 + \dots\end{aligned}\quad (1)$$

ΔE can thus be calculated with an error of

$$\delta_{Present} = \frac{1}{24} E_5 + \frac{3}{24} E_6 + \dots\quad (2)$$

Noted that the present theory is correct up to fourth-order and the error starts from the fifth-order, which can be expected to be much smaller than the errors of the other schemes. The difference in total energies is essentially derived from the energies of three orbitals. Because Janak's theorem is satisfied by any SCF theory, this relationship is satisfied by both HF and KS theories.

Numerical validation was performed with the ionization energies (IP) for H₂O, CO and pyrrole by calculation using Hartree-Fock (HF) and Kohn-Sham (KS) theory with the B3LYP and LCgau-core-BOP functionals. The present extended method reproduces full Δ SCF very accurately for all occupied orbitals obtained with HF, and for valence orbitals obtained with KS. KS core orbitals have some errors due to the self-interaction errors but the present method significantly

improves the core electron binding energies (CEBE). In its current form, the newly derived theory may not yet be practically useful, but it is simple and is conceptually useful for gaining improved understanding of SCF-type orbital theories.

(2) Original papers

1. Vertical Ionization Potential Benchmarks from Koopmans Prediction of Kohn-Sham Theory with Long-Range Corrected (LC) Functional.
Kimihiro Hirao, Han-Seok Bae, Jong-Won Song, and Bun Chan, *JPCM (Enrico Clementi Memorial Issue) J. Phys.: Condens. Matter* (Enrico Clementi Memorial Issue) **2022** 34 194001 (9 pages)
2. Taking Advantage of a Systematic Energy Non-linearity Error in Density Functional Theory for the Calculation of Electronic Energy Levels,
Bun Chan, William Dawson, Takahito Nakajima, Kimihiro Hirao, *J. Phys. Chem. A* **2021** 125 (49), 10507-10513
3. An Improved Slater's Transition State Approximation
Kimihiro Hirao, Takahito Nakajima, and Bun Chan, *J.Chem.Phys.* **2021** 155 034101
4. 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.

3. シニアリサーチフェロー

Kazuo Takatsuka**Senior Research Fellow****1. 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. In these pioneering studies, we often face very tough problems arising from nonadiabatically coupled electronic states in highly quasi-degenerate manifold. For instance, it is extremely difficult to characterize the nature of chemical bonds for those states, which are dynamically fluctuating from time to time among themselves. We then come to ask ourselves how we can describe the nature of chemical bonds in a general fashion and how we can characterize bond rearrangement, that is, chemical reactions. We therefore determined to go back to the very basic concept of the nature of chemical bonds and chemical reactions in terms of correlated electronic wavefunctions in an invariant manner. As a general tool with which to do so, we proposed the method of Energy Natural Orbitals (ENO) last year. We then have applied the ENO to the analyses of the nature of chemical bond and transition states and generalized notion of HOMO-LUMO interactions, the Woodward-Hoffmann symmetry forbidden reactions and the Jahn-Teller effect. By doing so we particularly have celebrated the 70-year anniversary of the Fukui frontier orbital theory and the 60 years from the Ruedenberg paper about the physical nature of chemical bond. Now our analyses of chemical bonds for nonadiabatically coupled highly quasi-degenerate electronic states are under way.

Below are the short abstracts of our studies carried out in FIFC for the academic year of 2021.

[1] An orbital picture extracted from correlated electronic wavefunctions for symmetry-forbidden and nonadiabatic chemical reactions: 70 years of Fukui frontier orbital theory and beyond. [1]

The one-electron picture in molecular electronic state theory, particularly the molecular orbital (MO) theory with the Hartree-Fock approximation, has set a foundation to develop chemical science. Frontier orbital theory, or the theory of HOMO (highest occupied MO)-LUMO (lowest unoccupied MO) interaction, and the conservation rule of orbital symmetry are among the brightest achievements in a molecular orbital picture. After 70 years from the birth of frontier orbital theory, however, 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. Recently, we have proposed an invariant method to extract general orbitals from such correlated electronic wavefunctions, which we refer to as Energy Natural Orbitals (ENOs) [K. Takatsuka and

Y. Arasaki, *J. Chem. Phys.* **154**, 094103 (2021)]. The energies of ENOs are summed exactly to the total electronic energy. 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. Only a small number of ENOs often dominate and characterize chemical reactions. With these properties, we have explored a couple of simple and typical symmetry forbidden reactions, illustrating the effects of electron correlation and degeneracy in relevant ENOs. We thus have proposed the notion of “internal conical intersection” among ENOs, which leads to Jahn–Teller effect, pseudo-Jahn–Teller effect, and so on.

[2] Time-dependent variational dynamics for nonadiabatically coupled nuclear and electronic quantum wavepackets in molecules [2]

We propose a methodology to unify electronic and nuclear quantum wavepacket dynamics in molecular processes including nonadiabatic chemical reactions. The canonical and traditional approach in the full quantum treatment both for electrons and nuclei rests on the Born–Oppenheimer fixed nuclei strategy, the total wavefunction of which is described in terms of the Born–Huang expansion. This approach is already realized numerically but only for small molecules with several number of coupled electronic states for extremely hard technical reasons. Besides, the stationary-state view of the relevant electronic states based on the Born–Oppenheimer approximation is not always realistic in tracking real-time electron dynamics in attosecond scale. We therefore incorporate nuclear wavepacket dynamics into the scheme of nonadiabatic electron wavepacket theory, which we have been studying for a long time. In this scheme thus far, electron wavepackets are quantum mechanically propagated in time along nuclear paths that can naturally bifurcate due to nonadiabatic interactions. The nuclear paths are in turn generated simultaneously by the so-called matrix force given by the electronic states involved, the off-diagonal elements of which represent the force arising from nonadiabatic interactions. In this paper we have advanced so that the nuclear wavepackets are directly taken into account in place of path (trajectory) approximation. The nuclear wavefunctions are represented in terms of the Cartesian Gaussians multiplied by plane waves, which allows for feasible calculations of atomic and molecular integrals together with the electronic counterparts in a unified manner. The Schrödinger dynamics of the simultaneous electronic and nuclear wavepackets are to be integrated by means of the dual least action principle of quantum mechanics [K. Takatsuka, *J. Phys. Commun.* **4**, 035007 (2020)], which is a time-dependent variational principle.

I have dedicated this paper to the late Professor Vincent McKoy, my boss at Caltech during 1979–1981 and my perpetual friend since then, and was a giant pioneer in the theory of electron scattering by molecules and molecular photoionization dynamics.

[3] Suppression of charge recombination by auxiliary atoms in photoinduced charge separation dynamics with Mn oxides: A theoretical study [3]

Charge separation is one of the most crucial processes in photochemical dynamics of energy

conversion, widely observed ranging from water splitting in photosystem II (PSII) of plants to photoinduced oxidation reduction processes. Several basic principles, with respect to charge separation, are known, each of which suffers inherent charge recombination channels that suppress the separation efficiency. We found a charge separation mechanism in the photoinduced excited-state proton transfer dynamics from Mn oxides to organic acceptors. This mechanism is referred to as coupled proton and electron wave-packet transfer (CPEWT), which is essentially a synchronous transfer of electron wave-packets and protons through mutually different spatial channels to separated destinations passing through nonadiabatic regions, such as conical intersections, and avoided crossings. CPEWT also applies to collision-induced ground-state water splitting dynamics catalyzed by Mn₄CaO₅ cluster. For the present photoinduced charge separation dynamics by Mn oxides, we identified a dynamical mechanism of charge recombination. It takes place by passing across nonadiabatic regions, which are different from those for charge separations and lead to the excited states of the initial state before photoabsorption. This article is an overview of our work on photoinduced charge separation and associated charge recombination with an additional study. After reviewing the basic mechanisms of charge separation and recombination, we herein study substituent effects on the suppression of such charge recombination by doping auxiliary atoms. Our illustrative systems are X–Mn(OH)₂ tied to N-methylformamidine, with X=OH, Be(OH)₃, Mg(OH)₃, Ca(OH)₃, Sr(OH)₃ along with Al(OH)₄ and Zn(OH)₃. We consequently found that the competence of suppression of charge recombination depends significantly on the substituents. We hope that the present study should serve as a useful guiding principle in designing the relevant photocatalysts.

[4] Spin current in chemical reactions [4]

Development in attosecond technologies has been realizing real-time control of electronic dynamics. As a useful means for real-time monitoring of radical bond-rearrangement reactions, we introduce spin flux to track the dynamics of spin density in them. As an illustrative example, we show the spin flux in the course of the basic radical reaction $H\cdot + H_2$. It is demonstrated that spin flux induces spin-polarization in the molecular target (H_2) to weaken the covalent bond, thus leading to possible bond cleavage. The mechanism shown here is in harmony with the three-stage mechanism in radical reactions by Nagase, Takatsuka, and Fueno [JACS, **98**, 3838 (1976).]

This paper aims at the development of a novel field of theoretical chemistry for spin current in chemical dynamics.

[5] Nature of chemical bond and potential barrier in an invariant energy-orbital picture [5]

Physical nature of the chemical bond and potential barrier is studied in terms of energy natural orbitals (ENOs), which are extracted from highly correlated electronic wavefunctions. ENO provides an objective one-electron picture about energy distribution in a molecule, just as the natural orbitals

(NOs) represent one electron view about electronic charge distribution. ENO is invariant in the same sense as NO is, that is, ENOs converge to the exact ones as a series of approximate wavefunctions approach the exact one, no matter how the methods of approximation are adopted. Energy distribution analysis based on ENO can give novel insights about the nature of chemical bonding and formation of potential barriers, besides information based on the charge distribution alone. With ENOs extracted from full configuration interaction wavefunctions in a finite yet large enough basis set, we analyze the nature of chemical bonding of three low-lying electronic states of a hydrogen molecule, all being in different classes of the so-called covalent bond. The mechanism of energy lowering in bond formation, which gives a binding energy, is important, yet not the only concern for this small molecule. Another key notion in chemical bonding is whether a potential basin is well generated stiff enough to support a vibrational state(s) on it. Based on the virial theorem in the adiabatic approximation and in terms of the energy and force analyses with ENOs, we study the roles of the electronic kinetic energy and its nuclear derivative(s) on how they determine the curvature (or the force constant) of the potential basins. The same idea is applied to the potential barrier and, thereby, the transition states. The rate constant within the transition-state theory is formally shown to be described in terms of the electronic kinetic energy and the nuclear derivatives only. Thus, the chemical bonding and rate process are found interconnected behind the scenes. Besides this aspect, we have scrutinized (1) the effects of electron correlation that manifests itself not only in the orbital energy but also in the population of ENOs and (2) the role of nonadiabaticity (diabatic state mixing), resulting in double basins and a barrier on a single potential curve in bond formation. These factors differentiate a covalent bond into subclasses. The success of ENO analysis of the nature of chemical bond now pushes us to explore the essential nature of what we call the dynamical bond, an extremely characteristic yet general chemical bonding in highly electronic states.

2. Original papers

[1] An orbital picture extracted from correlated electronic wavefunctions for symmetry-forbidden and nonadiabatic chemical reactions: 70 years of Fukui frontier orbital theory and beyond.

Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki,

J. Chem. Phys. **155**, 064104 (2021). (18pages) (open)

DOI: 10.1063/5.0059370

[2] Time-dependent variational dynamics for nonadiabatically coupled nuclear and electronic quantum wavepackets in molecules

Kazuo Takatsuka

Eur. Phys. J. D **75**, 252 (2021). (22 pages) (open)

(Topical issue in honor of Professor Vincent McKoy)

DOI: 10.1140/epjd/s10053-021-00263-9

[3] Suppression of charge recombination by auxiliary atoms in photoinduced charge separation dynamics with Mn oxides: A theoretical study

Y. Ohnishi, K Yamamoto, and K. Takatsuka

Molecules 27, 755 (2022) (18 pages) (open)

(Donlad Truhlar issue)

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules27030755>

[4] Spin current in chemical reactions

Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka

Chem Phys. Lett. **793**, 139462 (2022) (7 pages)

(Kozo Kuchitsu issue)

<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2022.139462>

[5] Nature of chemical bond and potential barrier in an invariant energy-orbital picture

Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka

J. Chem. Phys. 156, 234102 (2022) (20 pages) (open)

3. Presentation at academic conferences

(1) 高塚和夫, 新崎康樹

“フロンティア軌道理論の70年：電子相関と非断熱相互作用の下の反応論へ”
第23回理論化学討論会 (京都大学, 5月13-15日, online)

(2) Kazuo Takatsuka,

“From energy-domain to time-domain in quantum chemistry: Nonadiabatic electron dynamics”

Fall 2021 National ACS meeting (August 22-26, 2021, online) Symposium: Prominent ideas in quantum chemistry (invited)

(3) Kazuo Takatsuka,

“Nonadiabatic dynamics and quantum chemistry”

Theoretical Chemistry Symposium, India (December 11-14, 2021, online) (invited)

(4) Kazuo Takatsuka

“Real-time electron dynamics in molecular charge separations: Time-domain quantum chemistry”

The 58 Annual Convention of Chemists (Indian Chemical Society) (December 21-24 2021, online)
(Plenary Lecture)

4. 研究員

田中 一義

研究員

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の一つは「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、13族に属する典型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。特に13族元素のうち炭素原子に較べて電子欠損系であるホウ素は興味深い性質を有する。今年度は、ホウ素原子を含むカルボランブロックを元素ブロックとして含ませることによって、新規な π 共役高分子の電子状態の制御についての理論的設計を行った。

【はじめに】

主鎖の一部にカルボラン($B_{10}C_2H_{12}$)骨格を含む π 共役高分子は液相でも固相でも蛍光発光を示すことが知られており¹⁾、この意味でカルボランは興味深い元素ブロックである。このときのカルボランの働きとして、主鎖の π 共役性の変調とAIE (Aggregate Induced Emission)発生に何らかの関わりがあると考えられる。

ここでは元素ブロックとしてのカルボランの性質を調べるためにこれを含む単純な π 共役高分子モデルを考え、電子状態の制御について調べることにした。参考のために、カルボラン分子の構造と電子状態についても比較検討を行った。

【計算方法】

Fig. 1 に示す3通りの無限長のモデル高分子を考え、Gaussian 09²⁾およびCrystal 09³⁾ソフトを用いて結晶軌道解析を行った。(a)はカルボランを含まない原型高分子であるポリ(*p*-フェニレンエチニレン) (PPE)、(b)は*o*-カルボランがフェニレン骨格と融合した高分子 (*o*-カルボラン PPE と略称)、および(c)は*p*-カルボランが主鎖内に挿入された高分子 (*p*-カルボラン PPE と略称)である。

計算方法はB3LYP法により6-31G**基底を用いて構造最適化を行ってバンド構造を求めた。またこの構造に対する結晶軌道相とMulliken正味電荷と電子密度はSTO-6G基底を用いて求めた。カルボラン分子についても、同様にGaussian 09ソフトを用いることによって分子軌道解析を行った。

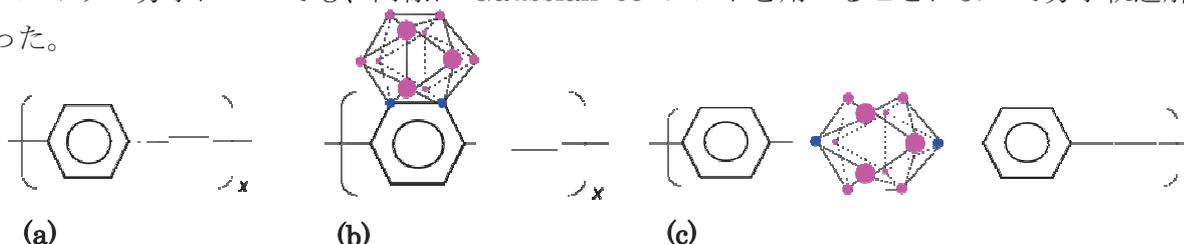


Fig. 1. Structures of the model polymers employed. (a) Poly(*p*-phenylene ethynylene) (PPE), (b) PPE condensed with *o*-carborane (*o*-carborane PPE), and (c) PPE inserted with *p*-carborane (*p*-carborane PPE).

【結果と考察】

モデル高分子について求めたバンド構造を Fig. 2 に示す。さらに、バンド構造から求められる電子物性の値を Table 1 にまとめた。最高被占(HO)および最低空(LU)バンドはともに π 性であり、PPE と σ -カルボラン PPE のバンド構造は概ね類似している。この意味で、 σ -カルボラン PPE おける π 共役は少なくとも阻害されていない。実際 Table 1 に示すように、 σ -カルボラン PPE および PPE の HO, LU バンド幅の値にはほとんど変化がない。一方 p -カルボラン PPE のバンド構造では、同じく HO および LU バンドは π 性であるがかなり平坦になっており、高分子全体にわたる π 共役は分断される傾向にあることを示す。したがってその HO, LU バンド幅はかなり小さくなっている。

Table 1. Electronic properties derived from the band structures.

| Electronic Properties | PPE | <i>o</i> -carborane PPE | <i>p</i> -carborane PPE |
|--|--------|-------------------------|-------------------------|
| Band gap ΔE_g (eV) | 2.768 | 1.494 | 3.922 |
| HO band width (eV) | 2.477 | 2.171 | 0.216 |
| LU band width (eV) | 2.769 | 2.601 | 0.351 |
| Ionization potential I_p (eV) | 5.177 | 5.741 | 5.916 |
| Electron affinity E_a (eV) | 2.410 | 4.248 | 1.995 |
| Effective mass m^* at the top of the HO band (unit m_0) [#] | -0.115 | -0.071 | -0.312 |
| Effective mass m^* at the bottom of the LU band (unit m_0) [#] | 0.106 | 0.067 | 0.228 |

[#] m_0 signifies the mass of a free electron.

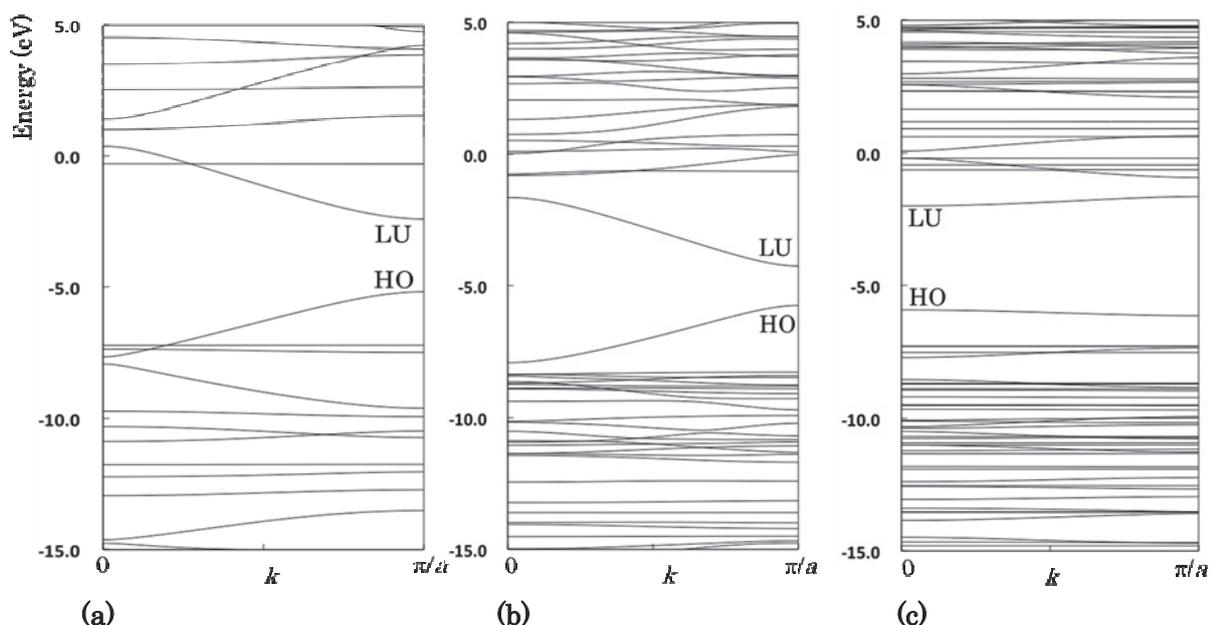


Fig. 2. Band structures of (a) PPE, (b) *o*-carborane PPE, and (c) *p*-carborane PPE. HO and LU signify the highest occupied and the lowest unoccupied bands, respectively.

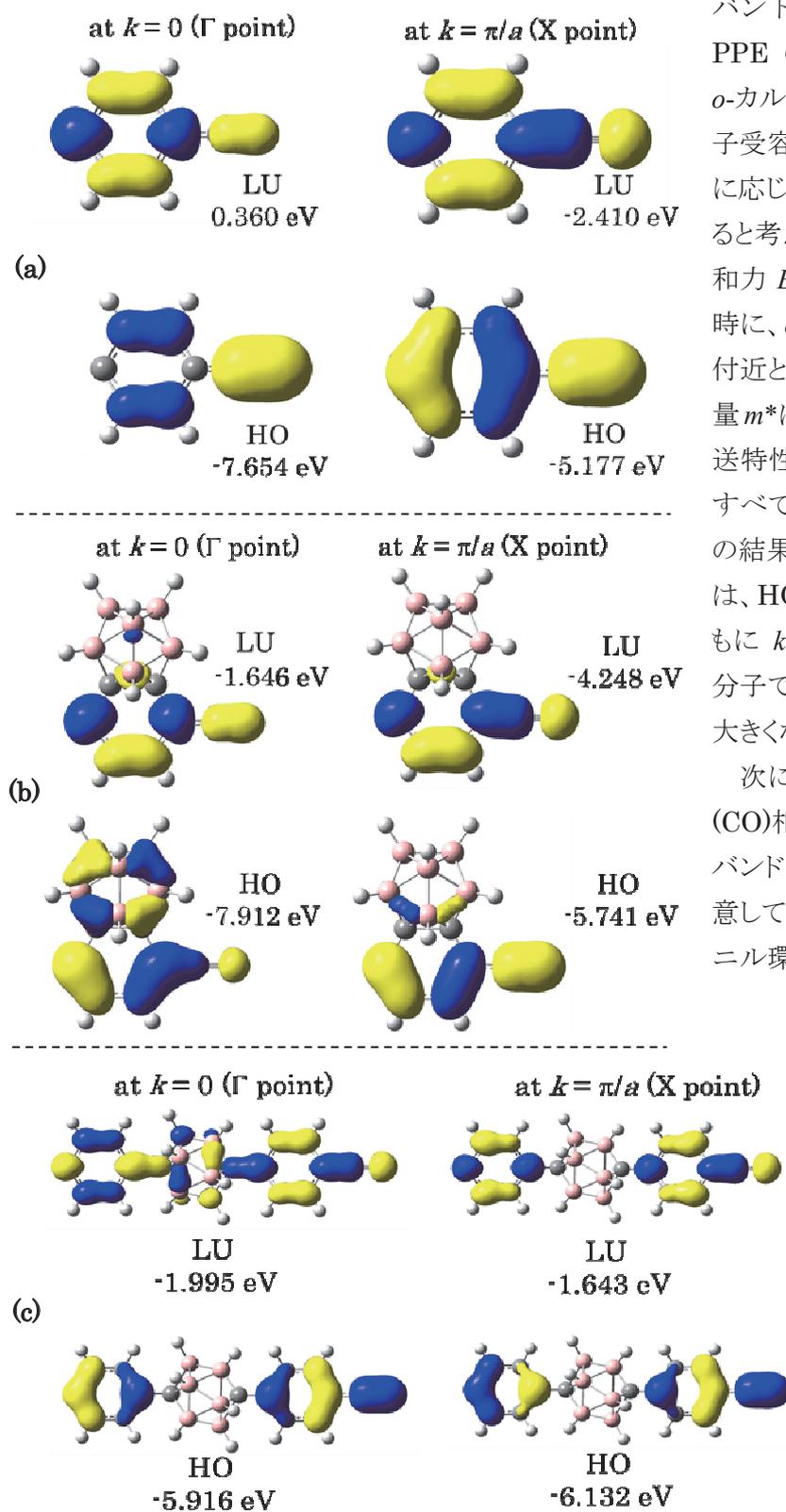


Fig. 3. HO- and LUCO patterns of (a) PPE, (b) *o*-carborane PPE, and (c) *p*-carborane PPE.

興味深いことに、 σ -カルボラン PPE のバンドギャップ(ΔE_g)の値は 1.494 eV で、PPE のその約半分になっている。これは *o*-カルボラン PPE の電子親和性が強く(電子受容性で n 型半導体になりやすい)、これに応じて LU バンドが下がって来たためであると考えられる。従ってこの高分子の電子親和力 E_a は PPE のそれよりも大きい。また同時に、*o*-カルボラン PPE の HO バンド頂上付近と LU バンドの底部分での電子有効質量 m^* はかなり小さくなり、一次構造内での輸送特性が上がっていることを示す。これらはすべて *o*-カルボランブロックが含まれるための結果である。一方、*p*-カルボラン PPE では、HO バンドの頂上と LU バンドの底は、ともに $k=0$ (Γ 点)において現われる。この高分子では、バンドが平坦化した分だけ ΔE_g が大きくなり、より絶縁体に近くなっている。

次にモデル高分子の HO, LU 結晶軌道 (CO)相を Fig. 3 に示す。PPE の HO, LU バンドは他のバンドと交差していることに注意しておく。PPE の HOCO 相は概ねフェニル環とアセチレンの MO 相が合わさった形状をしており、ここから PPE 内の結合長は、Fig. 4(a)のような特徴を持つものと考えられるが、実際の最適化構造および電子密度でもその傾向が見られる。

一方、*o*-カルボラン PPE の HOCO 相はこれと若干異なっていて、もとのフェニル環とアセチレン部分の結合長については、ポリアセチレン骨格で表現すればトランス-シソイド型構造(Fig. 4(b))に近いものとなることが考えられる。また *o*-カルボランブロックにあたかも

があり、軌道エネルギーとしては安定化が起こることになる。さらに *p*-カルボラン PPE の HOCO 相では PPE のそれと同様の形状に戻っているが、中央付近の *p*-カルボランブロックが HOCO における π 共役を

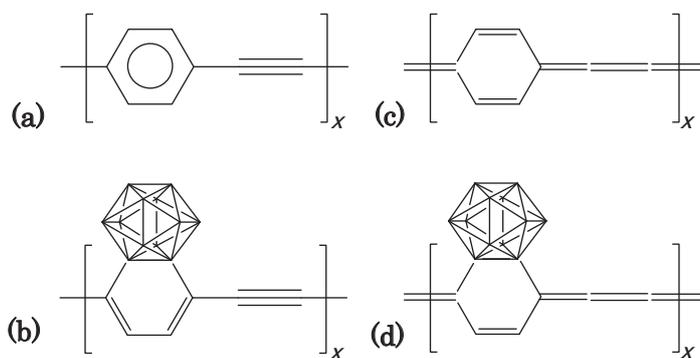


Fig. 4. Possible model polymer structures in the (a), (b) ground and the (c), (d) excited states for PPE and *o*-carborane PPE, respectively.

い σ 結合部分にわずかに電子が非局在化している。また *p*-カルボラン PPE の LUCO 相からは、PPE と同様にキノイド型骨格が優勢になる形状を示唆している。さらに LUCO では *p*-カルボラン部分にも電子が非局在化しており、励起状態では高分子全体を通じて π 共役性が回復する傾向がある。なお、Fig. 4(c), (d)におけるエチニレン部分の二重結合は横 π 結合である。

【Mulliken の電子密度 —カルボラン分子との比較—】

o-および *p*-カルボランブロックにおける B-B および B-C 結合についての Mulliken の電子密度は、0.35 ~ 0.45 程度と概ね弱い単結合の様相を示している。一方、B-H のそれは 0.80 ~ 0.82 程度とやや強い。比較のために同じ計算法 (B3LYP/6-31G**) を用いて調べたカルボラン分子における B-B および B-C 結合の Mulliken の電子密度も、0.34 ~ 0.45 程度と同様の値を示す。また B-H のそれも 0.80 ~ 0.82 程度である。従って、ここで考えている *o*-および *p*-カルボランブロックにおける結合特性は、それらの分子における特性と概ね一致している。

カルボラン分子そのものの電子状態については従来から多くの研究がなされており⁴⁾、 σ 共役結合あるいは σ 芳香族性を持つこと、余剰電子を収容しやすい傾向があること、などが言われている。このカルボラン分子が直截的に元素ブロックとして高分子の性質に関与していることは興味深い。

【結論】

o-カルボランでは π 共役系の電子親和性の向上、また *p*-カルボランでは π 共役性の分断が見られることが分かった。さらにカルボランブロックにおけるスピン収容能力などの考察も興味深いと考えられる。

1) K. Kokado, Y. Chujo, *Macromol.*, **42**, 1418 (2009). 2) Gaussian 09, Revision **B.1**, M. J. Frisch et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009. 3) R. Dovesi, R. Orlando, B. Civalleri, C. Roetti, V. R. Saunders, C. M. Zicovich-Wilson, *Z. Kristallogr.*, **220**, 571 (2005). 4) See, for instance R. E. Williams, *Chem. Rev.*, **92**, 177(1992); K. Hermansson, M. Wójcik, S. Sjöberg, *Inorg. Chem.*, **38**, 6039 (1999); E. D. Jemmis, M. M. Balakrishnarajan, P. D. Pancharatna, *Chem. Rev.*, **102**, 93 (2002).

2. 論文

(1) Masahiro MURAKAMI and Kazuyoshi TANAKA, “How to explain an SN_2 reaction ?” *J. Synth. Org. Chem., Jpn*, 79(No. 11), 1073-1076 (2021).

分断していることが分かる。これにより HO バンドが平坦になる。

さらに PPE の LUCO 相は、予想されるようにキノイド型骨格(Fig. 4(c))が優勢になる形状を示唆しており、電子注入した状態あるいは励起状態ではキノイド型骨格の様相を示すことが考えられる。また *o*-カルボラン PPE の LUCO 相は、電子注入した状態あるいは励起状態でシーストランソイド型骨格(Fig. 4(d))が優勢になることを示す。また LUCO では、*o*-カルボランブロックにおける B-C 間の弱

3. 著書

(1) Kazuyoshi TANAKA,
“Electronic Structures of Organic Semiconductors” in “Organic Semiconductors for Optoelectronics,” H. Naito ed., 1-39 (John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, West Sussex, UK, 2021).

4. 総説

(1) 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 13 化学反応経路を調べる」
現代化学, No. 4, 62-65 (2021).

(2) 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 14 分子間力の考慮」
現代化学, No. 5, 71-75 (2021).

(3) 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 15 数学補講」
現代化学, No. 6, 56-60 (2021).

(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 16 分子シミュレーション」
現代化学, No. 7, 56-61 (2021).

(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 17 大きな分子」
現代化学, No. 8, 54-57 (2021).

(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 18 1次元結晶や2次元結晶の扱い方」
現代化学, No. 9, 56-61 (2021).

(7) 田中一義

「化学のための数学入門 1 熱力学と偏微分」
現代化学, No. 1, 64-67 (2022).

(8) 田中一義

「化学のための数学入門 2 量子力学と偏微分」
現代化学, No. 2, 64-68 (2022).

(9) 田中一義

「化学のための数学入門 3 常微分方程式」
現代化学, No. 3, 63-67 (2022).

(10) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十八回 書いてみたい論文」
化学 76, No. 4, 23 (2021).

(11) 田中一義

「化学つれづれ草 第四十九回 論文の査読」

化学 76, No. 5, 31 (2021).

(12) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十回 思い出の研究 2」

化学 76, No. 6, 41 (2021).

(13) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十一回 非晶質材料 more」

化学 76, No. 7, 37 (2021).

(14) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十二回 国際的標準化」

化学 76, No. 8, 29 (2021).

(15) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十三回 波動関数の一乗」

化学 76, No. 9, 49 (2021).

(16) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十四回 気になる用語三つ」

化学 76, No. 10, 35 (2021).

(17) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十五回 蒙亨」

化学 76, No. 11, 41 (2021).

(18) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十六回 今年のノーベル物理学賞」

化学 76, No. 12, 59 (2021).

(19) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十七回 専門書を書き残すこと more」

化学 77, No. 1, 33 (2022).

(20) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十八回 一味違うエントロピー」

化学 77, No. 2, 35 (2022).

(21) 田中一義

「化学つれづれ草 第五十九回 歴史的化学論文大賞って何？」

化学 77, No. 3, 41 (2022).

5. その他 (アウトリーチ活動)

(1) NHK おはよう日本 2021/10/27 放送 (午前5時台の枠) 及び (同日午後6時台の京都ローカル枠) 「福井先生ノーベル化学賞受賞40年と残された研究メモ」 田中が受けた取材に基づく。

(2) 読売新聞朝刊 (京都版) 2021/12/9 「福井謙一氏メモを寄贈、親族 京大に デジタル化して公開へ」 田中が受けた取材に基づく。

(3) オンライン記者会見 2022/1/20 「アジアで初めて米国化学会「歴史的化学論文大賞 (Citations for Chemical Breakthrough Award)」を受賞しました」 オンライン記者会見 (名古屋大学理学研究科、分子科学研究所、高砂香料工業株式会社、京都大学福井謙一記念研究センター) 共同発表 (当センターからは田中発表)。これにもとづく京都新聞、毎日新聞、産経新聞、福井新聞、熊本新聞、福島新聞等の記事。読売新聞、中日新聞、東京新聞、日刊工業新聞、時事通信、中部経済新聞の Web ニュースで配信。yahoo ニュース、goo ニュース、msn ニュースで配信。

(4) 田中一義「計算化学の役立てかた」

京都グリーンケミカル・ネットワーク令和3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主催) 2022/1/31 (オンライン講義: 講演番号なし)

(註: これは企業の研究者向けです)

Tatsuhisa kato

Title (part-time researcher)

1. Summary of the research of the year

Conformational changes of α -helical peptides with different hydrophobic residues induced by metal-ion binding

Electron spin resonance (ESR) measurements of the coordination complex of Cu^{2+} can tell the form of coordination using the anisotropic spectral simulation. Then we can use the ESR measurements to confirm the helix structure of the peptides upon binding of the metal-ions. We designed peptides that formed helix bundle structures upon binding of the metal-ions to Histidine residues to form a stable hydrophobic core, in order to analyze the effects of Alanine, Valine, Isoleucine, and Leucine residues, located in the hydrophobic core, together with Histidine, on the conformational changes in respective peptides designated as HA, HV, HI, and HL, respectively. Circular dichroism measurements showed that HV and HI changed from random coil to helix bundle structures upon Zn^{2+} binding, similar to that observed for HA, while HL existed in the helix bundle structure even in the absence of Zn^{2+} . ESR measurements

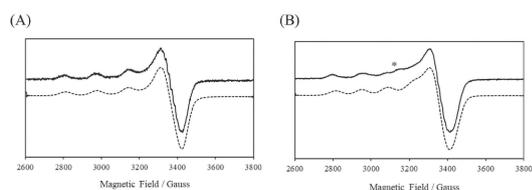


Figure 1. (A) ESR spectra of the Cu^{2+} complex with HI in the molar ratio of 1:1 (solid line, Cu^{2+} ; 0.2 mM, peptide; 0.2 mM) and the simulation spectrum obtained with the anisotropic g values of $g_{\text{in plane}} = 2.05$ and $g_{\text{out of plane}} = 2.25$ and Cu hyperfine constants of $A_{\text{in plane}} = 1.5$ mT and $A_{\text{out of plane}} = 20.0$ mT (dotted line). (B) ESR spectra in the molar ratio of 2:1 (solid line, Cu^{2+} ; 0.4 mM, peptide; 0.2 mM) and the simulation spectrum (dotted line).

showed that Cu^{2+} coordination of HI and HL was quite different from that of HA and HV, indicating that HA and HV fluctuated to a greater extent in the solution, despite that their apparent α -helical contents being similar to those of HI and HL, as shown in Figure 1. This was also supported by the results obtained from the analyses of thermal stabilities. The change in the structural fluctuation for each peptide upon Zn^{2+} binding was evaluated based on binding thermodynamics using isothermal titration calorimetry. The structural flexibility in the metal-ion-bound state was found to be in the order $\text{HA} > \text{HV} > \text{HI}$, and that in the metal-ion-unbound state was found to be greater for HI than that for HL.

Significant Effect of Flexibility of Bridging Alkyl Chains on the Proximity of Stacked Porphyrin and Phthalocyanine Conjugated with Fourfold Rotaxane Linkage

The spatial distance is an important factor in controlling the functional interactions between molecular units in a conjugate; therefore, the bridging unit was closely examined. Herein, we examined the effect of the flexibility of bridging alkyl chains on the proximity of stacked porphyrin and phthalocyanine conjugated with a fourfold rotaxane linkage. We found that closely stacking two π systems requires bridging alkyl chains above a certain length, and the shorter bridges hinder stacking because of their lower flexibility. The stacking distance between porphyrin and phthalocyanine in the conjugate with decyl (C_{10}) chains was estimated to be 4.03 Å and showed a unique physical character arising from short-distance interactions. The longer alkyl chains minimized steric restriction inside the fourfold rotaxane and allowed efficient communication between the porphyrin and phthalocyanine units. This is due to the flexibility of the side chains.

To investigate the effect of alkyl chain length on the interaction between porphyrin and phthalocyanine in the fourfold rotaxane, a dinuclear Cu^{2+} complex $[5(C_{10})\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ was prepared. Continuous-wave electron paramagnetic resonance spectra (CW-EPR) for $[5(C_6)\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ and $[5(C_{10})\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ are shown in Figure 2 that highlight the stacking distances between two Cu^{2+} centers in each conjugate using spin-spin interaction as the probe. The EPR spectrum of $[5(C_6)\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ at 10 K can be attributed to the summation of the two isolated doublets ($S = 1/2$) (Figure 2a). This indicates that the spin centers are too far apart to show significant exchange interactions in $[5(C_6)\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$. In contrast, the spectrum of $[5(C_{10})\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ in a frozen solution of CH_2Cl_2 showed the $\Delta m_s = 1$ transition at approximately 3400 Gauss, with a fine structure derived from large zero-field splitting and a seven-line hyperfine structure corresponding to two equivalent copper atoms ($I = 3/2$), due to the spin exchange between two Cu^{2+} centers (Figure 2b). Moreover, the $\Delta m_s = 2$ forbidden transition was observed at approximately 1700 Gauss. This result indicates that the distance between porphyrin and phthalocyanine in $[5(C_{10})\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ was shorter than that in $[5(C_6)\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$. A point-charge approximation from the zero-field splitting parameter ($D = 42.8$ mT) allowed estimation of the distance between two Cu^{2+} ions in $[5(C_{10})\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ to be 4.03 Å. From the comparison, the C_{10} bridges permit efficient stacking between porphyrin and phthalocyanine with their flexibility, whereas the shorter and less flexible hexyl (C_6) bridges inhibit the interaction because of the restricted conformations of each C–C bond in the alkyl chains.

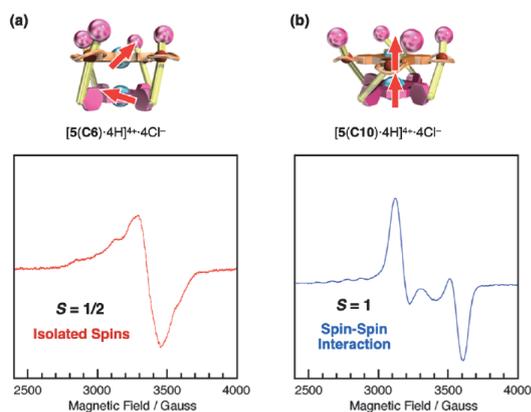


Figure 2. Comparison of EPR spectra of (a) $[5(C_6)\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ and (b) $[5(C_{10})\cdot 4H]^{4+}\cdot 4Cl^{-}$ in frozen CH_2Cl_2 at 10 K.

2. Original papers

- (1) **M. Tanaka, T. Kato, and M. Oda**, " Conformational changes of α -helical peptides with different hydrophobic residues induced by metal-ion binding ", *Biochemical Chemistry*, **277**, 106661(2021).
- (2) **Y. Yamada, H. Iida, S. Shibano, N. Mihara, T. Kato, and K. Tanaka**, " Significant Effect of Flexibility of Bridging Alkyl Chains on the Proximity of Stacked Porphyrin and Phthalocyanine Conjugated with Fourfold Rotaxane Linkage", *Chemistry – A European Journal*, e202200819 (2022).

3. Presentation at academic conferences

4. Others

5. 博士研究員

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エネルギー自然軌道と呼ぶ新しい分子軌道表現について研究した。その基本的な性質・有用性を調べ、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的性質の記述、特徴の抽出に関する理論研究に繋げる。

【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。また、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。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。

昨年度には、電子相関の特定のモデルに依存しない、分子に固有の1電子表現、エネルギー自然軌道 (ENO) 表現を得た。この表現では、従来からの直感的な解釈の電子相関係一般への拡張が期待される。今年度は ENO の具体的な応用に向けて、さまざまな系での ENO の挙動、特徴を研究した。

【方法論】 式(1)のように電子エネルギー E_e (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も想定している。その場合は添え字 i, j 等で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、電子密度でなく、電子エネルギー密度行列の対角化により、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。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 (α 電子 β 電子を別々に扱う、スピン軌道表現への拡張も行い、利用可能である)。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 [1]。

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

【エネルギー自然軌道による解析】 ここでは ENO による解析例を 2 つ示す。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 [3]。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 1(a) 赤と青)。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 (図 1 の Others)。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 (図 1(b))。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。

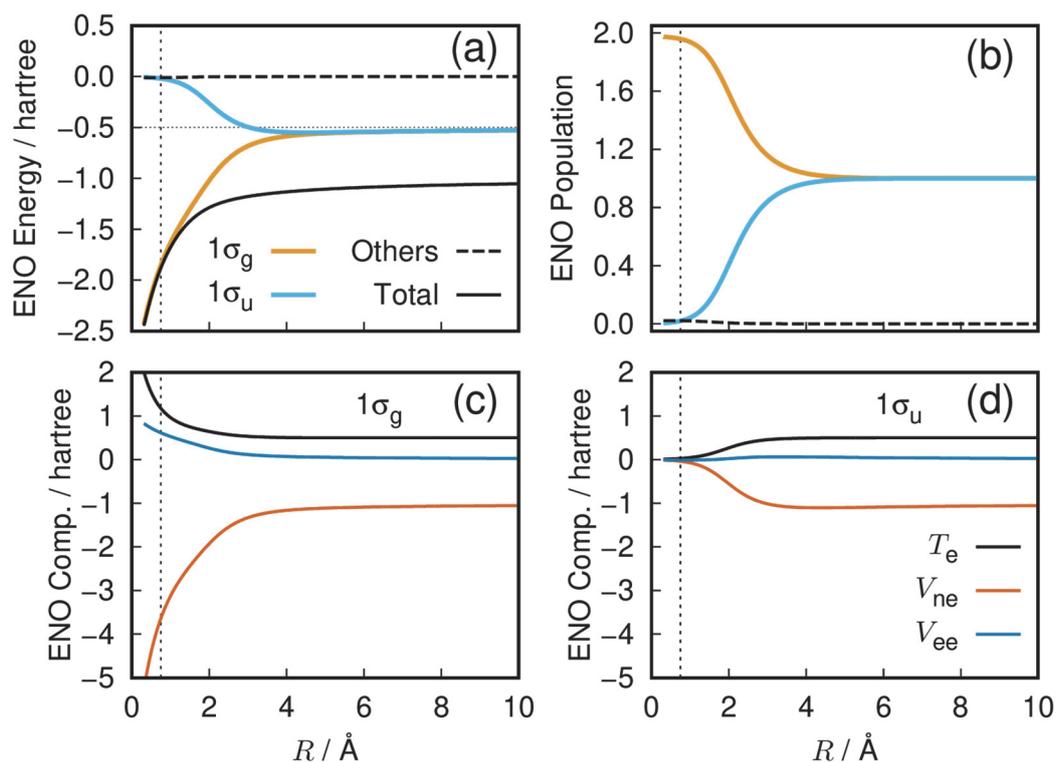


図 1. H_2 断熱基底状態 (a) ENO エネルギー、(b) ENO ポピュレーション。解離極限では縮重している 2 つの ENO (それぞれの原子に局在した軌道ととらえることができる) に 1 電子ずつあるのが、接近して分子となるにつれて、分子に広がった $1\sigma_g$ ENO に 2 電子の描像となる。(c) は $1\sigma_g$ ENO、(d) は $1\sigma_u$ ENO エネルギーの各成分。結合軌道の生成は電子・核引力ポテンシャルの急激な減少をとまなう。逆に反結合性 ENO はポピュレーションの減少からエネルギーは 0 に向かう、結合性軌道とは逆の挙動を示す。エネルギー成分の分解を考慮できるのも ENO の特徴である。

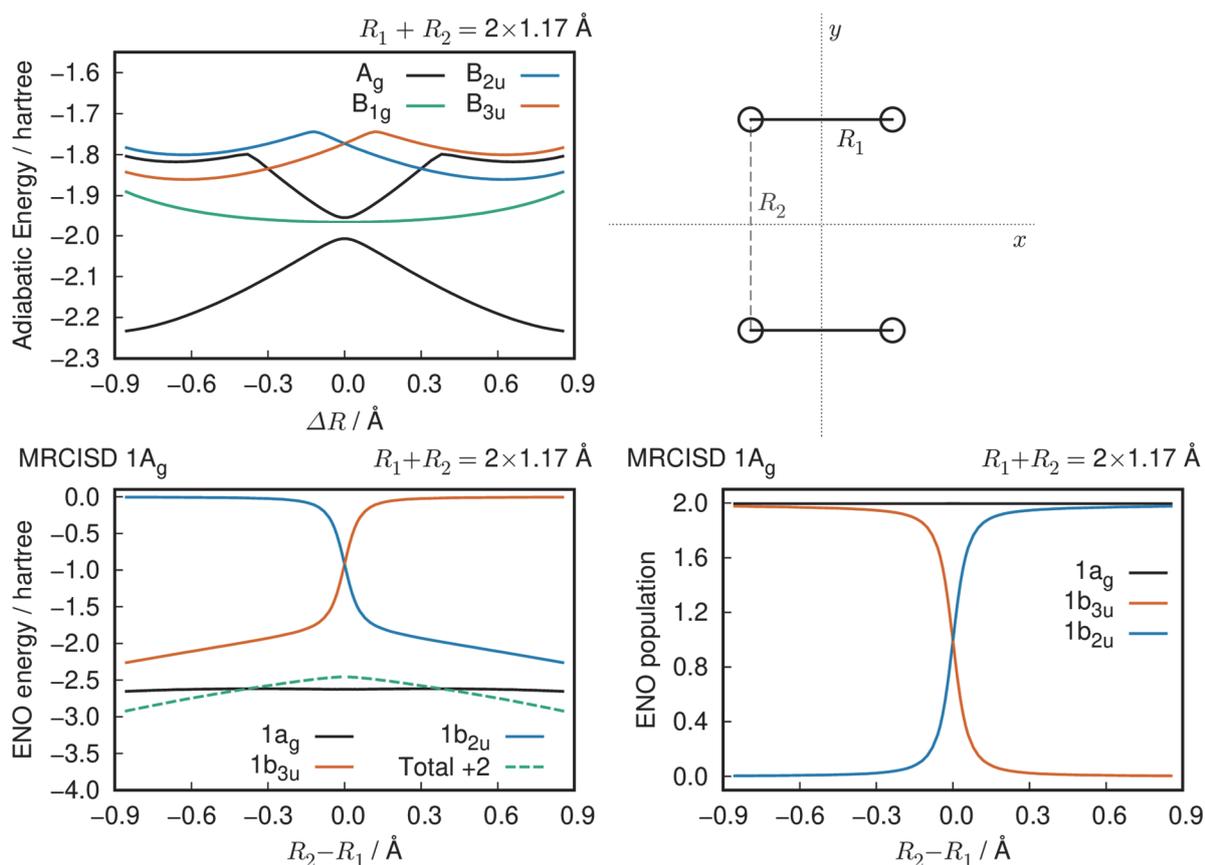


図 2. 長方形 H_2+H_2 結合交換反応のポテンシャル曲線 (左上、座標の取り方は右上)。下段は断熱基底状態の ENO エネルギーとポピュレーション。ポテンシャル曲線は擬交差を呈するが、ENO ではその背景に $1b_{3u}$ と $1b_{2u}$ との役割が交換される交差があることが自然と描かれる。

図 2 には長方形 H_2+H_2 結合交換反応のポテンシャル曲線および、電子基底状態の ENO エネルギー、ポピュレーションを示す [2]。電子基底状態は単純な分子軌道モデルでは対称性から結合交換反応は禁制と考えられるが、電子相関まで考えると図のように正方形配置の擬交差を経て結合交換が可能となる。これを ENO の描像で見ると、 $1b_{2u}$ 、 $1b_{3u}$ 軌道間の役割の交換であることが自然に描かれる。また、この軌道間の交差が断熱ポテンシャル面擬交差の背景に存在することがわかる。

【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である。上では断熱状態の例を見たが、励起状態でも同様な解釈しやすい、しかし以前には得られなかった描像が得られ、励起状態の共有結合の多様性についての知見を得た [3]。他の様々な種類の結合にこの解析を適用するとともに、従来の方法では解析が困難な、複数あるいは多数の断熱状態が混ざった高縮重状態のダイナミクスへ適用し、その解明を進めている。

【文献】

- [1] K. Takatsuka and Y. Arasaki, *J. Chem. Phys.* **154**, 094103 (2021).
- [2] K. Takatsuka and Y. Arasaki, *J. Chem. Phys.* **155**, 064104 (2021).
- [3] Y. Arasaki and K. Takatsuka, *J. Chem. Phys.* **156**, 234102 (2022).

2. 論文

- (1) Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki,
“An orbital picture extracted from correlated electronic wavefunctions and application to forbidden reactions: 70 years of the frontier orbital theory,”
J. Chem. Phys. 155, 064104 (2021, 18 pages).
- (2) Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka,
“Nature of chemical bond and potential barrier in an invariant energy-orbital picture,”
J. Chem. Phys. 156, 234102 (2022, 20 pages).

3. 学会発表

- (1) ○高塚和夫、新崎康樹
“フロンティア軌道理論の70年: 電子相関と非断熱相互作用の下の反応論へ”
第23回理論化学討論会 オンライン 2021/5/13 1L10

V 資料

1. 研究業績一覧

2021 (令和3) 年度

| No | Authors | Title | Journal | Volume(Number), first page to last page | year |
|-------|--|--|--|---|------|
| 佐藤 徹 | | | | | |
| 1 | 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 |
| 2 | Masaki Takahashi, Nozomu Ito, Naoki Haruta, Hayato Ninagawa, Kohei Yazaki, Yoshihisa Sei, Tohru Sato, Makoto Obata | Environment-sensitive emission of anionic hydrogen-bonded urea-derivative-acetate-ion complexes and their aggregation-induced emission enhancement | <i>Communc. Chem.</i> | 4, 168 | 2021 |
| 3 | Zhishuo Huang, Munirah D. Albaqami, Tohru Sato, Naoya Iwahara, Liviu F. Chibotaru | Jahn-Teller effect in the cubic fullerides A3C60 | <i>Phys. Rev. B</i> | 103, 134102 | 2021 |
| 春田 直毅 | | | | | |
| 1 | Yuansen Tang, Naoki Haruta, Akiyoshi Kuzume, and Kimihisa Yamamoto | Development of Highly Sensitive Raman Spectroscopy for Subnano and Single-Atom Detection | <i>Molecules</i> | 26(16), 5099 | 2021 |
| 2 | Masaki Takahashi, Nozomu Ito, Naoki Haruta, Hayato Ninagawa, Kohei Yazaki, Yoshihisa Sei, Tohru Sato, and Makoto Obata | Environment-sensitive emission of anionic hydrogen-bonded urea-derivative-acetate-ion complexes and their aggregation-induced emission enhancement | <i>Communications Chemistry</i> | 4, 168 | 2021 |
| 3 | Tatsuhisa Kato, Naoki Haruta, and Tohru Sato | Vibronic Coupling Density: Understanding Molecular Deformation | <i>SpringerBriefs in Molecular Science</i> | Springer, Singapore, ISBN 978-981-16-1795-9 | 2021 |
| 平尾 公彦 | | | | | |
| 1 | Takahito Nakajima; Kimihiko Hirao; Bun Chan | Higher-Order Transition State Approximation | <i>J.Chem.Phys.</i> | 156 114112. | 2022 |
| 2 | Jong-Won Song; Kimihiko Hirao, | Is charge-transfer excitation through a polyalkane single-bond chain an intramolecular charge-transfer? EOM-CCSD and LC-BOP study | <i>Chem.Phys.Lett.</i> | 796 139563 | 2022 |
| 3 | Kimihiko Hirao, Han-Seok Bae, Jong-Won Song; Bun Chan | Vertical Ionization Potential Benchmarks from Koopmans Prediction of Kohn-Sham Theory with Long-Range Corrected (LC) Functional | <i>JPCM (Enrico Clementi Memorial Issue) J. Phys.: Condens. Matter</i> | 34 194001 | 2022 |
| 4 | Bun Chan; William Dawson; Takahito Nakajima; Kimihiko Hirao | Taking Advantage of a Systematic Energy Non-linearity Error in Density Functional Theory for the Calculation of Electronic Energy Levels | <i>J. Phys. Chem. A</i> | 125 10507-10513 | 2021 |
| 5 | Kimihiko Hirao; Takahito Nakajima; Bun Chan | An Improved Slater's Transition State Approximation | <i>J.Chem.Phys.</i> | 155 034101 | 2021 |
| 6 | Kimihiko Hirao; Han-Seok Bae; Jong-Won Song; 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 |

| No. | Authors | Title | Journal | Volume(Number), first page to last page | year |
|-------|---|---|----------------------------------|---|------|
| 高塚 和夫 | | | | | |
| 1 | Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki | An orbital picture extracted from correlated electronic wavefunctions for symmetry-forbidden and nonadiabatic chemical reactions: 70 years of Fukui frontier orbital theory and beyond. | <i>J. Chem. Phys.</i> | 155, 064104 (18 pages) | 2021 |
| 2 | Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki | Time-dependent variational dynamics for nonadiabatically coupled nuclear and electronic quantum wavepackets in molecules | <i>Eur. Phys. J. D</i> | 75, 252 (22 pages) | 2021 |
| 3 | Yu Ohnishi, Kentaro Yamamoto, and Kazuo Takatsuka | Suppression of charge recombination by auxiliary atoms in photoinduced charge separation dynamics with Mn oxides: A theoretical study | <i>Molecules</i> | 27, 755 (18 pages) | 2022 |
| 4 | Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka | Spin current in chemical reactions | <i>Chem Phys. Lett.</i> | 793, 139462 (7 pages) | 2022 |
| 5 | Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka | Nature of chemical bond and potential barrier in an invariant energy-orbital picture | <i>J. Chem. Phys.</i> | 156, 234102 (20 pages) | 2022 |
| 田中 一義 | | | | | |
| 1 | Masahiro Murakami and Kazuyoshi Tanaka | How to Explain an SN2 Reaction ? | <i>J. Synth. Org. Chem., Jpn</i> | 79(11), 1073-1076 | 2021 |
| 北浦 和夫 | | | | | |
| 1 | Tribedi, Soumi; Kitaura, Kazuo; Nakajima, Takahito; Sunoj, Raghavan B. | On the question of steric repulsion versus noncovalent attractive interactions in chiral phosphoric acid catalyzed asymmetric reactions | <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> | 23(34), 18936-18950 | 2021 |
| 加藤 立久 | | | | | |
| 1 | Masahiro Tanaka, Tatsuhisa Kato, and Masayuki Oda | Conformational changes of α -helical peptides with different hydrophobic residues induced by meta-ion binding | <i>Bio.phys. Chem.</i> | 277, 106661 | 2021 |
| 2 | Yasuyuki Yamada, Hayato Iida, Shinya Shibano, Nozomi Mihara, Tatsuhisa Kato, and Kentaro Tanaka | Significant Effect of Flexibility of Bridging Alkyl Chains on the Proximity of Stacked Porphyrin and Phthalocyanine Conjugated with Fourfold Rotaxane Linkage | <i>Chem. Eur. J.</i> | e202200819 | 2022 |
| 新崎 康樹 | | | | | |
| 1 | Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki | An orbital picture extracted from correlated electronic wavefunctions and application to forbidden reactions: 70 years of the frontier orbital theory | <i>J. Chem. Phys.</i> | 155, 064104 (18 pages) | 2021 |
| 2 | Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka | Nature of chemical bond and potential barrier in an invariant energy-orbital picture | <i>J. Chem. Phys.</i> | 156, 234102 (20 pages) | 2022 |

2. 共同研究者受入れ状況

2021 (令和3) 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3年度は 新型コロナ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

2021 (令和3) 年度

| 職 名 | 氏 名 | 期間 (自) | 期間 (至) | 目 的 地 |
|--------------------------------------|-----|--------|--------|-------|
| 令和3年度は、新型コロナ感染拡大防止のため、海外渡航は実施されなかった。 | | | | |

4. 留学生受入れ一覧

2021 (令和3) 年度

| 受入れ教員 | 留学生名 | 受入れ期間 | 研究内容 | 受入財源 | 所属機関 |
|-------|-------------------------------|-----------------------|--|--|-----------------|
| 佐藤 徹 | Laetitia-Eiko XERRI(NAGAI) | 令和4年2月1日～ 令和4年7月1日 | Theoretical Study on Anchoring Effects in Heterogenous Catalysts | TCCM Erasmus Mundus Master Programme | ソルボンヌ大学 理工学部 |

5. 福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム

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 2022年1月26日(水) 13:00~18:30

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)

- 水上 渉 (大阪大学量子情報・量子生命研究センター) 13:05 – 13:55
「確率的手法を用いた量子化学計算：ニューラルネットワークと量子コンピュータの利用」
座長：西本 佳央 (京都大学大学院理学研究科)
- 石井 史之 (金沢大学ナノマテリアル研究所) 14:05 – 14:55
「固体中のスピン軌道相互作用とエネルギー変換」
座長：春田 直毅 (京都大学福井謙一記念研究センター)
- 森 俊文 (九州大学先導物質化学研究所) 15:05 – 15:55
「生体分子の動的構造と機能発現機構の理論的解明」
座長：中農 浩史 (京都大学大学院工学研究科)

受賞講演 (Award Lecture)

福井謙一奨励賞 (第5回) 受賞講演 16:05 – 16:30

受賞者：植松 祐輝 (九州大学大学院理学研究院)

「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」

座長：佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)

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) 16:30 – 16:35

ポスターセッション (Poster Session)

16:40 – 18:30

ポスターリスト (ブレイクアウトルーム 16:40~18:30)

- ✓ 番号が奇数の方は前半 (16:40-17:35)、番号が偶数の方は後半 (17:35-18:30) 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 (16:40-17:35) and the second half (17:35-18:30) 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. タンパク質-リガンド結合キネティクスの理論的解析

○笠原 健人[1]、昌山 廉[1]、沖田 和也[1]、松林 伸幸[1] (阪大院基礎工[1])

2. Higher-order Transition State Approximation

K. Hirao[1], T. Nakajima[2], B. Chan[3] (FIFC[1], RIKEN[2], Nagasaki Univ[3])

~~3. 変分量子固有値法のエネルギー期待値観測における誤差推定~~

○大場 優生[1]、倉重 佑輝[1] (京大院理[1]) 発表中止

4. 非調和振動ポテンシャルにおける MPS-MCTDH 手法の開発

○樋野 健太郎[1]、倉重 佑輝[1] (京大院理[1])

5. 分子回路設計指針構築に向けたアヌレンの電気伝導特性に関する理論研究

○甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[2]、長 奎吾[1]、上村 泰吾[1]、林 優太[2]、津田 雅大[2]、岸 亮平 [1,3,4]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 CSRN[5]、阪大 ICS[6])

6. 冷却による TMTTF 系の電荷秩序転移の理論解析

○北村 直大、倉重 佑輝 (京大院理)

7. HiPIP の[4Fe-4S]活性中心周囲の水素結合がイオン化ポテンシャルに与える影響に関する理論研究

○上村 泰五[1]、甘水 君佳[1]、長 奎吾[1]、林 優太[2]、津田 雅大[2]、佐々木 啓介[2]、岸 亮平 [1,4,5]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

8. New Simple Theoretical Chemical Bond Theory and Its Applications. / 新しい単純な科学結合理論とその応用

Chang, Bok Ryun / 張 福鍊 (Chang Medical Services)

9. スピン分極および電荷分極を併せ持つアズレン縮環共役分子の構造物性相関についての理論研究

○坂井 亮太[1]、杉森 亮太[1]、岡田 健治[1]、土田 聖也[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

10. 密度汎関数理論(DFT)法を用いたジスプロシウム錯体の電子状態に関する理論研究

○長 奎吾[1]、津田 雅大[2]、甘水 君佳[1]、上村 泰五[1]、林 優太[2]、佐々木 啓介[2]、岸 亮平[1,4,5]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

11. p-スチレンスルホン酸が配位した3,5-ビス(2-ピリジル)ピラゾール架橋イリジウム-銅二核錯体における分散力補正の有無による構造変化に関する理論研究

○林 優太[1]、甘水 君佳[2]、上村 泰吾[2]、長 奎吾[2]、金崎 良紀[1]、佐々木 啓介[1]、津田 雅大[1]、岸 亮平[2,4,5]、北河 康隆[2,3,4,5]、中野 雅由[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

12. 八員環を含む開殻縮環共役分子の構造、電子状態に関する理論研究

○土田 聖也[1]、岸 亮平[2,3,4]、坂井 亮太[2]、池内 雅登[2]、北河 康隆[2,3,4,5]、中野 雅由[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 CSRN[5]、阪大 ICS-OTRI[6])

13. バックブロンコバルト(II)錯体の電子状態に関する理論研究

○津田 雅大[1]、長 奎吾[2]、甘水 君佳[2]、上村 泰五[2]、林 優太[1]、佐々木 啓介[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[2,3,4,5]、中野 雅由[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

14. 分子集合体の励起状態計算における動的電子相関の重要性

○西尾 宗一郎、倉重 佑輝 (京大院理)

15. ペンタセン一次元多量体モデルにおける一重項分裂ダイナミクスの分子配置依存性に関する理論研究

○徳山 和明[1]、宮本 孟[1]、岡田 健治[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

16. Dicyclopenta-fused acene の開殻電子構造と三次非線形光学物性に対する電荷状態依存性についての理論研究

○清水 陽介[1]、岸 亮平[1,2,3]、吉田 航[1]、池内 雅登[1]、正田 迅己[1]、白井 尚樹[1]、北河 康隆[1,2,3,5]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS[4]、阪大 CSRN[5])

17. 開殻分子 π 積層一次元集合系の電子構造と光応答物性の分子配置依存性に関する理論研究

○正田 迅己[1]、岸 亮平[1,2,3]、横山 麻紗子[1]、吉田 航[1]、池内 雅登[1]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

18. 化学反応における領域同位体効果

○矢田 達寛[1,2]、春田 直毅[1,2,3]、佐藤 徹[1,2,3] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3])

19. 外部静電場が一重項分裂ダイナミクスに与える影響に関する理論研究

○當波 孝凱[1]、岡田 健治[1]、宮本 孟[1]、岸 亮平[1,2,3,4,5]、北河康隆[1,2,3,4,5]、中野雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 RCSEC[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS[5])

20. 量子もつれ光子対を用いた Fenna-Matthews-Olson タンパク質の時間分解分光スペクトルの理論的解析

○藤橋裕太[1,2]、東雅大[1,2,3]、石崎章仁[4,5] (京大院工[1]、JST さきがけ[2]、京大 ESICB[3]、分子研[4]、総研大[5])

21. パドルホイール型ルテニウム二核錯体におけるアセテート配位子に導入された多環芳香族炭化水素によるフロンティア軌道の変化に関する研究

○佐々木 啓介[1]、甘水 君佳[2]、片岡 祐介[3]、陳 秀慧[4]、許 益瑞[4]、岸 亮平[2,6,7]、北河 康隆[2,5,6,7]、中野 雅由[2,6,7,8] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、島根大理工[3]、台北科技大[4]、阪大 CSRN [5]、阪大 QIQB [6]、阪大 RCSEC[7]、阪大 ICS[8])

22. β,β -ジフェニルセリンを用いた立体選択的フッ素化反応に関する理論的研究

○矢島 武知[1]、佐藤 啓文[2,3,4]、有光 暁[5]、東 雅大[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、京大福井セ[4]、琉大理[5])

23. 化学反応における局在スピンの相関の解析

○中谷 佳萌[1]、東 雅大[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大 FIFC[3])

24. 非フラーレン型電子受容体 TACIC 薄膜の長寿命励起状態に関する理論的研究

○浦上 拓臣[1]、佐藤 啓文[2,3,4]、東 雅大[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、京大福井セ[4])

25. 反芳香族分子の π 積層多量体における芳香族性の分子数および分子間距離依存性に関する理論研究

○池内 雅登[1]、岸 亮平[1,3,4]、杉森 亮太[1]、正田 迅己[1]、土田 聖也[2]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 CSRN[5]、阪大 ICS-OTRI[6])

26. 分子動力学シミュレーションによる光捕集複合体 LH2 の吸収スペクトルの解析

○藪 俊佑[1]、佐藤 啓文[1,2,3]、東 雅大[1,2,4] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井センター[3]、JST さきがけ[4])

27. 階層型積分方程式によるグランドポテンシャル汎関数の自己無撞着な構成と相平衡および溶媒和への応用

○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])

28. ジアザジボラ置換オリゴアセン類縁体の開殻性及び非線形光学特性に関する理論研究

○杉森 亮太[1]、當波 孝凱[1]、坂井 亮太[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

29. π 共役ホスホール塩の溶液内蛍光特性の理論解析

○鈴木 さら[1]、今村 洗輔[2]、東 雅大[2, 3]、佐藤 啓文[2, 3, 4] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、京大福井セ[4])

30. ボウル型分子からなる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に関する理論研究

○岡田 健治[1]、徳山 和明[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

31. 有機薄膜太陽電池材料 ITIC の自発的対称性の破れによる電荷分離状態の生成

○在間 嵩朗[1,2]、大田 航[1,2]、大北 英生[3]、佐藤 徹[1,2,4] (京大福井セ[1]、京大院工分子工学[2]、京大院工高分子化学[3]、京大 ESICB[4])

32. MD シミュレーションによる光捕集複合体クロロソームに含まれる色素集合体の解析

○仲 啓志[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[3])

33. ドナー-アクセプター連結分子の電荷分離状態を含む光励起緩和過程

○木村 南[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])

34. 多参照摂動理論を用いた円錐交差探索

○西本 佳央 (京大院理)

35. π -アルキル発光性分子液体の励起エネルギー移動モデリング

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

36. RISM-SCF-cSED 法による溶液内化学シフトの計算理論

○今村 洸輔[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])

37. カルバゾールオリゴマーの構造、電荷状態、開殻性の相関に関する理論研究

○白井 尚樹[1]、吉田 航[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

38. 環状分子集合系におけるシングレットフィッシュンダイナミクスの構造-特性相関に関する理論研究

○宮本 孟[1]、岡田 健治[1]、徳山 和明[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

39. Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の超周期構造と NO 吸着の領域選択性

大西 駿也[1,2]、大田 航[1,2]、高倉 陸[1,2]、春田 直毅[1,2,3]、細川 三郎[2,3]、寺村 謙太郎[2,3]、田中 庸裕[2,3]、佐藤 徹[1,2,3] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3])

京都大学福井謙一記念研究センター 年報 2021

2022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)