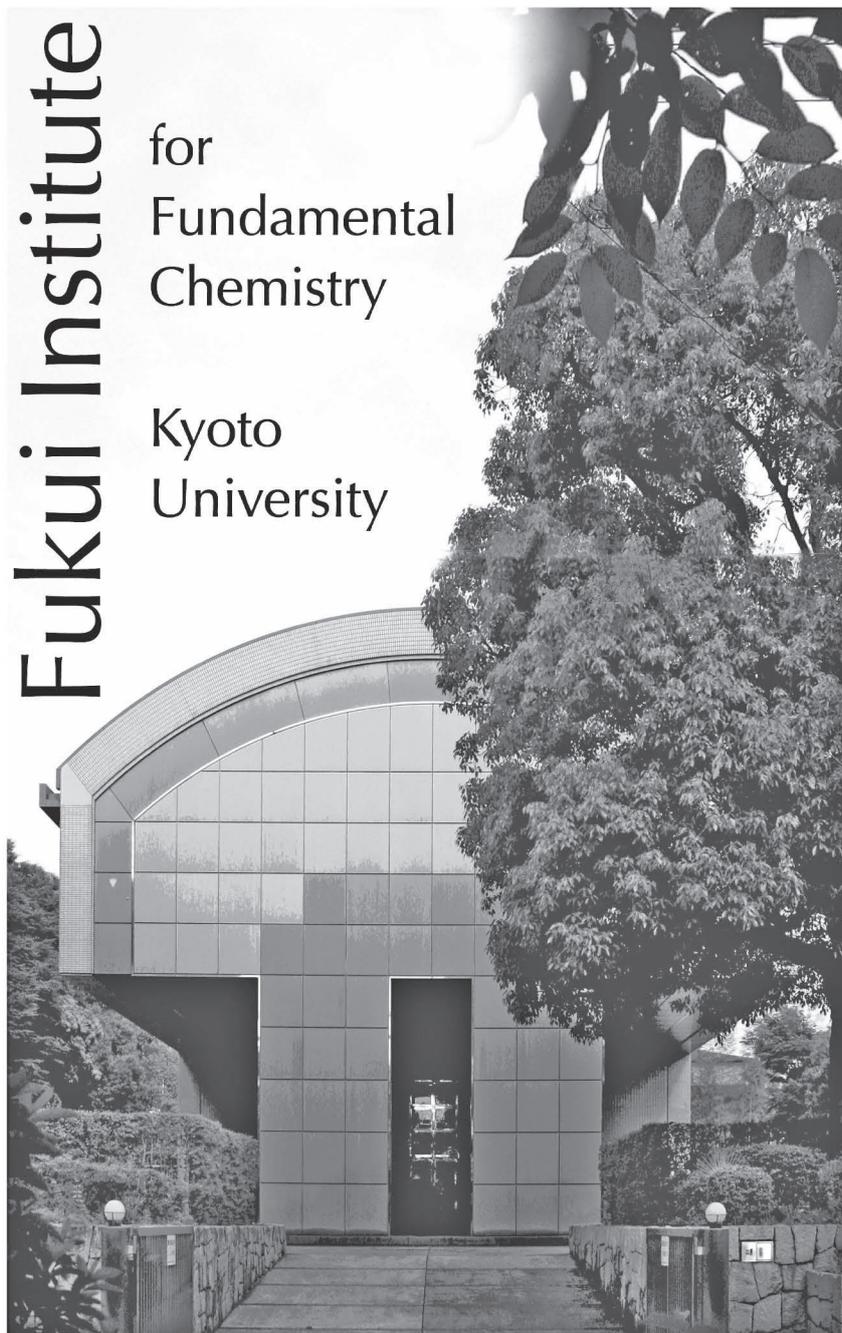


年報 2022



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

2022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（喜多一福井プロジェクト）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、新型コロナウイルス感染拡大防止のため、延期しておりましたが、2023年2月10日、4年ぶりに対面にて開催し、砂賀彩光先生（京都大学大学院理学研究科物理学第一教室特定研究員）に第7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。

さらに本年度は、福井博士の研究関連メモや大学文書館所蔵タイガー計算機1点を含む資料6種について、日本化学会より第14回化学遺産に認定されました。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。

2023年6月

京都大学福井謙一記念研究センター長
佐藤 徹

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 産学連携喜多一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)	連携教員	5
(4)	スーパーバイザー	8
(5)	専任教員	18
(6)	リサーチダイレクター	20
(7)	シニアリサーチフェロー	22
(8)	研究員	23
II 博士研究員等		
1.	博士研究員等組織	30
2.	博士研究員等プロフィール	30
III 研究広報活動		
1.	福井謙一記念研究センターシンポジウム	33
2.	セミナー	33
(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	33
4.	社会へのアウトリーチ活動	34
5.	福井謙一奨励賞の創設及び奨励賞の授与	34
6.	福井博士記念室の設置	34
7.	その他	34
IV 研究業績		
1.	専任教員	36
2.	リサーチダイレクター	48

3. シニアリサーチフェロー	54
4. 研究員	59
5. 博士研究員等	71

V 資料

1. 研究業績一覧	87
2. 共同研究者受入れ状況	89
3. 海外渡航一覧	89
4. 留学生受入れ状況	89
5. 福井謙一記念研究センターシンポジウム ポスター・プログラム	90

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。

<https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/publication/AnnualReport2022.pdf>

I 専任教員・スーパーバイザー

1. 教員組織

2022 (令和4) 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	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	青山 卓史	化学研究所 生体機能化学研究系
連携教員	教授	寺村 謙太郎	工学研究科 分子工学専攻
	教授	松田 健児	工学研究科 合成・生物化学専攻
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
平尾グループ	リサーチディレクター	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
佐藤グループ	研究員	加藤 立久	研究員
笹井グループ	研究員	笹井 理生	研究員

2. 教員プロフィール

(1) センター長

【氏名】	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-March 2023, Director, Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【在外研究歴】	June 2004-December 2004, Academic Visitor, 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】	Director (2022-), TIC division chair (2011-2021), The Chemical Society of Japan Executive Director (2012-2014, 2020-2022), Committee member (2012-2016, 2018-2022), Japanese Association for Molecular Science 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)	1. Kaho Nakatani, Masahiro Higashi, and Hirofumi Sato, “Extraction of local spin-coupled states by second quantized operators”, J. Chem. Phys., 157, 014112 (2022). 2. 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). 3. 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). 4. Yoshihiro Matsumura, Satoru Iuchi, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, “Chiral effects on the final step of an octahedron-shaped coordination capsule self-assembly” Phys. Chem. Chem. Phys., 20, 7383-7386 (2018).
【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. Cryo-EM structures of thermostabilized prestin provide mechanistic insights underlying outer hair cell electromotility. Haon Futamata, et al., <i>Nature Commun.</i>, 13, 6208 (2022). 2. Hybrid QM/MM free-energy evaluation of Drug-resistant mutational effect on the binding of an inhibitor Indinavir to HIV-1 protease. Masahiko Taguchi, Ryo Oyama, Masahiro Kaneso, and Shigehiko Hayashi*, <i>J. Chem. Inf. Model.</i>, 62, 1328-1344 (2022). 3. Time-resolved serial femtosecond crystallography reveals early structural changes in channelrhodopsin. Kazumasa Oda et al., <i>eLife</i>, 10, e62389 (2021) 4. 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). 5. 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). 6. 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).

【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
【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)(ルーヴアンカトリック大学) 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) 連携教員

【氏名 (ふりがな)】	寺村 謙太郎 (てらむら けんたろう)
【職名】	教授
【所属】	京都大学大学院工学研究科分子工学専攻
【直通電話】	075-383-2559
【FAX】	075-383-2561
【電子メールアドレス】	teramura.kentaro.7r@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
【現在の研究課題】	CO2 資源化
【研究内容キーワード】	CO2, 光触媒, 電極触媒, 水素化触媒, XAFS
【学歴】	平成 11 年 (1999 年) 3 月 京都大学工学部工業化学科卒業 平成 13 年 (2001 年) 3 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻修士課程 修了 平成 16 年 (2004 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 課程研究指導認定退学
【学位】	博士 (工学)
【略歴】	2004 年 4 月 -2005 年 5 月 科学技術振興機構・博士研究員 2005 年 6 月 -2006 年 11 月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学 専攻・特任助手 2006 年 12 月 -2007 年 3 月 京都大学次世代開拓研究ユニット (テニュアト ラック)・特定助手 2007 年 4 月 -2011 年 3 月 京都大学次世代開拓研究ユニット (テニュアトラッ ク)・特定助教 (職名変更) 2009 年 4 月 -2011 年 3 月 京都大学次世代開拓研究ユニット (テニュアトラッ ク)・上級研究員 (兼務, 中間評価において A 評価取得による) 2011 年 4 月 -2013 年 3 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻・講師 (テ ニュア取得, S 評価) 2011 年 10 月 -2015 年 3 月 科学技術振興機構さきがけ・研究員 (兼務) 2013 年 4 月 -2021 年 11 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻・准教 授 2021 年 12 月 - 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻・教授 2012 年 2 月 - 2012 年 5 月 英国オックスフォード大・客員研究員 (Prof. Dermot O'Hare)
【所属学会】	日本化学会, アメリカ化学会, アメリカ電気化学会, アメリカ材料学会, 触 媒学会, 光化学協会, 電気化学会, 日本セラミックス協会, 石油学会, 日 本 XAFS 研究会, 近畿化学協会, グリーンケミストリー研究会, PF 懇談会, SPring-8 利用者懇談会
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	1. Highly Selective Photocatalytic Conversion of Carbon Dioxide by Water over Al-SrTiO₃ Photocatalyst Modified with Silver-Metal Dual Cocatalysts Wang, Shuying; Teramura, Kentaro*; Hisatomi, Takashi; Domen, Kazunari; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro* ACS Sustainable Chemistry & Engineering (2021), 9(28), 9327-9335. DOI: 10.1021/acssuschemeng.1c02126 2. Dual Ag/Co cocatalyst synergism for the highly effective photocatalytic con- version of CO₂ by H₂O over Al-SrTiO₃ Wang, Shuying; Teramura, Kentaro*; Hisatomi, Takashi; Domen, Kazunari; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro* Chemical Science (2021), 12(13), 4940-4948. DOI: 10.1039/d1sc00206f

<p>【学術関係の受賞など】</p>	<p>3. Enhanced CO evolution for photocatalytic conversion of CO₂ by H₂O over Ca modified Ga₂O₃ Pang, Rui; <u>Teramura, Kentaro*</u>; Morishita, Masashige; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro*. Communications Chemistry (2020), 3(1), 137 DOI: 10.1038/s42004-020-00381-2</p> <p>4. Effective Driving of Ag-loaded Al-doped SrTiO₃ under irradiation at λ >300 nm for the photocatalytic conversion of CO₂ by H₂O Wang, Shuying; <u>Teramura, Kentaro*</u>; Hisatomi, Takashi; Domen, Kazunari; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro*. ACS Applied Energy Materials (2020), 3(2), 1468-1475. DOI:10.1021/acsaem.9b01927</p> <p>5. Modification of Ga₂O₃ by Ag-Cr Core-shell Cocatalyst Enhances Photocatalytic CO Evolution for the Conversion of CO₂ by H₂O Pang, Rui; <u>Teramura, Kentaro*</u>; Tatsumi, Hiroyuki; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro*. Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom) (2018), 54(9), 1053-1056. Selected as a back cover DOI:10.1039/c7cc07800e</p> <p>6. Efficient photocatalytic carbon monoxide production from ammonia and carbon dioxide by the aid of artificial photosynthesis Huang, Zeai; <u>Teramura, Kentaro*</u>; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro*. Chemical Science (2017), 8(8), 5797-5801. DOI:10.1039/c7sc01851g</p> <p>7. Which is an Intermediate Species for Photocatalytic Conversion of CO₂ by H₂O as the Electron Donor: CO₂ Molecule, Carbonic Acid, Bicarbonate, or Carbonate Ions? <u>Teramura, Kentaro*</u>; Hori, Kazutaka; Terao, Yosuke; Huang, Zeai; Iguchi, Shoji; Wang, Zheng; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro*. Journal of Physical Chemistry C (2017), 121(16), 8711-8721. DOI:10.1021/acs.jpcc.6b12809</p> <p>平成 23 年度 (2011 年度) 石油学会奨励賞 (新日鐵化学賞) 「光エネルギーを利用した低温アンモニア脱硝反応に関する研究」 平成 24 年度 (2012 年度) 触媒学会奨励賞 「高分散担持バナジウム酸化物の光励起機構の解明と高難度選択光酸化への応用」</p>
--------------------	---

【氏名】	Kenji Matsuda
【職名】	Professor (Adjunct Professor)
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room A4-321, Katsura Campus
【直通電話】	075-383-2738
【FAX】	075-383-2739
【電子メールアドレス】	kmatsuda@sbchem.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/matsuda-lab
【研究分野】	Physical Organic Chemistry
【現在の研究課題】	Physical organic chemistry for molecular electronics and highly functional materials
【研究内容キーワード】	Physical Organic Chemistry, Photochromism, Molecular Electronics, Supramolecular Assemblies, Open-Shell Molecules
【学歴】	B. S., Chemistry, Graduate School of Science, The University of Tokyo (1992) M. S., Chemistry, Graduate School of Science, The University of Tokyo (1994) Ph. D., Chemistry, Graduate School of Science, The University of Tokyo (1997)
【学位】	Doctor of Science from the University of Tokyo
【略歴】	Assistant Professor, Department of Chemistry, The University of Tokyo, 1994-1995 Assistant Professor, Institute for Fundamental Research of Organic Chemistry, Kyushu University, 1995-1998 Assistant Professor, Department of Chemistry and Biochemistry, Kyushu University, 1998-2004 Associate Professor, Department of Chemistry and Biochemistry, Kyushu University, 2004-2008 Professor, Department of Synthetic Chemistry and Biological Chemistry, Kyoto University, 2008-present JSPS researcher, University of Illinois, USA, 2001-2002 PRESTO research project leader, 2003-2007 Invited Professor, University of Rennes 1, France, 2011 Invited Professor, ENS Cachan, France, 2015
【所属学会】	Chemical Society of Japan, American Chemical Society, The Japanese Photochemistry Association, The Society of Physical Organic Chemistry, Japan, The Society of Synthetic Organic Chemistry, Japan, Kinka Chemical Society, The Japan Society of Applied Physics
【学会活動】	Executive Director, The Japanese Photochemistry Association (2022-2023) Secretary General (Executive Director), The Society of Physical Organic Chemistry, Japan (2022-2024) Chairman of Electronics Division, Kinka Chemical Society (2018-2021)
【主な著書、学術論文】	1. Y. Nakakuki, T. Hirose, H. Sotome, M. Gao, D. Shimizu, R. Li, J. Hasegawa, H. Miyasaka, K. Matsuda, Doubly Linked Chiral Phenanthrene Oligomers for Homogeneously π -Extended Helicenes with Large Effective Conjugation Length, <i>Nat. Commun.</i> 13, 1475 (2022). 2. R. Yasui, D. Shimizu, K. Matsuda, Large Enhancement of the Single Molecular Conductance of a Molecular Wire through a Radical Substituent, <i>Chem. Eur. J.</i> 28, e202104242 (2022). (front cover) 3. Y. Kotani, H. Yasuda, K. Higashiguchi, K. Matsuda, Re-entrant Photoinduced Morphological Transformation and Temperature-Dependent Kinetic Products of a Rectangular-Shaped Amphiphilic Diarylethene Assembly, <i>Chem. Eur. J.</i> 27, 11158-11166 (2021). 4. Y. Sumiya, K. Higashiguchi, K. Matsuda, A Diarylethene Annulated Isomer as a Highly-Conductive Molecular Wire Evaluated by the Exchange Interaction between Two Nitroxides, <i>Chem. Commun.</i> 56, 2447-2450 (2020). 5. N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, Self-Assembly of Photochromic Diarylethene-Peptide Conjugates Stabilized by β -Sheet Formation at the Liquid/Graphite Interface, <i>Chem. Commun.</i> 55, 5099-5102 (2019).
【学術関係の受賞など】	Inoue Research Award for Young Scientists, 1999 Chemical Society of Japan Award for Young Scientist, 2004 Nozoe Memorial Award for Young Scientist, 2006 Teaching Award, School of Engineering, Kyushu University, 2008 Japanese Photochemistry Association Award, 2016

(4) 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. Deep-Sea-Inspired Chemistry: A Hitchhiker's Guide to the Bottom of the Ocean for Chemists, Shigeru Deguchi, Hiroki Degaki, Ikuo Taniguchi, and Tsuyoshi Koga, <i>Langmuir</i> 39 , 7987–7994 (2023) 2. Experimental and Theoretical Studies on the Phase Behavior of Aqueous Solutions of Structurally Controlled Hyperbranched Poly(N-isopropylacrylamide)s, H. Kojima, ; Y. Imamura, Y.T. Lu, S. Yamago, T. Koga, <i>Macromolecules</i> , 55 , 7932-7944 (2022) 3. Thermoresponsive Gelation of Amphiphilic Random Copolymer Micelles in Water, M. Shibata, T. Terashima, T. Koga, <i>Macromolecules</i> , 54 , [†] 5241-5248 (2021) 4. Theory of transient networks with a well-defined junction structure, H. Ozaki, T. Koga, <i>J. Chem. Phys.</i> , 152 , 184902 (2020) 5. 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)

【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"> Hirao K, Speciale I, Notaro A, Manabe Y, Teramoto Y, Sato T, Atomi H, Molinaro A, Ueda Y, De Castro C, Fukase K. Structural determination and chemical synthesis of the N-glycan from the hyperthermophilic archaeon <i>Thermococcus kodakarensis</i>. <i>Angew. Chem. Int. Ed. Engl.</i> 62, e202218655, 2023. Sato T, Utashima SH, Yoshii Y, Hirata K, Kanda S, Onoda Y, Jin JQ, Xiao S, Minami R, Fukushima H, Noguchi A, Manabe Y, Fukase K, Atomi H. A non-carboxylating pentose bisphosphate pathway in halophilic archaea. <i>Commun. Biol.</i> 5, 1290, 2022. Jin JQ, Sato T, Hachisuka SI, Atomi H. A lipoate-protein ligase is required for de novo lipoyl-protein biosynthesis in the hyperthermophilic archaeon <i>Thermococcus kodakarensis</i>. <i>Appl. Environ. Microbiol.</i> 88, e0064422, 2022. Mori Y, Kawamura H, Sato T, Fujita T, Nagata R, Fujihashi M, Miki K, Atomi H. Identification and enzymatic analysis of an archaeal ATP-dependent serine kinase from the hyperthermophilic archaeon <i>Staphylothermus marinus</i>. <i>J. Bacteriol.</i> 203, e0002521, 2021. Zheng RC, Lu XF, Tomita H, Hachisuka SI, Zheng YG, Atomi H. TK1211 encodes an amino acid racemase towards leucine and methionine in the hyperthermophilic archaeon <i>Thermococcus kodakarensis</i>. <i>J. Bacteriol.</i> 203, e00617-20, 2021. Jin JQ, Hachisuka SI, Sato T, Fujiwara T, Atomi H. A structurally novel lipoyl synthase in the hyperthermophilic archaeon <i>Thermococcus kodakarensis</i>. <i>Appl. Environ. Microbiol.</i> 86, e01359-20, 2020. 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). 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).
【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. “Divergent stiffness of one-dimensional growing interfaces” Mutsumi Minoguchi, Shin-ichi Sasa Physical Review Letters 130(19) 197101 (2023) 2. “Characterizing the Asymmetry in Hardness between Synthesis and Destruction of Heteropolymers” Ikumi Kobayashi, Shin-ichi Sasa Physical Review Letters 128(24) 247801 (2022) 3. “Improving thermodynamic bounds using correlations” Andreas Dechant, Shin-ichi Sasa Phys. Rev. X 11(4) 041061 (2021) 4. “Long-Range Phase Order in Two Dimensions under Shear Flow” Hiroyoshi Nakano, Yuki Minami, Shin-ichi Sasa Physical Review Letters 126(16) 160604 (2021) 5. “Fluctuation–response inequality out of equilibrium” Andreas Dechant, Shin-ichi Sasa Proceedings of the National Academy of Sciences 117(12) 6430 - 6436 (2020) 6. “Global Thermodynamics for Heat Conduction Systems” Naoko Nakagawa, Shin-ichi. Sasa Journal of Statistical Physics 177(5)825-888 (2019)

【氏名 (ふりがな)】	山本 潤 (やまもと じゅん)
【職名】	教授 副研究科長 評議員
【所属】	大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻
【研究室】	理学研究科 5号館 218号室
【直通電話】	075-753-3788
【FAX】	075-753-3788
【電子メールアドレス】	junyama@scphys.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://softmatter.scphys.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	ソフトマター物理学
【現在の研究課題】	超界面とソフトマター
【研究内容キーワード】	ダイナミクス、揺らぎ、粘弾性
【学歴】	1987年7月東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻博士課程中退
【学位】	1990年6月工学博士 (東京大学)
【略歴】	1987年8月東京大学工学部物理工学科助手 1991年6月東京大学生産技術研究所助手 1999年10月 ERATO 横山液晶微界面プロジェクト GL 2005年8月京都大学大学院理学研究科教授
【所属学会】	日本物理学会、日本液晶学会
【学会活動】	2020-2024年国際液晶学会副会長 2015~2017年日本物理学会京都支部長 2014~2016年日本液晶学会財務理事
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1) K. W. Lee, T. Araki, J. Yamamoto, Dynamic control of an in-plane-switching liquid crystal cell using heterogeneous substrates, <i>Soft Matter</i> , 16, 348-356 (2020). 2) M. Saito, J. Yamamoto, R. Masuda, M. Kurokuzu, Y. Onodera, Y. Yoda, and M. Seto, Direct observation of interlayer molecular translational motion in a smectic phase and determination of the layer order parameter, <i>Phys. Rev. Res.</i> 1, 012008(R) (6 pages) (2019). 3) K. Hata, Y. Takanishi, I. Nishiyama and J. Yamamoto, Softening of twist elasticity in the swollen smectic C liquid crystal, <i>Euro. Phys. Lett.</i> 120, 56001(5P) (2017). 4) S. Bono, Y. Takanishi and J. Yamamoto, Effects of layer order on the mobility of mesogenic molecules in SmA liquid-crystalline emulsions, <i>Europhys. Lett.</i> , 113 , 56004 (5P) (2016). 5) E. Gorecka, N. Vaupotic̃, A. Zep, D. Pocięcha, J. Yoshioka, J. Yamamoto, and H. Takezoe, A Twist-Bend Nematic (NTB)Phase of Chiral Materials, <i>Angew. Chem.</i> 127 , (2015) 10293–10297.
【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】	無機固体の電子物性、磁性、光物性
【研究内容キーワード】	酸化物、金属、半導体、磁気的性質、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、日本工学教育協会、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) 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. (2) 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. (3) K. Agata, S. Murai, and K. Tanaka, “Stick-and-play metasurfaces for directional light outcoupling”, <i>Appl. Phys. Lett.</i> 118 (2021) 021110. (4) 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 (5) S. Murai, D. R. Abujetas, L. Liu, G. W. Castellanos, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, K. Tanaka, and J. G. Rivas, “Engineering bound states in the continuum at telecom wavelengths with non-Bravais lattices”, <i>Laser Photonics Rev.</i> 16 (2022) 2100661. (6) H. Takane, Y. Ota, T. Wakamatsu, T. Araki, K. Tanaka, and K. Kaneko, “Bandgap engineering of rutile-structured SnO ₂ -GeO ₂ -SiO ₂ alloy system”, <i>Phys. Rev. Mater.</i> 6 (2022) 084604. (7) 田中勝久, 「無機化学の基礎」, 東京化学同人 (2022) (8) H. Takane, T. Oshima, K. Tanaka, and K. Kaneko, “Growth dynamics of selective-area-grown rutile-type SnO ₂ on TiO ₂ (110) substrate”, <i>Appl. Phys. Express</i> 16 (2023) 045503.
【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", Kunihiro 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, Kunihiro 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 202 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, 放射光学会, 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"> 1. Oxygen Storage Capacity of Co-Doped SrTiO₃ with High Redox Performance Y. Yoshiyama, S. Hosokawa, H. Asakura, K. Teramura, T. Tanaka, <i>J. Phys. Chem. C</i>, 2022, 126, 4415-4422. 2. Tuning Ag-modified NaTaO₃ to Achieve High CO Selectivity for the Photocatalytic Conversion of CO₂ Using H₂O as the Electron Donor X. Xu, H. Asakura, S. Hosokawa, T. Tanaka, K. Teramura, <i>Appl. Catal. B, Environmental</i> 2022, 320, 121885. 3. Designing Reactive Bridging O²⁻ at the Atomic Cu–O–Fe Site for Selective NH₃ Oxidation X. Guan, R. Han, H. Asakura, Z. Wang, S. Xu, B. Wang, L. Kang, Y. Liu, S. Marlow, T. Tanaka, Y. Guo*, F. R. Wang, <i>ACS Catalysis</i> 2022, 12(24), 15207-15217. 4. 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. 5. 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. 6. 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. 7. 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, 26985-26993. 8. 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. 9. 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.

【氏名 (ふりがな)】	山本 量一 (やまもと りょういち)
【職名】	教授
【所属】	工学研究科 化学工学専攻
【研究室】	桂キャンパス A 棟 118 号室
【直通電話】	075-383-2661
【電子メールアドレス】	ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://sm.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】	AAPPS (アジア太平洋物理学会連合) 委員会委員
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. C. Feng, J. J. Molina, M. S. Turner, and R. Yamamoto, Dynamics of microswimmers near a liquid-liquid interface with viscosity difference, <i>Phys. Fluids</i> 35, 051903 (2023). 2. S. Imamura, K. Sawaki, J. J. Molina, M. S. Turner, and R. Yamamoto, Collective Motion of Quinke Rollers with Fully Resolved Hydrodynamics, <i>Adv. Theory Simulations</i> 6, 2200683 (2023). 3. J. Li, S. K. Schnyder, M. S. Turner, and R. Yamamoto, Competition between cell types under cell cycle regulation with apoptosis, <i>Phys. Rev. Res.</i> 4, 033156 (2022). 4. 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). 5. 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 (2021). 6. 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). 7. 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).
【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, Proc. Nat. Acad. Sci. USA 117: 20586-20596. 2. <u>S. Takada*</u> , G.B. Brandani, and C. Tan, 2020. Nucleosomes as allosteric scaffolds for genetic regulation, Curr. Opinion Struct. Biol. 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, Phys. Rev. Lett. 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, Nuc. Acids Res., 46: 2788-2801. 5. M. Shimizu, Y. Noguchi, Y. Sakiyama, H. Kawakami, T. Katayama*, <u>S. Takada*</u> , Near-atomic structural model for bacterial DNA replication initiation complex and its functional insights, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 113 • E8021-E8030 • 2016 6. C. Tan, T. Terakawa, <u>S. Takada*</u> , Dynamic Coupling among Protein Binding, Sliding, and DNA Bending Revealed by Molecular Dynamics, JACS., 138 • 8512-8522 • 2016 7. <u>S. Takada*</u> , R. Kanada, C. Tan, T. Terakawa, W. Li, H. Kenzaki, Modeling Structural Dynamics of Biomolecular Complexes by Coarse-Grained Molecular Simulations, Acc. Chem. Res., 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).

(5) 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
【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) (ルーヴアンカトリック大学) 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、触媒学会
【主な著書、学術論文】 (過去 5 年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. T. Kato, N. Haruta, T. Sato, “Vibronic Coupling Density: Understanding Molecular Deformation”, Springer, 2021. 2. 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). 3. 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). 4. 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). 5. 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).
【学術関係の受賞】	<p>2021 年 5 月 第 2 回理論化学会奨励賞</p> <p>2021 年 2 月 英国王立化学会 第 15 回 PCCP Prize</p> <p>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</p> <p>2019 年 6 月 第 22 回理論化学討論会 優秀講演賞</p> <p>2019 年 4 月 日本化学会 第 99 春季年会 (2019) 優秀講演賞 (学術)</p> <p>2019 年 2 月 福井謙一奨励賞 (第 3 回)</p> <p>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>

(6) リサーチダイレクター

【氏名（ふりがな）】	平尾 公彦（ひらお きみひこ）
【職名】	リサーチダイレクター
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	105
【直通電話】	075-711-7796
【電子メールアドレス】	hirao.kimihiko.2n@kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	https://researchmap.jp/read0180590/research_experience
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	電子状態理論、波動関数理論、密度汎関数法
【研究内容キーワード】	電子相関・相対論的分子理論・LC 汎関数
【学歴】	1974年3月京都大学工学 研究科燃料化学専攻博士課程単位取得退学
【学位】	1974年5月工学博（京都大学）
【略歴】	1974-1975年カナダ・アルバータ大学博士研究員 1988年-1993年 教養部教授 1993年-1995年 東京大学工学部工業化学科教授 1995年-2009年東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻教授（改組により） 2004年-2006年東京大学大学院工学系研究科研究科長・工学部長 2007年-2009年東京大学副学長 2009年4月-2010年6月理化学研究所特任顧問 2010年7月-2018年3月理化学研究所計算科学研究機構・機構長 2018年4月-2021年3月理化学研究所顧問 2018年10月 - 京都大学福井謙一記念研究センターリサーチダイレクター
【所属学会】	日本化学会、アメリカ化学会
【学会活動】	2006年-2012年 International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS, Menton) Secretary General 2004年-2012年 Asia Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists (APATCC) President
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. The core ionization energies calculated by delta SCF and Slater's transition state theory, Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan, and H-J. Lee, <i>J.Chem.Phys.</i> 2023, 158, 016112 2. Higher-Order Transition State Approximation, Takahito Nakajima, Kimihiko Hirao, and Bun Chan, <i>J.Chem.Phys.</i> 2022 156 114112. 3. 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) 4. 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) 5. 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

6. An Improved Slater's Transition State Approximation
Kimihiro Hirao, Takahito Nakajima, and Bun Chan, *J.Chem.Phys.* 2021 155 034101.
7. 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.
8. Rapid prediction of ultra-visible spectra from conventional (non-time-dependent) density functionak theory calculations,
Bun Chan and Kimihiro Hirao, *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11, 7882.
9. Charge-transfer Excitation Energies Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals
Kimihiro Hirao, Bun Chan, Jong-Won Song, and Han-Seok Bae *J.Phys. Chem.A* 2020 124, 8079-8087.
10. Core level Excitation Energies of Nucleic Acid Bases Expressed as Orbital Energies of Kohn–Sham Density Functional Theory with Long-range Corrected Functionals
Kimihiro Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan, Jong-Won Son, and Han-Seok Bae
J.Phys.Chem. A, 2020 124, 10482–10494.

(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

(7) 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 - 福井謙一記念研究センター シニアリサーチフェロー
【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 non-adiabatic 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)

(8) 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月米国エナジー・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】	日本化学会
【学会活動】	日本化学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	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) (以上著書) 1. 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). 2. 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). 3. 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). 4. 化学つれづれ草 第十二回 論文不正 (単著) 化学 73, No. 4, 19 (2018). 5. 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). 6. 化学つれづれ草 第十四回 無用の用 (単著) 化学 73, No. 6, 20 (2018). 7. 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). 8. 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). 9. 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). 10. 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). 11. 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).

	<p>12. 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).</p> <p>13. 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).</p> <p>14. 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).</p> <p>15. 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).</p> <p>16. 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).</p> <p>17. シミュレーションか理解か ー量子化学分野だけにとどまらない緊張関係ー Roald Hoffmann (訳) 現代化学 No. 1, 28-32 (2019).</p> <p>18. 化学つれづれ草 第二十四回 人にわかってもらうこと (単著) 化学 74, No. 4, 45 (2019).</p> <p>19. 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).</p> <p>20. 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).</p> <p>21. 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).</p> <p>22. 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).</p> <p>23. 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).</p> <p>24. 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).</p> <p>25. 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).</p> <p>26. 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).</p> <p>27. 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).</p> <p>28. 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).</p> <p>29. 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).</p> <p>30. 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).</p> <p>31. 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).</p> <p>32. 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).</p> <p>33. 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).</p> <p>34. 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).</p> <p>35. 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).</p> <p>36. 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).</p> <p>37. 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).</p> <p>38. 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).</p> <p>39. 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).</p>
--	--

40.	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).
41.	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).
42.	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)
43.	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)
44.	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)
45.	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)
46.	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)
47.	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)
48.	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)
49.	化学つれづれ草	第五十五回	蒙亨 (単著) 化学 76, No. 11, 41 (2021)
50.	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)
51.	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)
52.	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)
53.	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)
54.	化学つれづれ草	第六十回	データコレクトの面白さ (単著) 化学 77, No. 4, 29 (2022)
55.	化学つれづれ草	第六十一回	産高学低? (単著) 化学 77, No. 5, 57 (2022)
56.	化学つれづれ草	第六十二回	統計学の逆襲 more (単著) 化学 77, No. 6, 41 (2022)
57.	化学つれづれ草	第六十三回	論文投稿とレジリエンス (単著) 化学 77, No. 7, 32 (2022)
58.	化学つれづれ草	第六十四回	小学生とヘリウム (単著) 化学 77, No. 8, 55 (2022)
59.	化学つれづれ草	第六十五回	電子相いろいろ (単著) 化学 77, No. 9, 47 (2022)
60.	化学つれづれ草	第六十六回	データ改ざん again? (単著) 化学 77, No. 10, 31 (2022)
61.	化学つれづれ草	第六十七回	エントロピー番外編 (単著) 化学 77, No. 11, 23 (2022)
62.	化学つれづれ草	第六十八回	調和振動幻想 (単著) 化学 77, No. 12, 45 (2022)
63.	化学つれづれ草	第六十九回	鷹が鷹を生むか? (単著) 化学 78, No. 1, 59 (2023)
64.	化学つれづれ草	第七十回	諸葛孔明と天然ガス (単著) 化学 78, No. 2, 47 (2023)
65.	化学つれづれ草	第七十一回	局在性と鏡の国のアリス (単著) 化学 78, No. 3, 25 (2023)
66.	分子軌道法 (単著)		接着学会誌 56, No. 11, 431-440 (2020).
67.	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).
68.	量子コンピュータの仕組み (単著)		現代化学 No. 6, 38-44 (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 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).
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 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).
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 3 おもな分子軌道法について (単著) 現代化学, No. 6, 70-73 (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 4 基底関数の選び方と性質 (単著) 現代化学, No. 7, 64-67 (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 5 分子構造の最適化 (単著) 現代化学, No. 8, 67-70 (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 6 分子の電子状態からの情報 (単著) 現代化学, No. 9, 54-59 (2020).
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 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).
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 8 分子の電子物性とその特徴 (単著) 現代化学, No. 11, 66-70 (2020).
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 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).
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 10 光吸収と発光について (1) (単著) 現代化学, No. 1, 59-64 (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 11 光吸収と発光について (2) (単著) 現代化学, No. 2, 55-59 (2021).
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 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).
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 13 化学反応経路を調べる (単著) 現代化学, No. 4, 62-65 (2021)
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 14 分子間力の考慮 (単著) 現代化学, No. 5, 71-75 (2021)
83. 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)
84. 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)
85. 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)
86. 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)
87. 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)
88. 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)
89. 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)
90. 化学のための数学入門 4 量子力学における常微分方程式 (単著) 現代化学, No. 4, 68-73 (2022)
91. 化学のための数学入門 5 量子力学における偏微分方程式① (単著) 現代化学, No. 5, 64-68 (2022)
92. 化学のための数学入門 6 量子力学における偏微分方程式② (単著) 現代化学, No. 6, 65-71 (2022)
93. 化学のための数学入門 7 量子力学における偏微分方程式③ (単著) 現代化学, No. 7, 63-68 (2022)
94. 化学のための数学入門 8 実用的な積分① (単著) 現代化学, No. 8, 62-67 (2022)
95. 化学のための数学入門 9 実用的な積分② (単著) 現代化学, No. 9, 65-69 (2022)

<p>【学術関係の受賞など】</p>	<p>96. 化学のための数学入門 10 行列と行列式① (単著) 現代化学, No. 10, 63-67 (2022)</p> <p>97. 化学のための数学入門 11 行列と行列式② (単著) 現代化学, No. 11, 68-73 (2022)</p> <p>98. 化学のための数学入門 12 対称性と群論 (単著) 現代化学, No. 12, 67-73 (2022)</p> <p>99. 化学のための数学入門 13 基本的な関数の性質 (単著) 現代化学, No. 1, 73-78 (2023)</p> <p>100. 化学のための数学入門 14 統計と分布 (単著) 現代化学, No. 2, 66-73 (2023)</p> <p>101. 化学のための数学入門 15 次元解析とデータ処理 (単著) 現代化学, No. 3, 67-71 (2023)</p> <p>102. DeepMind21 が物質科学にもたらす影響 (単著) 現代化学, No. 6, 53-55 (2022)</p> <p>(以上和文総説)</p> <p>1. 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>2. 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>3. 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>4. Hydrogen Adsorption/Desorption Properties of Anhydrous Metal Oxalates; Metal = Mg²⁺ and Ca²⁺ (M. Matsumoto, T. Kita, and K. Tanaka) Bull. Chem. Soc. Jpn. 93, 985-987 (2020).</p> <p>5. How to Explain an SN₂ 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】	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.6e@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 2019, Professor Emeritus, Institute for Liberal Arts and Sciences Kyoto University
【所属学会】	Chemical Society of Japan, Society of Molecular Science Japan, Society of Electron Spin Science and Technology Japan
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. T. Terabayashi, E. Kayahara, Y. Zhang, Y. Mizuhata, N. Tokitoh, T. Nishinaga, T. Kato, and S. Yamago, “Synthesis of Twisted [N]Cycloparaphenylene by Alkene Insertion“, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, 62, e202214960 (2023). 2. Y. Uchida, K. Hino, T. Kato, and R. Tamura, “Through-Space Magnetic Interaction of cis-Azobenzene Biradical”, <i>Cryst. Growth Des.</i>, 23, 1641(2023).
【学術関係の受賞など】	The Society Award from the Society of Electron Spin Science and Technology Japan in 2017.

【氏名 (ふりがな)】	笹井 理生 (ささい まさき)
【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 104
【直通電話】	075-711-7792
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	msasai@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	生命現象の理論化学
【現在の研究課題】	クロマチンの生物物理・タンパク質ダイナミクス
【研究内容キーワード】	ゲノム立体構造・クロマチンドメイン・概日リズム・遺伝子ネットワーク
【最終学歴】	1985年3月京都大学理学研究科博士後期課程物理学第一専攻 満期退学
【学位】	1985年5月理学博士 (京都大学)
【略歴】	1985年8月分子科学研究所 助手 1991年4月名古屋大学教養部 助教授 1998年4月名古屋大学大学院人間情報学研究科 教授 2006年4月名古屋大学大学院工学研究科 教授 2022年4月名古屋大学大学院情報学研究科 客員教授 2022年6月京都大学福井謙一記念研究センター 研究員
【所属学会】	日本生物物理学会、日本物理学会、 Biophysical Society、American Chemical Society
【学会活動】	国際純粋及び応用物理学連合 (IUPAP) Biol. Phys. Commission Chair (2022年1月 - 2024年12月)、日本学術会議連携会員 (2017年10月 - 2023年9月)、Member of Biological Physics Faculty, Faculty Opinions (2020年7月 -)、理化学研究所生命機能科学研究センター Advisory Council 委員 (2018年4月 - 2024年3月)
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	1. S. S. Ashwin, Tadasu Nozaki, Kazuhiro Maeshima, and Masaki Sasai, Organization of fast and slow chromatin revealed by single-nucleosome dynamics. <i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i> 116, 19939–19944 (2019). 2. Bhaswati Bhattacharyya, Jin Wang, and Masaki Sasai, Stochastic epigenetic dynamics of gene switching. <i>Phys. Rev. E</i> 102, 042408 (2020). 3. Masaki Sasai, Mechanism of autonomous synchronization of the circadian KaiABC rhythm. <i>Scientific Reports</i> 11, 4713 (2021). 4. Shin Fujishiro and Masaki Sasai, Generation of dynamic three-dimensional genome structure through phase separation of chromatin. <i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i> 119, e2109838119 (2022). 5. Masaki Sasai, Role of the reaction-structure coupling in temperature compensation of the KaiABC circadian rhythm. <i>PLoS Computational Biology</i> 18, e1010494 (2022).
【学術関係の受賞】	2003年10月名古屋大学高等研究院教授、 2008年9月 韓国高等研究院 KIAS スカラー

II 博士研究員等

1. 博士研究員等組織

2022 (令和4) 年度

職名	氏名
高塚グループ 研究フェロー	新崎 康樹
高塚グループ 研究フェロー	花崎 浩太
笹井グループ 研究フェロー	藤城 新

2. 博士研究員等プロフィール

【氏名 (ふりがな)】	新崎 康樹 (あらさき 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 and K. Takatsuka, Time-resolved photoelectron signals from bifurcating electron wavepackets propagated across conical intersection in path-branching dynamics, <i>Chem. Phys.</i> 493, 42-48 (2017). 2. 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). 3. Y. Arasaki and K. Takatsuka, Chemical bonding and nonadiabatic electron wavepacket dynamics in densely quasi-degenerate excited electronic state manifold of boron clusters, <i>J. Chem. Phys.</i> 150, 114101 (2019, 18 pages). 4. K. Takatsuka and Y. Arasaki, Energy natural orbitals, <i>J. Chem. Phys.</i> 154, 094103 (2021, 14 pages). 5. Y. Arasaki and K. Takatsuka, Energy natural orbital characterization of nonadiabatic electron wavepackets in the densely quasi-degenerate electronic state manifold, <i>J. Chem. Phys.</i> 158, 114102 (2023, 21 pages).

【氏名 (ふりがな)】	花崎 浩太 (はなさき こうた)
【職名】	研究フェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	福井謙一記念研究センター 303
【直通電話】	075-711-7907
【電子メールアドレス】	hanasaki@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	計算化学、理論化学
【現在の研究課題】	非断熱電子ダイナミクス
【研究内容キーワード】	非断熱動力学、電子動力学、電子フラックス
【学歴】	2014年3月 東京大学総合文化研究科広域科学専攻博士課程修了
【学位】	博士 (学術)
【略歴】	2014年8月 Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY), Center for Free-electron Laser Science (CFEL) 博士研究員 2016年7月 東北大学理学研究科化学専攻理論化学研究室 博士研究員 2018年4月 京都大学福井謙一記念研究センター高塚研究室 研究フェロー 2020年8月 University of California, Riverside, Nanoscale & Mesoscale Energy Material Group 博士研究員 2022年9月 京都大学福井謙一記念研究センター高塚研究室 研究フェロー
【所属学会】	分子科学会
【主な著書、学術論文】	1. K. Hanasaki, M. Kanno, T. A. Niehaus and H. Kono, “An efficient approximate algorithm for nonadiabatic molecular dynamics”, J. Chem. Phys. 149, 244117 (2018). 2. K. Hanasaki and K. Takatsuka, “Relativistic theory of electron-nucleus-radiation coupled dynamics in molecules: Wavepacket approach”, J. Chem. Phys. 151, 084102 (2019). 3. K. Hanasaki and K. Takatsuka, “Relativistic formalism of nonadiabatic electron-nucleus-radiation dynamics in molecules: Path-integral approach”, Phys. Rev. A 100, 052501 (2019). 4. K. Hanasaki and K. Takatsuka, “On the molecular electronic flux: Role of nonadiabaticity and violation of conservation”, J. Chem. Phys. 154, 164112 (2021). 5. K. Hanasaki and K. Takatsuka, “Spin current in chemical reactions”, Chem. Phys. Lett. 793, 139462 (2022). 6. K. Hanasaki, Z. A. Ali, M. Choi, M. Del Ben, and B. M. Wong, “Implementation of real-time TDDFT for periodic systems in the open-source PySCF software package”, J. Comput. Chem. 44, 980 (2023).
【学術関係の受賞など】	日本学術振興会特別研究員 (DC1) 2011-2014

【氏名 (ふりがな)】	藤城 新 (ふじしろ しん)
【職名】	特定研究員
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	208
【直通電話】	075-711-7894
【電子メールアドレス】	fujishiro.shin.4u@kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	生物物理学
【現在の研究課題】	真核生物におけるクロマチン動態と転写制御の関係
【研究内容キーワード】	染色体、クロマチン、転写制御、ポリマー物理、動力学シミュレーション
【学歴】	2019年3月 名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻博士課程単位取得退学
【学位】	2016年3月 工学修士 (名古屋大学)
【略歴】	2019年4月-2020年3月 名古屋大学大学院工学研究科技術補佐員 2020年4月-2022年5月 名古屋大学大学院工学研究科研究員 2022年6月 - 京都大学福井謙一記念研究センター特定研究員
【所属学会】	日本生物物理学会
【主な著書、学術論文】	Fujishiro, S. & Sasai, M. Generation of dynamic three-dimensional genome structure through phase separation of chromatin. <i>Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.</i> 119 , e2109838119 (2022). Nagashima, R., Hibino, K., Ashwin, S. S., Fujishiro, S. et al. Single nucleosome imaging reveals loose genome chromatin networks via active RNA polymerase II. <i>J. Cell Biol.</i> 218 : 1511-1530 (2019).

III 研究広報活動

1. 福井謙一記念研究センターシンポジウム

日 時 2023年2月10日(金) 13:00 — 17:55

場 所 京都大学 福井謙一記念研究センター 3階 大会議室

講 演 13:05 — 14:05

田中 庸裕(京都大学大学院 工学研究科)

「自動車排ガス浄化三元触媒の貴金属使用節減と貴金属フリー化」

座長: 佐藤 徹(京都大学福井謙一記念研究センター)

14:15 — 15:15

加藤 昌子(関西学院大学 生命環境学部)

「蒸気応答性を示す金属錯体ソフトクリスタル」

座長: 榎 茂好(京都大学高等研究院物質-細胞統合システム拠点)

福井謙一奨励賞(第7回)受賞講演 15:25 — 15:55

受賞者: 砂賀 彩光(京都大学大学院 理学研究科)

「化学における量子電磁力学効果と分子を用いたCP対称性破れの探索」

ポスターセッション 16:05 — 17:55

2. セミナー

(1) 福井センターセミナー

2022年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、開催しなかった。

(2) その他のセミナー

2022年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、開催しなかった。

3. 国際交流

2022年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、WEB等を通じた交流が行われた。

4. 社会へのアウトリーチ活動

<学術講義>

(1) 田中一義研究員 2023（令和5）年1月30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4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

<産学公連携>

(1) 佐藤徹教授 公益財団法人京都産業21「産学公の森」推進事業補助金

令和4年度採択 II 事業化促進コース

「深青色有機EL素子の開発」構成企業／大学等研究機関名 京都大学

代表企業名 株式会社MOLFEX

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2年後に控えた平成29年度に、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創設した。

今年度のセンターシンポジウムにて、令和4年度の受賞者に表彰状と副賞のメダルを合わせた記念楯を授与し、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、体制の整備に着手した。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1冊について収録した。

7. その他

(1) 化学遺産認定

「アジア初のノーベル化学賞：福井謙一関係資料」として当センターと京都大学文書館の1件及び他機関等の3件、計4件の所蔵品が化学遺産として認定され、2023年3月23日に東京理科大学野田キャンパスにて表彰楯が授与された。当センターの表彰楯はセンターの展示コーナーに展示している。

化学遺産に認定された所蔵品とは、具体的にノーベル賞のメダルや賞状、卒業研究の関連資料や博士論文、手回しの機械式計算機や計算尺、化学式が書かれた黒板、研究関連のメモなどの6

項目、計約1400点である。

<https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/news/4073.html>

<https://www.chemistry.or.jp/news/information/dai14isan.html>

(2) 新聞掲載記事

読売新聞 2023(令和5)年3月4日朝刊(京都版)

「福井博士の品 化学遺産に」 田中一義研究員取材に基づく記事

(3) 化学工業日報 2023(令和5)年3月15日

「日本化学会化学遺産4件認定 福井謙一博士の遺品など」

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

系間交差過程における振電相互作用

混合スピン crude adiabatic 表現を用いて、全ての振動モードを考慮した系間交差速度定数の解析解を導出した。この表現では、無輻射遷移を振電相互作用を駆動力としたフォノン放出、吸収を伴う遷移とみなせ、内部転換[1]と系間交差を統一的に扱うことができる。さらに、crude adiabatic 表現を用いることで、振電相互作用の起源を振電相互作用密度(VCD)により明らかにし[2]、系間交差を制御した分子設計に応用することが可能である。なお、一般に良く用いられる純粋スピン表現では、系間交差はスピン軌道相互作用を駆動力として進行するとみなされる[3]。

始混合スピン状態 M から終混合スピン状態 N への系間交差速度定数は、

$$k_{N \leftarrow M}^{\text{ISC}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} |V_{\alpha}^{NM}|^2 \Theta_{\alpha},$$

$$\Theta_{\alpha} = \sum_{v, v'} P_{Mv}(T) |\langle \bar{\chi}_{Nv'} | Q_{\alpha} | \chi_{Mv} \rangle|^2 \rho(E_{Mv}).$$

ここで、 V_{α}^{NM} は混合スピン状態 NM 間の非対角振電相互作用定数(VCC)、 Θ_{α} は振動遷移強度である。また、 $P_{Mv}(T)$ は温度 T における始振動状態の統計因子、 χ_{Mv} , $\bar{\chi}_{Nv'}$ は始及び終混合スピン状態の振動波動関数、 $\rho(E)$ は終振電状態の状態密度、 E_{Mv} は始振電状態のエネルギーである。非ゼロな非対角 VCC を与える振動モードを促進モードといい、このモードはフォノン放出、吸収に寄与する[1]。混合スピン状態間の非対角 VCC は、純粋スピン状態間の非対角 VCC, $V_{\alpha}^{\ell k}$, の線形結合で表される。

$$V_{\alpha}^{NM} = \sum_{k, \ell} C_{\ell N}^* C_{kM} V_{\alpha}^{\ell k}.$$

ここで、 $C_{\ell N}^*$, C_{kM} は混合係数であり、純粋スピン状態間のスピン軌道相互作用とエネルギー差に依存する。非対角 VCD は VCC の被積分関数として与えられる。

$$V_{\alpha}^{\ell k} = \int dx \eta_{\alpha}^{\ell k}(x),$$

$$\eta_{\alpha}^{\ell k}(x) = \rho^{\ell k}(x) \times v_{\alpha}(x).$$

ここで、 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ はデカルト座標、 $\rho^{\ell k}$ は純粋スピン状態 ℓk 間の重なり密度、 v_{α} は振動モード α のポテンシャル導関数である、

テトラセンを例として、 S_1 を主成分とする混合スピン状態から、それとエネルギー的に接近した T_2 を主成分とする混合スピン状態への系間交差速度定数を計算した。その計算値は、 $4.4 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ であり、実験値 $5.5 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ [4] を良く再現した。系間交差の寄与因子を明らかにするため、振動モード毎の速度定数、混合スピン状態間の非対角 VCC、振動遷移強度をプロットした(Fig. 1)。最も大きな系間交差速度定数を与える主要な促進モードはモード 4 であることが分かった。また、モード 4 における混合スピン状態間の非対角 VCC は、主に純粋スピン状態 S_1 - T_4 間のスピン軌道相互作用と、 T_4 - T_2 間の非対角 VCC から構成されることが分かった。そこで、 T_4 - T_2 間の非対角 VCD を計算した結果、VCC の起源は炭素 2, 3, 5a, 11a であることが示された(Fig. 2)。本研究の手法により、系間交差速度定数をスピン軌道相互作用、振電相互作用、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。

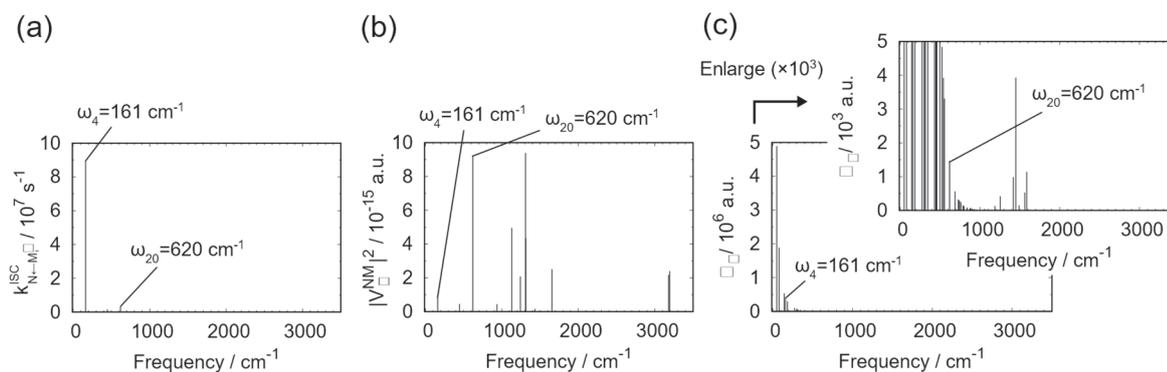


Fig. 1. Vibrational mode decomposition of the ISC rate constant: (a) $k_{N\leftarrow M}^{\text{ISC}}$, (b) V_{α}^{NM} , and θ_{α} plotted with respect to vibrational mode.

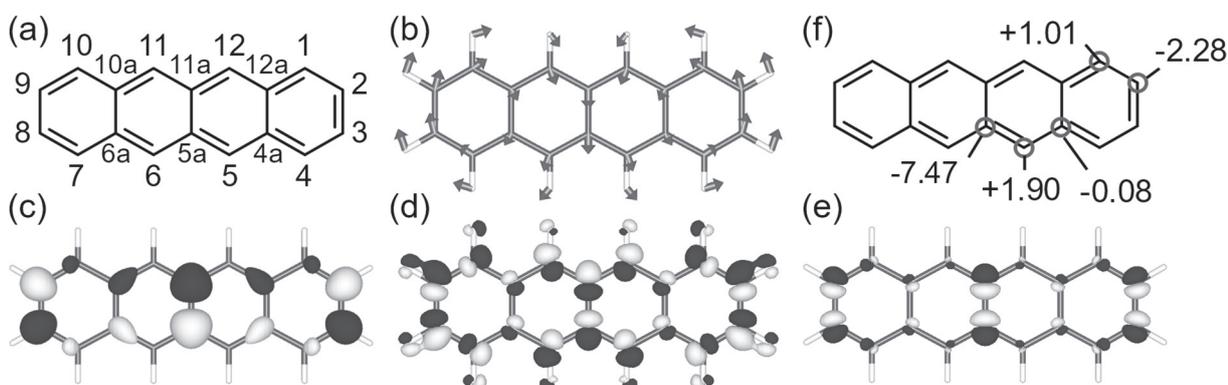


Fig. 2. (a) Structure of tetracene, (b) vibrational mode 4, (c) overlap density between T_2 and T_4 , (d) potential derivative of mode 4, (e) off-diagonal VCD, and atomic decomposition of the off-diagonal VCC.

【文献】 [1] W. Ota, M. Uejima, and T. Sato, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2023**, 96, 582. [2] T. Kato, N. Haruta, and T. Sato, *Vibronic Coupling Density: Understanding Molecular Deformation* (Springer, 2021). [3] B. R. Henry and W. Siebrand, *J. Chem. Phys.* **1971**, 54, 1072. [4] N. Nijegorodov, V. Ramachandran, and D. P. Winkoun, *Spectrochimica Acta Part A*, **1997**, 53, 1813.

アズレンにおける S_2 および S_1 状態からの内部転換過程

一般に、有機分子の蛍光は Kasha 則¹に従い、最低エネルギーの一重項励起状態から生じる。一方で、アズレンは Kasha 則に反する S_2 からの蛍光を示す²。この S_2 からの蛍光は、 S_2 - S_1 間のエネルギー差が大きいため、それらの間の内部転換(IC)が抑制されることに起因すると考えられてきた。しかし、 S_1 - S_0 間のエネルギー差は S_2 - S_1 間と同程度であるにも関わらず、 S_1 - S_0 間の IC は S_2 - S_1 間よりも速いことが報告されている³。従って、 S_2 - S_1 間の IC が抑制される原因としてエネルギー

ギー差だけでなく、振電相互作用も考慮して議論する必要がある。本研究では、アズレンの IC 速度定数を多モードを考慮して計算し、内部転換過程におけるエネルギー差と振電相互作用の寄与を示した。

【理論】 Crude Adiabatic 近似に基づくと、IC 速度定数は次式で与えられる。

$$k_{n \leftarrow m}^{\text{IC}} = \sum_{\alpha} k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}} \quad (1)$$

$k_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$ は振動モード α のフォノンの放出・吸収を伴う IC 速度定数で、次式で得られる。

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

ここで、 $V_{mn, \alpha}$ は始状態と終状態の間の非対角振電相互作用定数 (VCC) である。また、 $\Theta_{n \leftarrow m, \alpha \alpha}$ は核双極子モーメントで重み付けした終状態の状態密度で、対角 VCC $V_{n \leftarrow m, \alpha}$ に依存する。

対角 VCD は $V_{n \leftarrow m, \alpha}$ の被積分関数として次式で与えられる^{4,5}。

$$V_{nm, \alpha} = \int dx \eta_{nm, \alpha}(x) \quad (3)$$

ここで、

$$\eta_{n \leftarrow m, \alpha}(x) = \Delta \rho_{n \leftarrow m}(x) \times v_{\alpha}(x) \quad (4)$$

$\Delta \rho_{n \leftarrow m}(x)$ は始状態と終状態の間の差電子密度、 $v_{\alpha}(x)$ は振動モード α のポテンシャル導関数。

【結果と考察】 Fig. 1 に蛍光及び IC 速度定数の計算結果を示す。計算により得られた S_2 - S_0 間の蛍光速度定数及び、 S_2 - S_1 間と S_1 - S_0 間の IC 速度定数はそれぞれ、 $4.4 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 、 $6.2 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 、 $4.7 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ であり、実験で得られている蛍光速度定数 $(3.4 \times 10^7 \text{ s}^{-1})^2$ 及び、IC 速度定数 $(6 \times 10^8 \text{ s}^{-1}, 5 \times 10^{11} \text{ s}^{-1})^3$ を再現した。

S_2 - S_1 間の IC 抑制に寄与する振電相互作用を明らかにするために IC 速度定数の解析を行なった。

Fig. 2 の (a)、(b)、(c) はそれぞれ、 S_1 - S_0 間の IC 速度定数についての $k_{0 \leftarrow 1, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$ 、 $|V_{10, \alpha}|^2$ 、 $\Theta_{0 \leftarrow 1, \alpha \alpha}$ を示し、(d)、(e)、(f) はそれぞれ、 S_2 - S_1 間の IC 速度定数についての $k_{1 \leftarrow 2, \alpha \alpha}^{\text{IC}}$ 、 $|V_{21, \alpha}|^2$ 、 $\Theta_{1 \leftarrow 2, \alpha \alpha}$ を示す。 S_1 - S_0 間及び、 S_2 - S_1 間の IC 速度定数に最も大きく寄与する振動モードはそれぞれ、 1712 cm^{-1} の C-C 伸縮モード及び、 3163 cm^{-1} の C-H 伸縮モードであった。また、寄与が最大の振動モード同士を比べた時、 $|V_{21, \alpha}|^2$ は $|V_{10, \alpha}|^2$ の 6 分の 1 程度であるのに対し、 $\Theta_{1 \leftarrow 2, \alpha \alpha}$ は $\Theta_{0 \leftarrow 1, \alpha \alpha}$ の 200 分の 1 程度になる。従って、 S_2 - S_1 間の IC 抑制には $\Theta_{1 \leftarrow 2, \alpha \alpha}$ の寄与が大きい。さらに、 $\Theta_{1 \leftarrow 2, \alpha \alpha}$ が小さいのは S_1 の小さい対角 VCC $V_{1 \leftarrow 2, \alpha}$ に起因していることも示された。差電子密度 $\Delta \rho_{1 \leftarrow 2}(x)$ は C 原子上に対称に局在しており、分子振動とのカップリングが小さくなるため、小さい $V_{1 \leftarrow 2, \alpha}$ を与えることがわかった。

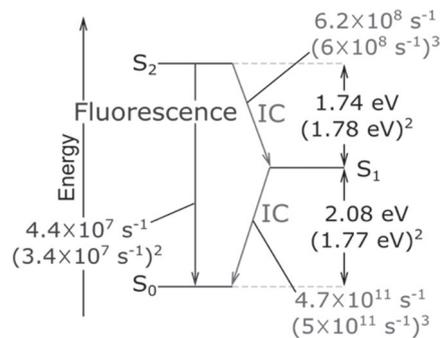


Fig. 1 Calculated fluorescence and IC rate constants.

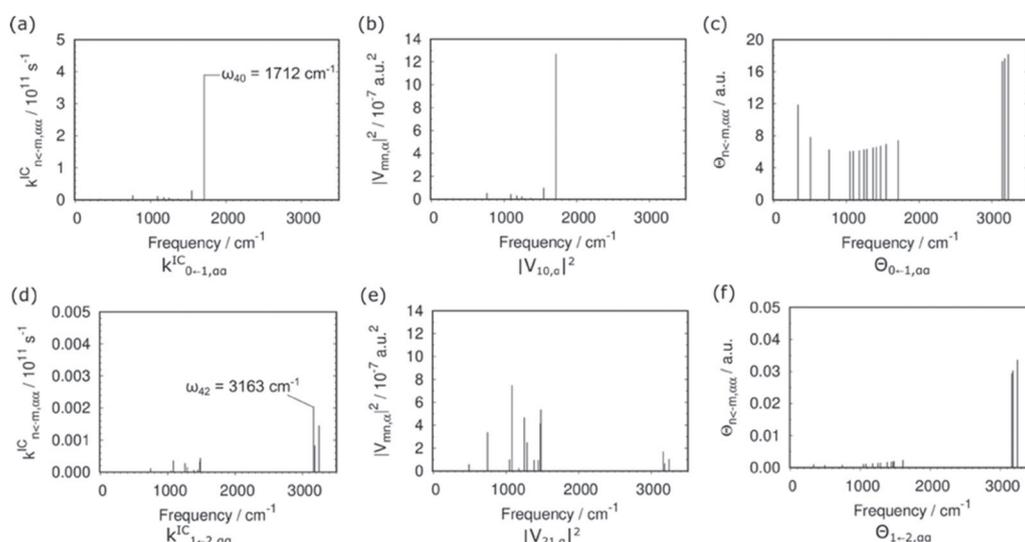


Fig. 2 IC-rate constants, $k_{n\leftarrow m,\alpha\alpha}^{IC}$, square of off-diagonal VCCs, $|V_{mn,\alpha}|^2$, and weighted density of states, $\Theta_{n\leftarrow m,\alpha\alpha}$, for $S_0\leftarrow S_1$ and $S_1\leftarrow S_2$.

【文献】 [1] M. Kasha, *Discuss. Faraday Soc.* **1950**, 9, 14. [2] G. Eber, S. Schneider, F. Dorr, *Chem. Phys. Lett.* **1977**, 52, 59. [3] G. Gillispie, E. C. Lim, *J. Chem. Phys.* **1978**, 68, 4578. [4] T. Kato, N. Haruta, T. Sato, *Vibronic Coupling Density : Understanding Molecular Deformation* (Springer, Singapore, 2021). [5] M. Uejima, T. Sato, D. Yokoyama, K. Tanaka, J.-W. Park, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2014**, 16, 14244.

2. 著書

- (1) Y. Hattori, R. Kitajima, W. Ota, T. Sato, R. Matsuoka, T. Kusamoto, and K. Uchida, *Chem. Sci.*, **13**, 13418 (2022).
- (2) R. Xiaotian, W. Ota, T. Sato, M. Furukori, Y. Nakayama, T. Hosokai, E. Hisamura, K. Nakamura, K. Matsuda, K. Nakao, A. P. Monkman, and K. Albrecht, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **62**, e202302550 (2023).

3. 学会発表

- (1) 大田 航, 上島 基之, 佐藤 徹
「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」
2022 年光化学討論会, 2022/09/13
- (2) 在間 嵩朗, 大田 航, 佐藤 徹
「アズレンにおける S_2 および S_1 状態からの内部転換過程」
2022 年光化学討論会, 2022/09/13

(3) 在間 嵩朗, 大田 航, 佐藤 徹

「Internal Conversion Processes from the S2 and S1 states in Azulene」

2022 年光化学討論会, 2022/09/13

(4) 大西 駿也, 細川 三郎, 田邊 豊和, 大田 航, 寺村 謙太郎, 田中 庸裕, 佐藤 徹

「Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒における超周期構造の発現機構」

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, 2023/02/10

(5) 大田 航, 上島 基之, 佐藤 徹

「系間交差過程における振電相互作用とスピン軌道相互作用」

日本化学会第 103 春季年会, 2023/3/18

春田 直毅

特定助教

1. 今年度の研究の要約

【Sn ドープ亜鉛リン酸塩ガラスの発光機構】

低濃度の Sn をドープした ZnO-P₂O₅ (ZP) ガラスは高効率な青色発光を生じるため¹⁾、LED 用の希土類フリー発光ガラス材料として注目を集めている。この SnO-ZnO-P₂O₅ (SZP) ガラス中で、Sn は 2 価であり²⁾、発光は Sn²⁺イオンの *s-p* 遷移に由来すると予想されている。Sn ドープ前の ZP ガラスについては、逆モンテカルロ法により、EXAFS 等の測定結果を再現する構造が推定されているが³⁾、Sn ドープ後のガラス構造は特定されておらず、高効率発光に寄与する局所構造及び発光メカニズムは未解明であった。本研究の目的は、SZP ガラスの吸収/発光スペクトルを再現する ONIOM モデルを構築し、その電子構造を解析することで、高効率な青色発光メカニズムを理論的に解明することである。

孤立した Sn²⁺イオンの励起状態計算を行った後、Sn²⁺周囲の ZP ガラスによる影響を取り込むため、ONIOM 計算を行った。まず、Sn²⁺が安定となる配位環境を特定するため、Sn²⁺に 1~6 個の O²⁻が配位したスズ錯体の基底状態一点計算を行い、HOMO 準位が低く、4 価になりにくい配位様式を特定した。次に、逆モンテカルロ法で推定された ZP ガラス構造³⁾において、4 価になりにくい配位様式の Zn²⁺を Sn²⁺に置換し、この Sn²⁺を中心とする立方体 (1024 原子) を切り出した。さらに、Sn²⁺を中心にルイス構造式を描き、ダングリングボンドが発生せず、形式酸化数の和が 0 となる範囲を QM 領域 (57 原子)、それ以外を MM 領域 (967 原子) とした。この ONIOM モデルに対して、基底状態において構造最適化及び振動解析、励起状態において一点計算を行った。QM 領域には (TD-) B3LYP/LanL2DZ (Zn, Sn), 6-31G* (O, P)、MM 領域には UFF を用いた。全ての電子状態計算には Gaussian 16, Rev. C.02 を使用した。

Sn²⁺が三角錐型 3 配位または四角錐型 4 配位するとき、HOMO 準位が低く、4 価になりにくいことが分かった。三角錐型 3 配位の Zn²⁺を Sn²⁺に置換した ONIOM モデルに対して、基底状態において構造最適化を行ったところ、Sn²⁺は四角錐型 4 配位に変化した (Fig. 1)。

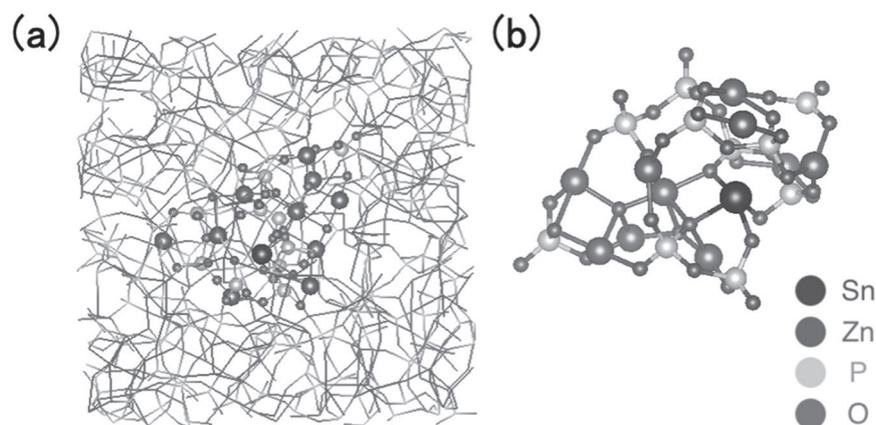


Fig. 1 (a) The optimized ONIOM model and (b) its QM region.

Sn^{2+} の s 軌道、 p 軌道由来の分子軌道はそれぞれ占有軌道、空軌道であり、2 価であった。励起状態一点計算から見積もられた吸収スペクトルは 5.1 eV に s - p 遷移由来のピークを持ち、実験で観測されるピーク位置 (5.0 eV) に近い値となった (Fig. 2)。 Sn^{2+} の周囲にまで分子軌道が非局在化することで、孤立した Sn^{2+} イオンの励起エネルギー (10.1 eV) よりも低エネルギーになったと考えられる。現在、発光状態についても検討中である。

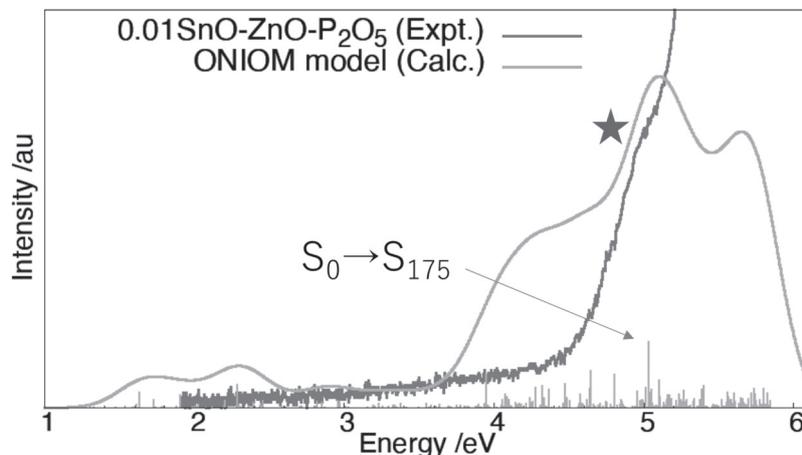


Fig. 2 The experimental absorption spectrum⁴⁾ and the theoretical one with the linewidth of 1300 cm^{-1} .

【ポリオキソメタレート触媒による CO_2 活性化機構】

前期遷移金属の八面体型酸化物が、辺や頂点で縮合したアニオン性クラスター $[\text{M}_x\text{O}_y]^{n-}$ をポリオキソメタレート (POM) と呼ぶ。近年、Hayashi らにより、Ta や Nb の Lindqvist 型 POM が合成され、 CO_2 固定化反応に対して、高い触媒活性を有することが報告された⁵⁾。Mo や W ではこうした触媒活性は現れない。この反応では CO_2 が触媒により活性化されることで、エポキシドに挿入されるが、 CO_2 活性化機構は未解明であった。本研究では、Ta と W の POM を例にとり、POM による CO_2 活性化機構を理論的に明らかにすることを目的とする。

電荷移動状態 $|\Psi_{\text{CT}}\rangle$ において、基準モード α に関する振電相互作用定数 (VCC) V_α は

$$V_\alpha := \left\langle \Psi_{\text{CT}} \left| \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial Q_\alpha} \right)_{\mathbf{R}_0} \right| \Psi_{\text{CT}} \right\rangle$$

と定義される⁶⁾。 \hat{H} は分子 Hamiltonian、 Q_α は基準座標、 \mathbf{R}_0 は参照状態 $|\Psi_0\rangle$ における平衡核配置である。Hellmann-Feynman の定理によれば、 V_α はエネルギー勾配に一致する。モードの位相を V_α が負となるように選べば、これが安定化方向となる。 V_α はさらに振電相互作用密度 (VCD) $\eta_\alpha(\mathbf{r})$ の積分値として表すことができる⁶⁾。

$$\eta_\alpha(\mathbf{r}) := \Delta\rho(\mathbf{r}) \times v_\alpha(\mathbf{r})$$

$\Delta\rho(\mathbf{r})$ は $|\Psi_{\text{CT}}\rangle$ と $|\Psi_0\rangle$ の間の差電子密度、 $v_\alpha(\mathbf{r})$ は 1 電子に働く核ポテンシャルを Q_α で微分したものである。 \mathbf{r} は空間座標を指す。 $\eta_\alpha(\mathbf{r})$ により、 V_α の大きさを電子構造と振動構造に基づいて解析できる。ここでは、POM と CO_2 の相互作用した状態を $|\Psi_{\text{CT}}\rangle$ 、孤立した状態を $|\Psi_0\rangle$ とする。また、各モードに V_α で重み付けして和をとることで、最急降下方向に対応する有効モード s を決定し、解析に用いる。

元素分析⁵⁾に従い、 $\text{TBA}_4[\text{H}_4\text{Ta}_6\text{O}_{19}]$ (Ta6)、 $\text{TBA}_2[\text{W}_6\text{O}_{19}]$ (W6)、 CO_2 吸着構造の構造最適化及び振動解析を行った。TBA はテトラブチルアンモニウムカチオンを指す。吸着に伴う CO_2 の構造変形の起源

を明らかにするため、直線型 CO_2 を配置した場合のフォース計算及び振動解析を行い VCC 及び VCD を計算した。計算レベルは B3LYP/3-21G (H, C, N, O), LanL2DZ (Ta, W) とした。電子状態計算には Gaussian 16 Rev. C.01、VCC 及び VCD の計算には当研究室で開発したコードを用いた。

CO_2 が Ta₆ に吸着すると還元されて (Mulliken 電荷: -0.14)、125.7 度で折れ曲がった (Fig. 3(a))。一方、W6 には吸着しなかった (Fig. 1(b))。W6 の占有軌道と CO_2 の LUMO のエネルギー差は大きく、軌道相互作用による安定化が小さいためである。

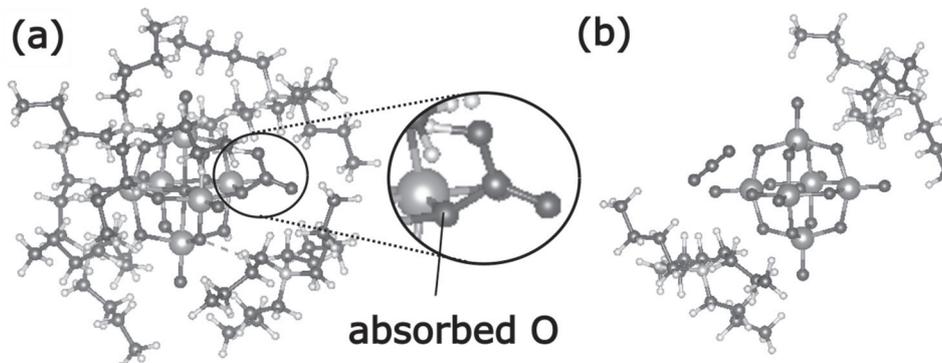


Fig. 3 The CO_2 -adsorbed structures: (a) Ta6 and (b) W6.

折れ曲がりの起源を解明するため、Ta6 上に直線型 CO_2 を配置して、VCD 解析を行った (Fig. 4)。Ta6 の $0-p$ からなる HOMO-3 と CO_2 の π 性 LUMO の σ 相互作用により、電荷移動が起こり、Ta6 と CO_2 の間に負の $\Delta\rho(\mathbf{r})$ が生じた。これが、 CO_2 変角モードに由来して分子間に現れる正の $v_s(\mathbf{r})$ と掛け合わさることで、負の $\eta_s(\mathbf{r})$ が生じ、負の V_s をもたらす。負の V_s はこのモード方向への安定化を意味する。

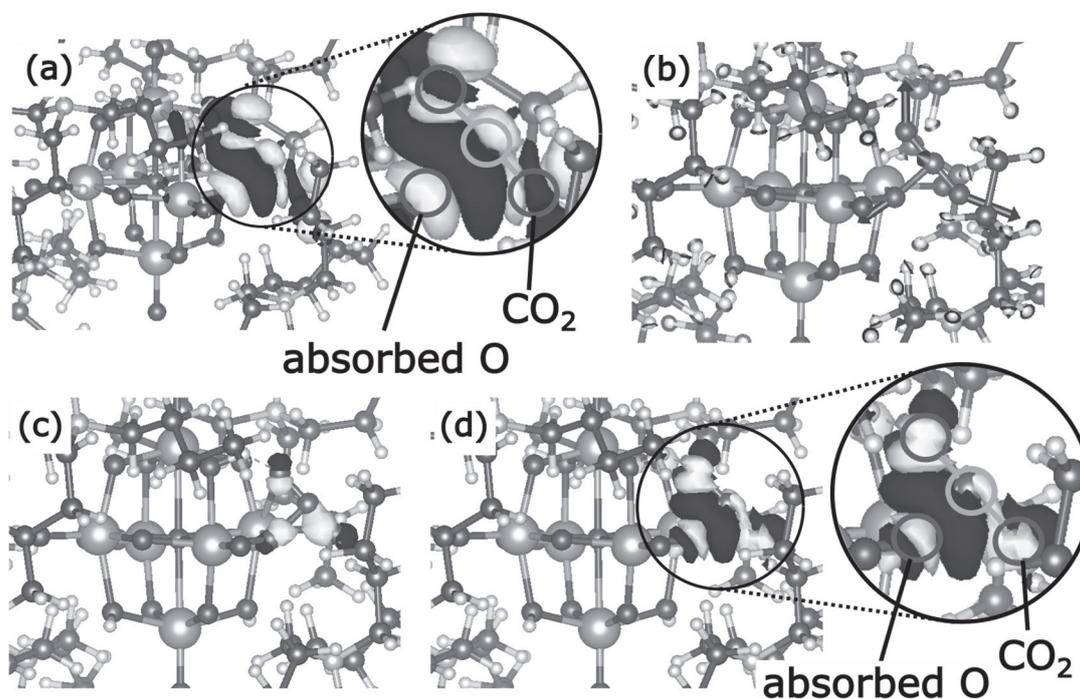


Fig. 4 (a) $\Delta\rho(\mathbf{r})$, (b) the effective mode s , (c) $v_s(\mathbf{r})$, and (d) $\eta_s(\mathbf{r})$ for Ta6 with the linear CO_2 . The gray and blue regions indicate positive and negative, respectively. V_s is -3.42×10^{-3} a.u.

【炭素クラスター負イオン C_6^- と C_6H^- の振電構造】

天文学や宇宙物理学において、星間物質の同定は積年の課題である。吸収スペクトルにおける拡散星間バンド (DIBs) は、いまだ大部分が起源不明である⁷⁾。直線型の炭素クラスター負イオンおよびその末端に水素の結合した $C_nH_m^-$ ($m \leq 2$) は、DIBs の有力な候補とされている⁸⁾。近年、孤立した C_6^- と C_6H^- の観察から、前者において、逆内部転換を経由した高速な冷却過程の存在が実証された^{9), 10)}。これは宇宙空間で C_6^- が安定的に存在する可能性を示唆する。 C_6^- については、高分解能の吸収スペクトルが実験的に得られているが¹¹⁾、量子化学計算に基づいた帰属は十分になされておらず、詳細な振電構造は明らかになっていない。本研究では、 C_6^- および C_6H^- の吸収スペクトルを計算し、実験吸収スペクトルを帰属することを目的とした。

分子 Hamiltonian \hat{H} に対して、基底状態の平衡核配置 \mathbf{R}_0 における、基準モード α に関する、励起状態 $|\Psi\rangle$ の対角振電相互作用定数 (VCC) を

$$V_\alpha := \left\langle \Psi \left| \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial Q_\alpha} \right)_{\mathbf{R}_0} \right| \Psi \right\rangle$$

で定める。 Q_α は基準座標である。角振動数を ω_α とし、

$$g_\alpha := \frac{V_\alpha}{\sqrt{\hbar \omega_\alpha^3}}$$

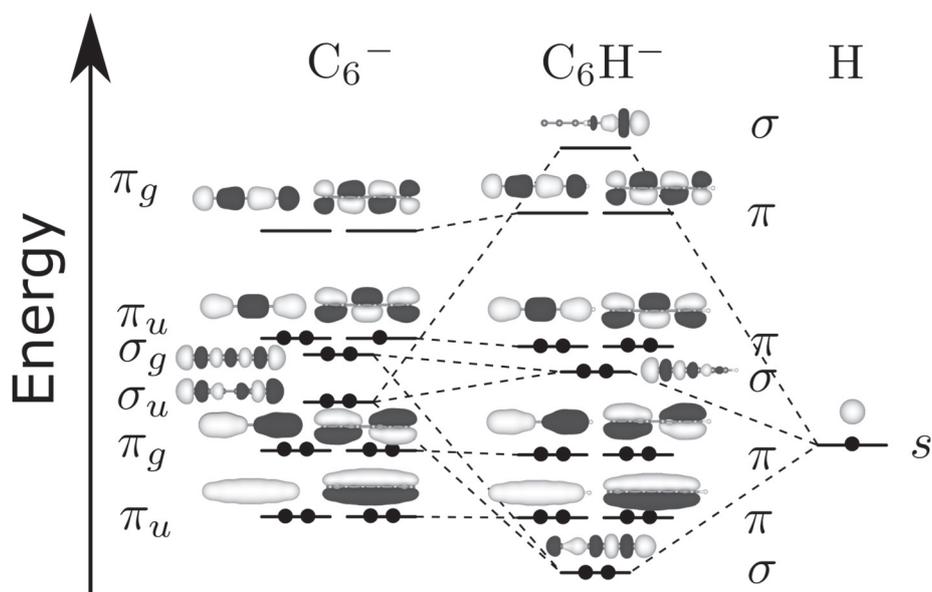
より、Franck-Condon 因子は

$$\langle v'_\alpha | v_\alpha \rangle = \sqrt{\frac{v_\alpha! v'_\alpha!}{2^{v_\alpha + v'_\alpha}}} \exp\left(-\frac{1}{4} g_\alpha^2\right) \times \sum_{l=0}^{\min[v_\alpha, v'_\alpha]} (-1)^{v'_\alpha - l} 2^l \frac{g_\alpha^{v_\alpha + v'_\alpha - 2l}}{l! (v_\alpha - l)! (v'_\alpha - l)!}$$

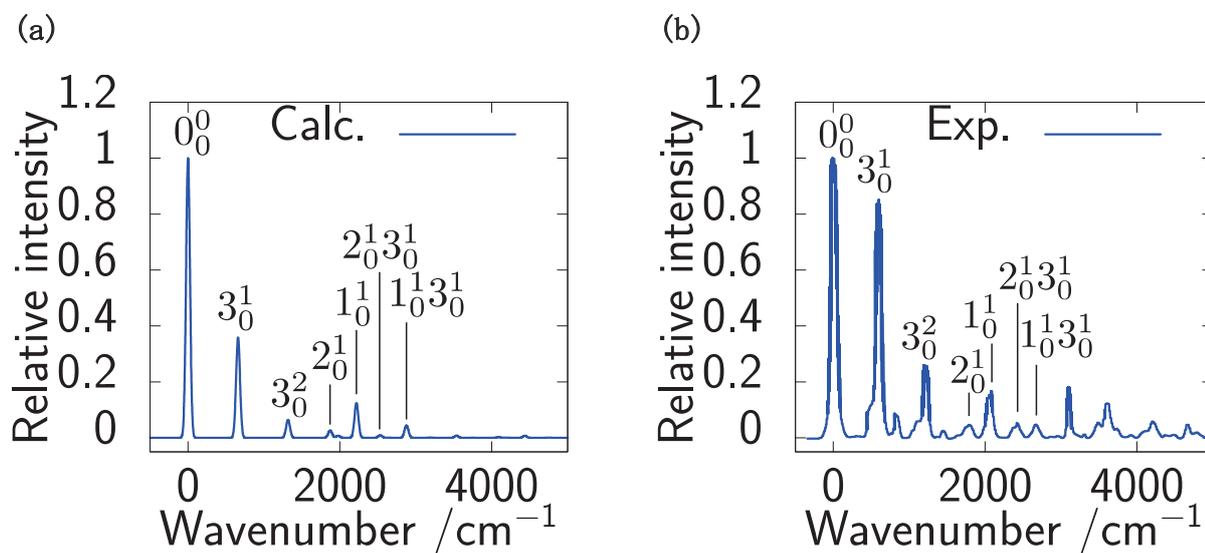
で与えられる¹²⁾。 v_α, v'_α は電子遷移前後のモード α の振動量子数である。これをもちいて、吸収スペクトルにおける各振電遷移の強度が得られる。

C_6^- および C_6H^- の基底状態の構造最適化、振動解析を行った。励起状態計算に基づき、VCC を算出し、吸収スペクトルを計算した。計算レベルは (TD-)PBE0/6-311G(d) とした。電子状態計算には Gaussian16 Rev. C.01、VCC と吸収スペクトルの計算には当研究室で開発したコードを用いた。

最安定構造はいずれも直線型となった。 C_6H^- の σ 軌道は C_6^- の σ 軌道と H の s 軌道の相互作用により局在するが、 π 軌道は対称性より H 付加の影響を受けなかった (Fig. 5)。 C_6H^- は $^1\Sigma^+$ となるが、 C_6^- は価電子が 1 個少なく、部分占有された π_u 軌道を持つため、 $^2\Pi_u$ となる。したがって、SOMO 近傍の占有軌道から SOMO への電子遷移が可能となり、低エネルギー領域に電子励起状態が現れる。

Fig. 5 MO correlation diagram of C_6^- , H, and C_6H^- .

C_6^- では、 π_g SOMO-3 \rightarrow π_u SOMO からなる D_5 ($^2\Pi_g$) が、 D_0 との間で最も振動子強度が大きい ($f = 0.046$)。 $D_5 \leftarrow D_0$ について、吸収スペクトルのシミュレーションを行ったところ、各ピークがC-C伸縮からなる $\nu_1(\sigma_g^+)$, $\nu_2(\sigma_g^+)$, $\nu_3(\sigma_g^+)$ モードの励起を伴う振電遷移として、おおむね帰属された (Fig. 6)。

Fig. 6 (a) The simulated spectrum of $D_5(^2\Pi_g) \leftarrow D_0(^2\Pi_u)$ absorption of C_6^- and (b) the experimental one¹¹⁾.

【文献】

- 1) H. Masai *et al.*, Opt. Express 20, 27319 (2012).
- 2) A. Torimoto *et al.*, J. Ceram. Soc. Jpn. 124, 554 (2016).
- 3) H. Masai *et al.*, Phys. Status Solidi B 257, 2000186 (2020).

- 4) H. Masai, unpublished result.
- 5) S. Hayashi *et al.*, J. Phys. Chem. C 122, 29398 (2018).
- 6) T. Kato *et al.*, Vibronic Coupling Density: Understanding Molecular Deformation (Springer, 2021).
- 7) G. H. Herbig, Annu. Rev. Astrophys. 33, 19 (1995).
- 8) J. Fulara *et al.*, Nature 366, 439 (1993).
- 9) G. Ito *et al.*, Phys. Rev. Lett. 112, 183001 (2014).
- 10) Y. Ebara *et al.*, Phys. Rev. Lett. 117, 133004 (2016).
- 11) P. Freivogel *et al.*, J. Chem. Phys. 107, 22 (1997).
- 12) M. Uejima *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 14244 (2014).

2. 論文

- (1) Shunya Tanaka, Daisuke Sakamaki, Naoki Haruta, Tohru Sato, Masayuki Gon, Kazuo Tanaka, Hideki Fujiwara,
“A Double Heterohelicene Composed of Two Benzo[b]phenothiazine Exhibiting Intense Room-Temperature Circularly Polarized Phosphorescence”
J. Mater. Chem. C 11, 4846–4854 (2023)

3. 総説

- (1) 春田 直毅
「力学的対称性理論・メカノケミストリー・エキシトン動学の確立に向けた基礎学理の構築」
フロンティア 第4巻4号、155-162、2022年10月31日
- (2) 春田 直毅
「メカノケミストリーの理論をつくる」
現代化学 2023年1月号、43-44、2023年1月1日

4. 学会発表

- (1) 春田 直毅
「力学的対称性理論・メカノケミストリー・エキシトン動学の確立に向けた基礎学理の構築」
第24回理論化学討論会 金沢商工会議所 2022年5月18日 IL04
- (2) 矢田 達寛、春田 直毅、佐藤 徹
「領域同位体効果による化学反応の促進と抑制」

第 32 回基礎有機化学討論会 京都パルスプラザ 2022 年 9 月 20 日 1P092

- (3) 春田 直毅、堺 稚菜、Lori Gonnet、佐藤 徹、Michel Baron
「ジフェニルフルベンとマレイミドのメカノケミカル反応における立体選択性の起源」
第 16 回分子科学討論会 2022 横浜 慶應義塾大学 矢上キャンパス 2022 年 9 月 21 日 3D13
- (4) Naoki Haruta
「Hidden Symmetry and Periodicity of Polyatomic Clusters」
International Congress on Pure & Applied Chemistry Kota Kinabalu 2022 オンライン 2022 年 11 月 23 日 IGS19
- (5) 高倉 陸、春田 直毅、大西 駿也、大田 航、細川 三郎、田邊 豊和、寺村 謙太郎、田中 庸裕、佐藤 徹
「Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd の超周期構造と CO 酸化に対する触媒活性」
日本コンピュータ化学会 2022 秋季年会 信州大学 長野 (工学) キャンパス 2022 年 11 月 25 日 1P11
- (6) 高倉 陸、春田 直毅、大西 駿也、大田 航、細川 三郎、田邊 豊和、寺村 謙太郎、田中 庸裕、佐藤 徹
「Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd の超周期構造と触媒活性」
日本化学会第 103 春季年会 (2023) 東京理科大学 野田キャンパス 2023 年 3 月 25 日 K305-4pm-12

5. その他

- (1) 高倉 陸、春田 直毅、大西 駿也、大田 航、細川 三郎、田邊 豊和、寺村 謙太郎、田中 庸裕、佐藤 徹
「Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の触媒活性」
第 18 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム 京都大学福井謙一記念研究センター 2023 年 2 月 10 日 27

2. リサーチダイレクター

Kimihiko 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

Orbitals represents a key concept in modern chemistry. The physical meaning of orbitals was clarified in the Koopmans theorem, which provides a simple and natural connection between the orbital energy and an experimental observable, the ionization energy.

The KS-DFT 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 (the CGB set). The vertical ionization potentials (IP) of the CGB set are estimated as negative orbital energies within the context of the Koopmans' prediction using the LCgau-core range-separation scheme in combination with PW86-PW91 exchange-correlation functional. The range separation parameter of the functional is tuned to minimize the error of the negative HOMO orbital energy from experimental IP. The results are compared with literature data, including *ab initio* IP variant of the equation-of-motion coupled cluster theory with singles and doubles (IP-EOM-CCSD), the negative orbital energies calculated by KS-DFT with the statistical averaging of orbital potential (SAOP), and those with the QTP family of functionals. The optimally tuned LC functional performs better than other functionals for the estimation of valence level IP. The mean absolute deviations (MAD) from experiment and from IP-EOM-CCSD are 0.31 eV (1.77 %) and 0.25 eV (1.46 %) , respectively. LCgau-core performs quite well even with fixed (not system-dependent). A value around 0.36 bohr^{-1} gives MAD of 0.40 eV (2.42%) and 0.33 eV (1.96%) relative to experiment and IP-EOM-CCSD, respectively. 0.36 bohr^{-1} 0.40 eV (2.38%), 0.35 eV (2.04%) The LCgau-core-PW86-PW91 functional is efficient alternative to IP-EOM-CCSD and it is reasonably accurate for outer valence orbitals. eV (0.25 %) but N(1s), O(1s) and F(1s) core ionization energies are predicted less accurately.

The paper is dedicated to my old and good friend, late Professor Enrico Clement. Enrico pass away on March 30, 2021.



(June 7, 2016, at ICQC in Beijing)

The core ionization energies calculated by delta SCF and Slater's transition state theory

The core ionization energies of the second-period and third-period elements are studied by Δ SCF and Slater's transition state (STS) theory using Hartree-Fock (HF) and Kohn-Sham (KS) approximations. Electron correlation increases the estimated core ionization energies, while the self-interaction error (SIE) decreases them especially for the third-period elements, and is a more significant factor. As a result, while HF lacks electron correlation, it is free of SIE and reasonably predicts the core ionization energies. The core ionization energies calculated by HF STS are very close to those calculated by HF Δ SCF, showing that STS reasonably describes the relaxation of the core hole. The core ionization energies calculated by KS are particularly sensitive to the SIE of the functional used, with functionals having less SIE yielding more accurate Δ SCF core ionization energies. Consequently, BH&HLYP gives better results than B3LYP and LC-BOP since BH&HLYP is the hybrid functional with high proportion of the exact HF exchange. Although the core ionization energies are underestimated by Δ SCF due to SIE, STS gives larger core ionization energies than Δ SCF

due to a concave behavior of the error curves of STS, which is also related to SIE. The mean absolute deviations (MADs) of STS relative to ΔSCF , and relative to the experiment, are almost constant regardless of the nuclei among the element in the second period, and likewise among those in the third period. The systematic nature suggests that shifting the STS core ionization energies may be useful. We propose the shifted STS (1) for reproducing ΔSCF values, and the shifted STS (2) to reproduce the observed ones for KS calculations. Both schemes work quite well. The calculated results of KS ΔSCF and STS vary depending on the functional. However, the variation of each species' shifted STS (2) is very small, and all shifted STS (2) values are close to the observed ones. As the shifted STS require only one SCF calculation, they are simple and practical for predicting the core ionization energies.

TABLE. The core ionization energies (eV) of the second-period elements (CH_4 , NH_3 , H_2O , HF , and furan) and third-period elements (SiH_4 , PH_3 , H_2S , HCl , and thiophene) calculated by ΔSCF , STS, Shifted STS (1) and Shifted STS (2)

Species	Method	STS	ΔSCF	Shifted STS (1)	Shifted STS (2)	Experiment
CH_4	Hartree-Fock	290.8	290.7	-	-	290.9
	BH&HLYP	291.9	291.3	291.2	290.8	
	B3LYP	292.0	290.9	290.8	290.8	
	LC-BOP	291.0	289.4	289.2	290.5	
NH_3	Hartree-Fock	405.4	405.3	-	-	405.6
	BH&HLYP	406.6	406.0	406.0	405.6	
	B3LYP	406.8	405.6	405.6	405.6	
	LC-BOP	405.8	404.1	404.0	405.4	
H_2O	Hartree-Fock	539.3	539.3	-	-	539.93
	BH&HLYP	540.8	540.2	540.2	539.8	
	B3LYP	540.9	539.7	539.7	539.8	
	LC-BOP	540.7	538.8	538.8	540.2	
HF	Hartree-Fock	693.4	693.5	-	-	694.22
	BH&HLYP	695.1	694.5	694.5	694.1	
	B3LYP	695.4	694.1	694.2	694.3	
	LC-BOP	694.8	692.8	693.0	694.3	

C₂H₄O	Hartree-Fock	539.2	539.1	-	-	539.4
	BH&HLYP	540.8	540.1	540.2	539.8	
	B3LYP	541.1	539.8	539.9	540.0	
	LC-BOP	540.3	538.4	538.5	539.8	
SiH₄	Hartree-Fock	1847.7	1847.7	-	-	1847.1
	BH&HLYP	1848.4	1847.1	1847.0	1847.1	
	B3LYP	1847.7	1845.5	1845.3	1847.4	
	LC-BOP	1847.0	1844.0	1844.3	1847.5	
PH₃	Hartree-Fock	2151.6	2151.7	-	-	2150.69
	BH&HLYP	2152.1	2150.8	2150.7	2150.8	
	B3LYP	2151.3	2149.0	2148.9	2150.6	
	LC-BOP	2150.5	2147.3	2147.2	2150.9	
H₂S	Hartree-Fock	2479.2	2479.3	-	-	2478.58
	BH&HLYP	2479.6	2478.2	2478.2	2478.3	
	B3LYP	2478.5	2476.1	2476.1	2478.4	
	LC-BOP	2478.1	2474.8	2474.8	2478.5	
HCl	Hartree-Fock	2831.0	2831.1	-	-	2829.8
	BH&HLYP	2831.2	2829.8	2829.8	2829.9	
	B3LYP	2830.2	2827.7	2827.8	2829.9	
	LC-BOP	2829.2	2825.8	2825.9	2829.7	

C ₄ H ₄ S	Hartree-Fock	2478.7	2478.8	-	-	2478.4 (2477.6)
	BH&HLYP	2479.2	2477.8	2477.8	2477.9	
	B3LYP	2478.3	2475.8	2475.9	2478.0	
	LC-BOP	2477.4	2474.1	2474.1	2477.9	

Original papers

1. 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, *JPCM (Enrico Clementi Memorial Issue) J. Phys.: Condens. Matter* **2022** 34 194001 (9 pages)
2. The core ionization energies calculated by delta SCF and Slater's transition state theory
Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan, and H-J. Lee, *J.Chem.Phys.*, **2023**, 158, 016112

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 particular, we have been challenging the possibly most tough electronic wavepacket states, which lie in the densely quasi-degenerate electronic-state manifold and are supported by persisting multiple multi-dimensional nonadiabatic transitions. In these states, we often face very tough problems that are not met otherwise. 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. Those molecules are also associated with huge electronic-state fluctuations. We often ask ourselves how we can describe the nature of chemical bonds in a general fashion and how we can characterize bond rearrangement and chemical reactions. Technically these electronic states can be described only in terms of highly correlated electronic functions such as Configuration Interaction wavefunctions, which are far more complicated than the conventional molecular orbitals. As a general tool with which to analyze more intuitively yet qualitatively, we have proposed the method of Energy Natural Orbitals (ENO) two years ago. [“Energy Natural Orbitals”, Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki, *J. Chem. Phys.* **154**, 094103 (2021).] After applications of ENO to some simple yet very important basic problems, such as the nature of chemical bond and transition states, and generalized notions of Fukui’s frontier orbital theory (HOMO-LUMO interaction theory) and the Woodward-Hoffmann symmetry forbidden reactions, the physical nature of chemical bond [1] and so on, we have resumed with those ENOs the study of boron clusters in persisting multiple multi-dimensional nonadiabatic electron wavepacket states. Many interesting and fundamental insights have been attained, which we hope set a theoretical foundation of future excited state chemistry [2].

In the long-standing study of nonadiabatic electron wavepacket dynamics, we have developed a new field of theoretical chemistry in spin current chemistry [3] and real-time electronic-energy flux in and in-between molecules [4]. We believe these fields will constitute crucial branches of theoretical and experimental molecular science.

Besides, we have published a review paper on quantum chaos in the dynamics of molecules [5] based on our long-standing experience in molecular chaos along with our own developed theory of chaos in nonadiabatic dynamics of molecular wave functions.

Below are the short abstracts of our relevant studies carried out in FIFC for the academic year of 2022.

[1] Energy natural orbital characterization of nonadiabatic electron wavepackets in the densely quasi-degenerate electronic state manifold

Dynamics and energetic structure of largely fluctuating nonadiabatic electron wavepackets were rather precisely studied [K. Takatsuka and Y. Arasaki, *J. Chem. Phys.* **154**, 094103 (2021)]. Such huge fluctuating states are sampled from the highly excited states of clusters of 12 boron atoms (B_{12}), which have densely quasi-degenerate electronic excited-state manifold, each adiabatic state of which gets promptly mixed with other states through the frequent and enduring nonadiabatic interactions within the manifold. Yet, the wavepacket states are expected to be of very long lifetimes. This excited-state electronic wavepacket dynamics is extremely interesting but very hard to analyze since they are usually represented in large time-dependent configuration interaction wavefunctions and/or in some other complicated forms. We have found that ENO gives an invariant energy orbital picture to characterize not only the static highly correlated electronic wavefunctions but also those time-dependent electronic wavefunctions. Hence, after confirming how the ENO representation works for some general cases such as proton transfer in water dimer and electron-deficient multicenter chemical bonding in diborane in the ground state, we then have penetrated deep into the analysis of the essential nature of nonadiabatic electron wavepacket dynamics in the excited states and show the mechanism of the coexistence of huge electronic fluctuation and rather strong chemical bonds under very random electron flows within the molecule. To quantify the intra-molecular energy flow associated with the huge electronic-state fluctuation, we define and numerically demonstrate what we call the electronic energy flux.

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

Physical nature of the chemical bond and potential barrier has been studied in terms of energy natural orbitals (ENOs), which are extracted from highly correlated electronic wavefunctions. ENO is invariant in the same sense as Natural Orbitals (NO) are. 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 have analyzed 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 have highlighted 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 can be 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, it turns out that the chemical

bonding and rate process are interconnected behind the scenes. Besides this aspect, we clarified (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.

[3] Spin current in chemical reactions

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 have introduced spin flux to track the dynamics of spin density in them. As an illustrative example, we picked the spin flux in the course of the basic radical reaction $\text{H}\cdot + \text{H}_2$. It has been 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 is in harmony with the classic theory of three-stage mechanism in radical reactions by Nagase and Fueno. The theories of chemical reactions are now being uplifted and tied to the developments of attosecond electron dynamics. Further developments are under way in our group.

[4] Real-time electronic energy current and quantum energy flux in molecules

Intra- and inter-molecular electronic energy current have been formulated by defining the probability current of electronic energy, called the energy flux. Among vast possible applications to electronic energy transfer phenomena, including chemical reaction dynamics, here we present a first numerical example from highly excited nonadiabatic electron wavepacket dynamics of a boron cluster B_{12} . The analysis of spatiotemporal electronic-energy current will put the study of energy transfer into a new stage, since it gives real-time information about when, where, how, and how much electronic energy flows in and in-between molecules. No such information was available before in the studies of energy transfer.

[5] Quantum chaos in the dynamics of molecules

Quantum chaos has been reviewed from the viewpoint of “what is molecule?”, particularly placing emphasis on their dynamics in the present review article. Molecules are composed of heavy nuclei and light electrons, and thereby the very basic molecular theory due to Born and Oppenheimer gives a view that quantum electronic states provide potential functions working on nuclei, which in turn are often treated classically or semiclassically. Therefore the classic study of chaos in molecular science began with those nuclear dynamics particularly about the vibrational energy randomization within a molecule. Statistical laws in probabilities and rates of chemical reactions even for small molecules of several atoms are among the chemical phenomena requiring the notion of chaos. Particularly the dynamics behind unimolecular decomposition are referred to as Intra-molecular Vibrational energy Redistribution (IVR). Semiclassical mechanics is also one of the main research fields of quantum chaos. We herein demonstrate chaos that appears only in semiclassical and full quantum dynamics.

A fundamental phenomenon possibly giving birth to quantum chaos is “bifurcation and merging” of quantum wavepackets, rather than “stretching and folding” of the baker’s transformation and the horseshoe map as a geometrical foundation of classical chaos. Such wavepacket bifurcation and merging are indeed experimentally measurable as we showed before in the series of studies on real-time probing of nonadiabatic chemical reactions. After tracking these aspects of molecular chaos, we have explored quantum chaos found in nonadiabatic electron wavepacket dynamics, which emerges in the realm far beyond the Born-Oppenheimer paradigm.

2. Papers

1) 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) (11 pages) (open)

DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0088340>

2) Energy natural orbital characterization of nonadiabatic electron wavepackets in the densely quasi-degenerate electronic state manifold

Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka,

J. Chem. Phys. **158**, 114102 (2023) (21pages) (open)

<https://doi.org/10.1063/5.0139288>

3) 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>

4) Real-time electronic energy current and quantum energy flux in molecules

Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki

J. Chem. Phys. **157**, 244108 (2022) (20 pages) (open)

DOI: 10.1063/5.0131200

5) Quantum chaos in the dynamics of molecules (Review)

Kazuo Takatsuka

Entropy, **25**, 63 (2023) (52 pages) (open)

<https://doi.org/10.3390/e25010063>

3. Presentation at academic conferences

(1) Kazuo Takatsuka

“An invariant energy-orbital theory for the nature of chemical bonds and transition states”

Theoretical Chemistry Meeting: Structure and Dynamics (TCMSD-2022)

Indian Association for the Cultivation of Science, Kolkata, May 26-29, 2022, online

(2) 高塚和夫, 新崎康樹

“不変一電子描像による化学結合論”

理論化学討論会 2022 5月/17-20日 金沢

(3) 花崎 浩太, 高塚 和夫

“電子フラックスと非断熱動力学”

分子科学討論会 2022 9月/19-22日 慶応大学

(4) Kazuo Takatsuka

“Nature of Chemical Bonds in Excited States”

Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry-10 Quy Nhon,
Vietnam, Feb. 19-23, 2023

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、遷移金属錯体を元素ブロックとする設計とその有用な応用開発に向けた研究がある。特に Ru 錯体では CO₂ の光還元機能を利用できる可能性があるので、今年度は Ru 錯体を元素ブロックとして含ませることによって、新規な CO₂ 還元機能に関わる反応設計についての理論的考察を行った。

Reaction Design toward Photoreduction of CO₂

1. Introduction

Photoreduction processes of CO₂ would be one of the key technologies to resolve the global warming issues and have been being kept as challenging theme to many researchers in chemistry. Organometallic complexes could form useful photocatalytic system for this purpose and several metallic species such as Ru, Re, Ru-Re binuclear system, and so on have been examined. In this connection, a computational analysis toward fabrication of a photoreduction system of CO₂ has been attempted in the following by employing a Ru complex, RuL₂(NCS)₂ (L = 2,2'-bipyridyl-4,4'-dicarboxylic acid) denoted as N3 in the below[1]. The calculation was done by DFT/B3LYP method using Gaussian09 program package in which SDD (Stuttgart/Dresden effective core potential) was employed for Ru metal and 6-31G** for other elements.

2. Results

The N3 complex shown in Fig. 1(a) or its analogues are the dyes utilized as photosensitizing material for e.g., TiO₂ electrode of dye sensitized solar cell. Calculated optical absorption energies of N3 are listed in Table 1 which is in reasonable agreement with the experimental data[2]. The calculated optical absorption spectrum is shown in Fig. 1(b). It is understood that this complex has favorable spectrum

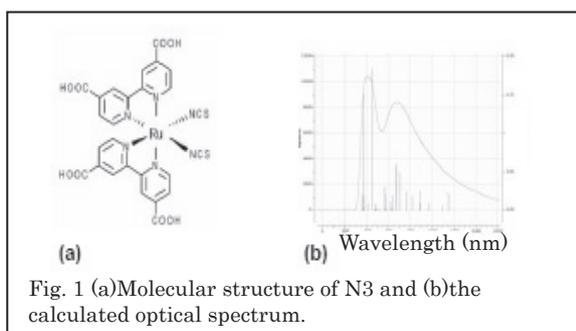


Table 1 Major peaks of the calculated optical absorption spectrum of N3.

No of excitation	Wavelength of the peak (in nm)	Corresponding MO transition in TD-DFT	Coefficient of the MO transition	Oscillator strength
10 th	668.76	HO→LU+3	0.6408	0.0591
9 th	704.08	HO→LU+2	0.6575	0.0496
29 th	445.12	HO-6→LU	0.5866	0.1853
33 rd	373.66	HO-5→LU+3	0.5408	0.1523
		HO-4→LU+2	0.4082	

¹Experimental absorption peaks are at 534 nm (1.42), 396 nm (1.40), and 313 nm (3.12), where values in parentheses indicate ϵ in 10⁴/M cm [2].

as seen by the calculated peak at 445 nm is related to the transition from the HOMO-6 to the LUMO

signifying the electron transfer from the metal (Ru) area to the ligands, which corresponds to, what is called, the metal-ligand charge transfer (MLCT). This phenomenon is first related to generation of the $^1\text{MLCT}$, which rapidly changes into the $^3\text{MLCT}$ state through spin-orbit coupling due to heavy atom effect of Ru.

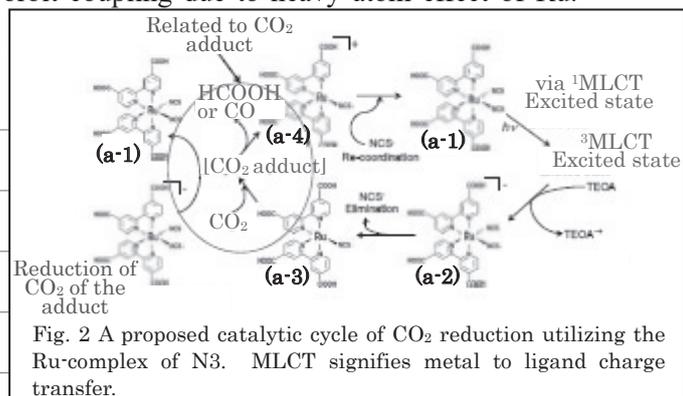
As seen in Table 2 the natural charge of Ru at $^3\text{MLCT}$ of **a-1**

Table 2 Calculated data at each state (see Fig. 4).

State	a-1	a-1 $^3\text{MLCT}$	a-2	a-3	a-4
Ru-N bond length ¹ (in Å)	2.043	2.001	2.062	2.030	1.995
Natural charge of Ru	0.5483	0.7104	0.5638	0.6531	0.6755
Relative energy ² (in eV)	0	+0.966 (+0.576)	-2.297 (-2.254)	+0.047 (+0.123)	+5.006 (+4.839)

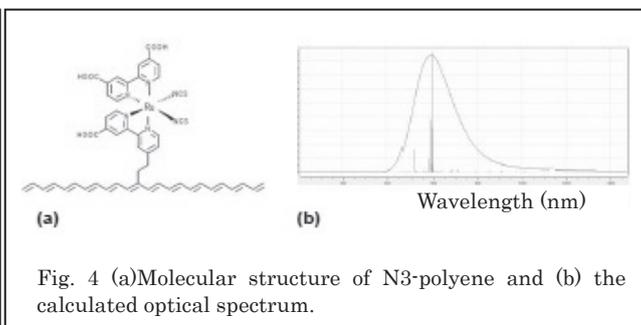
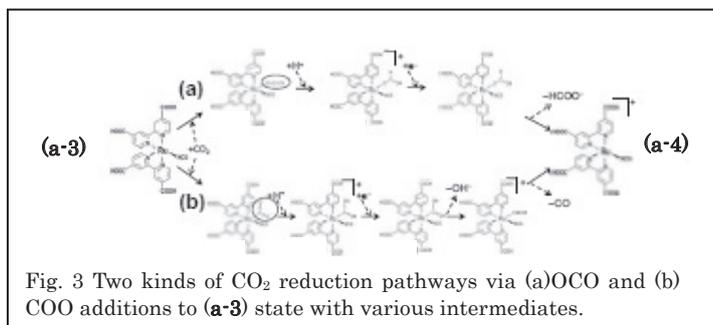
¹Between Ru and N atoms of Ru-NCS.

²In parentheses are those for N3-polyene system.



increases by ca. 0.2 actually signifying the occurrence of the charge transfer from Ru to ligands. It is noted that in **a-2** being anionic the natural charge on Ru is almost the same with that in **a-1**, signifying excessive electron in **a-2** ought to be on the ligands.

The total catalytic cycle of photoreduction of CO₂ has been proposed as starting from the a-1, $^3\text{MLCT}$ of **a-1**, **a-2**, **a-3**, and then to the CO₂ adduct liberating HCOOH or CO followed by changing to **a-4** and finally to the **a-1** again as shown in Fig. 2. The virtue of utilization of the $^3\text{MLCT}$ of **a-1** can be understood by that electron is easily injectable to the lower SOMO eventually yielding an anionic species. There can be considered two ways after formation of the CO₂ adduct to the **a-3** state as shown in Fig. 3 in the form of O=C=O or COO adduction. From the former adduct HCOO⁻ is liberated and from the latter CO.



3. Discussion

It would be possible to reinforce the optical absorption of N3 by introducing a polyene (e.g., dodecaene) substructure. An example of molecular design of N3-polyene is shown in in Fig. 4(a). It is seen from the calculated optical absorption spectrum in Fig. 4(b) the tail appreciably extends to the near IR region, which

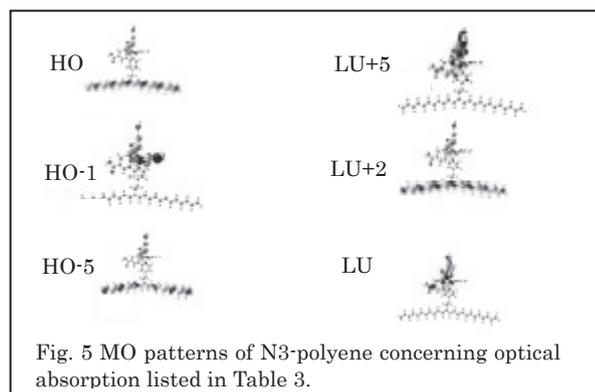


Table 3 Major peaks of the calculated optical absorption spectrum of N3-polyene.

No of excitation	Wavelength of the peak (in nm)	Corresponding MO transition in TD-DFT	Coefficient of the MO transition	Oscillator strength
19 th	598.91	HO→LU+2	0.5157	1.9269
		HO-5→LU	0.4018	
20 th	595.71	HO→LU+2	-0.3085	0.7083
		HO-5→LU	0.5433	
22 nd	592.69	HO-1→LU+5	0.5176	0.8305

ensures the utilization of solar light becomes more effective. Moreover, from Table 3, that the oscillator strength of the absorption in this system becomes much larger compared with those of N3. Analyses of the MO patterns corresponding to the optical absorption in Fig. 5 shows the contribution of optical transition from the main chain of polyene to the N3 moiety in addition to the transition within the polyene chain.

This enhancement of the oscillator strength comes from that of the transition moment from the state 0 to b mainly depending on the MO levels k and l , described as

$$(\mathbf{m}_{\text{ob}})_x = \sqrt{2} \left(\sum_r^{\text{allAO}} c_r^k c_r^l \bar{x}_{rr} + 2 \sum_{r,s(r>s)}^{\text{allAO}} c_r^k c_s^l \bar{x}_{rs} \right)$$

in which the average of the nuclear coordinate x with the AOs χ_r and χ_s is denoted by \bar{x}_{rs} . Note that the off-diagonal elements across the polymer part and N3 can appear. Thus the existence of polyene as a kind of catalytic support for N3 is appreciable to enhance the optical absorption. This occurs without disturbance of the whole catalytic cycle as shown in Table 2. Such catalytic support has also been attempted by adding C_3N_4 (carbon nitride) for Ru complex without clarification at molecular level[3]. More detailed will be reported elsewhere.

1. Partly reported by H. Fueno, S. Omae, and K. Tanaka, The 95th CSJ Annual Meeting, 1S4-07, Funabashi, Japan, Mar. 26 (2015).
2. M. K. Nazeeruddin, A. Kay, L. Rodicio, R. Humphry-Baker, E. Müller, P. Liska, N. Vlachopoulos, and M. Grätzel, *J. Am. Chem. Soc.*, **115**, 6382-6390 (1993).
3. R. Kuriki, K. Sekizawa, O. Ishitani, and K. Maeda, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 2406-2409 (2015).

2. 総説

(1) 田中一義

「化学のための数学入門 4 量子力学における常微分方程式」現代化学, No. 4, 68-73 (2022).

(2) 田中一義

「化学のための数学入門 5 量子力学における偏微分方程式①」現代化学, No. 5, 64-68 (2022).

(3) 田中一義

「化学のための数学入門 6 量子力学における偏微分方程式②」現代化学, No. 6, 65-71 (2022).

(4) 田中一義

「化学のための数学入門 7 量子力学における偏微分方程式③」現代化学, No. 7, 63-68 (2022).

(5) 田中一義

「化学のための数学入門 8 実用的な積分①」現代化学, No. 8, 62-67 (2022).

(6) 田中一義

「化学のための数学入門 9 実用的な積分②」現代化学, No. 9, 65-69 (2022).

(7) 田中一義

「化学のための数学入門 10 行列と行列式①」現代化学, No. 10, 63-67 (2022).

(8) 田中一義

「化学のための数学入門 11 行列と行列式②」現代化学, No. 11, 68-73 (2022).

(9) 田中一義

「化学のための数学入門 12 対称性と群論」現代化学, No. 12, 67-73 (2022).

(10) 田中一義

「化学のための数学入門 13 基本的な関数の性質」現代化学, No. 1, 73-78 (2023)

(11) 田中一義

「化学のための数学入門 14 統計と分布」現代化学, No. 2, 66-73 (2023).

(12) 田中一義

「化学のための数学入門 15 次元解析とデータ処理」現代化学, No. 3, 67-71 (2023).

(13) 田中一義

「DeepMind21 が物質科学にもたらす影響」現代化学, No. 6, 53-55 (2022).

(14) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十回 データコレクトの面白さ」化学 77, No. 4, 29 (2022).

(15) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十一回 産高学低？」化学 77, No. 5, 57 (2022).

(16) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十二回 統計学の逆襲 more」化学 77, No. 6, 41 (2022).

(17) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十三回 論文投稿とレジリエンス」化学 77, No. 7, 32 (2022).

(18) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十四回 小学生とヘリウム」化学 77, No. 8, 55 (2022).

(19) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十五回 電子相いろいろ」化学 77, No. 9, 47 (2022).

(20) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十六回 データ改ざん again ?」化学 77, No. 10, 31 (2022).

(21) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十七回 エントロピー番外編」化学 77, No. 11, 23 (2022).

(22) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十八回 調和振動幻想」化学 77, No. 12, 45 (2022).

(23) 田中一義

「化学つれづれ草 第六十九回 鳶が鷹を生むか？」化学 78, No. 1, 59 (2023).

(24) 田中一義

「化学つれづれ草 第七十回 諸葛孔明と天然ガス」化学 78, No. 2, 47 (2023).

(25) 田中一義

「化学つれづれ草 第七十一回 局在性と鏡の国のアリス」化学 78, No. 3, 25 (2023).

3. その他 (アウトリーチ活動)

(1) 読売新聞朝刊 (京都版) 2023/3/4 「福井博士の品 化学遺産に」田中が受けた取材に

基づく。

(2) 化学工業日報 2023/3/15 「日本化学会化学遺産4件認定 福井謙一博士の遺品など」

(3) 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4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）2023/1/30（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

Synthesis of Twisted [N]Cycloparaphenylene by Alkene Insertion

We report here a new synthetic method to prepare Möbius molecules using the characteristic structure of [n]cycloparaphenylenes ([n]CPPs, Figure 1b), which have the shortest sidewall segments of armchair CNTs with in-plane π -orbitals. We envisioned that the insertion of alkene or ortho-phenylene units, which have a normal π -structure, into the paraphenylene units in CPP would yield Möbius molecules if the relaxation from the 90°-twisted conformation was disrotatory (Figure 1b). Here, we report a proof of principle for the synthesis of alkene- and orthophenylene-inserted [6]-, [8]-, and [10]CPPs, which are abbreviated as ene-[n]CPP (**1**) and phe-[n]CPP (**2**), respectively, and studied their structures and physical properties. We also synthesized bis-alkene-inserted [4]-, [6]-, and [8]CPPs, which are abbreviated as (ene)₂-[n]CPP (**3**), to clarify the effect of twisting on the molecular structure and physical properties.

Single-crystal X-ray diffraction analyses reveal that the strips formed by the π -surfaces of **1** and **2** exhibited a Möbius topology in the solid state. While the Möbius topology in the parent **1** and **2** in solution was lost due to the free rotation of the paraphenylene unit even at low temperatures, ene-[6]CPP with eight 1-pyrrolyl groups preserved the Möbius topology even in solution. Despite a twist, **1** has in-plane conjugation and possesses a unique size dependence of the electronic properties: namely, the opposite size dependency of the HOMO–LUMO energy relative to conventional π -conjugated molecules.

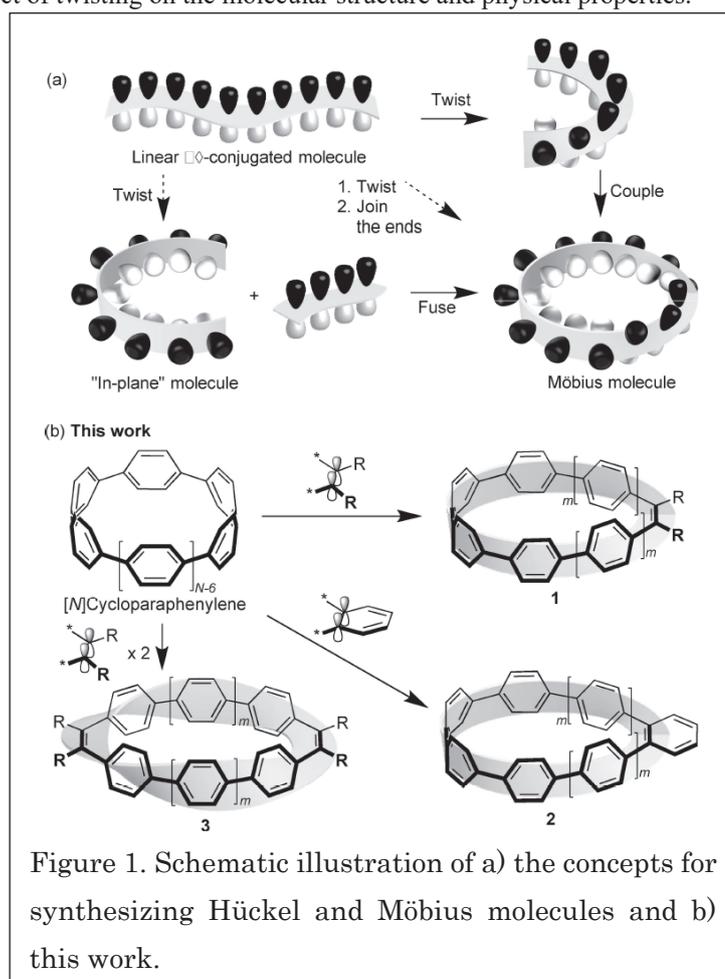


Figure 1. Schematic illustration of a) the concepts for synthesizing Hückel and Möbius molecules and b) this work.

Through-Space Magnetic Interaction of cis-Azobenzene Biradical

It was expected that metal-free LC materials consisting of nitroxide radical moieties can exhibit light-induced reversible switching of the magnetic properties as a new photomagnetic effect. In fact, an LC nitroxide radical compound with the additive of the photo-responsive azobenzene derivative exhibited light-induced reversible switching of the magnetic properties as a new photomagnetic effect. All of these magnetic phenomena are based on intermolecular through-space interactions. The present paper reports of successful photocontrol of intramolecular magnetic interactions through space. Two chiral PROXYL groups bridged with azobenzene show the change of the magnetic properties with the trans -cis photoisomerization of the azobenzene moiety. The isomerization brought the radicals closer together and increased the exchange interactions. The spin state of the cis - isomer was determined from two-dimensional nutation spectra as a mixture of $S = 1/2$ and $S = 1$. This is an example of the optical control of through-space intramolecular magnetic interactions.

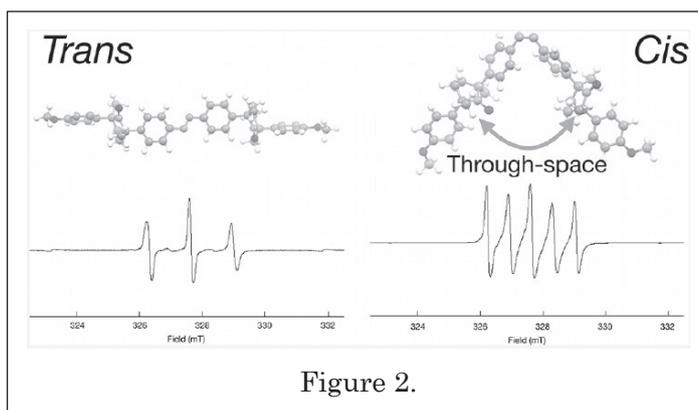


Figure 2.

2. Original papers

- (1) T. Terabayashi, E. Kayahara, Y. Zhang, Y. Mizuhata, N. Tokitoh, T. Nishinaga, T. Kato, and S. Yamago, "Synthesis of Twisted [N]Cycloparaphenylene by Alkene Insertion", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **62**, e202214960 (2023).
- (2) Y. Uchida, K. Hino, T. Kato, and R. Tamura, "Through-Space Magnetic Interaction of cis-Azobenzene Biradical", *Cryst. Growth Des.*, **23**, 1641(2023).

3. Presentation at academic conferences

4. Others

Masaki Sasai

Research Fellow

1. Summary of the research of the year

[1] 3D genome organization and dynamics

Human genome DNA is 2 m long, confined in a cell nucleus of about 10 μm diameter; this ratio of 2 m/10 μm = 2×10^5 is the same as the ratio to fold a 200-km railway on a 1-m office desk. Despite such intense compaction, DNA is transcribed, replicated, and repaired at suitable timing by spending chemical energy not much different from thermal energy. Understanding the 3D genome architecture in cells should be a key to resolving how such highly efficient functions and intense compaction are compatible with each other; hence in the last decade, much effort has been devoted to this problem, leading to innovations in biochemical and microscopy methods. These advances have opened a new perspective, revealing that the mammalian genome is hierarchically and flexibly organized from loops (10s nm), topological domains (100s nm), compartments (μm), and chromosome territories (a few to several μm). To understand the physical principles of these dynamic structures, we need to develop a physical theoretical model of 3D genome organization and dynamics.

We developed a model of the interphase human genome, consisting of about 6 Gb (6 giga base pairs or 6×10^9 nucleotide pairs). The model is based on the theoretical estimation of coarse-grained interactions between 100 kb (10^5 base pairs) chromatin regions. We derived the effective coarse-grained interactions between these chromatin regions using the polymer version of the reference interaction site model (Polymer-RISM, PRISM) and found that the interactions are mildly repulsive between functionally active regions, while they are distinctly repulsive between inactive regions. The difference in these interactions induces different motions of chromatin regions, which leads to the phase separation of chromatin regions into the active compartment (compartment A) and the inactive compartment (compartment B).

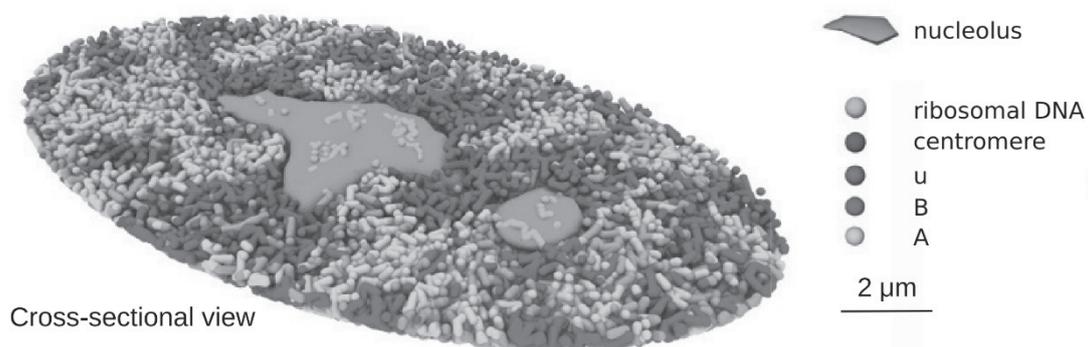


Fig. 1. Cross-section of the simulated genome structure of human fibroblast cell. The genome is phase-separated into the functionally active compartment A (yellow), the inactive compartment B (blue), the intermediate regions u (gray), and the nucleoli (green).

The calculated results showed that compartment B spontaneously forms at the nuclear periphery or around nucleoli through the phase separation mechanism, resolving the mysteries of compartment formation and arrangement in the nucleus. The hitherto developed theoretical models have been knowledge-based, using massive amounts of experimental data as input to constrain the simulated 3D structures. We proposed the first theoretical model, which does not rely on such input data, connecting the molecular functionality in chromatin domains and the mesoscopic structures of compartments and chromosome territories with high precision from the physical principles.

Reference: S. Fujishiro and M. Sasai, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 119, e2109838119 (2022).

[2] Formation dynamics of chromatin domains

Chromatin domains of 100 kb to 1 Mb (10^5 to 10^6 base pairs) are structural and functional units of the mammalian genome; therefore, much attention has been focused on the molecular mechanism of how these domains are formed. The present widespread hypothesis is the “loop-extrusion model,” which explains the domain as a loop of chromatin chain extruded by the action of cohesin; cohesin is a molecular motor that can real the chromatin chain into a loop by consuming ATP. However, the cohesin motion along the chromatin chain should be hindered by many molecular obstacles bound on the chromatin chain, and it is difficult to assume the smooth loop extrusion of 1 Mb size. We developed a model of loop formation by assuming a pair of cohesin molecules work together. The model resolves the difficulties in the loop-extrusion hypothesis and explains the observed biochemical data with high precision. This model simulated the chromatin domain using a combined computation scheme of the active nonequilibrium kinetics of cohesin and the passive thermal Brownian motion of the chain. We showed that the active kinetic of cohesin decisively affects the domain’s physical properties.

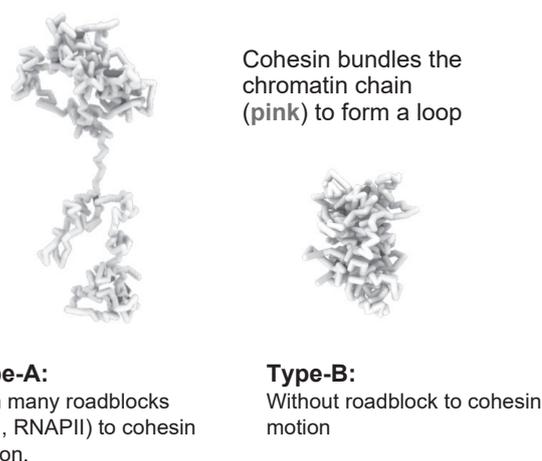


Fig. 2. The simulated chromatin domains. The functionally active type-A domain and the inactive type-B domain. The active cohesin kinetics largely affects the domain properties.

[3] Live-cell chromatin dynamics

Chromatin can be represented as a polymer chain connecting beads of nucleosomes. Therefore, the chromatin chain dynamics can be monitored with live-cell fluorescence microscopy by observing the movement of each individual nucleosome fused with a molecule that can bind a fluorescent dye. We cooperated with the experimental group led by Prof. Maeshima (National Institute of Genetics) and statistically analyzed the observed data using the Bayesian model of the nucleosome movement distribution. We found two distribution components in the single-cell genome-wide data, showing the existence of fast- and slowly-moving nucleosomes in cells. We also analyzed the two-body correlation in the observed nucleosome dynamics.

References: S. S. Ashwin, Kazuhiro Maeshima, and Masaki Sasai, Biophysical Reviews 12, 461–468 (2020).

[4] Circadian oscillations of the KaiABC protein system

When the mixture solution of cyanobacterial proteins, KaiA, KaiB, and KaiC, is incubated with ATP in vitro, the phosphorylation level of KaiC shows stable oscillations with approximately 24 h period. We analyzed these oscillations by developing a theoretical model of KaiC molecular reactions and structures and synchronization of many molecules. The simulated

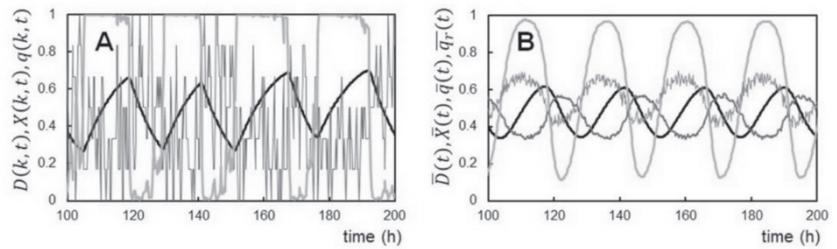


Fig. 3. Example oscillations of the simulated Kai clock. (A) Single-molecule oscillations of KaiC. (B) Ensemble oscillations of 1000 KaiC molecules. Phosphorylation level (black), Structure (orange), the ADP-binding probability, and the ADP-releasing rate (green).

results showed that the reduced structural cooperativity in KaiC should weaken the negative feedback coupling among reactions and structural transitions, which enlarges the oscillation amplitude and period, explaining the observed significant period extension upon single amino-acid residue substitution. We propose that an increase in thermal fluctuations similarly attenuates the reaction-structure feedback, explaining the temperature compensation in the KaiABC clock. The KaiABC clock provides a unique opportunity to analyze how the reaction-structure coupling regulates the system-level synchronized oscillations of molecules.

Reference: Masaki Sasai, PLoS Computational Biology, 18, e1010494 (2022).

[5] Nonequilibrium current and landscape of gene network dynamics

Epigenetic modifications of histones crucially affect eukaryotic gene activity, while the epigenetic histone state is largely determined by the binding of specific factors such as the transcription factors (TFs) to DNA. Here, the way in which the TFs and the histone state are

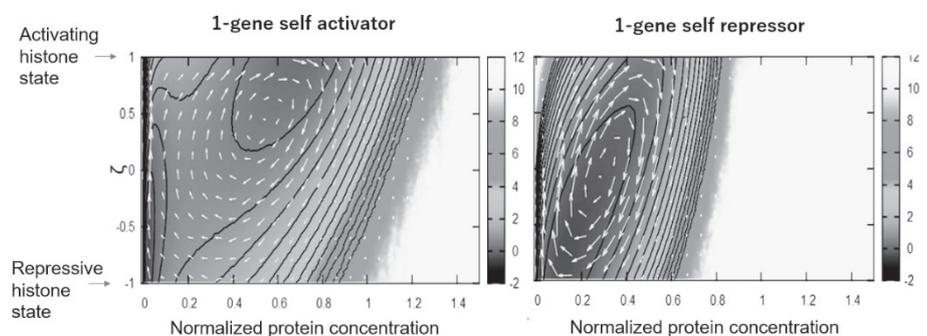


Fig. 4. Landscapes and non-equilibrium probability currents of the self-interacting single-gene circuits.

dynamically correlated is not obvious when the TF synthesis is regulated by the histone state. To gain insights into such dynamical feedback regulations, we theoretically analyzed a model of epigenetic gene switching by extending the Doi-Peliti operator formalism of reaction kinetics to the problem of coupled molecular processes. The slow nonadiabatic histone dynamics give rise to a distinct circular flow of the probability flux around basins in the landscape of the gene state distribution, which leads to hysteresis in gene switching. In contrast to the general belief that the change in the amount of TF precedes the histone state change, flux drives histones to be modified prior to the change in the amount of TF in self-regulating circuits.

Reference: Bhaswati Bhattacharyya, Jin Wang, and Masaki Sasai, Phys. Rev. E, 102, 04240 (2020).

[6] The force-generating mechanism of myosin VI motor

Myosin VI dimer walks toward the minus end of the actin filament with a large and variable step size of 25–36 nm. Two competing models have been put forward to explain this large step size.

The Spudich model assumes that the myosin VI dimer associates at a distal tail near the cargo-binding domain, which makes two full-length single α -helix (SAH) domains serve as long legs.

In contrast, the Houdusse–Sweeney model assumes that the association occurs in the middle (between residues 913 and 940) of the SAH

domain and that the three-helix bundles unfold to ensure the large step size. To compare the two proposed models, we computationally characterized the free energy landscape experienced by the leading head during the stepping movement along the actin filament. Our results showed that the Spudich model is more consistent with the 25–36 nm step size than the Houdusse–Sweeney model. Besides, the stiffness of the SAH domain is a key factor for giving a strong energetic bias toward the long distance of stepping. Free energy analysis of the stepping motion complements the visual inspection of static structures and enables a deeper understanding of the underlying mechanisms of molecular motors.

Reference: Tomoki P. Terada, Qing-Miao Nie, and Masaki Sasai, *J. Phys. Chem. B*, 12, 7262–7270 (2022).

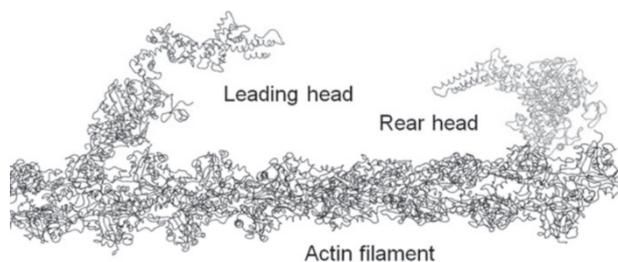


Fig. 5. A snapshot of the simulated myosin VI dimer and actin filament. Two subunits of the myosin dimer, leading head and rear head, are connected by the SAH domain (not drawn in the figure).

[7] The structural rule distinguishing a protein superfold

Superfolds are folds commonly observed among evolutionarily unrelated multiple superfamilies of proteins. We analyzed a typical superfold, the ferredoxin fold, and the fold which reverses the N to C terminus direction from the ferredoxin fold as a case study to find the rule to distinguish superfolds from the other folds. We proposed that minimal structural conflict or minimal frustration among secondary structures is the rule to distinguish a superfold from ordinary folds. The database analyses revealed that the most stringent structural rule in proteins, the right-handedness of the $\beta\alpha\beta$ -unit, is broken in a set of structures to prevent frustration, suggesting the proposed rule of minimum frustration among secondary structural units is comparably strong as the right-handedness rule of the $\beta\alpha\beta$ -unit.

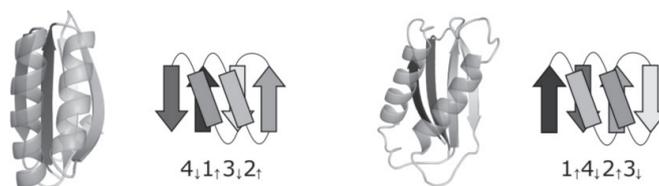


Fig. 6. Topology of the ferredoxin fold and the reverse ferredoxin fold. (Left) An example structure (PDB ID: 4QIV) and the topology $4\downarrow 1\uparrow 3\downarrow 2\uparrow$ of the ferredoxin fold. (Right) An example structure (PDB ID: 1T94) and the topology $1\uparrow 4\downarrow 2\uparrow 3\downarrow$ of the reverse ferredoxin fold.

Reference: Takumi Nishina, Megumi Nakajima, Masaki Sasai, and George Chikenji, *Molecule*, 27, 3547 (2022).

2. Original papers

- (1) Tomoki P. Terada, Qing-Miao Nie, and Masaki Sasai, Landscape-based view on the stepping movement of myosin VI. *J. Phys. Chem. B* 126(38), 7262-7270 (2022).
- (2) Masaki Sasai, Role of the reaction-structure coupling in temperature compensation of the KaiABC circadian rhythm. *PLoS Computational Biology* 18(9), e1010494 (2022).
- (3) Takumi Nishina, Megumi Nakajima, Masaki Sasai, and George Chikenji, The structural rule distinguishing a superfold: A case study of ferredoxin fold and the reverse ferredoxin fold. *Molecules*, the Special Issue *Frontiers in Protein Folding and Related Areas-in Memory of Professor Sir Christopher M. Dobson (1949–2019)* 27(11), 3547 (2022).
- (4) Shin Fujishiro and Masaki Sasai, Generation of dynamic three-dimensional genome structure through phase separation of chromatin. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 119(22), e2109838119 (2022).

3. Presentation at academic conferences

- (1) Shin Fujishiro and Masaki Sasai “Relationships between chromatin functions and the genome organization” American Chemical Society meeting (ACS Spring 2023), Indianapolis, USA, Mar. 26-30, 2023 (Symposium talk)
- (2) Shin Fujishiro and Masaki Sasai “Genome as a functionally designed mesoscopic soft-matter system” Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10), Quy Nhon, Vietnam, Feb. 19-23, 2023 (Keynote)
- (3) Masaki Sasai “From single molecule to cell: Regulations in proteins, genes, and genome” The International Center for Theoretical Sciences Program, Statistical Biological Physics, Bengaluru, India, Oct. 11-13, 2022 (Invited)
Recorded Video of Talk: <https://www.youtube.com/watch?v=ZcMd1WC6jw0>
- (4) Masaki Sasai “Genome: A heterogeneously designed soft-matter system” Biological Physics & Physical Biology Seminar, Online, organized by M. Das, E. Lushi, K. Weirich, J. Xing, A. Prasad, and S. Bahar. Sep. 9, 2022 (Invited)
Recorded Video of Talk: <https://youtu.be/uiIjEyrryDU>

5. 博士研究員等

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

今年度は昨年を引き続き、エネルギー自然軌道と呼ぶ新しい分子軌道表現による化学反応、結合の時間発展の解析について研究した。これまで困難であった、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着手した。

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

昨年度までに、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軌道表現による解釈の、電子相関系一般への拡張が可能である。前年度の共有結合の解析に続き、今年度は水素結合モデル、ジボラン多中心結合モデルなどいくつかの系で ENO の具体的な挙動、特徴を見たのち、強い非断熱系であるホウ素クラスタの研究に着手した。

【方法論】 式(1)のように電子エネルギー E_e (核核反発エネルギーは別に考える) が計算できるとする。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】 ENO 自体の特徴と有用性を考えるために、いくつかのよく知られた系が ENO でどのように記述されるかを調べた。ここでは図 1 に、 $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$ 陽子移動モデル (aug-cc-pVDZ 基底、80 軌道 16 電子 CISD、CSF 数 85501) で計算された ENO の空間分布を示す。計算上、ENO の数は分子軌道数と同じであるが、そのうち有意なポピュレーションを持つ軌道は系により決まり、その系を特徴付ける。この系の電子基底状態では、11 軌道で記述された。移動する陽子の座標を変えた計算の比較により、陽子の移動にともなって、陽子が所属する ENO が変化することが見られた。また、配置換相互作用の効果を表現した ENO の陽子移動への関与が見られた。このような計算により ENO を未知反応の解析に適用する準備が整った。

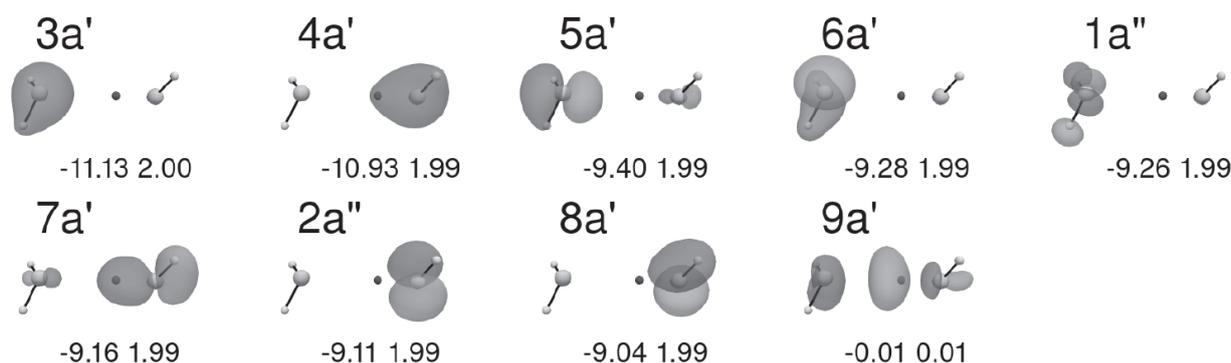


図 1。 $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$ 陽子移動モデルでの ENO 解析。11 の 1 電子軌道に分解される (O の 1s 軌道は省略)。陽子移動が主に移動陽子の所属軌道 $4a' \rightarrow 3a'$ 、 $7a' \rightarrow 5a'$ の変化として描かれ、一部の電子エネルギーは配置間相互作用の効果により $9a'$ 軌道を使って陽子とともに移動する。各図下段の数値は ENO エネルギーとポピュレーション。

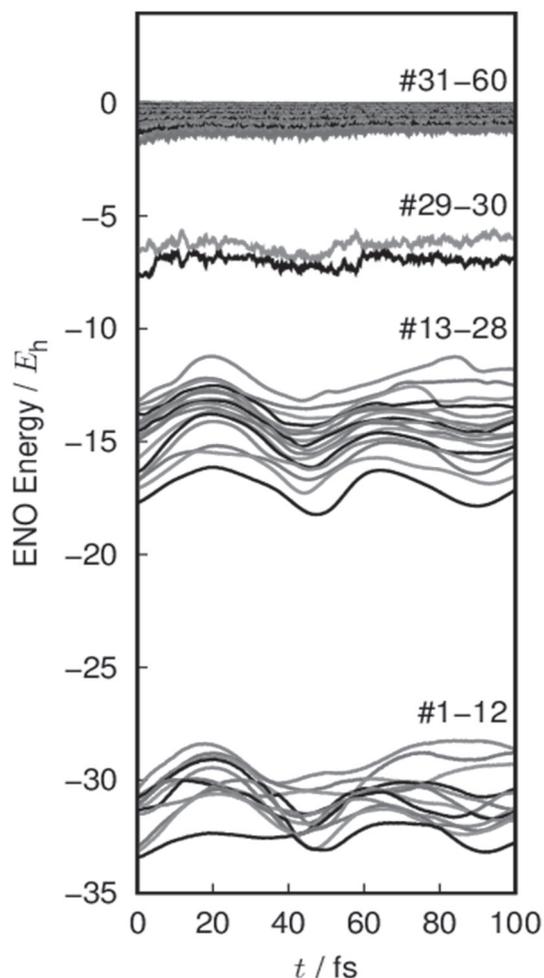


図2. B12 クラスターの時間発展における ENO エネルギーの時間変化。300 番目の高励起断熱状態から開始した電子波束は、強い非断熱相互作用により 10 fs で 100 から 500 番目の断熱状態に広く分岐する。その間 60 ある ENO はエネルギーの違う 4 つの層を成す。

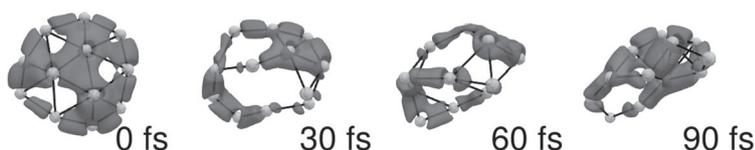


図3. B12 クラスター ENO #13-28 層の電子エネルギー空間分布の時間発展。結合部分のエネルギーを担う。

以前より取り組んでいるホウ素クラスターの超高励起動力学[2]に ENO 解析を適用した。ホウ素は空位の p 軌道を多く持つため、そのクラスターでは低位に密集した励起状態を持つ。ここでは B12 について、STO-3G 基底(60 軌道)、(HOMO,HOMO-1)からの CISD (CSF 数 1891)による電子状態計算を組み込んだ半古典 Ehrenfest (SET)動力学を計算した。

図2に、300 番目の断熱状態から SET 時間発展させて得たトラジェクトリーについて、ENO エネルギーの時間発展を示す[3]。ENO 28 以下のポピュレーションはそれぞれおよそ 2、(HOMO,HOMO-1)に相当する 29、30 のポピュレーションはそれぞれおよそ 1、残り 2 電子が 31 以上に分布する。連続的に起き続ける強い非断熱相互作用によって、10 fs 以内に 100-500 番目の断熱状態に広がった電子波束が形成されるが、ENO のエネルギー構造は時間がたっても 4 層を保ったままである。原子の 1s 軌道由来の#1-12、価電子の分布する#13-28、配置換相互作用により形成される#29-30、#31-60 に分かれる。29 番目以上の 2 層は、電子相関の効果による速い時間変化を示し、電子状態の非断熱な時間発展を担う。

一方、13 から 28 番の ENO の層はクラスターの結合の安定に寄与する。図3には 13-28 層の電子エネルギー空間分布を示す。この層の電子エネルギーが結合と解釈される空間に分布することが示された。

【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。従来、解釈が難しかった、個々の断熱状態が意味をなさないほど非断熱相互作用が強い高励起状態の動力学の解明が期待でき、その方向で研究を進めている。

【文献】

- [1] K. Takatsuka and Y. Arasaki, *J. Chem. Phys.* **154**, 094103 (2021).
- [2] Y. Arasaki and K. Takatsuka, *J. Chem. Phys.* **150**, 114101 (2019).
- [3] Y. Arasaki and K. Takatsuka, *J. Chem. Phys.* **158**, 114102 (2023).

2. 論文

- (1) 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).
- (2) Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki,
“Real-time electronic energy current and quantum energy flux in molecules,”
J. Chem. Phys. 157, 244108 (2022, 11 pages).
- (3) Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka,
“Energy natural orbital characterization of nonadiabatic electron wavepackets in the densely quasi-degenerate electronic state manifold,”
J. Chem. Phys. 158, 114102 (2023, 21 pages).

3. 学会発表

- (1) ○高塚和夫、新崎康樹
“不変一電子描像による化学結合論”
第 24 回理論化学討論会 金沢 2022/5/18 2L01

Kota Hanasaki

Research Fellow

1. Summary of the research of the year

Spin flux in nonadiabatic electron dynamics: mechanism and its role in chemical reactions

The Frontier orbital theory^[1], and the double perturbation theory^[2] have made remarkable contributions to the progress of the chemical reaction theory by clarifying the chemical reactivity and intermolecular interactions in an intuitively clear manner using real-space perturbation theories in the molecular orbital (MO) representation. Modern studies of chemical reactions, on the other hand, are heavily based on the concept of the adiabatic potential energy surfaces (PESs), which are defined in the nuclear coordinate space. Dynamical simulations on high-quality PESs often lead to accurate quantitative prediction of reactions. However, recent progress in experimental techniques realized control of electron dynamics and led to the development of the concept of ‘charge-directed reactivity’^{[3][4]}, which works in reactions including localized/dynamical electronic states^{[3][4][5]}. Such reactions clearly go beyond the traditional concept of static PESs and the revival of the real-space picture of chemical reactions is awaited. Empowered by real-time simulation techniques of electrons, which were absent in the '50s and '60s, we are working on a modern reformulation of chemical reaction theories based on the time-dependent Schrödinger equation of electron dynamics.

1. Electron flux and nonadiabaticity

The flux is one of the most fundamental quantities in quantum-mechanical dynamics, which is closely related to the time derivative of the corresponding density through the flux conservation law. Assuming that the time-dependent state of an electronic system $|\Psi(t)\rangle$ is expanded in a set of real-valued many-electron basis functions $\{|\Phi_I\rangle\}$ such as the configuration state functions (CSFs), the flux expectation value becomes,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_{I,J} \frac{\hbar}{2m_e} \text{Im}(C_I^*(t)C_J(t)) \langle \Phi_I | \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{r}) - (\nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})) \hat{\psi}(\mathbf{r}) | \Phi_J \rangle \quad (1)$$

from which we find that there must be a finite imaginary part or non-trivial complex phase in the expansion coefficients. In particular, the flux expectation value vanishes in the adiabatic approximation.

In Ref. [6] we proved that *the divergence of the flux obtained from the first-order nonadiabatic perturbation expansion equals the time derivative of the adiabatic density*. This fact shows the fundamental role of nonadiabaticity in the reproduction of electronic dynamics. At the same time, it also shows the validity of the flux analysis in the nonadiabatic simulations in the mixed quantum-classical (mQC) approximation. We, therefore, further extended our research on the electronic flux through mQC nonadiabatic simulations.

2. Properties of spin flux

Our paper published in April 2022 [7] was based on the results of calculations we performed in 2020 at the Fukui Institute. Following the analysis of the physical properties of the electronic fluxes in Ref. [6], we analyzed the results from a chemical viewpoint focusing on the behaviors of the spin flux that accompanies

the rearrangement of Heitler-London's spin-singlet structures in the chemical bonds. Below we show the summary of the paper [7].

We model the reactant of a radical substitution reaction, such as $\text{H} \cdot + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{H} \cdot$, for example, by a simplified three-electron model. Below the orbitals a and b represent the bonding and antibonding orbitals of the molecule, respectively, whereas the orbital u represents the radical orbital and \mathcal{C} represents the collection of all other if any, doubly occupied orbitals. Orbital symbols with and without overlines represent spin-orbital with down and up spin projections, respectively. The initially dominant configuration of the system can be represented by $|\Xi_0\rangle \equiv |a\bar{a}u\mathcal{C}\rangle$ and the nonadiabatic interaction introduces excited states. We here consider two types of excited configurations: a *local singlet* excitation, $|\Xi_{S1}\rangle \equiv \left| \sqrt{1/2} (a\bar{b} + b\bar{a}) u \mathcal{C} \right\rangle$, which arises from a spin-symmetric excitation of the molecule, and a *local triplet* excitation, $|\Xi_{T1}\rangle \equiv \left| \left(\sqrt{1/6} (a\bar{b} - b\bar{a}) u - \sqrt{2/3} ab\bar{u} \right) \mathcal{C} \right\rangle$, which appears as a spin-antisymmetric excitation in the molecule. Here the *local* spin multiplet refers to the spin structure in a specific spatial region of the interest that is independent of the total spin of the system (here in our 3-electron model, $S = 1/2$). Initially dominant $|\Xi_0\rangle$ has a local singlet $a\bar{a}$ around the covalent bond in the molecule. The system's time-dependent wavefunction $\Psi(t)$ becomes, by the superposition of these excited states, $|\Psi(t)\rangle = |\Xi_0\rangle C_0(t) + |\Xi_{S1}\rangle C_{S1}(t) + |\Xi_{T1}\rangle C_{T1}(t)$, where $C_I(t)$ represents the coefficient of the configuration $|\Xi_I\rangle$. Assuming dominance of $C_0(t)$, we can evaluate the expectation value of the generalized flux operator $\hat{\mathbf{j}}^\eta(\mathbf{r})$, which includes the charge and flux operator^{[6][7]}, as

$$\langle \Psi(t) | \hat{\mathbf{j}}^\eta(\mathbf{r}) | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} C_0^* C_{S1} \left(\mathbf{j}_{a\bar{b}}^\eta(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_{ab}^\eta(\mathbf{r}) \right) + \frac{1}{\sqrt{6}} C_0^* C_{T1} \left(\mathbf{j}_{a\bar{b}}^\eta(\mathbf{r}) - \mathbf{j}_{ab}^\eta(\mathbf{r}) \right) + \text{c.c.} \quad (2)$$

and we find that a finite charge flux ($\eta = c$) arises from the local singlet excitation whereas a finite spin flux ($\eta = s$) arises from the local triplet excitation. We emphasize the fact that a superposition of configurations with distinct local spin structures is a major cause of the spin flux. We can thus expect that the spin flux reflects the dynamical rearrangement of the local spin structure (such as the local singlet that forms a covalent bond) along the chemical reaction.

To validate our observation, we performed nonadiabatic simulations in the mQC approximation using the Semiclassical Ehrenfest Theory (SET) [8] to reproduce the spin fluxes in a radical substitution reaction $\text{H} \cdot + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{H} \cdot$. Figure 1 shows the spin and charge fluxes we obtained in the simulation of the radical substitution reaction in the collinear geometry. We find that in the early stage of the dynamics (Fig. 1 (a.1)), prior to the occurrence of the charge flux, the spin flux occurs around the existing bond and induces spin polarization that weakens the existing covalent bond.

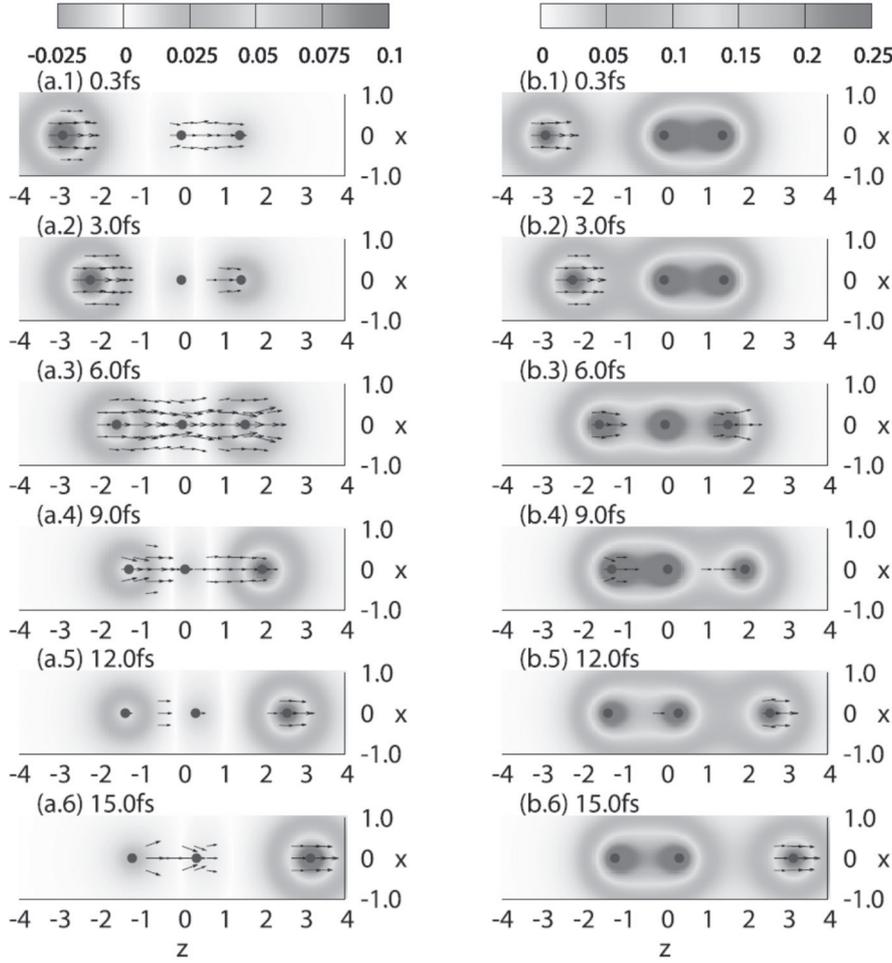


Fig. 1 Snapshots of the spin and charge fluxes in the radical substitution reaction $\text{H}\cdot + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}\cdot$ (collinear configuration)^[7]. Panels (a.1) -(a.6) show the spin density and flux, whereas panels (b.1) -(b.6) show the charge density and flux. Color maps show the density whereas arrows show the strength of the flux (Ref. [7]).

3. The driving mechanism of electronic fluxes

The three-electron model in the previous section shows that a superposition of configurations with distinct local structures is a microscopic origin of the spin flux, whereas it lacks the discussion about how such a superposition occurs in chemical reactions, i.e., the driving mechanism of the spin flux is missing. When I was rehired by the Fukui Institute in September 2022, we resumed our research with resolving this issue through a perturbation analysis.

We first assume that the electronic system, whose Hamiltonian $H^{el}(\mathbf{R}_t)$ is a function of the time-dependent nuclear coordinate \mathbf{R}_t , is in the ground state Φ_0 at the corresponding Hamiltonian at $t = 0$; $H^{el}(\mathbf{R}_{t=0}) \equiv H_0$. Expanding the wavefunctions with the adiabatic states at $t = 0$, $\{|\Phi_I\rangle\}$, the excited state amplitudes at a later time are driven by the perturbation $V_t \equiv H^{el}(\mathbf{R}_t) - H^{el}(\mathbf{R}_{t=0})$ as

$$a_I^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V_{I0}(t') e^{i\omega_{I0}t'} = \frac{1}{i\hbar} \left[V_{I0}(t') \frac{e^{i\omega_{I0}t'}}{i\omega_{I0}} \right]_0^t - \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \dot{V}_{I0}(t') \frac{e^{i\omega_{I0}t'}}{i\omega_{I0}} \approx \frac{V_{I0}(t)}{E_{0I}} e^{i\omega_{I0}t} - i\hbar \frac{\dot{V}_{I0}}{E_{0I}^2} (e^{i\omega_{I0}t} - 1) \quad (3)$$

where ω_{IJ} represents E_{IJ}/\hbar and in the last side, we approximated \dot{V}_t as time-independent in order to simplify the integration. We then obtain a first-order perturbation expression of the fluxes,

$$\mathbf{j}^{\eta(1)}(\mathbf{r}, t) = -\hbar \sum_I \frac{\langle \Phi_I | \hat{V} | \Phi_0 \rangle}{E_{0I}^2} \langle \Phi_0 | 2i\hat{\mathbf{j}}^\eta(\mathbf{r}) | \Phi_I \rangle (1 - \cos \omega_{0I}t) \approx -\hbar \sum_I \frac{\langle \Phi_I | \hat{V} | \Phi_0 \rangle}{E_{0I}^2} \langle \Phi_0 | 2i\hat{\mathbf{j}}^\eta(\mathbf{r}) | \Phi_I \rangle \quad (4)$$

where $\mathbf{j}^\eta(\mathbf{r})$ represents generalized flux including charge and spin fluxes (see Refs. [6] or [7] for the most generalized definition), and in the last side of Eq. (4), we dropped the oscillating cosine term since it merely

represents the transient oscillation arising from the approximation on the onset of the perturbation \dot{V} . Equation (4) suggests that the driving perturbation of the flux is $\hat{V} = \dot{\mathbf{R}}_t \cdot \nabla_N \hat{H}^{el}(\mathbf{R}) = \dot{\mathbf{R}}_t \cdot \nabla_N \hat{U}(\mathbf{R})$, with ∇_N being nuclear coordinate gradient and \hat{U} being the electron-nucleus interaction operator, which is a one-electron operator. The time derivative \dot{V} appears in the expression (4) since it is the dynamical part of the perturbation which was, by an application of the partial integration in Eq. (3), separated from its static counterpart (the static part, on the other hand, reflects the time evolution of the adiabatic ground state).

We also note the fact that the formula of the nonadiabatic coupling $\mathbf{X}_{IJ} \equiv \langle \Phi_I | \nabla_N | \Phi_J \rangle$ in the adiabatic representation, $\mathbf{X}_{IJ} = \langle \Phi_I | \nabla_N H^{el}(\mathbf{R}) | \Phi_J \rangle / E_{IJ}$, shows that the expression (4) at $t = 0$ is equivalent to the result of the nonadiabatic perturbation theory of fluxes we developed in Ref. [6], in which we proved that the divergence of the flux obtained by the first order perturbation equals the time derivative of the adiabatic density. As a consequence, we can be sure that Eq. (4) is sufficient for a qualitative analysis of the fluxes around $t = 0$ in near-adiabatic reactions.

4. Mechanism of the spin flux and its behavior

In order for the last side of Eq. (4) to take a finite value, there must be an excited state $|\Phi_I\rangle$ such that there are finite transition momenta of the operators \hat{V} and $\mathbf{j}^s(\mathbf{r})$ [9]. In the case of spin flux ($\eta = s$), however, the requirement is not automatically fulfilled because of the distinct spin symmetry of these one-electron operators; \hat{V} is symmetric, whereas $\mathbf{j}^s(\mathbf{r})$ is antisymmetric with respect to the spin projection. We here follow Murrell [2] and expand the system's wavefunction with the orbitals of separated reactant molecules. For simplicity of the discussion, we work on the radical substitution of the hydrogen molecule. Below, a and b represent the bonding and antibonding orbitals of the hydrogen molecule, whereas u represents the radical orbital. In this section, unlike in Sec. 2, there are finite overlaps between u and a , and between u and b . The ground state of the system is denoted by Φ_G (energy E_G) whereas an excited state which arises from local triplet excitation of Φ_G is denoted by Φ_X (energy E_X). The spin flux arising from these states is evaluated, in the lowest order of intermolecular interaction,

$$\mathbf{j}^s(\mathbf{r}, t) \approx -\hbar \left(\langle \Phi_X | \dot{V} | \Phi_G \rangle / E_{GX}^2 \right) \langle \Phi_G | 2i\mathbf{j}^s(\mathbf{r}) | \Phi_X \rangle \quad (5a)$$

$$\langle \Phi_X | \hat{V} | \Phi_G \rangle \approx (3\dot{V}_{ua}S_{ub} + 3\dot{V}_{bu}S_{ua}) / \sqrt{6} + \mathcal{O}(S^2) \quad (5b)$$

$$\langle \Phi_G | 2i\mathbf{j}^s(\mathbf{r}) | \Phi_X \rangle \approx (\varphi_b(\mathbf{r})\nabla\varphi_a(\mathbf{r}) - \varphi_a(\mathbf{r})\nabla\varphi_b(\mathbf{r})) / \sqrt{6} \quad (5c)$$

Denoting two hydrogen atoms in the molecule by X and Y, and its 1s atomic orbitals by x and y , bonding and antibonding orbitals a and b are rewritten as $a = (x + y) / \sqrt{2(1 + S_{xy})}$ and $b = (x - y) / \sqrt{2(1 - S_{xy})}$, Eqs. (5b) and (5c) are rewritten as

$$\langle \Phi_X | \dot{V} | \Phi_G \rangle \approx \sqrt{3/2} (\dot{V}_{ux}S_{ux} - \dot{V}_{uy}S_{uy}) / (1 - S_{xy}^2) + \mathcal{O}(S^2) \quad (5d)$$

$$\langle \Phi_G | 2i\mathbf{j}^s(\mathbf{r}) | \Phi_X \rangle \approx (\varphi_x(\mathbf{r})\nabla\varphi_y(\mathbf{r}) - \varphi_y(\mathbf{r})\nabla\varphi_x(\mathbf{r})) / \sqrt{6} (1 - S_{xy}^2) \quad (5e)$$

We now assume that the atom X is closer to the approaching radical. Taking account of the fact that \dot{V}_{ux} is negative in the early stage of the dynamics when the orbital overlap and the strength of the attractive nuclear potential are increasing, we can expect that the right-hand side of Eq. (5d) takes a negative value. Substitution of Eqs. (5d) and (5e) into Eq. (5a) then results in a spin flux flowing from atom X to Y (see Ref. [9] for the details of this discussion). The speculation here is validated by the numerical results shown in Ref. [7], which show, both in the collinear and non-collinear geometry, the spin flux in the initial few femtoseconds flows

along the covalent bond in the direction away from the radical. The results also confirm the reaction mechanism proposed by Nagase *et al.* in Ref. [10] from a dynamical viewpoint.

5. Spin flux arising from the triplet oxygen molecule

Another project we started working on in September 2022 is an extension of the spin flux analyses in Ref. [7] to radical reactions containing spin-triplet molecules. We worked on the radical reaction $\text{CH}_3 \cdot + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 \cdot$ through *ab initio* nonadiabatic dynamics simulations using SET and theoretical analyses^[9]. Here we set the initial configuration to be the ground state of the reactant system with total spin $S = 1/2$, corresponding to the reaction of the triplet O_2 and $\text{CH}_3 \cdot$ in the electronic ground state. In Fig. 2, we show the snapshots of the spin density and spin flux in this reaction^[9]. We find that the strong spin polarization at the beginning of the reaction (Fig. 2 (a)) is flattened by the spin flux flowing from O_2 to $\text{CH}_3 \cdot$, contributing to the bond formation at a later time.

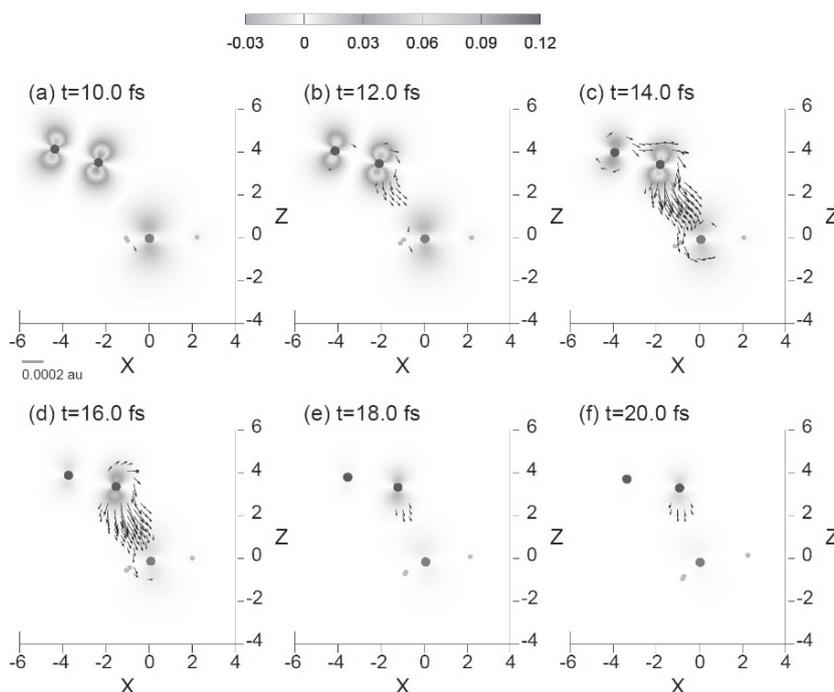


Fig. 2 Snapshots of the spin flux in the reaction

$\text{CH}_3 \cdot + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 \cdot$ ^[9] (O_2 starts from the triplet ground state). The color map shows the spin density whereas arrows show the spin flux. The mapping between the arrow length and the flux intensity is shown at the left bottom of panel (a) (Ref. [9]).

The cause of spin flux in this reaction is again a superposition of electronic configurations with distinct local spin structures. Here, the dominant configuration at the beginning of the reaction is, $|\Xi_{T1}\rangle \equiv \left| \left((\pi_1\bar{\pi}_2 + \bar{\pi}_1\pi_2) p_z - 2\pi_1\pi_2\bar{p}_z \right) \mathcal{C} / \sqrt{6} \right\rangle$ where π_1 and π_2 represent two π^* orbitals in O_2 , p_z represents the radical orbital in $\text{CH}_3 \cdot$ and \mathcal{C} represents all other doubly occupied orbitals forming a closed shell. The relevant excited configuration in this reaction was found to be 'charge-transferred' (CT) configurations including $|\Xi_{CT1}\rangle \equiv |\pi_1\bar{\pi}_1\pi_2\mathcal{C}\rangle$. The CT configuration Ξ_{CT1} clearly has a local singlet structure and therefore there is a finite transition moment of $\hat{j}^s(\mathbf{r})$ between Ξ_{T1} and Ξ_{CT1} , and there also is a finite transition moment of \hat{V} since Ξ_{CT1} is a single electron excitation ($p_z \rightarrow \pi_1$) of Ξ_{T1} ;

$$\langle \Xi_{T1} | 2i\hat{j}^s(\mathbf{r}) | \Xi_{CT1} \rangle = - (\varphi_{p_z}(\mathbf{r}) \nabla \varphi_{\pi_1}(\mathbf{r}) - \varphi_{\pi_1}(\mathbf{r}) \nabla \varphi_{p_z}(\mathbf{r})) / 2\sqrt{6} \quad (6a)$$

$$\langle \Xi_{CT1} | \hat{V} | \Xi_{T1} \rangle = \sqrt{3/2} \dot{V}_{\pi_1 p_z} \quad (6b)$$

Substitution of these matrix elements into Eq. (4) results in a spin flux arising from orbital pair π_1 and p_z . By fixing phases of MOs such that both p_z and π_1 take positive values in the intermolecular region of our

interest, we can expect that the matrix element $\hat{V}_{\pi_1 p_z}$ takes a negative value in the early stage of the reaction, whereas we also see that Eq. (6a) represents the spin flux flowing from π_1 to p_z . Substitution of these matrix elements into Eq. (4), we can predict the spin flux flows from O_2 to $CH_3 \cdot$, consistent with the numerical results shown in Fig. 2.

6. Summary

We studied the electronic fluxes in chemical reactions aiming at contributing to a possible formulation of the real-space time-dependent theory of chemical reactions. Following the basic theory of fluxes and nonadiabaticity in 2021[6], this year, we worked on the spin flux that was found to be arising from the rearrangement of the local spin structures associated with chemical bonds. In Ref. [7] we showed the essential cause of the spin flux and demonstrated, through *ab initio* nonadiabatic simulations, spin flux triggering the substitution reaction $H \cdot + H_2 \rightarrow H_2 + H \cdot$.

In the project starting from September 2022, we worked on identifying the driving mechanism of the spin flux and derived a simple perturbation expression Eq. (4), which indicates the driving perturbation of fluxes as the time-derivative of the electron-nucleus interaction, \hat{V} . Equation (4) also shows a requirement for the occurrence of the spin flux; there must be finite transition momenta of both operators \hat{V} and $\hat{j}^S(\mathbf{r})$ [9]. We then applied the perturbative expression to the reaction $H \cdot + H_2 \rightarrow H_2 + H \cdot$ in Ref. [7] and to the reaction $CH_3 \cdot + O_2 \rightarrow CH_3O_2 \cdot$, which we newly started nonadiabatic dynamics calculations [9]. The perturbation theory was found consistent with the numerical results in the early stage of the reactions.

References

- [1] K. Fukui, T. Yonezawa, and H. Shingu, "A molecular orbital theory of reactivity in aromatic hydrocarbons", *J. Chem. Phys.* **20**, 722 (1952).
- [2] J. N. Murrell, M. Randic, and D. R. Williams, "The theory of intermolecular forces in the region of small orbital overlap", *Proc. Roy. Soc. A* **284**, 566, (1965).
- [3] R. Weinkauff, P. Schanen, D. Yang, S. Soukara and E. W. Schlag, "Elementary Processes in Peptides: Electron Mobility and Dissociation in Peptide Cations in the Gas Phase", *J. Phys. Chem.* **99**, 11255 (1995).
- [4] F. Remacle, R. D. Levine and M. A. Ratner, "Charge directed reactivity: A simple electronic model, exhibiting site selectivity, for the dissociation of ions", *Chem. Phys. Lett.* **285**, 25 (1998).
- [5] I. Znakovskaya, P. von den Hoff, G. Marcus, S. Zherebtsov, B. Bergues, X. Gu, Y. Deng, M. J. J. Vrakking, R. Kienberger, F. Krausz, R. de Vivie-Riedle and M. F. Kling, "Subcycle Controlled Charge-Directed Reactivity with Few-Cycle Midinfrared Pulses", *Phys. Rev. Lett.* **108**, 063002 (2012).
- [6] K. Hanasaki and K. Takatsuka, "On the molecular electronic flux: Role of nonadiabaticity and violation of conservation", *J. Chem. Phys.* **154**, 164112 (2021).
- [7] K. Hanasaki and K. Takatsuka, "Spin current in chemical reactions", *Chem. Phys. Lett.* **793**, 139462 (2022).
- [8] M. Amano and K. Takatsuka, "Quantum fluctuation of electronic wave-packet dynamics coupled with

classical nuclear motions", J. Chem. Phys. **122**, 084113 (2005).

[9] K. Hanasaki and K. Takatsuka, *to be published*.

[10] S. Nagase, K. Takatsuka, T. Fueno, "*Localized molecular orbital studies of chemical reactions. Deformation, rearrangement, and spin polarization of bonds involved in radical reactions*", J. Am. Chem. Soc. **98**, 3838–3844 (1976).

2. Original papers

- (1) K. Hanasaki and K. Takatsuka, "*Spin current in chemical reactions*", Chem. Phys. Lett. **793**, 139462 (2022).

3. Presentations at academic conferences

- (1) K. Hanasaki and K. Takatsuka,
"Electronic flux and nonadiabaticity"
The 16th annual meeting of Japan society for molecular science, Yokohama, 2022/9/19 1E03

藤城 新

特定研究員

1. 今年度の研究の要約

テーマ: ヒト間期染色体ダイナミクスと機能のマルチスケールモデリングによる理解

細胞の機能は、主にその細胞内での遺伝子発現パターンによって決まる。遺伝子は物質としてはゲノム DNA の一部であり、その発現はゲノム DNA 上のほかの制御領域に結合した転写因子と呼ばれる分子によって制御される。これら DNA と転写因子等によって構成される、非常にヘテロで長大な複合体が染色体である。染色体は、その三次元構造とダイナミクスによって、各細胞で遺伝子発現の制御という情報処理を行い、複雑な多細胞生物というシステムを成立させている。

染色体は静的な三次元構造を持たず、非常に揺らぎの大きい系である。しかし、近年の実験技術の進歩により、染色体が遺伝子の制御状態に対応した動的な構造秩序を持つことが分かってきた。^(文献1) たとえば、コンパートメント、コンタクトドメイン、ループなどが挙げられる。染色体がなぜ大きな揺らぎのもとで秩序を保ち、それがどう遺伝子発現の制御と関連しているのか、現在積極的に議論されている。

【ゲノムスケールの間期細胞核モデリング】

コンパートメントは染色体上でコンタクトのパターンが似た領域の集まりで、実験に基づき染色体全体を 2 クラス (A/B) へ分類するのが標準的である。^(文献2) A/B コンパートメントが同領域における遺伝子の発現制御状態と非常に明確に対応することから、活性化された遺伝子の存在する染色体領域 (A コンパートメント) と抑制された遺伝子の存在する染色体領域 (B コンパートメント) は空間的に分離するのだと解釈されている。しかし、その分離が具体的にどのように起こるのかは明らかにされていない。

単純なモデルとして、染色体は A/B セグメントからなるコポリマーであり、AA 間または BB 間に引力相互作用が存在するため、A 相と B 相へ相分離するというものが存在する。しかし、このような引力モデルでは、同種のセグメント同士が激しく凝集し、実験結果と比較して相分離が過剰に起こるという問題がある。

我々は、引力モデルの問題について考察する過程で、斥力相互作用しか持たないコポリマー系でマイルドな相分離が起こることを発見した。遺伝子の活性化状態に対応したループ構造を仮定し、1kb の解像度で染色体ポリマーモデルのシミュレーションから PRISM 方程式により実効相互作用ポテンシャルを算出すると、AA 間・BB 間の相互作用は斥力であることがわかった。そして、100kb の解像度でヒトの全染色体の斥力コポリマーとしての粗視化シミュレーションを行うと、実験の A/B

コンパートメントを非常によく再現できた。さらに、10Mb の解像度まで粗視化したモデルを用いて、細胞間期の染色体には細胞分裂時の染色体構造（初期状態）の記憶が残っており、平衡から遠いことが重要であることも示した。（論文1）

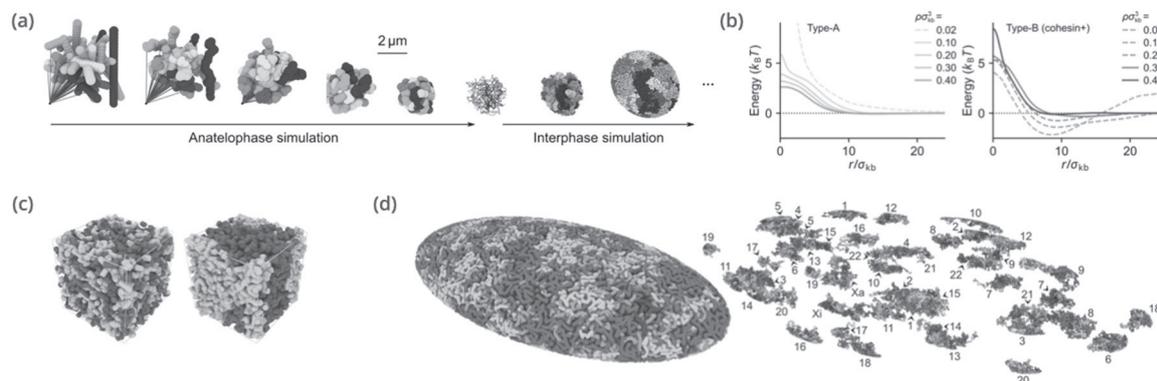


Figure 1 ゲノムスケール染色体モデリング。論文1より引用。(a) 10Mb/100kb スケールのシミュレーション。(b) 1kb スケールのシミュレーションと PRISM 計算で得られたセグメント間実効相互作用。(c) 斥力による相分離現象。左は初期状態、右は相分離後。(d) 斥力モデルによるヒト全ゲノム染色体シミュレーションのスナップショット。

このように、染色体の相分離が実効斥力に駆動されるマイルドなもので、さらに細胞周期中に平衡まで至らないことが、実際の細胞における染色体の A/B コンパートメント形成の物理的描像であると我々は考えている。

【斥力相分離を説明する平均場理論】

引力相互作用を持つセグメント同士が集まる相分離は、古典的な Flory-Huggins (FH) 理論で説明される。しかし、我々の染色体モデルシミュレーションでは、引力相互作用が存在しないにも関わらず相分離が起こった。また興味深いことに、シミュレーションにおいて相分離が起こるのは高密度の場合に限られていた。こうした性質は FH 理論では説明できず、新しい理論の展開が期待できる。

我々は、粒子が周辺粒子によって一時的に閉じ込められる効果（ケージング）に注目し、乱雑な粒子分布をケージング平均場とみなす理論と、その平均場における 1 粒子分配関数を計算する手法を考案した。この理論のもと、混合自由エネルギーは並進エントロピー、相互作用エネルギー、振動エントロピーの 3 つの成分の寄与に分けられる。そして、染色体モデルにおける斥力相分離は振動エントロピー成分によって駆動されることが分かった。

この理論において、振動エントロピーはポリマーセグメントの重なりやすさ（混ざりやすさ）にしたがって増加する。染色体においては、遺伝子が活性化された領域が互いに混ざりやすいポリマーポロジータを持つために、相分離が駆動されるのだと解釈できる。

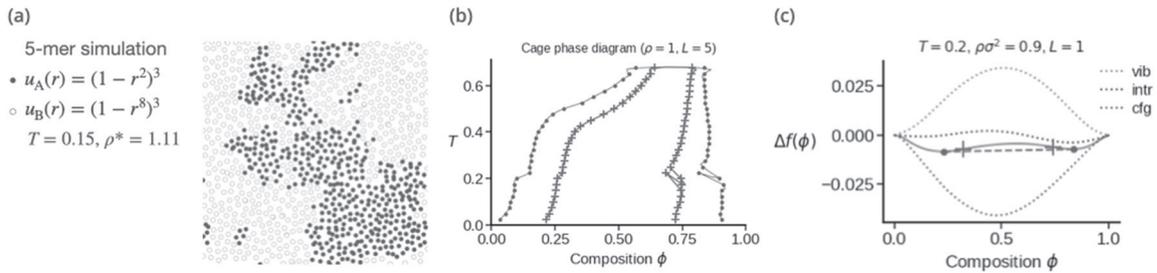


Figure 2 斥力相分離。(a) 異なる斥力ポテンシャルをもつオリゴマー混合系が、低温高密度において示す相分離。(b) ケージング平均場の理論から計算された相図。赤線はスピノーダル線、青線はバイノーダル線である。(c) ケージング平均場の理論から計算された混合自由エネルギー。破線vibは振動エントロピー成分、破線intrは相互作用エネルギー成分、破線cfgは並進エントロピー成分、黒線は総和である。振動エントロピーの大きな上凸性により、混合状態 $\phi=0.5$ が自由エネルギー的に不安定になる（よって相分離する）。

【ドメインスケールの染色体モデリング】

1kbの解像度のモデルでは、A/Bコンパートメントを特徴付ける要素としてコヒーシンのによるループ形成を考慮に入れた。コヒーシンは染色体に結合する蛋白質複合体であり、最近の研究によりコヒーシンは染色体上を動き回りながらループを形成することが示唆されている。^(文献3)我々は現在、コヒーシンのによる染色体のポリマーポロジの動的変化と相分離の関係について研究を進めている。

染色体上には遺伝子発現の制御に関与する転写因子が多数結合している。染色体上をスライド運動するコヒーシンが転写因子を越えられないと考えると、転写因子の結合パターンがループ形成のパターンを規定することになる。この仮定のもとでシミュレーションを行うと、転写因子の多いAコンパートメントでは小さく独立したループが連鎖し、Bコンパートメントでは大きなループが交差して絡み合った塊を作る。こうして出来るローカルな染色体トポロジーの違いがエントロピー差を生み、染色体のA/Bコンパートメントへの相分離を駆動するという理論を構築している。

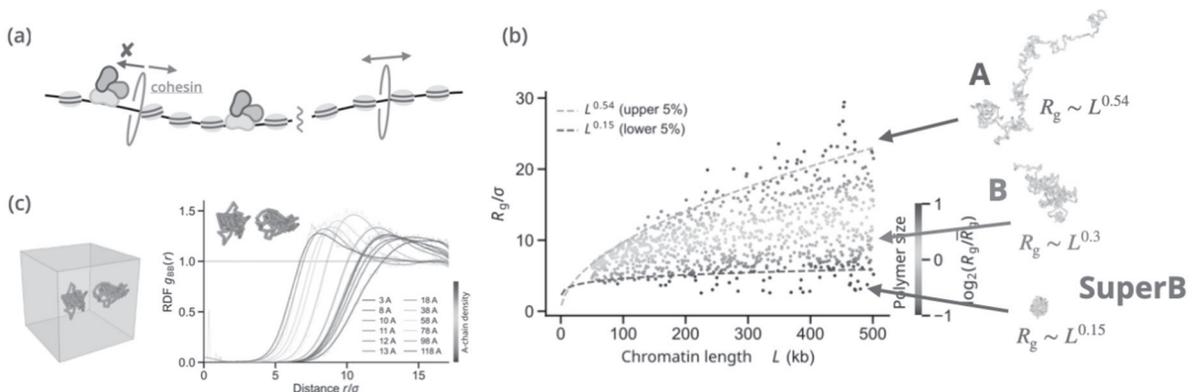


Figure 3 コヒーシンのによるループ形成と染色体構造。(a) 転写因子によるコヒーシン運動の制限モデル。(b) 転写因子密度やコヒーシン量等のランダムスイープで生成された1000パターンの染色体のポリマースケリング。(c) A型ポリマー(透明)の中にB型ポリマーが2分子存在する系のシミュレーションにおける、B型ポリマー間のRDF。RDFは様々

なA型ポリマーの濃度に対してプロットされる。A型ポリマーが一定量存在するとき(38A)、B型ポリマー間にエントロピー効果による実効引力が作用してRDFに高いピークが現れる。

【文献】

- 1) Zheng, H. & Xie, W. The role of 3D genome organization in development and cell differentiation. *Nat Rev Mol Cell Biol* 20, 535-550 (2019).
- 2) Lieberman-Aiden, E. *et al.* Comprehensive Mapping of Long-Range Interactions Reveals Folding Principles of the Human Genome. *Science* 326, 289-293 (2009).
- 3) Kim, E., Barth, R. & Dekker, C. Looping the Genome with SMC Complexes. *Annu. Rev. Biochem.* 92, annurev-biochem-032620-110506 (2023).

2. 論文

- (1) Fujishiro, S. & Sasai, M. Generation of dynamic three-dimensional genome structure through phase separation of chromatin. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 119, e2109838119 (2022).

3. 学会発表

- (1) 藤城 新, 笹井 理生
「ヒト染色体のフレキシブルな運動:全ゲノムとTADスケールのシミュレーション」
ゲノムモデリング研究会 国立遺伝学研究所 (三島) 2022/6/7 (招待講演)
- (2) Shin Fujishiro, and Masaki Sasai.
“Dynamic loops shape and reshape chromosome compartments”
第60回日本生物物理学会年会 函館 2022/9/29 2Pos114 (ポスター発表)
- (3) 藤城 新
「DNA 機能と染色体コンパートメントをつなぐ動的ループモデル」
第40回染色体ワークショップ・第21回核ダイナミクス研究会 (オンライン)
2022/12/20 PL4-4 (口頭講演)
- (4) Shin Fujishiro
“Cell-to-cell variation and time-varying structures of TADs”
ミニシンポジウム Genome building from TADs 理化学研究所 (筑波)
2023/1/31 (招待講演)

V 資料

1. 研究業績一覧

2022 (令和4) 年度

No	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
佐藤 徹					
1	Y. Hattori, R. Kitajima, W. Ota, T. Sato, R. Matsuoka, T. Kusamoto, and K. Uchida	The Simplest Structure of a Stable Radical Showing High Fluorescence Efficiency in Solution: Benzene Donors with Triarylmethyl Radicals	<i>Chem. Sci.</i>	13, 13418-13425	2022
2	R. Xiaotian, W. Ota, T. Sato, M. Furukori, Y. Nakayama, T. Hosokai, E. Hisamura, K. Nakamura, K. Matsuda, K. Nakao, A. P. Monkman, and K. Albrecht,	Carbazole-Dendronized Luminescent Radicals	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>	62, e202302550	2023
春田 直毅					
1	春田 直毅	力学的対称性理論・メカノケミストリー・エキシトン動学の確立に向けた基礎学理の構築	フロンティア	第4巻4号、155-162	2022
2	春田 直毅	メカノケミストリーの理論をつくる	現代化学	2023年1月号、43-44	2023
平尾 公彦					
1	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
2	Kimihiko Hirao; Takahito Nakajima; Bun Chan; H-J.Lee	The core ionization energies calculated by delta SCF and Slater's transition state theory	<i>J.Chem.Phys.</i>	158 064112	2023
高塚 和夫					
1	Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka	Spin current in chemical reactions	<i>Chem Phys. Lett.</i>	793 , 139462 (7 pages)	2022
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
3	Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki	Real-time electronic energy current and quantum energy flux in molecules	<i>J. Chem. Phys.</i>	157 , 244108 (20 pages)	2022
4	Kazuo Takatsuka	Quantum chaos in the dynamics of molecules	<i>Entropy</i>	25 , 63 (52 pages)	2023
5	Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka	Energy natural orbital characterization of nonadiabatic electron wavepackets in the densely quasi-degenerate electronic state manifold	<i>J. Chem. Phys.</i>	158, 114102 (21pages)	2023

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
加藤 立久					
1	Tomoaki Terabayashi, Eiichi Kayahara, Yichen Zhang, Yoshiyuki Mizuhata, Norihiro Tokitoh, Tooru Nishinaga, Tatsuhisa Kato, and Shigeru Yamago	Significant Effect of Flexibility of Bridging Alkyl Chains on the Proximity of Stacked Porphyrin and Phthalocyanine Conjugated with Fourfold Rotaxane Linkage	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>	62, e202214960	2021
2	Yoshiaki Uchida, Kenjiro Hino, Tatsuhisa Kato. And Rui Tamura	Synthesis of Twisted [N]Cycloparaphenylene by Alkene Insertion	<i>Cryst. Growth Des.</i>	23, 1641-1647	2022
笹井 理生					
1	Tomoki P. Terada, Qing-Miao Nie, and Masaki Sasai	Landscape-based view on the stepping movement of myosin VI	<i>J. Phys. Chem. B</i>	126(38),7262–7270	2022
2	Masaki Sasai	Role of the reaction-structure coupling in temperature compensation of the KaiABC circadian rhythm	<i>PLoS Comp. Biol.</i>	18(9), e1010494	2022
3	Takumi Nishina, Megumi Nakajima, Masaki Sasai, and George Chikenji	The structural rule distinguishing a superfold: A case study of ferredoxin fold and the reverse ferredoxin fold	<i>Molecules</i>	27(11), 3547	2022
4	Shin Fujishiro and Masaki Sasai	Generation of dynamic three-dimensional genome structure through phase separation of chromatin	<i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i>	119(22), e2109838119	2022
新崎 康樹					
1	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	Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki	Real-time electronic energy current and quantum energy flux in molecules	<i>J. Chem. Phys.</i>	157, 244108 (11 pages)	2022
3	Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka	Energy natural orbital characterization of nonadiabatic electron wavepackets in the densely quasi-degenerate electronic state manifold	<i>J. Chem. Phys.</i>	158, 114102 (21 pages)	2023
花崎 浩太					
1	Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka	Spin current in chemical reactions	<i>Chem. Phys. Lett.</i>	793, 139462	2022
藤城 新					
1	Shin Fujishiro, and Masaki Sasai	Generation of dynamic three-dimensional genome structure through phase separation of chromatin	<i>Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.</i>	119(22), e2109838119	2022

2. 共同研究者受入れ状況

2022 (令和4) 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
佐藤 徹	青木 拓磨 竹中 将斗	民間等共同研究員	2022/4/1 ~ 2023/2/28	住友化学株式会社	振電相互作用による分子構造と耐久性の相関解析並びに振電相互作用による分子の吸収スペクトル制御
佐藤 徹	上島 基之 福永 宏雄 大田 航 坂上 恵	民間等共同研究員	2022/4/1 ~ 2023/3/31	株式会社MOLFEX	蛍光プローブならびに共鳴ラマンプローブに関する研究

3. 海外渡航一覧

2022 (令和4) 年度

職名	氏名	期間(自)	期間(至)	目的地
研究員	笹井 理生	10/10/2022	10/18/2022	インド
研究員	平尾 公彦	2/17/2023	2/23/2023	ベトナム
研究員	高塚 和夫	2/17/2023	2/23/2023	ベトナム
研究員	笹井 理生	2/17/2023	2/23/2023	ベトナム
研究員	笹井 理生	3/25/2023	3/31/2023	アメリカ

4. 留学生受入れ一覧

2022 (令和4) 年度

受入れ教員	留学生名	受入れ期間	研究内容
佐藤 徹	胡 政男	令和4年10月1日 ~ 令和5年3月31日	organic chemistry, physical chemistry, and quantum chemistry

5. 福井謙一記念研究センターシンポジウム ポスター・プログラム



第18回

京都大学

福井謙一

記念研究センター

シンポジウム

開会式 (Opening)

【開会の辞】 佐藤啓文 (センター長) 13:00-13:05

講演会 (Lecture Session)

田中 庸裕 (京都大学大学院 工学研究科) 13:05-14:05
「自動車排ガス浄化三元触媒の貴金属使用節減と貴金属フリー化」

加藤 昌子 (関西学院大学 生命環境学部) 14:15-15:15
「蒸気応答性を示す金属錯体ソフトクリスタル」

福井謙一賞 (Fukui Encouragement Award) 15:25-15:55

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

令和5年2月10日(金)

会場：京都大学 福井謙一記念研究センター
2023.2.10 Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University

〒606-8103 京都市左京区高野西開町34-4
お申し込みは下記ホームページをご参照ください (2023年1月27日締め切り)

問合せ先：春田 直毅 / E-mail: sympo2022@fukui.kyoto-u.ac.jp
事務室 / Tel: 075-711-7708 Fax: 075-781-4757

<https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/sympo2022>



第 18 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム

プログラム

日時 2023 年 2 月 10 日 (金) 13:00~17:55

場所 京都大学福井謙一記念研究センター 3 階 大会議室

開会式 (Opening)

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

講演会 (Lecture Session)

- 田中 庸裕 (京都大学大学院工学研究科) 13:05 – 14:05
「自動車排ガス浄化三元触媒の貴金属使用節減と貴金属フリー化」
座長：佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)
- 加藤 昌子 (関西学院大学生命環境学部) 14:15 – 15:15
「蒸気応答性を示す金属錯体ソフトクリスタル」
座長：榎 茂好 (京都大学高等研究院物質-細胞統合システム拠点)

受賞講演 (Award Lecture)

福井謙一奨励賞 (第 7 回) 受賞講演 15:25 – 15:55
受賞者：砂賀 彩光 (京都大学大学院理学研究科)
「化学における量子電磁力学効果と分子を用いた CP 対称性破れの探索」

ポスターセッション (Poster Session)

ポスターリスト (3 階大会議室 16:05~17:55)

- ✓ 番号が奇数の方は前半 (16:05-17:00)、番号が偶数の方は後半 (17:00-17:55)、ポスターボードの前で発表するようにしてください。
- ✓ Authors with odd and even poster numbers should be present at the poster during the first half (16:05-17:00) and the second half (17:00-17:55) of the session, respectively.

1. **CHFCIBr 分子におけるパリティを破る鏡像異性体間エネルギー差の電子励起による増大**
○黒田 直也[1]、砂賀 彩光[2]、瀬波 大土[1] (京大院工[1]、京大複合研[2])
2. **アニオン交換膜内におけるイオン動態の分子動力学解析**
○笠原 健人[1]、奈良 悠里[2]、松林 伸幸[1]、八木 清[3]、田中 学[2] (阪大院基礎工[1]、東京都立大都市環境[2]、理研開拓研究本部[3])
3. **電子非断熱動力学とスピнкаレント**
○花崎 浩太[1]、高塚 和夫[1] (京大福井セ[1])
4. **ホストゲスト材料の安定構造探索: 密度汎関数計算と粒子群最適化の比較**
○福浦 秀太[1]、湯村 尚史[1]、西舘 陽平[2] (京工繊大院[1]、会津大学[2])
5. **Structure Search for inorganic molecules based on DIRECT (Dividing RECTangle) algorithm**
○Kansei Kanayama, Kazuaki Toyoura (Grad. Sch. of Eng., Kyoto Univ.)
6. **[18]アヌレンを用いた分子並列回路モデルの電子状態と電気伝導特性の関係に関する理論研究**
○甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[1]、西田 光博[2]、津田 雅大[1]、林 優太[1]、本城 一樹[2]、益田 晃希[2]、岸 亮平[1,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])
7. **Higher-order Slater's Transition State Approximation**
○平尾公彦[1,2]、中嶋隆人[2]、Bun Chan[3] (京大福井セ[1]、理研[2]、長崎大[3])
8. **ヒドリドが反応に関わる Ir-M (M = Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)ヘテロ金属二核錯体触媒の分子軌道エネルギー制御に関する理論研究**
○林 優太[1]、甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[1]、津田 雅大[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])
9. **密度汎関数理論を用いたコレスタンの熱力学安定性の評価**
○温 祐貴[1]、佐藤 啓文[2,3]、齊藤 諒介[4,5]、東 雅大[2] (京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3]、山口大理[4]、JST さきがけ[5])
10. **量子化学計算を用いた SrFeOx 薄膜における長距離水素スピルオーバー現象の解明**
○植田 泰成[1]、鎌田 太郎[2]、福浦 秀太[1]、湯村 尚史[1]、細川 三郎[1]、田中 庸裕[3]、菅 大介[2]、島川 祐一[2] (京工繊大院[1]、京大化研[2]、京大院工[3])

11. CASPT2-IPEA の解析的微分

○西本 佳央 (京大院理)

12. ニトロゲナーゼの P クラスタ周囲の水素結合がフロンティア軌道に与える影響に関する理論研究

○本城 一樹[1]、甘水 君佳[2]、林 優太[2]、佐々木 啓介[2]、津田 雅大[2]、西田 光博[1]、益田 晃希[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])

13. QM/MM RWFE-SCF 法を用いたアニオンチャネルロドプシン GtACR1 の変異体モデリングおよび光励起エネルギー計算

○鹿倉 啓史、成 鍼、林 重彦 (京大院理)

14. N-アルキル化 DABCO を対成分とする F2TCNQ 陰イオンラジカル塩の結晶構造と電気特性

○増田 怜旺[1]、石川 学[1,2]、大塚 晃弘[1,2]、中野 義明[1,2] (京大院理[1]、京大環安保[2])

15. N-アルキル化 DABCO と TCNQ から成る電荷移動錯体の構造と物性

○立木 実[1]、中井 暁量[2]、石川 学[2,3]、中野 義明[2,3]、大塚 晃弘[2,3] (京大理[1]、京大院理[2]、京大環安保[3])

16. エネルギー表示の新規拡散方程式

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

17. N-アルキル化 DABCO と F4TCNQ から成る分子性導体の結晶構造および物性

○矢野 亜実[1]、○石川 優李[2]、石川 学[1,3]、大塚 晃弘[1,3]、中野 義明[1,3] (京大院理[1]、京大理[2]、京大環安保[3])

18. 密度汎関数理論法を用いたダブルデッカー型テルビウム(III)フタロシアニン錯体の構造と磁気異方性に関する理論研究

○益田 晃希[1]、津田 雅大[2]、甘水 君佳[2]、林 優太[2]、佐々木 啓介[2]、西田 光博[1]、本城 一樹[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])

19. Internal Conversion Processes from the S₂ and S₁ states in Azulene

○在間 嵩朗[1,2]、大田 航[3]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、MOLFEX[3])

20. ビス-ペリアズレン連結二量体モデルの軌道相互作用・開殻性についての理論研究

島田 魁智[1]、坂井 亮太[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])

21. テンソルネットワークに基づく波束ダイナミクスに最適化されたグリッドポテンシャルエネルギー曲面の開発

○樋野 健太郎[1]、倉重 佑輝[1] (京大院理[1])

22. 一次元不均一分子集合系における一重項分裂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]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])

23. 光化学反応解析に向けた半古典ダイナミクスの実装開発

○津村 将弥[1]、倉重 佑輝[1] (京大理院[1])

24. 近接積層した反芳香族分子集合系の分子間相互作用エネルギーと開殻性の関係に関する理論研究

○杉森 亮太[1]、池内 雅登[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 RCSEC[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])

25. Low-rank 型波動関数理論による π 共役分子集合体における励起子の解析

○西尾 宗一郎、倉重 佑輝 (京大院理)

26. 八員環を含有する開殻縮環共役分子の構造と電子状態に関する理論研究

○土田 聖也[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])

27. Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の触媒活性

○高倉 陸[1,2]、春田 直毅[1,2,3]、大西 駿也[1,2]、大田 航[1,2]、細川 三郎[1,3,4]、田邊 豊和[5]、寺村 謙太郎[1,2,3]、田中 庸裕[1,3]、佐藤 徹[1,2,3] (京大院工[1]、京大福井セ[2]、京大 ESICB[3]、京都工繊大材料化学[4]、防衛大機能材料[5])

28. Co 置換型ペロブスカイト酸化物の酸素貯蔵能

○杉本 良介[1]、細川 三郎[1] (京都工芸繊維大学[1])

29. アニオンポンプロドプシン NpHR のイオン輸送過程に関する理論的研究

○江尻 智森[1]、小山 糧[1]、林 重彦[1] (京大院理[1])

30. **バソクプロインコバルト(II)単イオン磁石における電子状態と磁気異方性の相関に関する理論研究**
 ○津田 雅大[1]、益田 晃希[2]、甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[1]、林 優太[1]、西田 光博[2]、本城 一樹[2]、岸 亮平[1,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])
31. **電極電解液界面の動的誘電率計算とデバイ緩和解析**
 ○田仲 雄一[1]、佐藤 啓文[1,2]、中農 浩史[3] (京大院工[1]、京大福井セ[2]、産総研 CD-FMat[3])
32. **ポリアセンにおけるヘテロ原子置換が単分子電気伝導性に与える影響に関する理論研究**
 ○西田 光博[1]、甘水 君佳[2]、佐々木 啓介[2]、津田 雅大[2]、林 優太[2]、本城 一樹[1]、益田 晃希[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])
33. **水溶媒による Z-(allyloxycarbonyl)methyl ラジカル環化反応の促進機構**
 ○鈴木 さら[1]、Soni Aman Govind[2]、今村 洗輔[1]、東 雅大[1]、佐藤 啓文[1, 3] (京大院工[1]、インド工科大[2]、京大福井セ[3])
34. **原子価結合理論に基づく有限 π 共役分子集積体における電荷分布の積層構造依存性に関する理論研究**
 ○吉田 航[1]、重田 育照[2]、松井 啓史[3]、岸 亮平[1,4,5,6]、北河 康隆[1,4,5,6,7] (阪大院基礎工[1]、筑波大 CCS[2]、大安研[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 QIQB[5]、阪大 ICS-OTRI[6]、阪大 SRN-OTRI[7])
35. **Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒における超周期構造の発現機構**
 ○大西 駿也[1,2]、細川 三郎[3]、田邊 豊和[4]、大田 航[1,2]、寺村 謙太郎[1]、田中 庸裕[1]、佐藤 徹[1,2] (京大院工[1]、京大福井セ[2]、京都工繊大材料化学[3]、防衛大機能材料[4])
36. **ジフェノキノン骨格を含有する縮合環化合物のシングレットフィッシュン過程に関与する低励起状態に関する理論研究**
 ○岡田 健治[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTR[4]I、阪大 SRN-OTRI[5])
37. **マルコフ状態モデルによる V 字型多環芳香族両親媒性分子の自己組織化構造の研究**
 ○山本 裕生[1]、田口 雅彦[2]、林 重彦[1] (京大院理[1]、量子科学技術研究開発機構[2])

38. 架橋配位子に導入した π 電子系の軌道対称性と軌道エネルギーによるルテニウム二核錯体の電子状態制御に関する理論研究

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

39. イクオリンの生物発光過程についての理論的研究

○安東 智大[1]、林 重彦[1] (京大院理[1])

40. ヘリセン骨格を有する開殻一重項分子の一重項-分裂過程に関する電子励起状態についての理論研究

○中山 直哉[1]、岡田 健治[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])

41. Role of Vibronic Couplings and Energy Gap in the Internal Conversion Process of a Molecule

大田 航[1,2]、上島 基之[3]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、MOLFEX[3])

42. β -diketiminato 配位子を持つ低原子価 14 属元素錯体の構造と電子状態に関する理論研究

中筋 千尋[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])

京都大学福井謙一記念研究センター 年報 2022

2023年10月発行

発行人 佐藤 徹

編者 佐藤 徹

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)