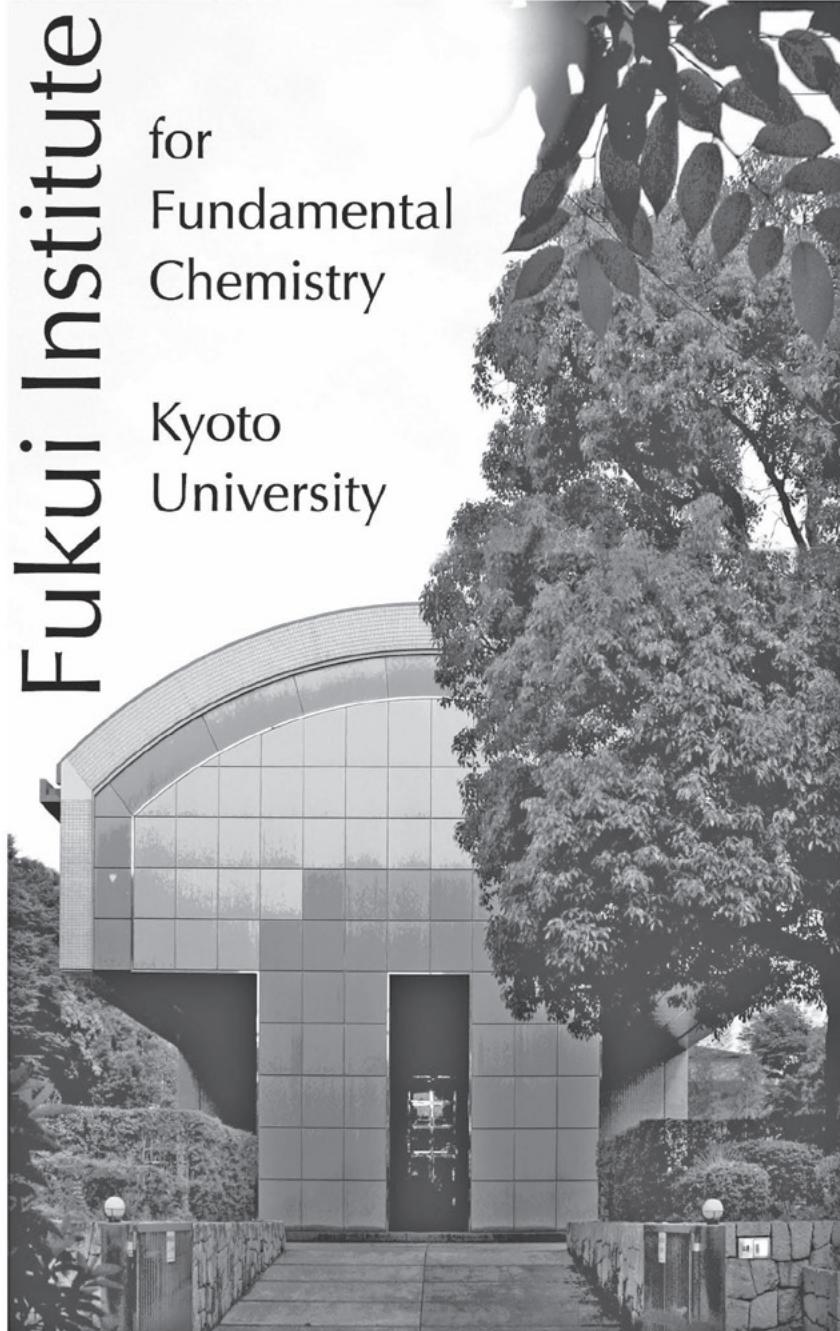


年報 2024

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

2024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。

館内には福井先生の生い立ちからノーベル賞受賞までの軌跡を辿っていただくための展示コーナーや、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。

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。

福井博士の生誕百年にあたる2018年度より、記念事業の一環として企業研究者のための基礎化学研修プログラム(喜多-福井プロ

ジェクト)を開設しました。喜多源逸先生は、福井博士が“終生の師”と呼び、「応用をやるなら、基礎をやれ」、「数学が得意なら化学をやれ」という言葉で福井博士が化学の道に進むきっかけを作られた方であり、また本学工学部化学系における基礎重視の学風を築かれた方です。このプロジェクトは、喜多先生に源を発するこの伝統を再認識し、産業への応用も見据えた基礎化学・理論化学を広く展開できる技術者・研究者の育成に貢献しようとするものです。同年には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開設いたしました。

2023年4月、福井博士の研究や国際会議開催に関する資料群がデジタル化され、京都大学研究資源アーカイブ資料32「福井謙一研究資料、1936-1988(主年代1940-1982)」として公開されました。1988年以降の福井先生の資料も継続してアーカイブ作業を進めており、公開可能な範囲でデジタル化を予定しています。

例年冬に開催しているセンターシンポジウムは第21回を迎え、国内外のトップクラスの研究者による特別講演、京都大学内外からのポスター発表を行いました。

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。

2025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-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
2023 (令和6)	4	「福井謙一研究資料、1936–1988(主年代1940–1982)」、 京都大学デジタルアーカイブシステムにて公開

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 教員

1. 組織		1
2. プロフィール		
(1) センター長		2
(2) 副センター長		4
(3) 連携教員		6
(4) 専任教員		12

II 研究員

1. 組織		16
2. プロフィール		17

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
3. 京都大学福井謙一記念研究センター 見学会		33
4. 社会へのアウトリーチ活動		34
(1) 2024 年度「産業応用のための基礎化学講座」の開催		34
(2) 京都大学アカデミックディへの参加		34
(3) 第3回ものづくりプロセス基礎講習シリーズ		34
5. 福井謙一奨励賞の創設及び奨励賞の授与		34
6. その他		
(1) 「福井謙一博士の計算メモ、研究会メモ、講演メモ」京都大学研究資源アーカイブによるデジタル化について	…	34

IV 研究業績

1. 専任教員		36
2. 研究員		53

V 資料

1. 研究業績一覧	89
2. 共同研究者受入れ状況	93
3. 海外渡航一覧	93
4. 留学生受入一覧	93
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	94
6. セミナー	100
7. 京都大学福井謙一記念研究センター 見学会	101
8. 2024 年度「産業応用のための基礎化学講座」パンフレット	102

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/AnnualReport2024.pdf>

I 教員

1. 組織

2024(令和6)年度

職 名	氏 名	備 考
センター長	佐 藤 徹	福井謙一記念研究センター 理論化学
副センター長	松 田 建 児	工学研究科 合成・生物化学専攻
協議員	工学研究科長	立 川 康 人 工学研究科 社会基盤工学専攻
	理学研究科長	田 中 耕 一 郎 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻
	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	松 田 建 児 工学研究科 合成・生物化学専攻
	教 授	寺 村 謙 太 郎 工学研究科 分子工学専攻
	教 授	佐 藤 啓 文 工学研究科 分子工学専攻
	教 授	大 北 英 生 工学研究科 高分子化学専攻
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)
	特定准教授	春 田 直 毅 専 任
	特定助教	大 田 航 専 任
	特定助教	中 村 泰 司 専 任(吉澤グループ)

2. プロフィール

(1) センター長

【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)(ルーヴァンカトリック大学) 平成16年 3月 京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門助教授 平成23年 1月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻准教授 平成30年 2月 京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門教授 令和 5年 4月 京都大学福井謙一記念研究センター長 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・ナノチュープ・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)	<p>“Enhanced Solid-State Phosphorescence of Organoplatinum π-Systems by Ion-Pairing Assembly”, Yohei Haketa, Kaifu Komatsu, Hiroi Sei, Hiroki Imoba, Wataru Ota, Tohru Sato, Yu Murakami, Hiroki Tanaka, Nobuhiro Yasuda, Norimitsu Tohnai, Hiromitsu Maeda, <i>Chem. Sci.</i> 15(3), 964-973(2024).</p> <p>“Intersystem Crossing as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes: A Unified View of Nonradiative Transitions in a Molecule Bull”, Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato, <i>Chem. Soc. Jpn.</i> 97 (2), uoad020 (2024).</p> <p>“Ion-Pairing Assemblies of Anion-Responsive Helical PtII Complexes”, Yohei Haketa, Maho Kawami, Wataru Ota, Tohru Sato, Hiromitsu Maeda, <i>Org. Chem. Front.</i> 11 (23), 6651-6659 (2024).</p> <p>“Synthesis of Substituent-Free Dioxadiazene circulene to Investigate Intermolecular Interactions and Photophysical Properties”, Aoi Nakagawa, Wataru Ota, Takumi Ehara, Yusuke Matsuo, Kiyoshi Miyata, Ken Onda, Tohru Sato, Shu Seki, Takayuki Tanaka, <i>Chem. Commun.</i> 60 (99), 14770-14773 (2024).</p>

	<p>“Magnetic Circular Dichroism of Luminescent Triarylmethyl Radicals”, Yohei Hattori, Daiya Suzuki, Wataru Ota, Tohru Sato, Rapenne Gwénaël, Yoshitane Imai, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 15 (47), 11696-11700 (2024).</p> <p>“Theoretical study on the mechanochemical reactivity in Diels–Alder reactions”, Wakana Sakai, Lori Gonnet, Naoki Haruta, Tohru Sato, Michel Baron, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 26 (2), 873-878 (2024).</p> <p>“Spontaneous-Symmetry-Breaking Charge Separation Induced by Pseudo-Jahn-Teller Distortion in Organic Photovoltaic Material”, Takeaki Zaima, Wataru Ota, Naoki Haruta, Motoyuki Uejima, Hideo Ohkita, Tohru Sato, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 14(43), 9706-9712 (2023) .</p>
【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

(2) 副センター長

【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 (2022-2025) 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】	<ol style="list-style-type: none"> 1. K. Satake, N. Ootsuki, K. Higashiguchi, K. Matsuda, NIR-Responsive Double Closed-Ring Isomer of a Diarylethene Fused Dimer Synthesized by Stepwise Photochemical and Oxidative Cyclization Reaction, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 147, 9653 (2025) 2. T. Aoki, H. Sotome, D. Shimizu, H. Miyasaka, K. Matsuda, Propeller-Shaped Blatter-Based Triradicals: Distortion-Free Triangular Spin System and Spin-State-Dependent

	<p>Photophysical Properties, Angew. Chem. Int. Ed. 64, e202418655 (2025).</p> <p>3. D. Shimizu, H. Sotome, H. Miyasaka, K. Matsuda, Optically Distinguishable Electronic Spin-isomers of a Stable Organic Diradical, ACS Cent. Sci. 10, 890 (2024)</p> <p>4. Y. Hiroyasu, K. Higashiguchi, C. Shirakata, M. Sugimoto, K. Matsuda, Kinetic Analysis of the Photochemical Paths in Asymmetric Diarylethene Dimer, Chem. Eur. J. 29, e202300126. (2023)</p> <p>5. 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, Nat. Commun. 13, 1475 (2022).</p> <p>【学術関係の受賞など】</p> <p>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</p>
--	---

(3) 連携教員

【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 (2022-2025) 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】	<ol style="list-style-type: none"> 1. K. Satake, N. Ootsuki, K. Higashiguchi, K. Matsuda, NIR-Responsive Double Closed-Ring Isomer of a Diarylethene Fused Dimer Synthesized by Stepwise Photochemical and Oxidative Cyclization Reaction, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 147, 9653 (2025) 2. T. Aoki, H. Sotome, D. Shimizu, H. Miyasaka, K. Matsuda, Propeller-Shaped Blatter-Based Triradicals: Distortion-Free Triangular Spin System and Spin-State-Dependent

	<p>Photophysical Properties, Angew. Chem. Int. Ed. 64, e202418655 (2025).</p> <p>3. D. Shimizu, H. Sotome, H. Miyasaka, K. Matsuda, Optically Distinguishable Electronic Spin-isomers of a Stable Organic Diradical, ACS Cent. Sci. 10, 890 (2024)</p> <p>4. Y. Hiroyasu, K. Higashiguchi, C. Shirakata, M. Sugimoto, K. Matsuda, Kinetic Analysis of the Photochemical Paths in Asymmetric Diarylethene Dimer, Chem. Eur. J. 29, e202300126. (2023)</p> <p>5. 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, Nat. Commun. 13, 1475 (2022).</p>
【学術関係の受賞など】	<p>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</p>

【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】	CO ₂ 資源化
【研究内容キーワード】	CO ₂ , 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)	<p>1. Enhanced photocatalytic conversion of CO₂ by H₂O over Ag@Cr-cocatalyst-modified ZnTa₂O₆ Kawata, Kio; Iguchi, Shoji; Naniwa, Shimpei; Nishimoto, Masamu; Teramura, Kentaro ACS Catal. (2025), 15, 4081–4088. Selected as a front cover DOI: 10.1021/acscatal.4c06530 Supplementary Cover DOI: 10.1021/acscatal.4c06530 ChemRxiv (2024) DOI:10.26434/chemrxiv-2024-pn3xw</p>

2. Ag co-catalyst prepared by ultrasonic reduction method for efficient photocatalytic conversion of CO₂ with H₂O using ZnTa₂O₆ photocatalyst
 Kawata, Kio; Iguchi, Shoji*; Naniwa, Shimpei; Tanaka, Tsunehiro; Nishimoto, Masamu; Teramura, Kentaro*
Catalysis Science & Technology (2024), 14(21), 6207-6214.
 DOI: [10.1002/cctc.202400871](https://doi.org/10.1002/cctc.202400871)
ChemRxiv (2024), 1-36.
 DOI: [10.26434/chemrxiv-2024-1j428](https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-1j428)
3. Fourteen-membered macrocyclic cobalt complex for low-concentration CO₂ electrolysis with high faradic efficiency towards CO
 Inada, Takeshi; Iguchi, Shoji*; Moriya, Makoto; Ohyama, Junya; Nabae, Yuta; Naniwa, Shimpei; Tanaka, Tsunehiro; Teramura, Kentaro*
Catalysis Science & Technology (2024), 14(2), 391-396.
 DOI: [10.1039/D3CY01177A](https://doi.org/10.1039/D3CY01177A)
ChemRxiv (2023), 1-4.
 DOI: [10.26434/chemrxiv-2023-0crqz](https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-0crqz)
4. Mg-doped SrTiO₃ photocatalyst with Ag-Co cocatalyst for enhanced selective conversion of CO₂ to CO using H₂O as the electron donor
 Nakamoto, Takechi; Iguchi, Shoji*; Naniwa, Shimpei; Tanaka, Tsunehiro; Teramura, Kentaro*
Catalysis Science & Technology (2023), 13(15), 4534-4541
 DOI: [10.1039/d3cy00576c](https://doi.org/10.1039/d3cy00576c)
ChemRxiv (2023), 1-40
 DOI: [10.26434/chemrxiv-2023-x7zgc](https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-x7zgc)
5. Kinetic Study of Heterogeneous Photocatalytic CO₂ Reduction:
 Development of a General Formula for Relations between Activity and Reaction Conditions
 Morishita, Masahige; Asakura, Hiroyuki; Hosokawa, Saburo; Tanaka, Tsunehiro; Teramura, Kentaro*
ACS Catalysis (2023), 13(10), 6966-6973
 DOI: [10.1021/acscatal.2c05823](https://doi.org/10.1021/acscatal.2c05823)

【学術関係の受賞など】

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」

【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 June 2004-December 2004, Academic Visitor, PTCL, Oxford University
【在外研究歴】	The Chemical Society of Japan, Japanese Association for Molecular Science,
【所属学会】	Japanese Society of Theoretical Chemistry, The Japan Association of Solution Chemistry
【学会活動】	Director (2022-2024), The Chemical Society of Japan Executive Director (2012-2014, 2020-2022, 2024-2026), 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)	<ol style="list-style-type: none"> Kosuke Imamura, Daisuke Yokogawa, and Hirofumi Sato, "Recent developments and applications of RISM-SCF-cSED: A hybrid model of quantum chemistry and integral equation theory of molecular liquids", <i>J. Chem. Phys.</i>, 160, 050901 (2024). Satoshi Takahashi, Satoru Iuchi, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, "Theoretical and computational methodologies for understanding coordination self-assembly complexes", <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 25, 14659 (2023). Kaho Nakatani, Masahiro Higashi, and Hirofumi Sato, "Extraction of local spin-coupled states by second quantized operators", <i>J. Chem. Phys.</i>, 157, 014112 (2022). 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 [M12L24]24+", <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 23, 866-877 (2021).
【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)

【氏名(ふりがな)】	大北 英生(おおきた ひでお)
【職名】	教授
【所属】	京都大学大学院工学研究科 高分子化学専攻
【研究室】	A3-214
【直通電話】	075-383-2612
【FAX】	075-383-2617
【電子メールアドレス】	ohkita@photo.polym.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	https://photo.polym.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	高分子機能学
【現在の研究課題】	高分子光物理・光化学、高分子光・電子物性、高分子太陽電池
【研究内容キーワード】	高分子・光・電子
【学歴】	1993年 京都大学工学部高分子化学科卒業 1995年 同大学院修士課程修了 1997年 同大学院博士後期課程修了
【学位】	京都大学 博士(工学)
【略歴】	1997年 京都大学大学院工学研究科 助手 2005年 Imperial College London客員研究員兼任(2006年まで) 2006年 京都大学大学院工学研究科 助教授 2007年 京都大学大学院工学研究科 准教授(名称変更) 2009年 JST さきがけ研究者兼任(2015年まで) 2016年 京都大学大学院工学研究科 教授 2017年 広島大学大学院工学研究科 客員教授 2021年 九州大学先導物質化学研究所 非常勤講師 現在に至る
【所属学会】	高分子学会、光化学協会、応用物理学会、日本化学会、ICPST、SPIE
【学会活動】	高分子学会関西支部幹事、応物M&BE分科会幹事、ICPST組織委員、SPIE Program Committee、Nano Research Energy Editorial Board Member
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<u>H. Ohkita</u> , "Interface Engineering for Ternary Blend Polymer Solar Cells Based on Spectroscopic and Device Analyses", <i>Polym. J.</i> , in press. <u>H. Ohkita</u> , "Future Perspective of Polymer Solar Cells Based on Recent In-Depth Understanding of Photovoltaic Conversion Mechanism", <i>JSAP Rev.</i> , 2022, 220207_1-7 (2022). S. Natsuda, T. Saito, R. Shirouchi, Y. Sakamoto, T. Takeyama, Y. Tamai, <u>H. Ohkita</u> , "Cascaded Energy Landscape as a Key Driver for Slow Yet Efficient Charge Separation with Small Energy Offset in Organic Solar Cells", <i>Energy Environ. Sci.</i> , 15, 1545–1555 (2022). T. Fukuhara, K. Yamazaki, T. Hidani, M. Saito, Y. Tamai, I. Osaka, <u>H. Ohkita</u> , "Molecular Understanding of How the Interfacial Structure Impacts the Open-Circuit Voltage of Highly Crystalline Polymer Solar Cells", <i>ACS Appl. Mater. Interfaces</i> , 13, 34357–34366 (2021). Y. Cho, H. D. Kim, J. Zheng, J. Bing, Y. Li, M. Zhang, M. A. Green, A. Wakamiya, S. Huang, <u>H. Ohkita</u> , A. W. Y. Ho-Baillie, "Elucidating Mechanisms behind Ambient Storage-Induced Efficiency Improvements in Perovskite Solar Cells", <i>ACS Energy Lett.</i> , 6, 925–933 (2021).
【学術関係の受賞など】	2003年 平成15年度高分子学会奨励賞 2004年 平成16年度日本化学会BCSJ賞 2007年 2007年度光化学協会奨励賞 2009年 高分子研究発表会[神戸]ヤングサイエンティスト講演賞 2010年 さきがけ「太陽光と光電変換機能」総括賞 2018年 2018年度光化学協会賞 2023年 2023年度高分子学会賞

(4) 専任教員

【氏名（ふりがな）】	佐藤 徹 (さとう とおる)
【職名】	教授
【所属】	理論研究部門
【研究室】	210
【直通電話】	075-711-7849
【電子メールアドレス】	tsato@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	準備中
【研究分野】	理論化学
【現在の研究課題】	振電相互作用理論、機能性分子の理論設計
【研究内容キーワード】	振電相互作用, 有機EL, Jahn-Teller効果
【学歴】	平成9年3月 京都大学大学院工学研究科 分子工学専攻博士後期課程修了
【学位】	博士(工学)
【略歴】	平成 9年 4月 日本学術振興会特別研究員(PD)(財団法人基礎化学研究所) 平成10年 1月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻助手 平成15年10月 文部科学省在外研究員(若手)(ルーヴァンカトリック大学) 平成16年 3月 京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門助教授 平成23年 1月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻准教授 平成30年 2月 京都大学福井謙一記念研究センター理論研究部門教授 令和 5年 4月 京都大学福井謙一記念研究センター長 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)	<p>“Enhanced Solid-State Phosphorescence of Organoplatinum π-Systems by Ion-Pairing Assembly”, Yohei Haketa, Kaifu Komatsu, Hiroi Sei, Hiroki Imoba, Wataru Ota, Tohru Sato, Yu Murakami, Hiroki Tanaka, Nobuhiro Yasuda, Norimitsu Tohnai, Hiromitsu Maeda, <i>Chem. Sci.</i> 15(3), 964-973(2024).</p> <p>“Intersystem Crossing as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes: A Unified View of Nonradiative Transitions in a Molecule Bull”, Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato, <i>Chem. Soc. Jpn.</i> 97 (2), uoad020 (2024).</p> <p>“Ion-Pairing Assemblies of Anion-Responsive Helical PtII Complexes”, Yohei Haketa, Maho Kawami, Wataru Ota, Tohru Sato, Hiromitsu Maeda, <i>Org. Chem. Front.</i> 11 (23), 6651-6659 (2024).</p> <p>“Synthesis of Substituent-Free Dioxadiazacyclopentene to Investigate Intermolecular Interactions and Photophysical Properties”, Aoi Nakagawa, Wataru Ota, Takumi Ehara, Yusuke Matsuo, Kiyoshi Miyata, Ken Onda, Tohru Sato, Shu Seki, Takayuki Tanaka, <i>Chem. Commun.</i> 60 (99), 14770-14773 (2024).</p> <p>“Magnetic Circular Dichroism of Luminescent Triarylmethyl Radicals”, Yohei Hattori, Daiya Suzuki, Wataru Ota, Tohru Sato, Rapenne Gwénaël, Yoshitane Imai, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 15 (47), 11696-11700 (2024).</p> <p>“Theoretical study on the mechanochemical reactivity in Diels–Alder reactions”, Wakana Sakai, Lori Gonnet, Naoki Haruta, Tohru Sato, Michel Baron, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 26 (2), 873-878 (2024).</p> <p>“Spontaneous-Symmetry-Breaking Charge Separation Induced by Pseudo-Jahn-Teller Distortion in Organic Photovoltaic Material”, Takeaki Zaima, Wataru Ota, Naoki Haruta, Motoyuki Uejima, Hideo Ohkita, Tohru Sato, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 14(43), 9706-9712 (2023).</p>
【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】	特定准教授
【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 2024年4月 京都大学福井謙一記念研究センター 特定准教授
【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)	<p>1. S. Kosaka, K. Kurebayashi, N. Yamato, H. Tanaka, N. Haruta*, M. Yamamoto*, “Thiyl chemistry: cysteine-catalyzed maleate isomerization via aqueous thiyl radical processes”, <i>Green Chem.</i> 27, 2743 (2025).</p> <p>2. H. Masai, M. Koshimizu, H. Kawamoto, H. Setoyama, Y. Onodera, K. Ikeda, S. Maruyama, N. Haruta, T. Sato, Y. Matsumoto, C. Takahashi, T. Mizoguchi, “Combinatorial characterization of metastable luminous silver cations”, <i>Sci. Rep.</i> 14, 4638 (2024).</p> <p>3. W. Sakai, L. Gonnet, N. Haruta, T. Sato, M. Baron, “Theoretical study on mechanochemical reactivity in the Diels-Alder reactions”, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 26, 873 (2024).</p> <p>4. W. Sakai, L. Gonnet, N. Haruta, T. Sato, M. Baron, “Origin of Stereoselectivity in a Mechanochemical Reaction of Diphenylfulvene and Maleimide”, <i>J. Phys. Chem. A</i> 127, 5790 (2023).</p> <p>5. T. Kato, N. Haruta, T. Sato, “Vibronic Coupling Density: Understanding Molecular Deformation”, Springer, 2021.</p>
【学術関係の受賞】	2021年05月 第2回理論化学会奨励賞 2021年02月 英国王立化学会 第15回PCCP Prize 2020年03月 日本化学会 第34回若い世代の特別講演会 講演者 2019年06月 第22回理論化学討論会 優秀講演賞 2019年04月 日本化学会 第99春季年会(2019) 優秀講演賞(学術) 2019年02月 福井謙一奨励賞(第3回) 2013年11月 第3回CSJ化学フェスタ2013 優秀ポスター発表賞

【氏名（ふりがな）】	大田 航（おおた わたる）
【職名】	特定助教
【所属】	福井謙一記念研究センター 理論研究部門
【研究室】	福井記念研究センター205
【直通電話】	075-711-7838
【FAX】	075-711-7838
【電子メールアドレス】	ota.wataru@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	量子化学
【現在の研究課題】	振電相互作用理論の基礎から応用
【研究内容キーワード】	高次光過程・金属-非金属転移・化学史
【最終学歴】	2021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指導認定退学
【学位】	2024年1月工学博士(京都大学)
【略歴】	2024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 理論化学会 日本コンピュータ化学会 日本セラミックス協会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<p>1. Masanori Sakamoto, Yoshiyuki Mizuhata, Wataru Ota, Tatsuki Konishi, Hirokazu Tahara, Kenji Kamada, Tohru Sato, Orbital Hybridisation of π-conjugated Ligands with Atomically Precise Metal Clusters for Enhanced Two-Photon Absorption, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 147(27), 23451-23457(2025).</p> <p>2. Rui Xiaotian, Wataru Ota, Tohru Sato, Minori Furukori, Yasuo Nakayama, Takuya Hosokai, Eri Hisamura, Kazuhiro Nakamura, Kenshiro Matsuda, Kohei Nakao, Andrew P. Monkman, Ken Albrecht, Carbazole-Dendronized Luminescent Radicals, <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 62, 582-590(2023).</p> <p>3. Masanori Sakamoto, Masaki Hada, Wataru Ota, Fumihiko Uesugi, Tohru Sato, Localized Surface Plasmon Resonance Inducing Cooperative Jahn-Teller Effect for Ultrafast Crystal Phase Change in a Nanocrystal, <i>Nat. Commun.</i> 14, 4471 (2023).</p> <p>4. Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Tohru Sato, Role of Vibronic Couplings and Energy Gap in the Internal Conversion Process of a Molecule, <i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i> 96, 582 (2023).</p>
【学術関係の受賞】	2023年 BCSJ賞

【氏名（ふりがな）】	中村 泰司（なかむら たいじ）
【職名】	特定助教
【所属】	福井謙一記念研究センター(吉澤グループ)
【研究室】	福井謙一記念研究センター 303C
【直通電話】	075-711-7725
【電子メールアドレス】	nakamura.taiji.6d@kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	計算化学
【現在の研究課題】	複雑化学系の応用量子化学
【研究内容キーワード】	量子化学・反応機構解析・窒素固定・理論的分子設計
【学歴】	2021年3月 群馬大学大学院理工学府理工学専攻博士後期課程修了
【学位】	2021年3月 博士(理工学)(群馬大学)
【略歴】	2021年4月 国立研究開発法人産業技術総合研究所 博士研究員 2022年1月 アイオワ州立大学/Ames National Laboratory 博士研究員 2023年1月 九州大学 先導物質化学研究所 特任助教 2024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、理論化学会、分子科学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<p>1. <u>T. Nakamura</u>, Y. Tsuruta, A. Egi, H. Tanaka, Y. Nishibayashi, K. Yoshizawa “Theoretical Study of Imide Formation in Nitrogen Fixation Catalyzed by Molybdenum Complex Bearing PCP-Type Pincer Ligand with Metallocenes” <i>Inorg. Chem.</i> 64, 9124–9136 (2025).</p> <p>2. <u>T. Nakamura</u>, G. Schoendorff, D.-S. Yang, M. S. Gordon, “Systematic Investigation of Electronic States and Bond Properties of LnO, LnO⁺, LnS, and LnS⁺ (Ln = La–Lu) by Spin–Orbit Multiconfiguration Perturbation Theory.” <i>J. Chem. Theory Comput.</i> 21, 267–282 (2025).</p> <p>3. A. Egi, H. Tanaka, <u>T. Nakamura</u>, K. Arashiba, Y. Nishibayashi, K. Yoshizawa “Computational screening of PCP-type pincer ligands for Mo-catalyzed nitrogen fixation” <i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>, 97, uoae041, (2024).</p> <p>4. <u>T. Nakamura</u>, B. B. Dangi, L. Wu, Y. Zhang, G. Schoendorff, M. S. Gordon, D.-S. Yang, “Spin–orbit coupling of electrons on separate lanthanide atoms of Pr₂O₃ and its singly charged cation” <i>J. Chem. Phys.</i> 159, 244303 (2023).</p> <p>5. <u>T. Nakamura</u>, D. G. Fedorov, “The catalytic activity and adsorption in faujasite and ZSM-5 zeolites: the role of differential stabilization and charge delocalization”, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 24, 7739–7747 (2022).</p> <p>6. <u>T. Nakamura</u>, T. Yokaichiya, D. G. Fedorov, <i>J. Phys. Chem. A</i> 126, 957–969 (2022).</p> <p>7. <u>T. Nakamura</u>, T. Kudo, “Comparison of group 14 elements in sp³ and sp² environment by fragment structure energy analysis”, <i>J. Comput. Chem.</i> 42, 1817–1825 (2021).</p> <p>8. <u>T. Nakamura</u>, T. Yokaichiya, D. G. Fedorov, “Quantum-Mechanical Structure Optimization of Protein Crystals and Analysis of Interactions in Periodic Systems”, <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> 12, 8757–8762 (2021).</p>

II 研究員

1. 組織

2024(令和6)年度

職名	グループ名	氏名
リサーチダイレクター	平尾グループ	平 尾 公 彦
研究員	喜多・福井プロジェクト	田 中 一 義
シニアリサーチフェロー	高塚グループ	高 塚 和 夫
研究員	佐藤（徹）グループ	加 藤 立 久
研究員	笹井グループ	笹 井 理 生
研究員	吉澤グループ	吉 澤 一 成
研究フェロー	高塚グループ	新 崎 康 樹
特定研究員	笹井グループ	藤 城 新
特定研究員	佐藤（啓）グループ	金 丸 恒 大
		山 田 一 雄
兼任研究員		中 田 浩 弥

2. プロフィール

【氏名（ふりがな）】	平尾 公彦(ひらお きみひこ)
【職名】	リサーチ・ダイレクター
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	105
【直通電話】	075-711-7796
【電子メールアドレス】	hirao.kimihiko.2n@kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	https://researchmap.jp/read0180590/research_experience
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	電子状態理論、波動関数理論、密度汎関数法
【研究内容キーワード】	電子相関・相対論的分子理論・LC汎関数
【学歴】	1974年3月 京都大学工学 研究科燃料化学専攻博士課程単位取得退学
【学位】	1974年5月 工学博士(京都大学)
【略歴】	1974年 - 1975年 カナダ・アルバータ大学博士研究員 1988年 - 1993年 名古屋大学教養部教授 1993年 - 2009年 東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻教授 2004年 - 2006年 東京大学大学院工学系研究科研究科長・工学部長 2007年 - 2009年 東京大学副学長、理事 2009年4月 - 2010年 6月理化学研究所特任顧問 2010年 - 2018年 理化学研究所計算科学研究機構・機構長 2018年 - 2021年 理化学研究所顧問 2018年 - 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)	<p>1. Validation of Long-Range-Corrected LC2gau Functional for Koopmans' Prediction of Core and Valence Ionization Energies with Diverse Data Kimihiko Hirao, Dae-Hwan Ahn, Jong-Won Song, Bun Chan, Takahito Nakajima, <i>J. Phys. Chem. A</i> 2025 129</p> <p>2. Theoretical study of 1s, 2s, and 2p core electron binding energies of third-period elements calculated by the ΔSCF method, Koopmans' theorem, and Slater's transition state theory within the framework of Hartree-Fock and Kohn-Sham theory, Kimihiko Hirao, Dae-Hwan Ahn, Jong-Won Song, Bun Chan, Takahito Nakajima, <i>J. Phys. Chem. A</i> 2025 129</p> <p>3. Exploiting the Correlation between the 1s, 2s, and 2p Energies for the Prediction of Core-Level Binding Energies of Si P, S, and Cl species. Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan <i>J. Phys. Chem. A "Trygve Helgaker Festschrift"</i> 2024 128 (33), 6879-6897.</p> <p>4. Long-range corrected density functional theory including a two-Gaussian Hartree-Fock operator for high accuracy core-excitation energy calculations of both the 2nd- and 3rd-row atoms (LC2gau-core-BOP) Ahn, Dae-Hwan; Nakajima, Takahito; Hirao, Kimihiko; Song, Jong-Won Journal of Chemical Theory and Computation, 2024 20 (16), 7113-7125.</p>

5. Neighbor Effect on Conformational Spaces of Alanine Residue in Azapeptides, Mouna El Khabchi, Shi-Wei Liu, Hua-Jun Shawn Fan, Mohammed Mcharfi, Mohammed Benzakour, Jong-Won Song, Ho-Jin Lee, and Kimihiko Hirao, *Heliyon* **10** (12) 2024
6. The verification of delta SCF and Slater's transition state theory for the calculation of core ionization energy. Hirao, K.; Nakajima, T.; Chan, B.; Lee, H-J. *J.Comput.Chem.* **2024**, *45*, 183-192.
7. The core-level 2s and 2p binding energies of third-period elements (P, S, and Cl) calculated by Hartree-Fock and Kohn-Sham DSCF theory, Hirao, K.; Nakajima, T.; Chan, B. *J.Phys.Chem.A*, **2023** *127*, 7954-7963.
8. 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
9. Higher-Order Transition State Approximation, Takahito Nakajima, Kimihiko Hirao, and Bun Chan, *J.Chem.Phys.* **2022** *156* 114112.
10. 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, *Chem.Phys.Lett.* **2022** *796* 139563 (6 pages)
11. 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)
12. 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, *J.Phys. Chem.A* **2021** *125* (49), 10507-10513
13. An Improved Slater's Transition State Approximation Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, and Bun Chan, *J.Chem.Phys.* **2021** *155* 034101.
14. Koopmans-Type Theorem in Kohn-Sham Theory with Optimally Tuned Long-Range Corrected (LC) Functionals, Kimihiko Hirao, Han-Seok Bae, Jong-Won Song, and Bun Chan, *J.Phys. Chem. A* **2021**, *125*, 16, 3489–3502.
(Award, Fellowship)
2002 International Academy of Quantum Molecular Science (Menton, France)
2005 日本化学会賞(日本化学会)
2007 Fukui Medal, Asia Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists
2008 向井賞(東京応化科学技術振興財団)
2009 東京大学名誉教授
2009 日本化学会フェロー 2009
2010 ICCMSE Award, European Society of Comp. Methods in S&E
2018 兵庫県県勢高揚功労賞
2019 兵庫県科学賞
2021 理化学研究所名誉研究員
2021 分子科学会名誉会員
2024 井植文化賞(科学技術部門) 井植記念会

【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.33t@st.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 分子・高分子の電子物性、量子機能材料、量子統計力学
【研究内容キーワード】	
【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 米国エナージー・コンバージョン・デバイシズ社リサーチケミスト 1981年12月 京都大学工学部助手 1988年12月 同 助教授 1996年11月 京都大学大学院工学研究科教授 2012年 4月 京都大学福井謙一記念研究センター長併任 2015年 4月 京都大学名誉教授ならびに京都大学福井謙一記念研究センターシニア リサーチフェロー 2019年 4月から 京都大学福井謙一記念研究センターFIFCリサーチフェロー 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)	<p>1. Theoretical Chemistry for Experimental Chemists – Pragmatics and Fundamentals” (単著, Springer Nature, Singapore, 2020).</p> <p>2. Organic Semiconductors for Optoelectronics (共著, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, West Sussex, UK, 2021) (以上著書)</p> <p>1. 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). 2. 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). 3. 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) 4. 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). 5. シミュレーションか理解か 一量子化学分野だけにとどまらない緊張関係— Roald Hoffmann (訳) 現代化学 No. 1, 28-32 (2019). 6. 化学つれづれ草 第二十四回 人にわかつてもらうこと (単著) 化学 74, No. 4, 45 (2019). 7. 化学つれづれ草 第二十五回 量子力学三題漸 (単著) 化学 74, No. 5, 59 (2019). 8. 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). 9. 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). 10. 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). 11. 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</p>

- 74, No. 9, 19 (2019).
12. 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).
 13. 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).
 14. 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).
 15. 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).
 16. 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).
 17. 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).
 18. 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).
 19. 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).
 20. 化学つれづれ草 第三十八回 新型コロナウィルス感染症と自触媒反応(単著) 化学 75, No. 6, 23 (2020).
 21. 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).
 22. 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).
 23. 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).
 24. 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).
 25. 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).
 26. 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嘶(単著) 化学 75, No. 12, 48 (2020).
 27. 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).
 28. 化学つれづれ草 第四十六回 アーカイブというものの(単著) 化学 76, No. 2, 41 (2021).
 29. 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).
 30. 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).
 31. 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).
 32. 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).
 33. 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).
 34. 化学つれづれ草 第五十二回 國際的標準化(単著) 化学 76, No. 8, 29 (2021).
 35. 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).
 36. 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).
 37. 化学つれづれ草 第五十五回 蒙亨(単著) 化学 76, No. 11, 41 (2021).
 38. 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).
 39. 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).
 40. 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).
 41. 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).
 42. 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).
 43. 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).
 44. 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).
 45. 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).
 46. 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).
 47. 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).

48. 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)
49. 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)
50. 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)
51. 化学つれづれ草 第六十九回 鳥が鷹を生むか? (単著) 化学 78, No. 1, 59 (2023)
52. 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)
53. 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)
54. 化学つれづれ草 第七十二回 ノイズの効用 (単著) 化学 78, No. 4, 50 (2023)
55. 化学つれづれ草 第七十三回 悩ましい論文 (単著) 化学 78, No. 5, 31 (2023)
56. 化学つれづれ草 第七十四回 バイオマスと発酵 (単著) 化学 78, No. 6, 35 (2023)
43. 化学つれづれ草 第七十五回 Mooreの法則と日の丸半導体 (単著) 化学 78, No. 7, 31 (2023)
57. 化学つれづれ草 第七十六回 Climb Every Mountain (単著) 化学 78, No. 8, 36 (2023)
58. 化学つれづれ草 第七十七回 今どき産業スパイ? (単著) 化学 78, No. 9, 52 (2023)
59. 化学つれづれ草 第七十八回 注目度の高い論文って? (単著) 化学 78, No. 10, 38 (2023)
60. 化学つれづれ草 第七十九回 朱と水銀 (単著) 化学 78, No. 11, 50 (2023)
61. 化学つれづれ草 第八十回 パラレルワールドと夢物語 (単著) 化学 78, No. 12, 32 (2023)
62. 化学つれづれ草 第八十一回 イノベーション・ボックス税制とは (単著) 化学 79, No. 1, 27 (2024)
63. 化学つれづれ草 第八十二回 Schrödinger-Zimmer (単著) 化学 79, No. 2, 25 (2024)
64. 化学つれづれ草 第八十三回 現象のモデル化 (単著) 化学 79, No. 3, 53 (2024)
65. 化学つれづれ草 第八十四回 思想家Boltzmann (単著) 化学 79, No. 4, 39 (2024)
66. 化学つれづれ草 第八十五回 音楽と情報エントロピー (単著) 化学 79, No. 5, 23 (2024)
67. 化学つれづれ草 第八十六回 複雑性とフラクタル次元 (単著) 化学 79, No. 6, 23 (2024)
68. 化学つれづれ草 第八十七回 レジリエンス確保? (単著) 化学 79, No. 7, 30 (2024)
69. 化学つれづれ草 第八十八回 Maxwellの考え方 (単著) 化学 79, No. 8, 25 (2024)
70. 化学つれづれ草 第八十九回 鉄精錬の歴史 (単著) 化学 79, No. 9, 34 (2024)
71. 化学つれづれ草 第九十回 物理学者Kohnさん (単著) 化学 79, No. 10, 55 (2024)
72. 化学つれづれ草 第九十一回 霧のカレリアと天然C60 (単著) 化学 79, No. 11, 54 (2024)
73. 化学つれづれ草 第九十二回 C60とSchlegel図 (単著) 化学 79, No. 12, 57 (2024)
74. 分子軌道法 (単著) 接着学会誌 56, No. 11, 431-440 (2020).
75. 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).
76. 量子コンピュータの仕組み (単著) 現代化学 No. 6, 38-44 (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 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).
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 2 対象となるシューレーディンガー方程式 (単著) 現代化学, No. 5, 70-73 (2020).
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 3 おもな分子軌道法について (単著) 現代化学, No. 6, 70-73 (2020).

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 4 基底関数の選び方と性質 (単著) 現代化学, No. 7, 64-67 (2020).
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 5 分子構造の最適化 (単著) 現代化学, No. 8, 67-70 (2020).
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 6 分子の電子状態からの情報 (単著) 現代化学, No. 9, 54-59 (2020).
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 7 分子のもつスピニ状態についての情報 (単著) 現代化学, No. 10, 70-74 (2020).
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 8 分子の電子物性とその特徴 (単著) 現代化学, No. 11, 66-70 (2020).
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 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).
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 10 光吸收と発光について(1) (単著) 現代化学, No. 1, 59-64 (2021).
87. 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 光吸收と発光について(2) (単著) 現代化学, No. 2, 55-59 (2021).
88. 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).
89. 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).
90. 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).
92. 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).
93. 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).
94. 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).
95. 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).
96. 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).
97. 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).
98. 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).
99. 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).
100. 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).
101. 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).
102. 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).
103. 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).
104. 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).
105. 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).
106. 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).
108. 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).
109. 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).
110. 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).
111. 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).
112. DeepMind21が物質科学にもたらす影響 (単著) 現代化学, No. 6, 53-55 (2022).
113. 近未来的の考察 生成AIによって理論化学・計算化学は変わるか (単著) 現代化学, No. 8, 39-40 (2023).

	<p>114. フロンティア軌道理論とは その誕生と意義(単著)現代化学, No. 11, 51-55 (2023)</p> <p>115. 基礎講座 化学反応はなぜ起こる?(単著)現代化学, No. 4, 28-33 (2024) (以上和文総説)</p> <p>1. 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>2. 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>3. 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>4. How to Explain an SN₂ Reaction ? (M. Murakami and K. Tanaka) J. Synth. Org. Chem. Jpn, 79, 1073-1076 (2021). (以上学術論文)</p>
【学術関係の受賞など】	<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（ふりがな）】	高塚 和夫																				
【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, 量子力学基礎論																				
【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】	<table> <tbody> <tr> <td>1978年8月</td> <td>ノースダコタ州立大学 博士研究員</td> </tr> <tr> <td>1979年9月</td> <td>カルフォルニア工科大学博士研究員</td> </tr> <tr> <td>1982年1月</td> <td>岡崎国立共同研究機構分子科学研究所理論研究系助手</td> </tr> <tr> <td>1987年4月</td> <td>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)</td> </tr> <tr> <td>1992年4月</td> <td>名古屋大学大学院人間情報学研究科教授</td> </tr> <tr> <td>1997年10月－2016年3月</td> <td>東京大学大学院総合文化研究科教授</td> </tr> <tr> <td>1998年4月－2016年3月</td> <td>東京大学教授 理学系研究科化学専攻(兼任)</td> </tr> <tr> <td>2001年4月－2016年3月</td> <td>自然科学研究機構分子科学研究所教授(兼任)</td> </tr> <tr> <td>2016年4月－2021年3月</td> <td>福井謙一記念研究センター リサーチリーダー</td> </tr> <tr> <td>2021年4月－</td> <td>福井謙一記念研究センター シニアリサーチフェロー</td> </tr> </tbody> </table>	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
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). 各種評議委員会委員(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)	<p>論文</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Kazuo Takatsuka," Maupertuis-Hamilton least action principle in the space of variational parameters for Schrödinger dynamics; A dual time-dependent variational principle" <i>J. Phys. Comm.</i> 4, 035007 (16 pages) (2020) 2. Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka "Charge separation and successive reconfigurations of electrons and protons driving water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex. On the mechanism of water splitting in PSII." <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 22, 7912-7934 (2020) 3. Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki, "Energy Natural Orbitals" <i>J. Chem. Phys.</i> 154, 094103 (2021). (14 pages). 4. Kazuo Takatsuka "Electron dynamics in molecular elementary processes and chemical reactions" <i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i> 94, 1421–1477 (2021). 6. Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki "An orbital picture extracted from correlated electronic wavefunctions for symmetry-forbidden and nonadiabatic 																				

	<p>chemical reactions: 70 years of Fukui frontier orbital theory and beyond.” <i>J. Chem. Phys.</i> 155, 064104 (2021). (18 pages)</p> <p>7. Kazuo Takatsuka “Time-dependent variational dynamics for nonadiabatically coupled nuclear and electronic quantum wavepackets in molecules” <i>Eur. Phys. J. D</i> 75, 252 (2021).</p> <p>8. Kazuo Takatsuka, “Quantum chaos in the dynamics of molecules” <i>Entropy</i>, 25, 63 (2023) (52 pages) (open)</p> <p>9. Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki, “Electronic-state chaos, intramolecular electronic energy redistribution, and chemical bonding in persisting multidimensional nonadiabatic systems” <i>J. Chem. Phys.</i> 159, 074110 (2023)</p> <p>10. Kazuo Takatsuka, “Schrödinger dynamics in length-scale hierarchy: from spatial rescaling to Huygens-like proliferation of Gaussian wavepackets” <i>J. Phys. A: Math. Gen.</i> 56 (2023) 445302 (22 pages)</p> <p>11. Kazuo Takatsuka, “Geometrical decomposition of nonadiabatic interactions to collective coordinates in many-dimensional and many-state mixed fast-slow dynamics” <i>J. Chem. Phys.</i> 160, 044112 (2024) (7 pages)</p> <p>12. Kazuo Takatsuka, “The dual structure of the Schrödinger dynamics”, <i>JPSJ</i>, 94, 094003 (2025) (20 pages)</p> <p>【学術関係の受賞など】</p> <p>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)</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)	1. T. Higaki, K. Tanaka, H. Izu, S. Oishi, K. Kawamoto, M. Tada, W. Sameera, R. Takahata, T. Teranishi, S. Kikkawa, S. Yamazoe, T. Shiga, M. Nihei, <u>T. Kato</u> , R. Cramer, Z. Zhang, K. Meyer, and Y. Ohki, “An Icosahedral 55-Atom Iron Hydride Cluster Protected by tri-tert-Butylphosphines”, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> , 147 , pp. 3215-3222 (2025). (doi.org/10.1021/jacs.4c12759).
【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
【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
【学会活動】	国際純粹及び応用物理学連合(IUPAP) Biological Physics Commission (C6) Chair(2022年1月-2024年12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) 日本物理学会国際交流アドバイザリー委員(2024年10月-)
【主な著書、学術論文】	<ol style="list-style-type: none"> 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). Tadasu Nozaki, et al., Condensed but liquid-like domain organization of active chromatin regions in living human cells. <i>Science Advances</i> 9, eadf1488 (2023). Shiori Iida, et al., Orientation-independent-DIC imaging reveals that a transient rise in depletion attraction contributes to mitotic chromosome condensation. <i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i> 119, e2403153121 (2024). Shin Fujishiro, Masaki Sasai, and Kazuhiro Maeshima, Chromatin domains in the cell: phase separation and condensation. <i>Current Opinion in Structural Biology</i> 91, 103006 (2025). Shin Fujishiro and Masaki Sasai, Three-dimensional memory of nuclear organization through cell cycles. <i>J. Chem. Phys.</i> 162, 065103 (2025).
【学術関係の受賞など】	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

【氏名（ふりがな）】	吉澤 一成（よしざわ かずなり）
【職名】	研究員
【所属】	福井謙一記念研究センター 総合研究部門
【研究室】	福井記念研究センター303C
【直通電話】	075-711-7727
【電子メールアドレス】	yoshizawa.kazunari.7s@kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	応用量子化学
【現在の研究課題】	電子輸送、触媒反応、接着
【研究内容キーワード】	ナノテクノロジー、メタン活性化、窒素固定、接着の科学
【最終学歴】	1992年3月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士課程修了
【学位】	1992年3月 博士(工学)(京都大学)
【略歴】	1984年4月 日本鋼管(株)中央研究所(1988年2月まで) 1992年4月 日本学術振興会特別研究員 1994年4月 (財)基礎化学研究所研究員 1995年7月 京都大学工学部助手 1997年5月 京都大学工学部助教授 2001年4月 九州大学有機化学基礎研究センター教授 2003年4月 九州大学先導物質化学研究所教授(改組) 2017年4月 九州大学先導物質化学研究所副所長 2021年4月 九州大学先導物質化学研究所所長 2024年3月 九州大学定年退職(名誉教授) 2024年4月 京都大学福井謙一記念研究センター研究員
【在外研究歴】	1994年8月-1995年6月 米国Cornell大学化学科(Roald Hoffmann教授) (日本学術振興会海外特別研究員)
【所属学会】	日本化学会、高分子学会、触媒学会、分子科学会、理論化学会、接着学会 錯体化学会、近畿化学協会
【学会活動】	英国王立化学会New Journal of Chemistry誌編集委員
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<p>1. A. Shrestha, Y. Sumiya, K. Okazawa, Y. Tsuji, K. Yoshizawa, "Density Functional Theory Study of Adhesion Mechanism between Epoxy Resin Cured with 4,4'-Diaminophenyl Sulfone and 4,4'-Diaminophenylmethane and Carboxyl Functionalized Carbon Fiber" <i>Langmuir</i>, 40, 21573-21586 (2024).</p> <p>2. Y. Tsuji, K. Okazawa, T. Tatsumi, K. Yoshizawa, "σ Interference: Through-Space and Through-Bond Dichotomy", <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 146, 32506-32518 (2024).</p> <p>3. Y. Ashida, T. Mizushima, K. Arashiba, A. Egi, H. Tanaka, K. Yoshizawa, Y. Nishibayashi, "Catalytic Production of Ammonia from Dinitrogen Employing Molybdenum Complexes Bearing N-Heterocyclic Carbene-Based PCP-Type Pincer Ligands", <i>Nat. Synth.</i>, 2, 635-644 (2023).</p> <p>4. H. Fujisaki, T. Ishizuka, H. Kotani, Y. Shiota, K. Yoshizawa, T. Kojima, "Highly Selective Methane Oxidation by Molecular Iron Catalysts in Aqueous Media", <i>Nature</i>, 616, 476-481 (2023).</p> <p>5. M. Yoshida, Y. Tsuji, S. Iguchi, H. Nishiguchi, I. Yamanaka, H. Abe, T. Kamachi, K. Yoshizawa, "Toward Computational Screening of Bimetallic Alloys for Methane Activation: A Case Study of MgPt Alloy", <i>ACS Catal.</i>, 12, 9458-9472 (2022).</p>
【学術関係の受賞など】	2011年日本化学会学術賞、2016年第70回藤原セミナー主催者、2018年錯体化学会貢献賞、2022年分子科学会賞、2024年日本化学会賞、日本化学会BCSJ論文賞9回受賞

【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)	<p>1. 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).</p> <p>2. K. Takatsuka and Y. Arasaki, Energy natural orbitals, <i>J. Chem. Phys.</i> 154, 094103 (2021, 14 pages).</p> <p>3. 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).</p> <p>4. Y. Arasaki and K. Takatsuka, Sonification of molecular electronic energy density and its dynamics, <i>RSC Adv.</i> 14, 9099-9108 (2024).</p> <p>5. K. Takatsuka and Y. Arasaki, Mechanism of quantum chaos in molecular nonadiabatic electron dynamics, <i>J. Chem. Phys.</i> 161, 061101 (2024, 7 pages).</p>

【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】	sfj@fukui.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】	日本生物物理学学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	Fujishiro, S. & Sasai, M. Three-dimensional memory of nuclear organization through cell cycles. <i>The Journal of Chemical Physics</i> 162 , 065103 (2025). Fujishiro, S., Sasai, M. & Maeshima, K. Chromatin domains in the cell: Phase separation and condensation. <i>Current Opinion in Structural Biology</i> 91 , 103006 (2025). Fujishiro, S. & Sasai, M. Three-Dimensional Simulation of Whole-Genome Structuring Through the Transition from Anaphase to Interphase. in <i>Computational Methods for 3D Genome Analysis</i> (ed. Nakato, R.) vol. 2856 293–308 (Springer US, New York, NY, 2025). 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).

【氏名（ふりがな）】	金丸 恒大 (かなまる こうだい)
【職名】	研究フェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター 佐藤 啓文グループ
【研究室】	名古屋大学情報学研究棟601
【電子メールアドレス】	kanemaru.kodai.5h@kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	理論化学、計算化学
【現在の研究課題】	液体の方程式のバイオマテリアルへの応用
【研究内容キーワード】	液体の積分方程式理論、高分子、バイオマテリアル
【学歴】	2023年3月 理学府化学専攻博士課程(修了)
【学位】	2023年3月 理学博士(九州大学)
【略歴】	2023年4月 福井謙一記念研究センター研究フェロー
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<p>1. Kodai Kanemaru, Yoshihiro Watanabe, Norio Yoshida, and Haruyuki Nakano, “Solvent effects in four-component relativistic electronic structure theory based on the reference interaction-site model” <i>J. Comput. Chem.</i> 44(1), 5–14 (2022)</p> <p>2. Kodai Kanemaru, Yoshihiro Watanabe, Norio Yoshida, and Haruyuki Nakano, “Application of the reference interaction site model self-consistent field method based on the Dirac–Hartree–Fock wave function to a chemical reaction” <i>IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.</i> 1280, 012002/1–4 (2023)</p> <p>3. Yuki Seno, Kodai Kanemaru, Shoichi Tanimoto, Tatsuhiko Miyata, Haruyuki Nakano, and Norio Yoshida, “Applicability of integral equation theory of molecular liquids to the hydration thermodynamic response to charged particles”, <i>Physica A</i> 674(15), 130787(2025)</p>

【氏名（ふりがな）】	山田 一雄（やまだ かずお）
【職名】	特定研究員
【所属】	福井謙一記念研究センター
【電子メールアドレス】	yamada.kazuo.8r@kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	計算化学・理論化学
【現在の研究課題】	人工ポリペプチド溶解度の理論計算
【研究内容キーワード】	生体高分子,自由エネルギー計算,分子動力学シミュレーション
【最終学歴】	2016年3月 九州大学大学院理学府物理学専攻博士後期課程単位取得退学
【学位】	2016年5月 理学博士(九州大学)
【略歴】	2016年4月 大阪大学基礎工学部特任研究員 2023年4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】	物理学会, 分子シミュレーション学会, 化学工学会, 高分子学会
【主な著書、学術論文】 (過去5年以内)	<ol style="list-style-type: none"> 1. K, Yamada and N. Matubayasi, "Chain-Increment Method for Free-Energy Computation of a Polymer with All-Atom Molecular Simulations" <i>Macromol.</i> 53, 775–788(2020). 2. K, Yamada and N. Matubayasi, "Chain-Increment Approach to the Mutual Miscibility of Polymers with All-Atom Molecular Simulation" <i>Macromol.</i> 56, 3857-3872(2023).

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 2025年2月6日（木）13:00 – 17:25

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

吉澤 一成（京都大学 福井謙一記念研究センター）

「複雑化学系の応用量子化学研究」

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）

14:15 – 15:15

恩田 健（九州大学大学院 理学研究院）

「時間分解分光と量子化学計算による光機能性材料の励起状態過程の解明」

座長：佐藤 徹（京都大学福井謙一記念研究センター）

15:25 – 15:55 福井謙一奨励賞 受賞講演

16:05 – 17:25 ポスターセッション

2. セミナー

Contact	Speaker	Title	Affiliation	Date
Kimihiko Hirao	Prof. Ram Kinkar Roy	Correlating Density Functional Reactivity Theory (DFRT) Based Stabilization Energy with Equilibrium Constant and Charge Transfer Limit of a Chemical Adduct	Dept. of Chemistry, BITS-Pilani	May 24 (Friday), 2024

3. 京都大学福井謙一記念研究センター見学会

新入生（主に理工化学科1回生）を対象に、福井謙一博士及び福井謙一記念研究センターを広く知ってもらうため、講演及び見学会を開催した。

日 時 2024年4月13日（土）10:30 – 12:00

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 田中一義京都大学名誉教授 「福井謙一博士の生い立ちとノーベル化学賞」

4. 社会へのアウトリーチ活動

(1) 2024年度「産業応用のための基礎化学講座」の開催

「応用をやるには、基礎をやれ」福井謙一博士が基礎化学講座の道に進まれるきっかけを作られ、本学化学系における基礎重視の学風を築かれた喜多源逸博士の言葉。この伝統を再認識し、産業で研究開発を行っておられる技術者・研究者の方を対象とした「産業応用のための基礎化学講座」を2019年度に開講、コロナ禍の中止を経て2023年度再開した。

対面・WEB傘下のハイブリッド方式を採用した6回の講座を開催し、関東圏等遠方からの参加も含め、のべ126名が受講した。

(2) 京都大学アカデミックディへの参加

11月2日（土）11時～18時、京都大学百周年記念館2階国際交流ホールII・IIIにて開催された本学研究者による研究紹介のコーナー「研究者と立ち話」に参加した。

展示タイトル「光らない分子を光らせる」、展示代表者の佐藤徹センター長が来場者へ説明と実演を行った。興味をもって頂いた方から、後日センター基金へのご寄附を頂戴するなど、広報にも役立った。

京都大学アカデミックデイ×ホームカミングデイ 2024 - 京都大学同窓会

<https://ku.research.kyoto-u.ac.jp/academic-day/a2024/a2024-p009/>

(3) 第3回ものづくりプロセス基礎講習シリーズ

ものづくりプロセス基礎講習シリーズ | 近畿化学協会

<https://kinka.or.jp/event/2024/mono-process3.html>

11月5日（火）、近畿化学協会主催、センター共催「表面化学技術者のための実践基礎演習」第1日目をセンターで開催した。約40名の参加があった。

5. 福井謙一奨励賞の創設及び奨励賞の授与

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

今年度のセンターシンポジウムにて、令和6年度の受賞者に表彰状と記念楯を授与し、受賞題目に関する講演が行われた。（資料編を参照）

6. その他

(1) 「福井謙一博士の計算メモ、研究会メモ、講演メモ」京都大学研究資源アーカイブによるデジタル化について

昨年度公開されたアーカイブ資料に引き続き、主にノーベル賞受賞後の博士の資料のアーカイブ化作業を開始した。公開は次年度となる予定。

福井謙一研究資料、1936–1988（主年代 1940–1982）.- 京都大学研究資源アーカイブ (kyoto-u.ac.jp)

<https://www.rra.museum.kyoto-u.ac.jp/archives/2824/>

1981 年にノーベル化学賞を受賞した福井謙一が残した研究および国際会議開催に関する資料群。1979 年に京都で開催された「第 3 回量子化学国際会議 International Congress of Quantum Chemistry」の準備段階で作成された文書や書簡、おもに 1940 年代から 80 年代の研究メモと研究者との書簡、博士論文などの手稿を含みます。とくに理論から実験にわたる広範な研究メモは、自ら研究テーマを記した封筒やファイルに分類されており、福井謙一の関心の広さと深さを資料群から知ることができます。（京都大学研究資源アーカイブ HP より）

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

酸化パラジウムにおける電子相関の補正

酸化パラジウム (PdO) は常温で正方晶系 (空間群: P4₂/mmc) の構造を持ち、0.8 ~ 2.2 eV のバンドギャップを持つ半導体である [1]。PdO は窒素酸化物の還元や一酸化炭素および炭化水素の酸化を行う自動車触媒として用いられており [2]、その電子構造を理解することは触媒機構を考える上で重要である。従来の局所密度近似 (LDA) や一般化勾配近似 (GGA) を用いた密度汎関数理論 (DFT) 計算では、PdO の電子構造は誤って金属的であると予測される [3]。この問題の解決策の一つはハイブリッド汎関数 HSE06 を用いることであるが、計算コストが高く、自動車触媒等の大きな系に適用することは困難である。DFT+U 法および DFT+U+V 法は、低い計算コストで、従来の DFT 計算では考慮できない電子相関を補正することが可能である [4]。本研究では、第一原理 DFT+U 法と DFT+U+V 法を PdO に適用し、自動車触媒の理論研究への応用に向けて、その基本的な電子構造を理解することを目的とした [5]。

図 1 に PdO のバンド構造および状態密度 (DOS) の計算結果を示す。汎関数 PBE を用いた DFT 計算ではバンドギャップはゼロとなった。一方、HSE, PBE+U, PBE+U+V を用いた DFT 計算では、M 点でそれぞれ 0.95、1.41、1.51 eV のバンドギャップが得られ、実験結果の 0.8 ~ 2.2 eV を概ね再現した。伝導帯の DOS は全ての計算手法で同様であった一方、PBE および HSE06 汎関数と比較すると、PBE+U および PBE+U+V は価電子帯における Pd-O 相互作用の度合いが大きくなることが分かった。

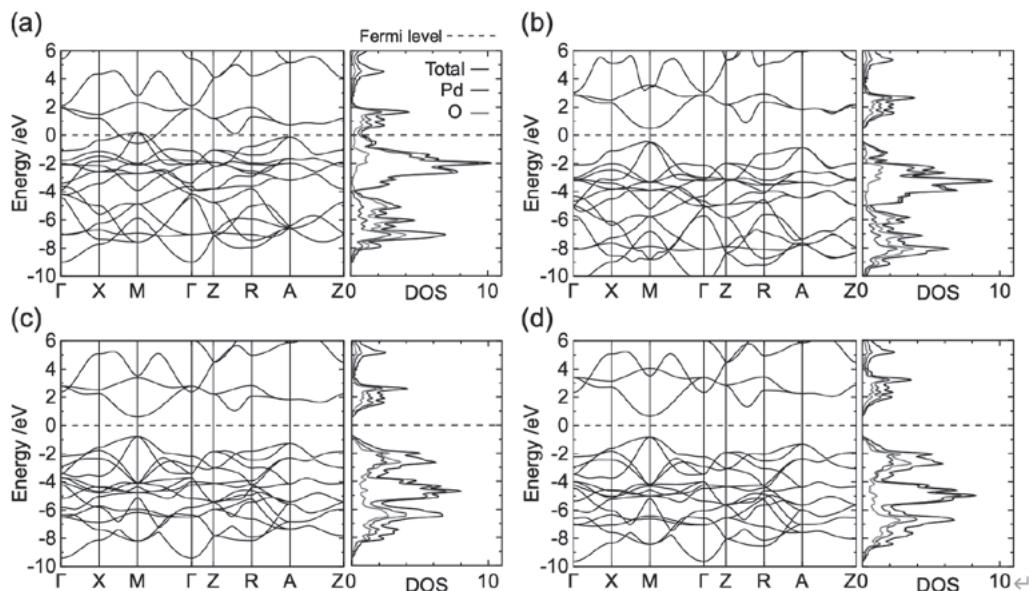


Fig. 1 Calculated band structure and DOS using (a) PBE, (b) HSE06, (c) PBE+U, and (d) PBE+U+V methods [5].

【文献】

- [1] A. G. Christy et al., Phys. Rev. B 52, 9259 (1997).
- [2] S. Hosokawa, W. Ota, T. Tanabe, K. Shingai, C. Watanabe, H. Asakura, S. Onishi, L.-E. Xerri, H. Yoshida, M. Machida, K. Teramura, T. Sato, T. Tanaka, J. Mater. Chem. A 13, 28574 (2025).
- [3] K.-T. Park et al., Phys. Rev. B 49, 4425 (1994).
- [4] V. L. Campo et al., J. Phys. Condens.: Matter. 22, 055602 (2010).
- [5] A. Ishikawa, W. Ota, T. Sato, preprint at 10.26434/chemrxiv-2025-zrtkp.

2. 論文

- (1) Yohei Haketa, Kaifu Komatsu, Hiroi Sei, Hiroki Imoba, Wataru Ota, Tohru Sato, Yu Murakami, Hiroki Tanaka, Nobuhiro Yasuda, Norimitsu Tohnai, Hiromitsu Maeda, Enhanced Solid-State Phosphorescence of Organoplatinum π -Systems by Ion-Pairing Assembly
Chem. Sci. 15(3), 964-973(2024).
- (2) Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato,
Intersystem Crossing as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes: A Unified View of Nonradiative Transitions in a Molecule
Bull. Chem. Soc. Jpn. 97 (2), uoad020 (2024).
- (3) Yohei Haketa, Maho Kawami, Wataru Ota, Tohru Sato, Hiromitsu Maeda,
Ion-Pairing Assemblies of Anion-Responsive Helical PtII Complexes
Org. Chem. Front. 11 (23), 6651-6659 (2024).
- (4) Aoi Nakagawa, Wataru Ota, Takumi Ehara, Yusuke Matsuo, Kiyoshi Miyata, Ken Onda, Tohru Sato, Shu Seki, Takayuki Tanaka,
Synthesis of Substituent-Free Dioxadiaza[8]circulene to Investigate Intermolecular Interactions and Photophysical Properties,
Chem. Commun. 60 (99), 14770-14773 (2024).
- (5) Yohei Hattori, Daiya Suzuki, Wataru Ota, Tohru Sato, Rapenne Gwénaël, Yoshitane Imai,
Magnetic Circular Dichroism of Luminescent Triarylmethyl Radicals,
J. Phys. Chem. Lett. 15 (47), 11696-11700 (2024).
- (6) Wakana Sakai, Lori Gonnet, Naoki Haruta, Tohru Sato, Michel Baron
Theoretical study on the mechanochemical reactivity in Diels–Alder reactions
Phys. Chem. Chem. Phys. 26 (2), 873-878 (2024).
- (7) Hirokazu Masai, Masanori Koshimizu, Hiroki Kawamoto, Hiroyuki Setoyama, Yohei Onodera, Kazutaka Ikeda, Shingo Maruyama, Naoki Haruta, Tohru Sato, Yuji Matsumoto, Chika Takahashi, Teruyasu Mizoguchi
Combinatorial characterization of metastable luminous silver cations
Sci. Rep. 14 (1), 4638 (2024).

3. 学会発表

(1) Wataru Ota, Tohru Sato,

Radiative and Nonradiative Transitions as Photon and Phonon Cooperative Processes

14th International Conference on Electroluminescence and Optoelectronic Devices, Kyoto,

2024.11.14

(2) Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato

Nonradiative Transitions as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption

Processes

International Conference on Science and Technology of Synthetic Electronic Materials 2024,

Dresden, 2024.6.25

春田 直毅

特定准教授

1. 今年度の研究の要約

【近赤外 OLED 材料の光物理素過程に関する理論的研究】

近年、近赤外OLEDに注目が集まっている。近赤外光は生体透過性が高いため、非侵襲で深部までの生体計測や食品検査が可能となる。近赤外OLEDは一般にエネルギーギャップ則[1]により発光効率が低いことが問題とされてきた。最近、トリフェニルアミンをドナー部位、ベンゾチアジアゾール部位をアクセプター部位とするドナー・アクセプター型分子TBSMCNが、トルエン溶液中ではピーク波長695 nm、PLQY 35%で発光し、ホスト中にドープしたOLED素子では外部量子効率が最大で14.25%に達することが報告された[2]。これは670~820 nmのレアメタルフリー近赤外OLEDで最高の性能である。しかし、その高効率発光の原因は不明であった。本研究の目的は、光物理素過程に関する速度定数を理論的に求め、それらを解析することで、TBSMCNの高効率近赤外発光の原因を理解することである。

電子状態 m から n への発光スペクトル $\sigma(E)$ は次式で与えられる[3]。

$$\sigma(E) = \frac{4E^3}{3c^3\hbar^4} \sum_{v,v'} P_{mv}(T) |\mu_{mn}|^2 |\langle \chi_{nv'} | \chi_{mv} \rangle|^2 \delta(E - E_{mv} + E_{nv'})$$

$v = (\dots, v_\alpha, \dots)$ は振動量子数の組、 $P_{mv}(T)$ は温度 T における振電状態 χ_{mv} のBoltzmann分布、 μ_{mn} は電子状態 m, n 間の遷移双極子モーメントを指す。Franck–Condon因子 $\langle \chi_{nv'} | \chi_{mv} \rangle$ のモード α に関する因子は

$$\langle v_\alpha' | v_\alpha \rangle = \sqrt{\frac{v_\alpha! v_\alpha'!}{2^{v_\alpha+v_\alpha'}}} \exp\left(-\frac{1}{4} g_{nn,\alpha}^2\right) \sum_{l=0}^{\min[v_\alpha, v_\alpha']} (-1)^{v_\alpha'-l} 2^l \frac{g_{nn,\alpha}^{v_\alpha+v_\alpha'-2l}}{l! (v_\alpha-l)! (v_\alpha'-l)!}, \quad g_{nn,\alpha} = \frac{V_{nn,\alpha}}{\sqrt{\hbar\omega_\alpha^3}}$$

となる。 ω_α はモード α の振動数である。 $V_{nm,\alpha}$ は Ψ_m, Ψ_n 間のモード α に関する 振電相互作用定数(VCC)を指し、

$$V_{nm,\alpha} = \left\langle \Psi_n \left| \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial Q_\alpha} \right)_{R_0} \right| \Psi_m \right\rangle$$

で与えられる。 \hat{H} は分子Hamiltonian、 Q_α はモード α の基準座標、 R_0 は参照核配置である。 $m=n$ のときを対角VCC、 $m \neq n$ のときを非対角VCCと呼ぶ。対角VCCはFranck–Condon因子を通じて、 $\sigma(E)$ の形状を特徴付ける。

電子状態 m, n 間の無輻射遷移速度定数 $k_{n \leftarrow m}^{\text{nr}}$ はモード毎の寄与 $k_{n \leftarrow m, \alpha}^{\text{nr}}$ に分解でき、次式で与えられる[4]。

$$k_{n \leftarrow m}^{\text{nr}} = \sum_{\alpha} k_{n \leftarrow m, \alpha}^{\text{nr}}, \quad k_{n \leftarrow m, \alpha}^{\text{nr}} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nm,\alpha}|^2 \theta_{\alpha}$$

$$\theta_{\alpha} = \sum_{v_\alpha} P_{mv_\alpha}(T) \left[\frac{(v_\alpha+1)\hbar}{2\omega_\alpha} F^{(\alpha)}(+\hbar\omega_\alpha) + \frac{v_\alpha\hbar}{2\omega_\alpha} F^{(\alpha)}(-\hbar\omega_\alpha) \right]$$

ここで、 $F^{(\alpha)}(E)$ はモード α を除いたFranck–Condon包絡線であり、

$$F^{(\alpha)}(E) = \sum_{\nu \neq \nu_\alpha} \sum_{\nu' \neq \nu_{\alpha'}} \prod_{\beta \neq \alpha} |\langle \bar{\nu}_\beta' | \nu_\beta \rangle|^2 \delta \left(E_n - E_m + \sum_{\beta \neq \alpha} \hbar \omega_\beta (\nu_\beta' - \nu_\beta) + E \right)$$

と定義される。Franck–Condon包絡線はFranck–Condon因子で重み付けされた振電状態密度であり、 $E = \pm \hbar \omega_\alpha$ におけるその値が $k_{n \leftarrow m}^{\text{nr}}$ に影響する。よって、 $k_{n \leftarrow m}^{\text{nr}}$ は非対角、対角VCCの両方に依存する。

さらに、VCC $V_{nm,\alpha}$ は振電相互作用密度(VCD) $\eta_{n,\alpha}(x)$ の積分値として表せる[3]。 $\eta_{n,\alpha}(x)$ は状態 m, n 間の差電子密度 $\Delta \rho_{nm}(x)$ あるいは状態 m, n 間の重なり密度 $\rho_{nm}(x)$ とポテンシャル導関数 $v_\alpha(x)$ の積で定義される。

$$V_{nm,\alpha} = \int d^3x \eta_{nm,\alpha}(x), \quad \eta_{n,\alpha}(x) = \begin{cases} \Delta \rho_{nm}(x) \times v_\alpha(x) & (m = n) \\ \rho_{nm}(x) \times v_\alpha(x) & (m \neq n) \end{cases}$$

尚、系間交差を考える際には、電子状態 m, n として、スピン混合状態を採用すればよい[4]。

TBSMCNに対して、発光状態 S_1 において構造最適化及び振動解析を行った。 S_1 最適化構造での S_0 の対角VCCを求め、displaced harmonic oscillatorモデルを用いて、 $S_1 \rightarrow S_0$ の蛍光スペクトルを計算した。その際、実験のスペクトル線形[2]を再現するように、各振電遷移に対して、半値幅 800cm^{-1} のGauss関数で線幅を与えた。また、蛍光速度定数 k_f 、内部転換速度定数 k_{IC} 、 $S_1 \rightarrow T_1$ の系間交差速度定数 k_{ISC} を求めた。速度定数を計算する際、蛍光スペクトル及びリン光スペクトルのピーク波長の実験値に基づき、 S_1 及び T_1 のエネルギーを補正した。計算レベルは M06-2X/6-31G(d,p) とし、分極連続体モデルによりトルエンの溶媒効果を考慮した。電子状態計算には Gaussian 16, Rev. C01、スペクトルと速度定数の計算及び解析には当研究室で開発したコードを用いた[3,4]。

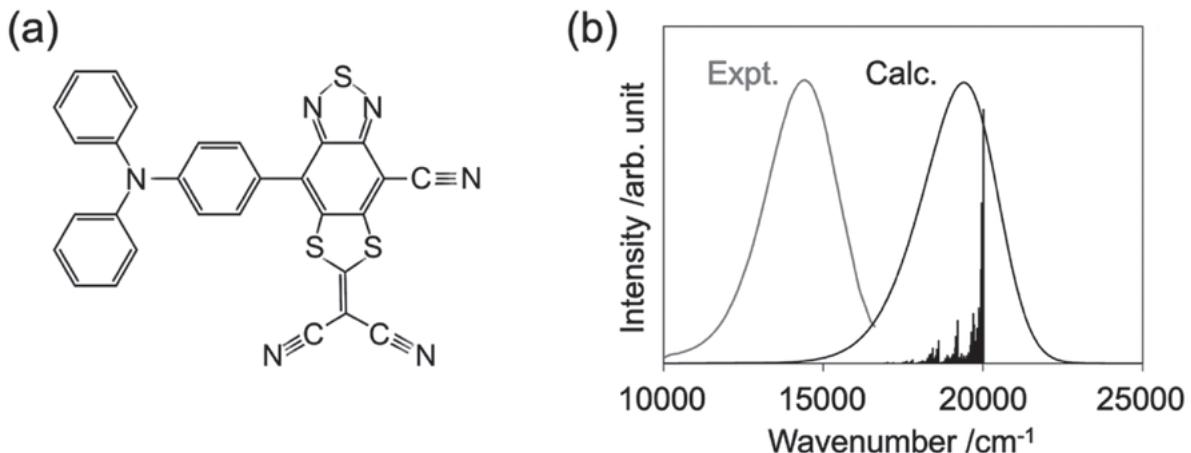


Fig. 1 (a) TBSMCN, (b) the calculated and experimental[2] fluorescence spectra.

発光状態 S_1 は HOMO-LUMO 遷移を主配置とする CT 型励起状態に帰属された。計算で得られた $S_1 \rightarrow S_0$ の蛍光スペクトルは、トルエン溶液中で観測されたスペクトル線形[2]を再現した(Fig.1(b))。また、速度定数を計算したところ、蛍光速度定数は $4.8 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 、内部転換速度定数は $5.3 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 、系間交差速度定数は $6.7 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 、PLQY の計算値は 27% となり、実験値 35% [2] に近い値となった。内部転換速度定数が最大となるモード 2, 128について解析したところ(Fig.2)、モード 2 では非対角 VCC が小さく、モード 128 では θ_α が小さいために、内部転換が抑制されていることが分かった。 S_1 が CT 型励起状態であり、 S_1 と S_0 の重なり密度が小さいこ

とが非対角VCCが小さい原因であった。また、ドナー・アクセプター型分子にも関わらず、再配列エネルギーが152 meVと非常に小さく、Franck-Condon包絡線がシャープになることで θ_α が小さくなることも分かった。再配列エネルギーが小さいのは、S₁とS₀の差電子密度が各原子上に局在し、振動モードと相互作用しにくいためであった。

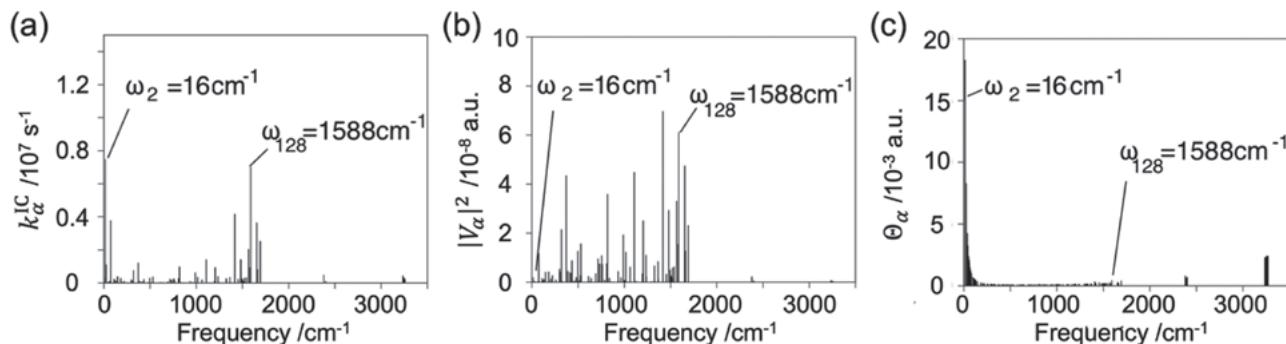


Fig. 2 (a) $k_{S_0 \leftarrow S_1, \alpha}^{IC}$, (b) $|V_{S_0 S_1, \alpha}|^2$, (c) θ_α .

近赤外発光分子TBSMCNでは、以下の2つの理由で内部転換が抑制されていることが分かった。

- (1) S₁がCT型励起状態であり、S₁とS₀の重なり密度が小さいため、非対角VCCが小さくなる。
- (2) S₁とS₀の間の差電子密度が各原子上に局在し、振動モードと相互作用しにくいため、対角VCC及び再配列エネルギーが小さくなる。

【文献】

- 1) N. J. Turro and J. C. Scaiano, Principles of Molecular Photochemistry (University Science Books, 2009).
- 2) Y. Yu, et al., Angew. Chem. 134, e202204279 (2022).
- 3) T. Kato, et al., Vibronic Coupling Density (Springer, 2021).
- 4) W. Ota, et al., Bull. Chem. Soc. Jpn. 97, uoad020 (2024).

2. 論文

- (1) Satoru Kosaka, Kentaro Kurebayashi, Naoki Yamato, Hiroshi Tanaka, Naoki Haruta*, Masanori Yamamoto*
“Thiyl chemistry: cysteine-catalyzed maleate isomerization via aqueous thiyl radical processes”
Green Chem. 27, 2743-2750 (2025)

3. 学会発表

- (1) 春田直毅、堺稚菜、Lori Gonnet、佐藤徹、Michel Baron

「メカノケミカル Diels–Alder 反応の収率と選択性の起源」

第 26 回理論化学討論会 筑波大学大学会館 2024 年 5 月 22 日 2L03

(2) 高見 哲理、春田 直毅、加藤 立久、佐藤 徹

「炭素クラスター負イオン C₆⁻ と C₆H⁻ の振電構造に関する理論的研究」

第 26 回理論化学討論会 筑波大学大学会館 2024 年 5 月 22 日 P121

(3) 杉村 潤輝、春田 直毅、佐藤 徹

「ポリオキソメタレート触媒による二酸化炭素固定化に関する理論的研究」

第 26 回理論化学討論会 筑波大学大学会館、2024 年 5 月 23 日 P209

(4) 大田 航、上島 基之、春田 直毅、佐藤 徹

「フォノンの放出・吸収過程としての無輻射遷移」

第 26 回理論化学討論会 筑波大学大学会館 2024 年 5 月 23 日 3L11

(5) 高見 哲理、春田 直毅、加藤 立久、佐藤 徹

「炭素クラスター負イオン C₆⁻ と C₆H⁻ の振電構造に関する理論的研究」

日本コンピュータ化学会 2024 春季年会 東京工業大学 大岡山キャンパス 2024 年 6 月 6 日
1P04

(6) 杉村 潤輝、春田 直毅、佐藤 徹 「ポリオキソメタレート触媒による二酸化炭素固定化に関する理論的研究」日本コンピュータ化学会 2024 春季年会 東京工業大学 大岡山キャンパス 2024 年 6 月 7 日 2P15

(7) Tetsuri Takami, Naoki Haruta, Tatsuhisa Kato, Tohru Sato

「Theoretical Study on Vibronic Structures of Carbon Cluster Anions C₆⁻ and C₆H⁻」

The 8th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry
Frontier Research in Applied Sciences Building, Hokkaido University, Japan 19 June 2024
PII-06

(8) Junki Sugimura, Naoki Haruta, Tohru Sato

「Theoretical Study on CO₂ Fixation Catalyzed by Polyoxometalate」

The 8th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry
Frontier Research in Applied Sciences Building, Hokkaido University, Japan 19 June 2024
PII-21

(9) Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato

「Nonradiative Transitions as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes」

International Conference on Science and Technology of Synthetic Electronic Materials
2024 Dresden International Congress Center, Germany 25 June 2024 S-25-02

(10) 大田 航、上島 基之、春田 直毅、佐藤 徹

「無輻射遷移速度定数の第一原理計算と分子設計への応用」

2024 年光化学討論会 九州大学 伊都キャンパス 2024 年 9 月 3 日 1D02

(11) 高見 哲理、春田 直毅、加藤 立久、佐藤 徹

「高速な輻射冷却を示す炭素クラスター負イオン C₆⁻ の振電構造」

第 18 回分子科学討論会 2024 京都 京都大学 吉田キャンパス 2024 年 9 月 18 日 1A07

(12) 八木 拓巳、大田 航、春田 直毅、佐藤 徹

「Crude adiabatic 描像における 2 フォトン・1 フォノン過程としての共鳴・非共鳴 Raman 散乱」

第 18 回分子科学討論会 2024 京都 京都大学 吉田キャンパス 2024 年 9 月 19 日 2P098

(13) 杉村 潤輝、春田 直毅、竹邊 日和、松原 誠二郎、佐藤 徹

「キュバン異性化反応における Jahn-Teller 効果」

第 18 回分子科学討論会 2024 京都 京都大学 吉田キャンパス 2024 年 9 月 21 日 4D13

(14) 八木 拓巳、大田 航、春田 直毅、佐藤 徹

「Crude adiabatic 描像における共鳴・非共鳴 Raman 散乱理論」

日本化学会第 105 春季年会 (2025) 関西大学 千里山キャンパス 2025 年 3 月 27 日 [C]C302-2vn-01

(15) 杉村 潤輝、春田 直毅、竹邊 日和、松原 誠二郎、佐藤 徹

「キュバン異性化反応における Jahn-Teller 効果」

日本化学会第 105 春季年会 (2025) 関西大学 千里山キャンパス 2025 年 3 月 28 日 [F]2205-3am-03

(16) 塙 稚菜、Lori Gonnet、春田 直毅、佐藤 徹、Michel Baron

「Diels-Alder 反応のメカノケミカル反応性に関する理論的研究」

日本化学会第 105 春季年会 (2025) 関西大学 千里山キャンパス 2025 年 3 月 28 日 [F]2304-3pm-05

(17) 高見 哲理、春田 直毅、加藤 立久、佐藤 徹

「高速な輻射冷却を示す炭素クラスター負イオン C₆⁻ の吸収スペクトルにおける振電構造の再帰属」

日本化学会第 105 春季年会 (2025) 関西大学 千里山キャンパス 2025 年 3 月 29 日 [C]C204-4am-02

4. その他

- (1) 杉村 潤輝、春田 直毅、竹邊 日和、松原 誠二郎、佐藤 徹
「キュバン異性化反応におけるJahn-Teller効果」第20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 2025年2月6日 4
- (2) Zhengnan Hu, Naoki Haruta, Tohru Sato
「Theoretical study on photophysical processes of triphenylamine-benzothiadiazole compounds」
第20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 2025年2月6日 13
- (3) 堀 稚菜、Lori Gonnet、春田 直毅、佐藤 徹、Michel Baron
「Diels-Alder 反応のメカノケミカル反応性に関する理論的研究」
第20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 2025年2月6日 17
- (4) 八木 拓巳、大田 航、春田 直毅、佐藤 徹
「粗断熱描像における共鳴 Raman 散乱強度の定式化」第20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 2025年2月6日 20
- (5) 高見 哲理、春田 直毅、加藤 立久、佐藤 徹
「高速な輻射冷却を示す炭素クラスター負イオンC₆⁻の吸収スペクトルにおける振電構造の再帰属」
第20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 2025年2月6日 30

大田 航

特定助教

1. 今年度の研究の要約

今年度は振電相互作用理論の基礎および応用研究を行った。振電相互作用は分子振動と電子の間の相互作用であり、様々な現象の駆動力となることが知られている。今年度は特に発光分子の理論研究に取り組んだ。

【ラジカル分子における磁気円偏光】

一般に、ラジカル分子は光耐久性が悪く、発光量子効率が低いことが知られている。一方、3回回転対称性を有するTTMラジカルの一つのベンゼン環をピリジル環に置き換えたPyBTMは、比較的高い耐久性および量子収率を示す。本研究では、PyBTMおよび、そのF置換体F2PyBTMを用いることで、溶液中で初めて観測されたラジカル分子の磁気円偏光二色性の電子構造の帰属を行なった[5]。

図1にDFT計算により得られたPyBTMとF2PyBTMの磁気円偏光二色性スペクトルを示す。計算は実験スペクトルの線形を概ね再現した。PyBTMではD8-D9, D10-D9の混合、F2PyBTMではD8-D9, D10-D8の混合により強いMCDが生じることが分かった。PyBTMとF2PyBTMの擬縮退したD8, D9は、TTMの縮退したD7,D8由来である。よって、エネルギー的に接近した擬縮退励起状態が磁場により混合することで、強い磁気円偏光が生じることが分かった。

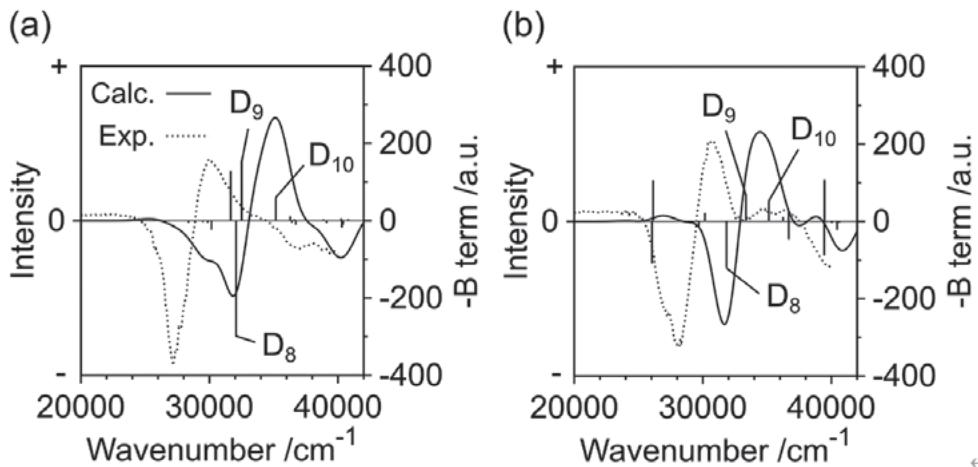


Figure 1 Calculated and experimental MCD spectrum of (a) PyBTM and (b) F2PyBTM [5].

【アザ[8]サーキュレンのHerzberg-Teller効果】

Herzberg-Teller効果とは、状態間の電子遷移が対称禁制であっても、分子振動により対称性が崩れることで僅かに生じる遷移のことをいう。本研究では、アザ[8]サーキュレンで観測されたHerzberg-Teller効果のスペクトル計算と帰属を行なった[4]。その結果、基底状態との振動子強度が大きいS2を中間状態とし、C-C伸縮運動によって誘起されるHerzberg-Teller効果が生じることが分かった。さらに、THF溶媒が配位することで蛍光スペクトルは短波長側にシフトすることを示した。

【白金錯体の発光メカニズム】

円偏光発光を示す白金錯体における発光メカニズムを検討した[3]。その結果、共役系が大きいキラル部位が発光を引き起こし、T1-S0間のエネルギーギャップを大きくすることで、発光量子収率が増大する可能性を示した。

2. 論文

- (1) Yohei Haketa, Kaifu Komatsu, Hiroi Sei, Hiroki Imoba, Wataru Ota, Tohru Sato, Yu Murakami, Hiroki Tanaka, Nobuhiro Yasuda, Norimitsu Tohnai, Hiromitsu Maeda,
Enhanced Solid-State Phosphorescence of Organoplatinum π -Systems by Ion-Pairing Assembly
Chem. Sci. 15(3), 964-973(2024).
- (2) Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato,
Intersystem Crossing as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes:
A Unified View of Nonradiative Transitions in a Molecule
Bull. Chem. Soc. Jpn. 97 (2), uoad020 (2024).
- (3) Yohei Haketa, Maho Kawami, Wataru Ota, Tohru Sato, Hiromitsu Maeda,
Ion-Pairing Assemblies of Anion-Responsive Helical PtII Complexes
Org. Chem. Front. 11 (23), 6651-6659 (2024).
- (4) Aoi Nakagawa, Wataru Ota, Takumi Ehara, Yusuke Matsuo, Kiyoshi Miyata, Ken Onda,
Tohru Sato, Shu Seki, Takayuki Tanaka,
Synthesis of Substituent-Free Dioxadiaz[8]circulene to Investigate Intermolecular Interactions and Photophysical Properties,
Chem. Commun. 60 (99), 14770-14773 (2024).
- (5) Yohei Hattori, Daiya Suzuki, Wataru Ota, Tohru Sato, Rapenne Gwénaël, Yoshitane Imai,
Magnetic Circular Dichroism of Luminescent Triarylmethyl Radicals,
J. Phys. Chem. Lett. 15 (47), 11696-11700 (2024).

3. 学会発表

- (1) Wataru Ota, Tohru Sato,
Radiative and Nonradiative Transitions as Photon and Phonon Cooperative Processes
14th International Conference on Electroluminescence and Optoelectronic Devices, Kyoto,
2024.11.14
- (2) Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato
Nonradiative Transitions as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes
International Conference on Science and Technology of Synthetic Electronic Materials
2024, Dresden, 2024.6.25

4. その他

(1) 大田 航

凝縮系の電子格子相互作用

第5回 理論化学若手セミナー オンライン 2025/3/17

(2) 大田 航

輻射・無輻射遷移の量子化学

第332回分子工学コロキウム 京都 2024/12/16

(3) 大田 航

不均一系触媒表面上での化学吸着反応

表面化学技術者のための実践基礎講習 京都 2024/11/5

Taiji Nakamura
Program-Specific Assistant Professor

1. Summary of the research of the year

Theoretical Study of Imide Formation in Nitrogen Fixation Catalyzed by Molybdenum Complex Bearing PCP-Type Pincer Ligand with Metallocenes

Ammonia serves as an essential feedstock for a wide range of chemical products, including fertilizers and pharmaceuticals. A current industrial method of synthesizing ammonia is the Haber-Bosch process, in which hydrogen gas and atmospheric nitrogen are used as source materials. The method of nitrogen fixation employing heterogeneous catalysts is highly efficient, but places a heavy burden on the environment due to the requirement for harsh reaction conditions in addition to using natural gas to supply hydrogen gas.¹ In contrast, nitrogen fixation by homogeneous catalysts has been widely studied using Fe and Mo complexes whose electronic properties allow nitrogen fixation under mild conditions.² Nishibayashi and coworkers reported an improvement in activity through successful catalytic nitrogen fixation using an Mo complex with a PCP pincer ligand (PCP = 1,3-bis(di-tert-butylphosphinomethyl)benzimidazole-2-ylidene) where 4,350 equivalents of NH₃ were produced based on the Mo complex (Scheme 1).³ The improvement is presumably due to the proton-coupled electron transfer (PCET) reaction in which the complex of electron source and proton source acts as a PCET mediator that provides both an electron and a proton to the Mo complex.^{3,4} In this study, nitrogen fixation reactions catalyzed by a mononuclear molybdenum nitride (Mo≡N) complex bearing a PCP-type pincer ligand, [MoI(N)(PCP)], were investigated by quantum chemical calculations. Reaction energy profiles were constructed by density functional theory (DFT) calculations with the Gaussian 09 package, and electronic structure on transition metals and the orbital energy levels were analyzed by state-average multi-configurational self-consistent field (SA-MCSCF) calculations with GAMESS program.

Specifically, we analyzed the imide formation of [MoI(N)(PCP)] yielding an Mo-imide complex [MoI(NH)(PCP)] in detail since this reaction is proposed as a rate-limiting step in the catalytic cycle. In this study, 2,4,6-collidinium (ColH⁺) was employed as protonation agent, while

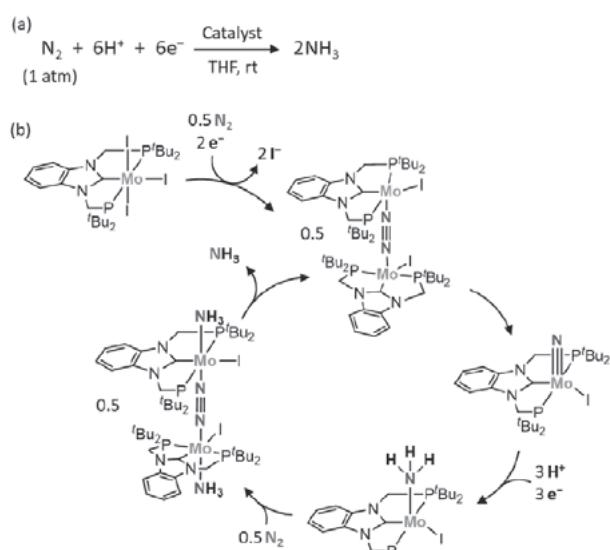


Fig. 1. (a) Catalytic nitrogen fixation reaction with 6 proton sources and 6 electron sources. (b) A possible mechanism of catalytic ammonia formation in the presence of Mo-PCP complex as a catalyst.

metallocenes $\text{Cp}_2\text{M}^{\text{II}}$ and $\text{Cp}^*\text{}_2\text{M}^{\text{II}}$ ($\text{M} = \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$, and Ni) were employed as reductant. Computational screening of the metallocenes $\text{Cp}_2\text{M}^{\text{II}}$ and $\text{Cp}^*\text{}_2\text{M}^{\text{II}}$ has identified that $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}$ and $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{II}}$ as promising reductants for the imide formation of $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$ from a thermodynamic aspect. The calculated free energy change (ΔG_{298}) showed that the imide formation is sufficiently exergonic when using $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}$ and $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{II}}$. In the screening of protonated metallocenes for PCET mediators, $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}]\text{H}^+$ and $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{II}}]\text{H}^+$ were highlighted. The reactivity of $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}$, $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{II}}$, $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}]\text{H}^+$, and $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{II}}]\text{H}^+$ can be attributed to the stability of their +3 oxidation states with electronic configurations of 3d3 for $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{III}}]^+$ and 3d6 for $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{III}}]^+$.

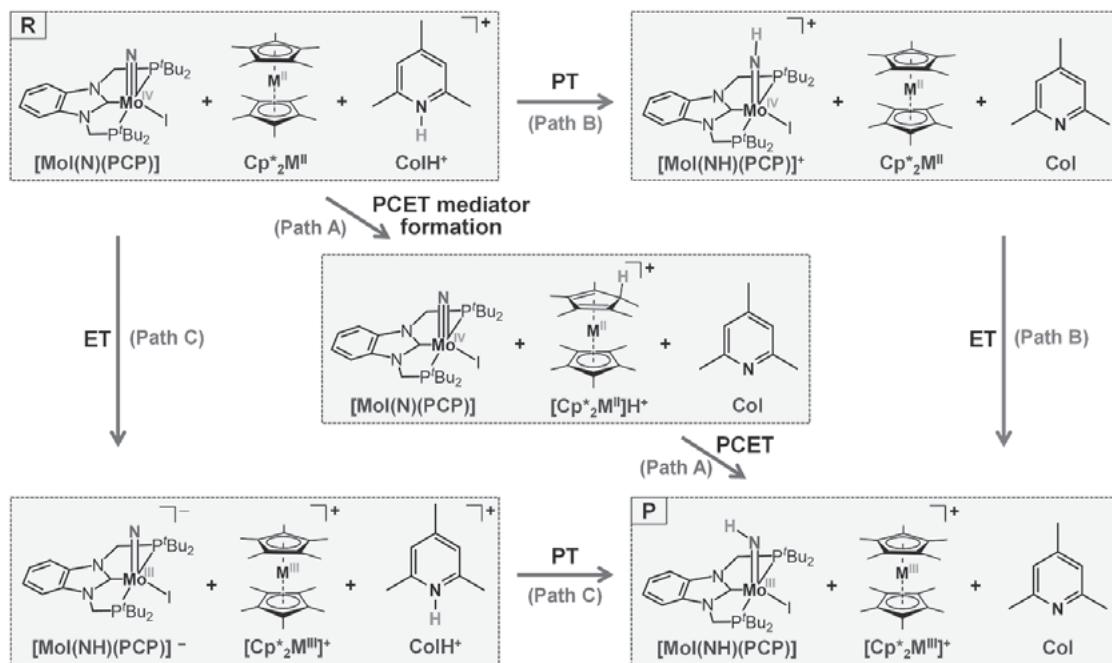


Fig. 2. Imide formation of molybdenum nitride complex $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$ with ColH^+ and $\text{Cp}^*\text{}_2\text{M}^{\text{II}}$. 1a: Protonation of $\text{Cp}^*\text{}_2\text{M}^{\text{II}}$ by ColH^+ . 1b: PCET from $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{M}^{\text{II}}]\text{H}^+$ to $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$. 2a: Protonation of $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$ by ColH^+ . 2b: Reduction of $[\text{MoI}(\text{NH})(\text{PCP})]^+$ by $\text{Cp}^*\text{}_2\text{M}^{\text{II}}$. 3a: Reduction of $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$ by $\text{Cp}^*\text{}_2\text{M}^{\text{II}}$. 3b: Protonation of $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]^-$ by ColH^+ .

Depending on the metal element in the metallocenes, the imide formation of $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$ can proceed by the proton-coupled electron transfer (PCET) or stepwise proton/electron transfer (PT/ET) mechanism. In the PCET mechanism described as Path A, $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}$ or $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{II}}$ is first protonated by ColH^+ , and the resulting protonated metallocene acts as a PCET mediator to imidize $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$. On the other hand, the stepwise PT from ColH^+ and ET from the metallocenes were investigated as Path B (PT → ET) and Path C (ET → PT). Path C is not a dominant pathway for both $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}$ and $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Co}^{\text{II}}$, due to the significant endergonic ET process of $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$. For $\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}$, Path A (PCET) is more favorable since both the formation of $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}]\text{H}^+$ and the subsequent PCET reaction are exergonic. In this pathway, the protonation of $[\text{Cp}^*\text{}_2\text{Cr}^{\text{II}}]$ is the rate-limiting step having an activation free energy of 12.3 kcal mol⁻¹. Considering the thermal equilibrium between $[\text{MoI}(\text{N})(\text{PCP})]$ and $[\text{MoI}(\text{NH})(\text{PCP})]^+$ in the reaction solution, Path B was not considered dominant because the concentration of $[\text{MoI}(\text{NH})(\text{PCP})]^+$ formed by PT is expected to be low. The low concentration of a catalytic amount of

[MoI(N)(PCP)] also reduces the probability of path B, where [MoI(N)(PCP)] is initially protonated by CoH^+ . Also, the concentration of the catalyst [MoI(N)(PCP)] is much lower than that of the reductant [Cp^*2CrII] in the experimental conditions, suggesting that the reductant should have more opportunities to encounter the protonating reagent CoH^+ than the catalyst. For Cp^*2CoII , both Path A (PCET) and Path B (PT \rightarrow ET) are feasible. Path B might be somewhat more

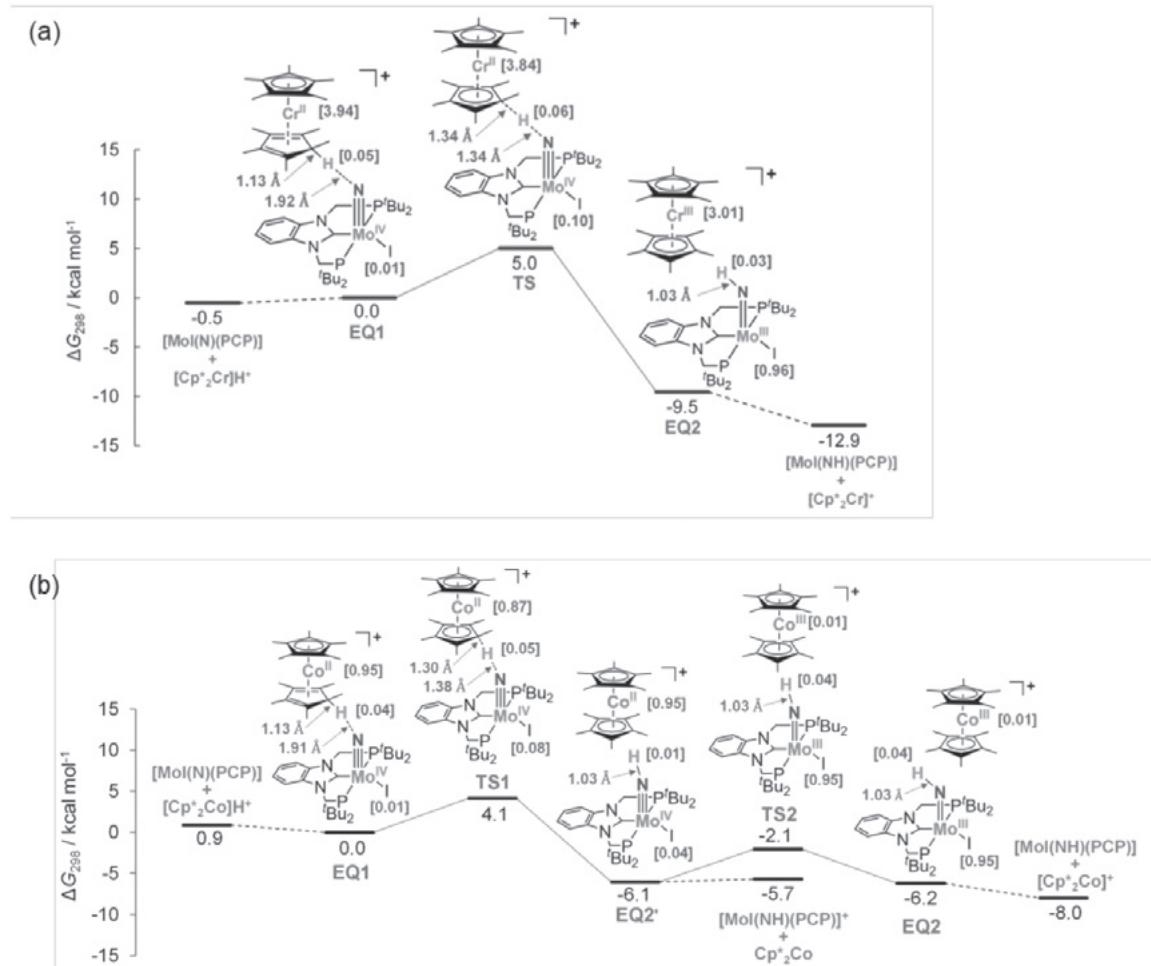


Fig. 3. Gibbs free energy diagrams along the reaction pathway of imide formation of [MoI(N)(PCP)] by (a) $[\text{Cp}^*2\text{CrII}]H^+$ and (b) $[\text{Cp}^*2\text{CoII}]H^+$. Optimized structures of the reactant complex (EQ1), the intermediate complex (EQ2'), the product complex (EQ2), and the transition states (TS, TS1 and TS2) are shown with bond lengths related to reaction coordinates and the Mulliken spin densities on Cp^*2Cr , Cp^*2Co , Mo complex, and transferring H atom in square brackets.

favorable because its activation barrier and endergonicity are relatively lower than Path A. The calculations for Cp^*2CrII and Cp^*2CoII revealed that the relative strength of proton accepting ability between [MoI(N)(PCP)] and reductants would be one of the key factors determining the reaction mechanism (PCET or stepwise PT/ET).

Tracing detailed electronic states along the reaction coordinates revealed that the metal element in metallocenes can alter the catalytic reaction mechanism. Thus, the proper choice of reductants is crucial to enhance the catalytic reactivity. In this study, the screening of metallocenes and protonated metallocenes identified promising candidates for reductants and PCET mediators. The improvement of the Mo-PCP catalytic system for nitrogen fixation will be efficiently achieved by combining theoretical predictions with experimental investigations. We believe that the screening protocol and reaction mechanism analysis employed in this study

can help and accelerate the further development of protonation agents and reductants (PCET mediators).

References

- [1] a) J. Humphreys, R. Lan, S. Tao, *Adv. Energy Sustainability Res.* **2021**, 2, 2000043. b) C. Smith, A. K. Hill, L. Torrente-Murciano, *Energy Environ. Sci.* **2020**, 13, 331.
- [2] a) J. S. Anderson, J. Rittle, J. C. Peters, *Nature* **2013**, 501, 84. b) K. Arashiba, Y. Miyake, Y. Nishibayashi, *Nat. Chem.* **2011**, 3, 120.
- [3] a) Y. Ashida, K. Arashiba, K. Nakajima, Y. Nishibayashi, *Nature* **2019**, 568, 536. b) Y. Ashida, T. Mizushima, K. Arashiba, A. Egi, H. Tanaka, K. Yoshizawa, Y. Nishibayashi, *Nat. Synth.* **2023**, 2, 635.
- [4] a) A. Yamamoto, X. Liu, K. Arashiba, A. Konomi, H. Tanaka, K. Yoshizawa, Y. Nishibayashi, H. Yoshida, *Inorg. Chem.* **2023**, 62, 5348. b) T. Nakamura, Y. Tsuruta, A. Egi, H. Tanaka, Y. Nishibayashi, K. Yoshizawa, *Inorg. Chem.* **2025**, 64, 9124.

2. Original papers

- (1) Akihito Egi, Hiromasa Tanaka, Taiji Nakamura, Kazuya Arashiba, Yoshiaki Nishibayashi, Kazunari Yoshizawa,
“Computational screening of PCP-type pincer ligands for Mo-catalyzed nitrogen fixation”
Bull. Chem. Soc. Jpn. 97, uoae041, (2024).
- (2) Taiji Nakamura, George Schoendorff, Dong-Sheng Yang, and Mark S. Gordon,
“Systematic Investigation of Electronic States and Bond Properties of LnO, LnO+, LnS, and
LnS+ (Ln = La–Lu) by Spin–Orbit Multiconfiguration Perturbation Theory.”
J. Chem. Theory Comput. 21, 267-282 (2025).
- (3) Tamotsu Uchiyama, Taiji Nakamura, Miyabi Hiyama, and Takako Kudo,
“Theoretical study of Si/C mixed analogues of Platonic hydrocarbons”
Comput. Theor. Chem. 1246, 115116 (2025).

3. Presentation at academic conferences

- (1) 中村 泰司、杉野目 駿、亀田 義勝、西林 仁昭、吉澤 一成
「モリブデンオキソ錯体の反応性に関する理論研究」
第18回分子科学討論会 京都大学 2024年9月21日 4P094
- (2) 中村 泰司、杉野目 駿、亀田 義勝、西林 仁昭、吉澤 一成
「モリブデンオキソ錯体の形成およびMOFへの吸着過程に関する理論的研究」
第 57 回酸化反応討論会プログラム 鳥取市・とりぎん文化会館 2024年11月16日 P-31
- (3) 中村 泰司、江木 晃人、田中 宏昌、荒芝 和也、西林 仁昭、吉澤 一成
「窒素固定反応におけるモリブデン錯体触媒の活性向上を志向した理論的配位子設計」
第47回ケモインフォマティクス討論会 金沢商工会議所会館 2024年12月17日 O-06

- (4) 中村 泰司、江木 晃人、田中 宏昌、荒芝 和也、許斐 明日香、西林 仁昭、吉澤 一成
「モリブデン錯体を用いた触媒的窒素固定反応に関する理論的検討」
日本化学会第105春季年会(2025) 関西大学 千里山キャンパス 2025年3月29日 C302-4pm2

Presented by a co-author

- (5) 内山 保、中村 泰司、樋山 みやび、工藤 貴子
「ケイ素・炭素混合多面体化合物の理論的研究」
化学反応経路探索のニューフロンティア2024 京都大学・福井謙一記念研究センター 2024年9月17日（火）P16
- (6) 亀田 義勝、杉野目 駿、中村 泰司、田中 宏昌、吉澤 一成、西林 仁昭
「MOF担持モリブデンオキソ錯体による再利用可能な窒素固定触媒の開発」
第74回錯体化学討論会 岐阜大学・長良川国際会議場 2024/09/20 3D-11
- (7) 鶴田 裕介、中村 泰司、山田 基貴、有川 康弘、塩田 淑仁
「密度汎関数理論計算に基づく二核ルテニウム錯体による亜硫酸還元の反応機構解析」
第18回分子科学討論会 京都大学 2024年9月21日 4P083
- (8) 鶴田 裕介、中村 泰司、山田 基貴、有川 康弘、塩田 淑仁
「二核ルテニウム錯体による亜硫酸還元反応に対する量子化学計算を用いた反応機構解析」
第 57 回酸化反応討論会プログラム 鳥取市・とりぎん文化会館 2024年11月16日 P-32

4. Others

- (1) 中村 泰司、田中 宏昌、吉澤 一成,
“配位子構造のスクリーニングによる高活性な窒素固定錯体触媒の開発を目指した理論研究”
Organometallic News, 2-7 (2025)

2. 研究員

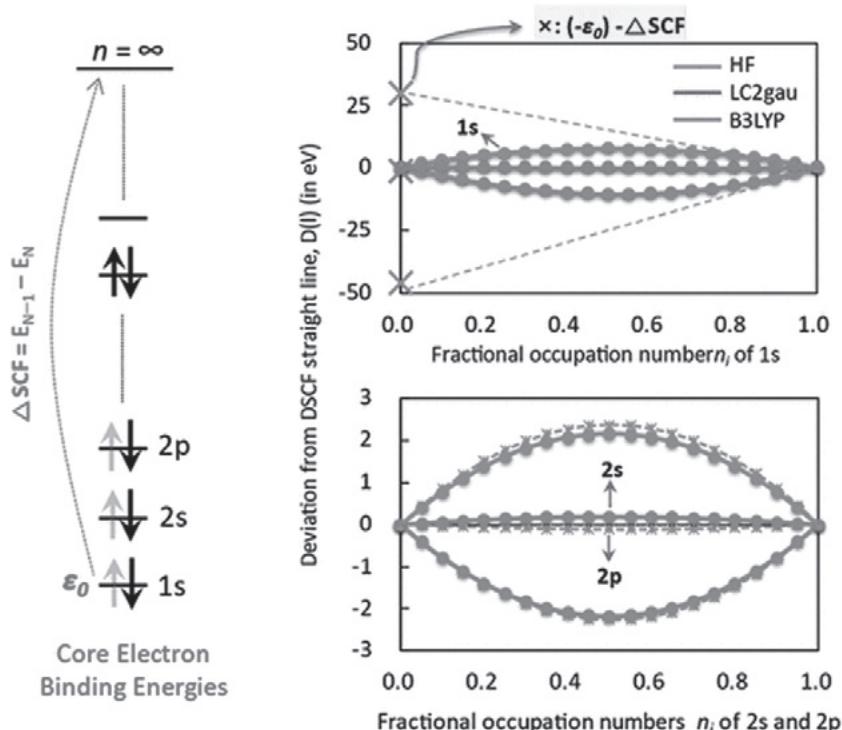
Kimihiko Hirao

Research Director

1. Summary of the research of the year

Theoretical Study of 1s, 2s, and 2p Core Electron Binding Energies of Third-Period Elements

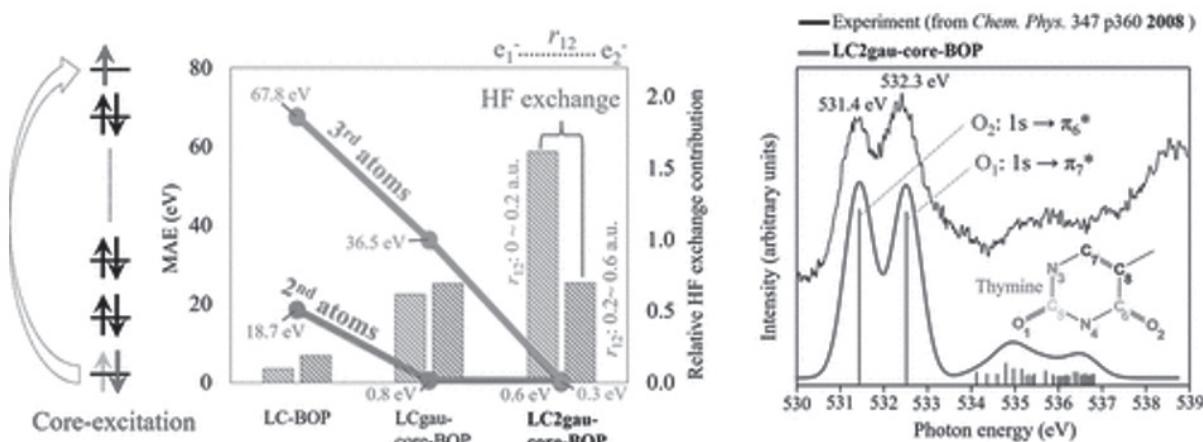
The binding energies (BEs) of the 1s, 2s, and 2p core electrons of third-period elements were calculated using the Δ SCF method, Koopmans' theorem, and Slater's transition state theory (STS), within the frameworks of Hartree–Fock (HF) and Kohn–Sham (KS) theory, employing B3LYP and LC2gau-core-BOP (LC2gau) functionals. The total self-consistent field (SCF) energy difference (Δ SCF) between neutral and cationic states was obtained by solving the SCF equations with fractional occupation numbers. Energy functionals were plotted as a function of continuously varying occupation numbers, and the validity of Koopmans' theorem and STS theory was assessed by analyzing the derivative of the energy functional with respect to occupation number. The HF Δ SCF method reproduces the experimental core electron binding energies (CEBEs) of third-period elements with reasonable accuracy. STS theory within HF closely matches the Δ SCF values, though the errors relative to experimental results are nearly identical to those of the Δ SCF approach. In contrast, the B3LYP Δ SCF method slightly underestimates the experimental BEs of 1s and 2p electrons and significantly underestimates the 2s BEs, primarily due to self-interaction errors (SIEs) inherent in the functional. The LC2gau



Δ SCF method effectively eliminates the SIEs for 2s electrons and provides BE values with improved accuracy. Koopmans' theorem holds well in the LC2gau framework, reproducing Δ SCF results with reasonable accuracy. Interestingly, the error between Δ SCF and experimental values is approximately equal in magnitude—but opposite in sign—to the error between Koopmans' theorem and Δ SCF, particularly for 1s and 2s BEs. As a result of this error cancellation, Koopmans' approach with LC2gau predicts CEBEs closer to the experimental values, achieving a high level of accuracy.

Development of the LC2gau-core DFT functional

In the previous work, LCgau-core-BOP, which includes the short-range interelectronic Gaussian attenuating Hartree–Fock (HF) exchange to the long-range HF exchange, showed high accuracy core-excitation energies from 1s orbitals of the second-row atoms ($1s \rightarrow \pi^*$, $1s \rightarrow \sigma^*$, $1s \rightarrow n^*$, and $1s \rightarrow$ Rydberg), but underestimates the core-excitation energies from 1s orbitals of the third-row atoms. To improve this, we added one more Gaussian attenuating HF exchange to LCgau-core-BOP. We named it LC2gau-core-BOP, which achieves a mean absolute error (MAE) of 0.6 and 0.3 eV for core excitation energies of the second- and third-row atoms of the tested small molecules, respectively. We found that the inclusion of the short-range interelectronic HF exchange at a distance ranging from 0.2 to 0.6 a.u. contributes to the increase of performances on 1s orbital energy calculations of the second-row atoms, while the inclusion of more short-range interelectronic HF exchange at a distance ranging from 0 to 0.2 a.u. does to the increase of performance on 1s orbital energy calculations of the third-row atoms. It is notable that all of these improvements were accomplished using flexible Gaussian attenuating HF exchange inclusion. LC2gau-core-BOP shows deviations of less than 0.8 eV from experimental values for all of the core-excitation energies of the tested medium-size molecules consisting of thymine, oxazole, glycine, and dibenzothiophene sulfone. Moreover, by optimizing one parameter of the OP correlation functional, LC2gau-core-BOP provides atomization energies over the G3 test set with an accuracy comparable to that of B3LYP.



Original paper

1. Validation of Long-Range-Corrected LC2gau Functional for Koopmans' Prediction of Core and Valence Ionization Energies with Diverse Data, Kimihiko Hirao, Dae-Hwan Ahn, Jong-Won Song, Bun Chan, Takahito Nakajima, *J. Phys. Chem. A* **2025** 129
2. Theoretical study of 1s, 2s, and 2p core electron binding energies of third-period elements calculated by the Δ SCF method, Koopmans' theorem, and Slater's transition state theory within the framework of Hartree-Fock and Kohn-Sham theory, Kimihiko Hirao, Dae-Hwan Ahn, Jong-Won Song, Bun Chan, Takahito Nakajima, *J. Phys. Chem. A* **2025** 129
3. Exploiting the Correlation between the 1s, 2s, and 2p Energies for the Prediction of Core-Level Binding Energies of Si P, S, and Cl species, Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan *J. Phys. Chem. A "Trygve Helgaker Festschrift"* **2024** 128 (33), 6879-6897.
4. Long-range corrected density functional theory including a two-Gaussian Hartree-Fock operator for high accuracy core-excitation energy calculations of both the 2nd- and 3rd-row atoms (LC2gau-core-BOP) Ahn, Dae-Hwan; Nakajima, Takahito; Hirao, Kimihiko; Song, Jong-Won, Journal of Chemical Theory and Computation, **2024** 20 (16), 7113-7125.

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、典型ならびに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Sn錯体は従来あまり研究されておらず、かつ有機金属錯体として興味深い挙動を示す可能性があるので、2024年度からはスズカルボニル基 ($O=Sn<$) を含む有機分子の合成とその電子状態解析に着手している。

A Monomeric Diarylstannanone with a Sn=O Double Bond: Synthesis and Characterization

A series of diarylstannylenes, $(Rind)2Sn$ [$Rind = 1,1,7,7$ -tetra-R1-3,3,5,5-tetra- R2-s-hydridacen-4-yl: EMind (a: R1=Et, R2=Me), Eind (b: R1=R2=Et), and MPind (c: R1=Me, R2 = nPr)], has been obtained as purple to blue crystals by the reaction of $SnX_2 \cdot$ dioxane ($X=Br$ or Cl) with two equiv. of $(Rind)Li$. The less bulky EMind-based stannylene, $(EMind)2Sn$, reacted with N_2O gas to afford a 1,3,2,4-dioxadistannetane, $(EMind)4Sn_2(\mu-O)_2$, through the dimerization of a stannanone, $(EMind)2Sn=O$. In contrast, a similar oxidation reaction using the bulkier MPind-based stannylene, $(MPind)2Sn$, produced a hitherto unknown acid-base free monomeric diarylstannanone, $(MPind)2Sn=O$, with an authentic $Sn=O$ double bond. The stannanone was highly sensitive to air and moisture but remained thermally stable at room temperature. Isolating as a pure single crystalline material proved challenging due to its highly-reactive nature; however, its structural characteristics and bonding properties were discussed based on both experimental findings and computational results. The $Sn=O$ double bond in the stannanone exhibits a weaker and more polarized character compared to the $Ge=O$ double bond in the diaryl germanone, $(Eind)2Ge=O$.

現在、上記のような論文をまとめる過程にあり、2025年度には全体を報告する予定である。

2. 総説

(1) 田中一義

「基礎講座 化学反応はなぜ起こる?」現代化学, No. 4, 28-33 (2024)

(2) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十一回 イノベーション・ボックス税制とは」化学 79, No. 1, 27 (2024)

(3) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十二回 Schrödinger-Zimmer」化学 79, No. 2, 25 (2024)

(4) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十三回 現象のモデル化」化学 79, No. 3, 53 (2024)

(5) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十四回 思想家Boltzmann」化学 79, No. 4, 39 (2024)

(6) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十五回 音楽と情報エントロピー」化学 79, No. 5, 23 (2024)

(7) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十六回 複雑性とフラクタル次元」化学 79, No. 6, 23 (2024)

(8) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十七回 レジリエンス確保?」化学 79, No. 7, 30 (2024)

(9) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十八回 Maxwellの考え方」化学 79, No. 8, 25 (2024)

(10) 田中一義

「化学つれづれ草 第八十九回 鉄精錬の歴史」化学 79, No. 9, 34 (2024)

(11) 田中一義

「化学つれづれ草 第九十回 物理学者Kohnさん」化学 79, No. 10, 55 (2024)

(12) 田中一義

「化学つれづれ草 第九十一回 霧のカレリアと天然C60」化学 79, No. 11, 54 (2024)

(13) 田中一義

「化学つれづれ草 第九十二回 C60とSchlegel図」化学 79, No. 12, 57 (2024)

3. その他（アウトリーチ活動）

京都大学総合博物館のアーキビスト教員とともに、福井謙一先生のアーカイブズ収集整理を行いながら、そのオンライン公開を目指す作業を行っている。

Kazuo Takatsuka
FIFC Senior Research Fellow

1. Summary of the research of the year

Quantum mechanics, the Schrödinger equation in particular, is the single most fundamental theory for theoretical chemistry. However, even one hundred years after its birth, understanding and interpretation about quantum mechanics remain unsettled, with no tight consensus to this day. The controversy often centers around the mysterious nature of the Schrödinger (wave) function. I have therefore tried to reformulate the Schrödinger dynamics in three stages [1] (the number referring to the papers cited below in the part of original papers); (1) Derivation of the real-valued Schrödinger equation from scratch in a completely universal manner, (2) Deriving the real-valued path integrals having an integral measure in contrast to the Feynman kernel, and (3) Formulating a quantum stochastic path dynamics in the Ito stochastic differential equation. The relevant new properties such as “detanglement” and interpretation about quantum mechanics have followed.

This year is the 55th anniversary of the one of the most influential work by Whal on his monumental molecular orbital studies.[2] We have updated one-electron view of chemical bonds in terms of our proposed Energy Natural Orbitals (ENO) and its extension ENOX, which extract orbital picture from correlated and/or excited state electronic wavefunctions, like the Configuration Interaction wavefunctions. ENOX gives an electronic orbital representation of the potential energy surfaces (PES) in such a way that the sum of the ENOX orbital energies is equivalent to the PES energy.

We have made substantial progress in the theoretical treatment of nonadiabatic electron wavepacket dynamics,[3,4,5] by studying a new state of small carbon cluster in excited states, which follows the electronic states of diamond, graphite and graphene and fullerene and carbon nanotubes. Many interesting characteristics have been identified theoretically and computationally.

Each progress will be summarized below in little greater detail.

2. On the foundation of quantum mechanics

We have analyzed the Schrödinger dynamics and the Schrödinger function (or the so-called wavefunction), from the viewpoint of conflict and compatibility between a distribution function and dynamical paths. The following four analyses have been made. (1) The Schrödinger equation is reconstructed from scratch in the real field only, without referring to Newtonian mechanics nor optics. Only the very simple conditions such as the space-time translational symmetry and the conservation of flux and energy are imposed on the factorization of the density distribution in configuration space. The real-valued Schrödinger function attained is naturally interpreted as a coherent distribution function of a two-dimensional vector. On returning to the original complex-valued Schrödinger equation, it is readily understood why

and how the imaginary number should arise in the very fundamental equation in the quantum world, and we directly confirmed that the Schrödinger equation is physically consistent.

(2) The Langevin dynamics gives a path of a Brownian particle in contrast to the Gaussian distribution function subjected to the diffusion equation. Likewise in quantum dynamics, we formulate a single-event path dynamics, contrasting with the Schrödinger distribution function. The path thus attained is referred to as one-world path, which represents, for instance, a path of a singly launched electron in the double-slit experiment that leaves a spot at the measurement board, while many of accumulated spots give rise to the fringe pattern. To do so, we start from the Feynman-Kac formula to draw a relation between a stochastic dynamics and the parabolic differential equations, to one of which the Schrödinger equation is transformed. We thus have extracted the basic stochastic dynamics for individual single-event (one-world) dynamics.

(3) To highlight the roles of the flux and energy conservation as one of the central pillars for the Schrödinger dynamics, we next have studied a path dynamics in an infinite dimensional parameter space. We find that the quantum Maupertuis-Hamilton principle reveals manifolds of symplectic structure in the parameter space on which the energy and flux to be conserved. The classical-trajectory-like paths are driven by the coupled ordinary differential equations in a parameter space, which is actually equivalent to propagating the Schrödinger function in space-time.

(4) A detailed physical analysis over the space-time propagation of the Schrödinger function is made from the viewpoint of the ultimate roles of classical paths. It is well known that the standard semiclassical theory can be very well represented in terms of classical trajectories. Yet, we show that such trajectory components are demanded to branch into many coherent pieces beyond the semiclassical regime and dissolve into the deep dynamics of genuine full quantum dynamics. We tracked how the inherent quantum natures like the Huygens-principle-like properties are built in.

3. On the foundation of quantum mechanics

To elucidate the molecular electronic energy variation and to simultaneously track the topography of the potential energy surface (PES) such as the potential basin, transition states, and potential barriers in the study of chemical bond formation and relevant chemical reactions, we have devised ENOX as an extension of the ENO (Energy Natural Orbital) so that the total sum of the ENOX orbital energies exactly matches the PES energy, that is the sum of the electronic energy and nuclear-nuclear repulsion energy. ENOX gives a one-electron (orbital) energy representation, thereby enabling to track the potential energy surface with the ENOX orbital energies alone. The ENOX extracts an orbital view of energy structure from the highly accurate wavefunctions in ground and excited states, electronic states delocalized across multiple potential energy surfaces (breaking the Born-Oppenheimer approximation), time-dependent wavepacket states, and so on. We have applied ENOX to the ground state homopolar diatomic molecules in the second row (Li₂ to F₂) to atomize their chemical bond

formations and thereby have updated the monumental work of Wahl from the molecular orbital approximation to the correlated electronic wavefunction realm.

4. A new state of small carbon clusters in excited states

We have reported a new class of electronic excited states in small carbon clusters, which are found in the manifolds composed of many highly quasi-degenerate electronic excited states. In those manifolds, virtually any one of highly excited adiabatic states undergo frequent, intense, and continual multidimensional nonadiabatic transitions from many-states to many-states simultaneously. Therefore, the notion of single (isolated) adiabatic state and the potential energy surface associated with it loses its physical sense. Consequently, only dynamical nonadiabatic electron wavepacket makes sense as a physical substance. We refer to these excited states as the complex electronic excited states. These states were first found in small boron clusters. The following peculiar characteristics have been identified:

- 1) The electron wavepacket propagates in time like a diffusion in the Hilbert space with the huge state fluctuation.
- 2) Quantum chaos has been identified in the quantum electron dynamics for the first time.
- 3) Despite the huge electronic fluctuation, they are supported by rather strong chemical bonds.
- 4) The excess nuclear kinetic energy is dissipated to the electronic sea towards “equilibration” due to a “friction” induced by the continual nonadiabatic couplings.
- 5) Despite the high electronic state energy, the clusters bear long-life times, due to the phenomena of Intramolecular Electronic-energy Redistribution (INER) [Takatsuka and Arasaki, *J. Chem. Phys.*, 2023, 159, 074110], and so on.

Here in this work, we have shown that the above characteristics are certainly “generic” as molecular properties in the excited states of the carbon clusters in depth. In addition to the previously established analyses, we here perform numerical analyses of the geometrical decomposition (collective coordinate analysis) of the nonadiabatic interactions [Takatsuka, *J. Chem. Phys.*, 2024, 160, 044112] to quantify the concept of nonadiabatic burst and identify the origin of nonadiabatic chaos.

Sonification of the dynamics of the energy natural orbitals (ENO) with respect to the present carbon cluster has been presented.

5. Original papers

- [1] Analysis of quantum mechanics with real-valued Schrödinger equation, single-event quantum-path dynamics, Maupertuis path in parameter space, and branching paths beyond semiclassics

Kazuo Takatsuka

arXiv:2501.08606 [quant-ph] <https://doi.org/10.48550/arXiv.2501.08606>

- [2] Orbital perspective of the nature of chemical bonds and potential energy surfaces: 55 years

after Wahl's molecular orbital representation of homopolar diatomic molecules
 PCCP, accepted for publication
<https://doi.org/10.1039/D5CP01870F>

- [3] Geometrical decomposition of nonadiabatic interactions to collective coordinates in many-dimensional and many-state mixed fast–slow dynamics

Kazuo Takatsuka
 J. Chem. Phys. 160, 044112 (2024) (7 pages)
<https://doi.org/10.1063/5.0186816>

- [4] Sonification of molecular electronic energy density and its dynamics

Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka
 RSC Advances 14, 9099-9109 (open)
 DOI: 10.1039/d4ra00999a
 (Sound data in <https://doi.org/10.1039/d4ra00999a>)

- [5] Mechanism of quantum chaos in molecular nonadiabatic electron dynamics

Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki
 J. Chem. Phys. 161, 061101 (2024) (6 pages)
 (doi: 10.1063/5.0219345)

6. Presentation at academic conferences

- (1) 高塚和夫・新崎康樹 (Kazuo Takatsuka, Yasuki Arasaki)

“電子エネルギーの実体論とその表現”
 (“Sonification of molecular electronic states and electron dynamics”)
 第26回理論化学討論会 2024/5/21-23 筑波大学

- (2) 高塚和夫・新崎康樹 (Kazuo Takatsuka, Yasuki Arasaki)

“多次元・多状態間非断熱過程の集団座標分解Nonadiabatic chaos と Nonadiabatic burst”
 (“Collective coordinate analysis of nonadiabatic interactions: Applications to Nonadiabatic chaos and Nonadiabatic burst”)
 分子科学討論会 2024年9月18-21, 京都大学

Tatsuhisa kato

part-time researcher

1. Summary of the research of the year

An Icosahedral 55-Atom Iron Hydride Cluster Protected by tri-tert-Butylphosphines

Nanoclusters are nanometer-sized molecular compounds characterized by significant metal–metal bonding and low average oxidation states, and they exhibit unique properties distinct from those of small metal complexes or nanoparticles. Unlike noble metals stable in metallic forms, the synthesis of nanometer-sized iron clusters has been precluded by the relatively weak iron–iron bonds and the high reactivity of low oxidation state iron, despite the extensive history of molecular iron compounds. Here, we report the synthesis and characterization of a cationic 55-atom iron cluster $[Fe_{55}]$ with a 1.2 nm icosahedral core. (Figure 1.) Its 12 vertices are occupied by tri-tert -butylphosphines, while multiple hydrides cover the surface. This core can be viewed as a substructure of the face-centered cubic (fcc), in contrast to the bodycentered cubic (bcc) for the stable bulk phase. This work reveals a stable structure and fundamental properties of a nanometer-sized iron cluster, which have remained elusive for decades, and the simple synthetic protocol provides a route to explore molecular nanochemistry.

Further analysis was performed using electron spin resonance (ESR) spectroscopy on $[Fe_{55}][Fe_6]$ in toluene at 300 K, revealing a relatively narrow and sharp line at $g_{eff} \approx 2$. At 4 K, a sharp $S = 1/2$ signal appeared at $g_{eff} \approx 2.08$, which may be assignable to $[Fe_6]$ anion. Additionally, a broad spectrum with significantly increased line width appeared (Figure 2). Upon warming the frozen solution to 160 K, the intensity of the broad spectrum increased, accompanied by a shift in the apparent resonance field and a decrease in line width. Similar spectra were observed in ESR measurements of powdered samples. These results deviate from Curie's law and sharply contrast with conventional paramagnetic Fe complexes, indicating a property unique to our compound.

2. Original papers

- (1) T. Higaki, K. Tanaka, H. Izu, S. Oishi, K. Kawamoto, M. Tada, W. Sameera, R. Takahata, T. Teranishi, S. Kikkawa, S. Yamazoe, T. Shiga, M. Nihei, T. Kato, R. Cramer, Z. Zhang, K. Meyer, and Y. Ohki, “An Icosahedral 55-Atom Iron Hydride Cluster Protected by tri-tert-Butylphosphines”, *J. Am. Chem. Soc.*, 147, pp. 3215-3222 (2025). (doi.org/10.1021/jacs.4c12759).

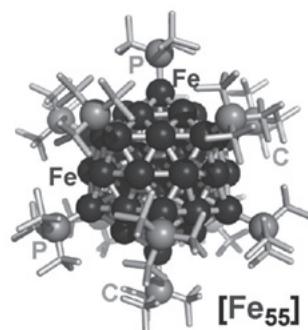


Fig. 1. Crystal structure of $[Fe_{55}][Fe_6]$ depicted in a ball-and-stick model. Hydrogen atoms and the crystal solvent (toluene) are omitted for clarity. Color legend: dark blue, Fe; orange, P; teal, Si; light blue, N; gray, C.

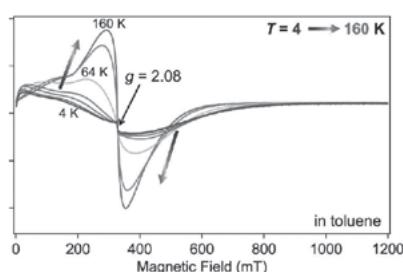


Fig. 2. Variable-temperature ESR spectra of $[Fe_{55}][Fe_6]$ in toluene from 4 to 160 K.

Masaki Sasai

FIFC Research Fellow

1. Summary of the research of the year

[1] Thermodynamic mechanism of chromatin domain formation

Chromatin domains, sub-mega base assemblies of chromatin in cells, serve as both structural and functional units of the genome. A key question is the mechanism of how these domains are formed within cells. Recent insights from microscopy measurements have shed light on this issue, showing that the core of these domains consists of condensed clusters of nucleosomes, while the outer region consists of functionally active open chromatin (Miron et al., Sci Adv 2020; Minami et al., Sci Adv 2025). Based on this understanding, we developed a thermodynamic theory of chromatin domain formation that predicts a universal relation between the domain size and the fraction of open chromatin regions. This relation has been shown to fit the observed domain size distribution across a variety of organisms, including yeast, Arabidopsis, tomato, fruit fly, mouse, and humans (Fig. 1). These findings support the loop-capture model (Uhlmann, Mol Cell 2025) of how cohesin stabilizes domain boundaries, challenging the widely accepted loop-extrusion hypothesis of domain formation (Mirny et al., Curr Opin Cell Biol 2019).

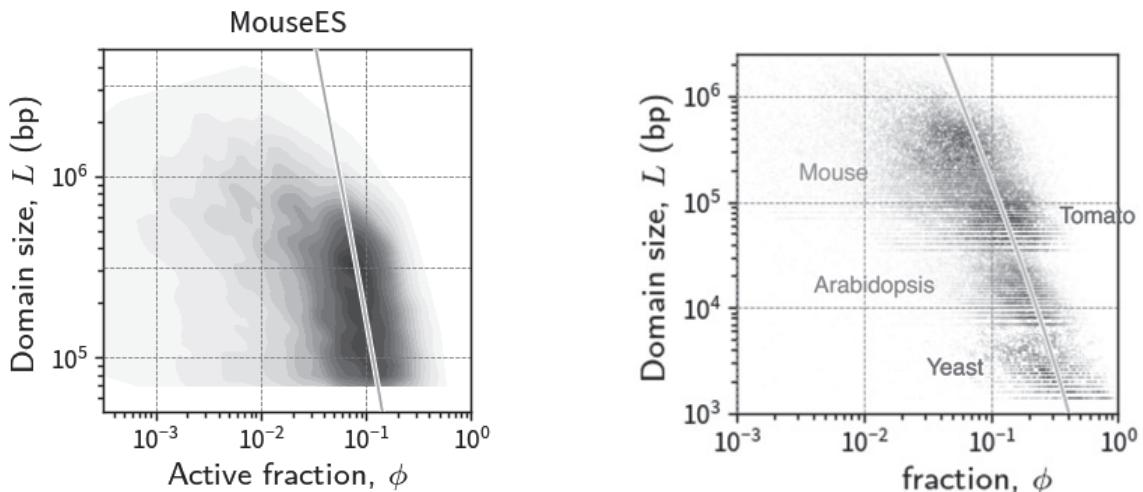


Fig. 1: A universal relation explaining the distribution of the size of chromatin domains across various organisms. The distribution of the domain size L is plotted as a function of the fraction ϕ of open chromatin regions. L was detected from the Hi-C data and ϕ was detected from the Chip-seq data of acetylated H4 tails both reported in databases. The orange line is a universal relation derived from the thermodynamic theory of domain formation. (Left) The distribution in mouse embryonic stem (ES) cells. (Right) Distributions of various organisms superposed.

[2] Bayesian-based analysis of the unexpected movement of linker histone.

Linker histone H1 has traditionally been considered a stable molecule that binds to a specific location on nucleosomes, contributing to the maintenance of a condensed chromatin structure by restricting its spatial configuration. However, advances in live-cell imaging techniques developed by Maeshima's laboratory (National Institute of Genetics, Mishima) have enabled researchers to trace the dynamic trajectories of individual H1 molecules in living cells. These measurements revealed that H1 exhibits unexpected rapid movements, challenging the conventional

understanding of its role (Shimazoe et al., bioRxiv 2025). In our study, we analyzed these live-cell trajectories of H1 using a Bayesian-based method, demonstrating the significant impact of H1's rapid motions (Fig. 2). This analysis enhances our understanding of the role of dynamic molecular movements within cells.

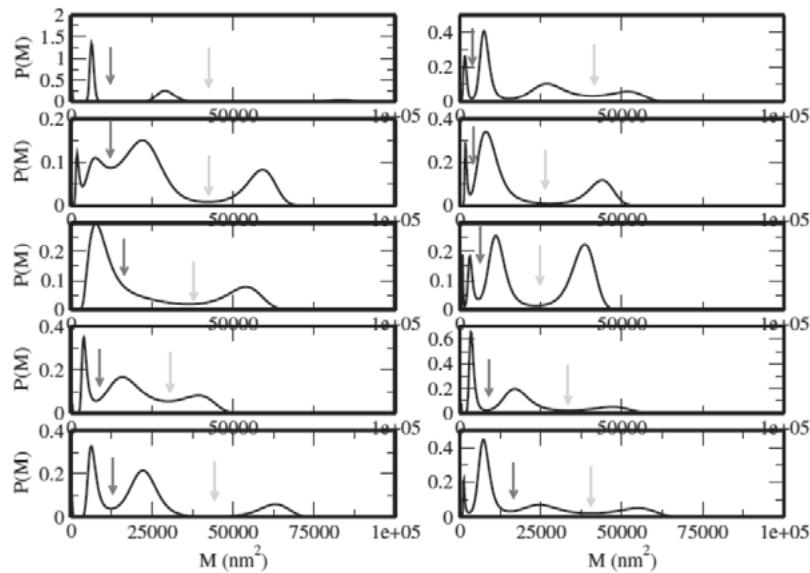


Fig. 2: The distribution $P(M)$ of mean-square distance M observed during 0.5 sec in the single-molecular trajectories of H1 movement in living human cells. Each panel represents the distribution obtained from each single cell, which was analyzed with the Bayesian method. Distributions from 10 cells are compared. Arrows indicate the distribution valleys.

[3] Genome architecture formed through multiple cell cycles

We developed a model of human genome structure through cell cycles by extending the previously developed whole-genome model (Fujishiro and Sasai, PNAS 2022) to cover the mitotic phase. With this extension, we focused on the role of memory persisting through cell cycle in genome organization. The simulation progresses from mitosis to interphase and the subsequent mitosis, leading to successive cell cycles. During mitosis, our model describes microtubule dynamics, showing how forces orchestrate the assembly of chromosomes into a rosette ring structure at metaphase (Fig. 3). The model explains how the positioning of chromosomes depends on their size in metaphase. The memory of the metaphase configuration persists through mitosis and into interphase in dimensions perpendicular to the cell division axis, effectively guiding the distribution of chromosome territories over multiple cell cycles. At the onset of each G1 phase, phase separation of active and inactive chromatin domains occurs, leading to A/B compartmentalization. Our cycling simulations show that the compartments are unaffected by structural memory from previous cycles and are consistently established in each cell cycle.

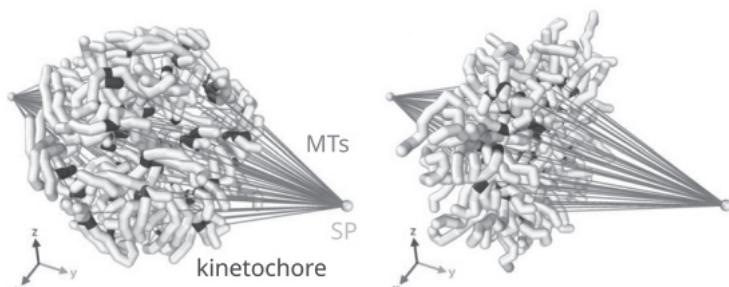


Fig. 3: Snapshots of the entire cell-cycle simulation of human genome structure. Through the dynamic movements of chromosomes in prometaphase (left), chromosomes assemble to show the rosette-ring arrangement at metaphase (right).

[4] Nonequilibrium currents and landscapes of gene network dynamics

In gene regulation, the timescales for changes in chromatin states can differ from those for changes in the concentration of product protein, raising questions about how to understand their coupled dynamics. We examined the effects of these different timescales on eukaryotic gene regulation using a stochastic model that describes the landscapes and probability currents of nonequilibrium fluctuations. This model shows that slow, nonadiabatic transitions of chromatin states significantly impact gene-regulation dynamics. The simulated circular flow of the probability currents indicates a maximum entropy production when the rates of chromatin-state transitions are low in the intensely nonadiabatic regime. In the mildly nonadiabatic regime, this circular flow fosters hysteresis, suggesting that changes in chromatin states precede changes in transcription activity. Furthermore, calculations using a model of a circuit involving three core genes in mouse embryonic stem (mES) cells illustrate how the timescale difference can tune fluctuations in individual genes (Fig. 4).

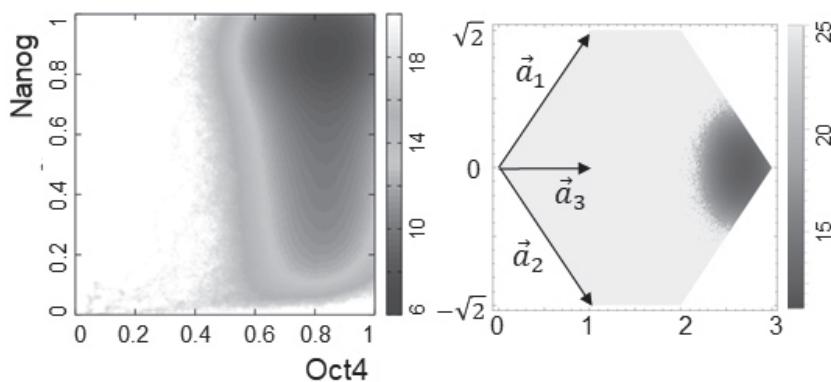


Fig. 4: The landscape of the circuit of the three core genes, Oct4, Sox2 and Nanog, of mES cells, calculated with the heterogeneous adiabaticity parameters. (Left) The two-dimensional landscape showing the distribution of concentrations of Oct4 and Nanog. (Right) The three-dimensional landscape projected on the two-dimensional plane.

2. Original papers

- (1) Shiori Iida, Satoru Ide, Sachiko Tamura, Masaki Sasai, Tomomi Tani, Tatsuhiko Goto, Michael Shribak, and Kazuhiro Maeshima,
“Orientation-independent-DIC imaging reveals that a transient rise in depletion attraction contributes to mitotic chromosome condensation.”
Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 121, e2403153121 (2024).
- (2) Shin Fujishiro and Masaki Sasai, “Three-dimensional memory of nuclear organization through cell cycles.” J. Chem. Phys. 162, 065103 (2025).
- (3) Masa A Shimazoe, Charles Phillips, Jan Huertas, Satoru Ide, Sachiko Tamura, Stephen Farr, SS Ashwin, Masaki Sasai, Rosana Collepardo-Guevara, and Kazuhiro Maeshima,
“Linker histone H1 functions as a liquid-like glue to organize chromatin in living human cells.”
bioRxiv, <https://doi.org/10.1101/2025.03.05.641622> (2025).
- (4) Masaki Sasai, Bhaswati Bhattacharyya, Shin Fujishiro, and Yoshiaki Horiike
“Landscapes and nonequilibrium fluctuations of eukaryotic gene regulation.”
arXiv:2502.10067 (2025).

3. Review papers and books

- (1) Shin Fujishiro and Masaki Sasai, “Three-dimensional simulation of whole-genome structuring through the transition from anaphase to interphase.” Computational Methods for 3D Genome Analysis (Springer Nature) 293-308 (2024).
- (2) Shin Fujishiro, Masaki Sasai, and Kazuhiro Maeshima, “Chromatin domains in the cell: phase separation and condensation.” Current Opinion in Structural Biology 91, 103006 (2025).

4. Presentation at academic conferences

- (1) Shin Fujishiro and Masaki Sasai,
“Formation of chromatin domains without loop extrusion: the chromatin capture model of interphase cohesin.”
The 21st Congress of the International Union for Pure and Applied Biophysics (IUPAB), Kyoto, June 24-28, 2024 (Invited).
- (2) Masaki Sasai,
“Non-adiabatic effects of chromatin state transitions on landscape and probability current in gene switching.”
Joint Annual Meeting of the Korean Society for Mathematical Biology and the Society for Mathematical Biology 2024, Seoul, June30 – July 5, 2024 (Invited).

吉澤 一成

研究員

1. 今年度の研究の要約

複雑系の応用量子化学:

(1) Mo触媒窒素固定のためのピンサー配位子の計算スクリーニング

窒素固定、すなわち窒素原子 (N_2) をアンモニア (NH_3) に変換する反応は、生物学的にも工業的にも不可欠なものである。工業的な窒素固定プロセスであるハーバー・ボッシュ法は、高温 (350 ~ 550°C) ・ 高圧 (150~350気圧) という非常に過酷な反応条件を必要とし、不均一系Fe触媒を用いる。1 工業プロセスとは対照的に、生物学的プロセスでは、室温・大気圧といった温和な反応条件で、酵素ニトロゲナーゼが用いられる。FeMoニトロゲナーゼの活性部位は、FeMo補因子として知られる遷移金属クラスター $Fe_{10}MoS_{10}C$ です。2-5 温和な条件下での人工窒素固定の実現は、最も困難な課題の一つと考えられてる。最近、西林らは、この成果を報告しています。図1に示すピリジン系ピンサー配位子 [$MoI_3(PNP)$] 1 (PNP = 2,6-ビス(ジ-tert-ブチルホスフィノメチル)ピリジン) を有するモリブデン(III)-三ヨウ化物錯体を合成した。窒素固定反応のためのモリブデン系分子触媒の設計を目的として、N-ヘテロ環カルベン系PCP型ピンサー配位子の計算スクリーニングが行われている。

これまでに、元のPCP配位子に電子供与性/吸引性置換基を導入することが、触媒活性を制御する有望な方法であることを理論的および実験的に実証している [Nat. Synth. 2023, 2, 635]。本研究では、提案する触媒機構の律速段階に関与する38個の置換PCP配位子 [$MoI(NHx)(R-PCP)$] ($x = 1\text{--}3$)を有する窒素Mo中間体の電子的およびエネルギー的特性について調べた。電子吸引性置換基はR-PCPの π 受容能を高め、対応する Mo窒化物($Mo \equiv N$)錯体のLUMOを効果的に安定化させる。これは、プロトン結合電子移動(PCET)による窒化物N原子の変換に有利になると期待される。PCP配位子への強力な電子吸引性置換基の導入は、結合解離自由エネルギー(BDFE)および結合解離エンタルピー(BDE)を用いて評価した [$MoI(NHx)(R-PCP)$] のN-H結合エネルギーも増加させる。計算スクリーニングの結果、我々は高い π 受容能を持つPCP配位子を設計するための代替戦略として、縮合ベンゼン環の導入によるPCP配位子の π 共役系の拡張を新たに提案した。

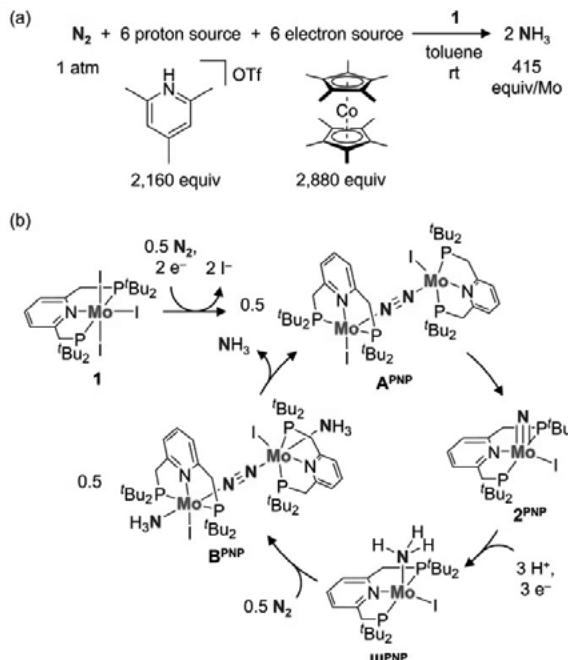


Fig. 1. Catalytic ammonia formation in the presence of 1 as a catalyst. (a) Reported catalytic reaction. (b) Plausible reaction pathway for 1.

(2) エポキシ樹脂と炭素繊維の接着に関する密度汎関数理論研究

炭素繊維 (CF) は、複合材料用途における究極の耐荷重材料となり、高い強度対重量比、高剛性、高比弾性率、引張強度、優れた耐食性などの優れた特性から、ポリマー複合材料に広く使用されている。CF強化ポリマー (CFRP) は、従来の複合材料に比べて大きな利点を備えているため、航空宇宙、スポーツ、自動車機器の設計に広く使用されている。複合システムの構成要素間に相乗効果があれば、CFRPはより優れた機械的特性を発揮することが知られている。

本研究では、4,4'-ジアミノジフェニルスルホン (DDS) および4,4'-ジアミノジフェニルメタン (DDM) で硬化したビスフェノールAジグリシジルエーテル (DGEBA) をベースとする2種類のエポキシ樹脂硬化物のCF表面への接着の分子メカニズムを、密度汎関数理論 (DFT) 計算を用いて理論的に探究した。CF表面の構造はよく分かっていないが、ここではカルボキシル (COOH) 基で官能基化されたグラファイトのアームチェアエッジ構造でモデル化した。ちなみに、アームチェアエッジ構造はグラフェンのエネルギー的に安定な端構造と考えられる。図2に示すように、CF表面を用いて2つの接着界面を構築した。1つはDGEBA-DDS分子 (CF/DGEBA-DDS界面) であり、もう1つはDGEBA-DDM分子 (CF/DGEBA-DDM界面) である。界面特性は、界面における最大接着応力 (S_{max}) を計算することで分析した。接着応力-変位曲線から、 S_{max} はCF/DGEBA-DDS界面では1160.37 MPaであり、CF/DGEBA-DDM界面の1060.48 MPaよりも高いことが明らかになった。エネルギー分解解析では、両界面の接着応力に対するDFTの寄与は類似していたが、CF/DGEBA-DDS界面では分散の寄与がより顕著であった。結晶軌道ハミルトンポピュレーション (COHP) 解析では、DFTの寄与は類似していたものの、異なる界面相互作用が示された。両界面の官能基間の水素結合 (H-結合) が観察され、エポキシ樹脂のベンゼン環とCF表面のCOOH基間の弱いOH-π相互作用も観察された。積分COHPから計算された軌道相互作用エネルギー、すなわちIpCOHPは、CF/DGEBA-DDS界面には大きな絶対IpCOHP値 (> 1 eV) を持つ6つの水素結合相互作用があるのに対し、CF/DGEBA-DDM界面には5つあることを明らかにした。DGEBA-DDM分子のアミン基とCF表面との間の相互作用は、すべての相互作用の中で大きなIpCOHP値を示した。DDS分子の中心にあるスルホン基とその強い表面相互作用により、DGEBA-DDS分子はDGEBA-DDM分子よりもCF表面に近くになり、CF/DGEBA-DDS界面での分散相互作用が強化された。したがって、CF表面は分散相互作用を通じて、DGEBA-DDM分子よりもDGEBA-DDS分子に対して強い親和性を示す。

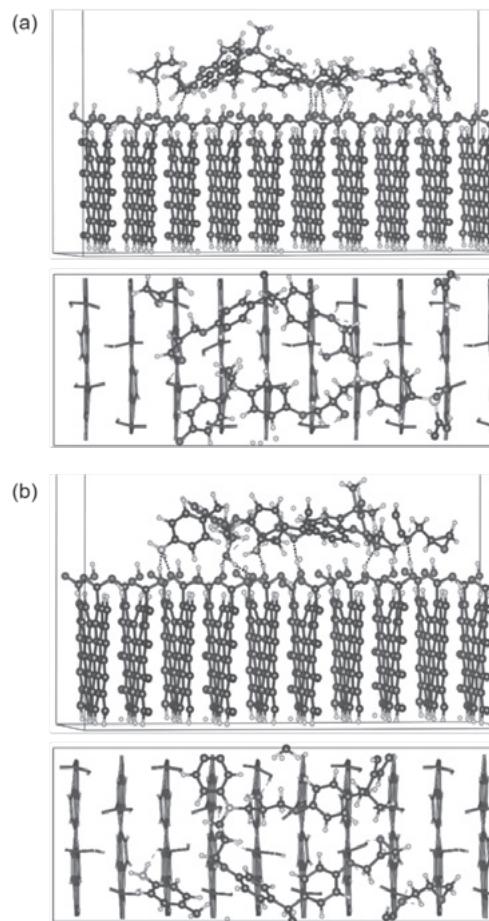


Fig. 2. (a) Optimized structure of CF/DGEBA-DDS interface, below its top view. (b) Optimized structure of CF/DGEBA-DDM interface, below its top view.

Fig. 2. (a) Optimized structure of CF/DGEBA-DDS interface, below its top view. (b) Optimized structure of CF/DGEBA-DDM interface, below its top view.

2. 論文

- (1) Tomoya Ishizuka, Taichiro Nishi, Nanase Namura, Hiroaki Kotani, Yasuko Osakada, Mamoru Fujitsuka, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Takahiko Kojima, Photocatalytic Substrate Oxidation Catalyzed by a Ruthenium (II) Complex with a Phenazine Moiety as the Active Site Using Dioxygen as a Terminal Oxidant, *J. Am. Chem. Soc.*, **146** (48), 33023-33034 (2024).
- (2) Ryoga Toyoshima, Yohei Kametani, Kazunari Yoshizawa, Yoshihito Shiota, The Effect of Intramolecular Proton Transfer on the Mechanism of NO Reduction to N₂O by a Copper Complex: A DFT Study, *Inorg. Chem.*, **63** (46), 22138-22148 (2024).
- (3) Yuta Tsuji, Kazuki Okazawa, Toshinobu Tatsumi, Kazunari Yoshizawa, σ Interference: Through-Space and Through-Bond Dichotomy, *J. Am. Chem. Soc.*, **146** (47), 32506-32518 (2024).
- (4) Koichiro Nishimoto, Naoki Noto, Yohei Kametani, Bendik Grømer, Chihaya Murata, Hiroko Okuwa, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Susumu Saito, (PNCP) Ir vs (PNNP) Ir: Neutral Iridium Complex for Direct Hydrogenation of Carboxylic Acids, *Organometallics*, **43** (23), 3013-3021 (2024).
- (5) Amit Shrestha, Yosuke Sumiya, Kazuki Okazawa, Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa, Density Functional Theory Study of Adhesion Mechanism between Epoxy Resin Cured with 4,4'-Diaminophenyl Sulfone and 4,4'-Diaminophenylmethane and Carboxyl Functionalized Carbon Fiber, *Langmuir*, **40** (41), 21573-21586 (2024).
- (6) Taku Wakabayashi, Yohei Kametani, Eimi Tanahashi, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Jieun Jung, Susumu Saito, Ferrocenyl PNNP Ligands-Controlled Chromium Complex-Catalyzed Photocatalytic Reduction of CO₂ to Formic Acid, *J. Am. Chem. Soc.*, **146** (38), 25963-25975 (2024).
- (7) Shogo Kuriyama, Yuye Zhang, Hiromasa Tanaka, Asuka Konomi, Akihito Egi, Kazunari Yoshizawa, Yoshiaki Nishibayashi, Synthesis and Reactivity of Iron-Oxocyclohexadienyl Complexes toward Proton-Coupled Electron Transfer, *Organometallics*, **43** (21), 2736-2746 (2024).
- (8) Kohei Kikkawa, Yosuke Sumiya, Kazuki Okazawa, Kazunari Yoshizawa, Yoshimitsu Itoh, Takuzo Aida, Thiourea as a “polar hydrophobic” hydrogen-bonding motif: application to highly durable all-underwater adhesion, *J. Am. Chem. Soc.*, **146** (30), 21168-21175 (2024).
- (9) Yosuke Sumiya, Ryoma Kaji, Kazunari Yoshizawa, Surface treatment of poly (p-phenylene sulfide) and its impact on adhesion of epoxy resin: Theoretical insights, *Chem. Phys. Lett.*, **847**, 141370 (2024).
- (10) Satoru Yamamoto, Yuta Tsuji, Riichi Kuwahara, Kazunari Yoshizawa, Keiji Tanaka, Effect of condensed water at an alumina/epoxy resin interface on curing reaction, *Langmuir*, **40** (24), 12613-12621 (2024).
- (11) Akihito Egi, Hiromasa Tanaka, Taiji Nakamura, Kazuya Arashiba, Yoshiaki Nishibayashi, Kazunari Yoshizawa, Computational screening of PCP-type pincer ligands for Mo-catalyzed nitrogen fixation, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **97** (5), upaoe041 (2024).
- (12) Ryoji Hatakenaka, Nanami Nishikawa, Yuji Mikata, Hiroki Aoyama, Kohsuke Yamashita,

- Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Yuuya Kawasaki, Katsuhiko Tomooka, Shin Kamijo, Fumito Tani, Toshihiro Murafuji, Efficient Synthesis and Structural Analysis of Chiral 4, 4-Biazulene, *Chem. Eur. J.*, **30** (24), e202400098 (2024).
- (13) Shintaro Saeki, Daisuke Kawaguchi, Yuta Tsuji, Satoru Yamamoto, Kazunari Yoshizawa, Keiji Tanaka, Electronic interaction of epoxy resin with copper at the adhered interface, *Langmuir*, **40** (18), 9725-9731 (2024).
- (14) Shinji Kanegawa, Shu-Qi Wu, Ziqi Zhou, Yoshihito Shiota, Takumi Nakanishi, Kazunari Yoshizawa, Osamu Sato, Polar Crystals Using Molecular Chirality: Pseudosymmetric Crystallization toward Polarization Switching Materials, *J. Am. Chem. Soc.*, **146** (16), 11553-11561 (2024).
- (15) Hideki Sugimoto, Akira Yoneda, Mayuka Yano, Kazunobu Sato, Yoshihito Shiota, Mayuko Miyanishi, Kazunari Yoshizawa, Shinobu Itoh, Redox-active tin (ii) complexes with sterically demanding o-phenylenediamido ligands and their reactivity with organic azides, *Dalton Trans.*, **54** (12), 5025-5034 (2024).
- (16) Taichi Mitsumoto, Taiji Nakamura, Hiromasa Tanaka, Kazunari Yoshizawa, Yoshiaki Nishibayashi, Cooperative Ammonia Formation Catalyzed by Molybdenum and Samarium Complexes, *Angew. Chem. Int. Ed.*, e202507061 (2024).
- (17) 中村 泰司、田中 宏昌、吉澤 一成, 配位子構造のスクリーニングによる高活性な窒素固定錯体触媒の開発を目指した理論研究, *Organometallic News*, page 2-7 (2024).
- (18) Tsukasa Abe, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, A Theoretical Approach for Investigating the Reaction Mechanism of Methane–Methanol Conversion, and Application of the Approach to Catalysts, *Redox-based Catalytic Chemistry of Transition Metal Complexes*, Royal Society of Chemistry, Chapter 9, 152-165 (2024).

(3) 学会発表 (招待講演)

- (1) Kazunari Yoshizawa,
“Applied Quantum Chemistry for Complex Systems”
CERI Lecture Series, Fukuoka, June 22, 2024.
- (2) Kazunari Yoshizawa
“Applied Quantum Chemistry for Complex Systems”
Division of Organometallic Chemistry, The Kinki Chemical Society, Japan., Tokyo, June 24, 2024.
- (3) Kazunari Yoshizawa
“Quantum Chemical Study of Complex Chemical Systems”
Computational Materials Design and Quantum Computing, Bandung, Indonesia, September 3, 2024.
- (4) Kazunari Yoshizawa
“Molecular Theory of Adhesion”
Kuju Molecular Science Seminar, Kuju, September 13, 2024.

(5) Kazunari Yoshizawa

“Enzyme Chemistry in the Quantum Era: Proposal of Computational Mutation”

Chemistry Festa, Tokyo, October 23 (2024).

(4) その他

(1) Kazunari Yoshizawa

“Applied Quantum Chemistry Studies of Complex Systems”

FIFC Symposium, Kyoto, February 6, 2025.

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

今年度は非断熱相互作用の特異値分解 (geometrical decomposition)、エネルギー自然軌道表現に核核反発を含める拡張 (ENOX) などの手法の実用化を軸に、これまで続けてきたホウ素クラスタ高電子励起状態の動力学の解析をすすめ、炭素クラスタ高電子励起状態に類似の状態が存在しうることを明らかにした。また ENOX 法が電子相関を含む高度な電子状態に対する直感的な化学結合の記述を与えることを示した。

【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。

これまでの研究で、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) 表現を得ている。電子エネルギーを 1 電子表現に自然に分割するこの手法では、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。今年度は化学結合の記述に応用すべく、この手法に核核反発を取り込む拡張を行った。また、複雑な非断熱相互作用の解析方法として非断熱相互作用の特異値分解を導入し、前年からのホウ素クラスタの強い非断熱系の研究を進め、新たに炭素クラスタにおいても類似の強い非断熱系動力学が成立しうることを示した。

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

$$E_e = \sum_{ij} \mathbf{h}_{ij} \rho_{ij} + \sum_{ijkl} \mathbf{g}_{ijkl} \Gamma_{ijkl} = \mathbf{Tr} \mathbf{H}^{(1)} \quad (1)$$

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

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、電子密度ではなく、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 [1]。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)。さらに、核核反発も以下のように含めた拡張を定義すると軌道エネルギー ϵ_k^x の和がポテンシャルエネルギーそのものとなり、結合への軌道の寄与を議論できる (ENOXと呼称する) [2]。

$$\epsilon_k^x = T_e^k + V_{ee}^k + V_{ne}^k + V_{nn}(\mathbf{R})n_k \quad (5)$$

【ホウ素クラスタ高励起状態動力学におけるバースト】 ホウ素は 2p 軌道に多数の空軌道を持っており、比較的低いエネルギーにそれに由来した密集した励起状態構造を持つ。その中では、個々の断熱状態を個別に考えることが意味をなさないような、強い非断熱相互作用に支配された動力学が展開する。昨年度までの研究で、非断熱相互作用による状態の拡散がきわめて速く、特に極めて短時間 (fs 未満) に非常に大きな状態拡散 (バースト) が見られることが発見されていた。

この現象の解析のために、非断熱相互作用の特異値展開を導入した。電子波束の断熱展開係数が式 (6) の形式に表されるとする (反古典エーレンフェスト描像)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_I(t) = \sum_J \left[H_{II}^{(el)}(\mathbf{R}) \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}(t)} - i\hbar \sum_{j=1}^{3N_a} \dot{R}_j(t) X_{IJ}^j(\mathbf{R}(t)) \right] C_J(t) \quad (6)$$

ここで非断熱相互作用の速度以外の部分

$$\mathbf{Z}_{lk}(t) = - \sum_J X_{IJ}^k C_J \quad (7)$$

に対して特異値分解 [3]

$$\mathbf{Z} = (\mathbf{f}_1 \quad \mathbf{f}_2 \quad \dots \quad \mathbf{f}_r) \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{s}_1^\dagger \\ \mathbf{s}_2^\dagger \\ \vdots \\ \mathbf{s}_r^\dagger \end{pmatrix} \quad (8)$$

を導入すると、非断熱相互作用を、速度と非断熱相互作用行列要素の積から、断熱展開係数の変化への影響を成分に分解することができる。

$$\mathbf{Z}\dot{\mathbf{R}} = \sum_{K=1}^r \sigma_K \mathbf{f}_K (\mathbf{s}_K^\dagger \cdot \dot{\mathbf{R}}) \quad (9)$$

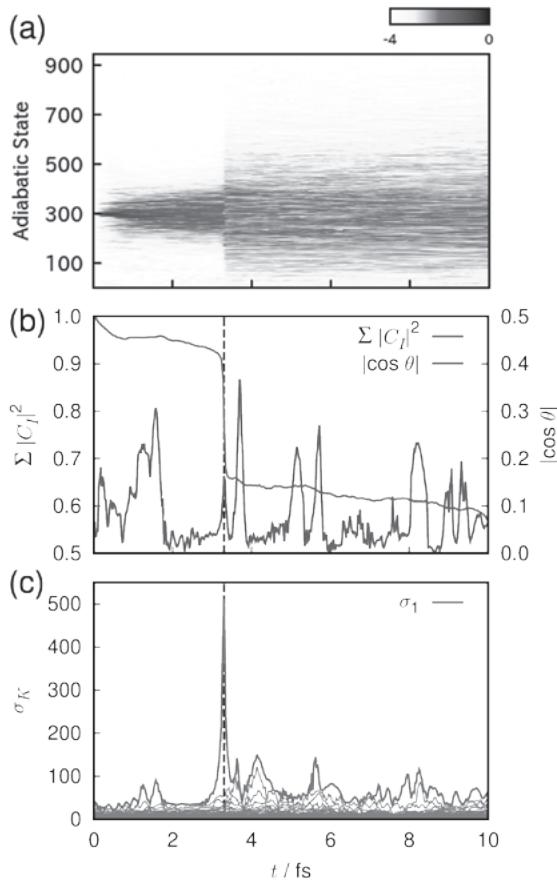


図1。B12クラスタ高電子励起状態(断熱状態300番)から開始した電子波束の時間発展における、(a) 断熱状態展開係数の急激な拡散。展開係数の二乗の対数を色で示す。(b) 同時間発展における、断熱200~400番状態の割合と、核速度方向と非断熱相互作用方向との角度 θ 。(c) 同時間発展での、動的非断熱相互作用の特異値の最大値 σ_1 の値。時刻3.3 fs に引いた破線のように、特異値の最大値と相互作用方向の一一致がそろう時点で大きな非断熱的状態拡散が起きる。

図1 (a) に、バースト時の断熱展開係数の瞬間的な拡散の様子を示す。特異値の最大値に関与する成分を取り出すと、特に大きな特異値を示す瞬間（図1 (c)）の、関連する速度方向と非断熱相互作用方向との一致（図1 (b)）がバーストと関係している。つまり、特異値分解により、どの方向の速度が大きく状態拡散に寄与するかがわかる [4]。

【炭素クラスタ高励起電子波束状態】 空2p軌道を多数持つことでは、炭素クラスタはホウ素クラスタと同様である。図2 のように、炭素クラスタの高励起状態でも、ホウ素クラスタ同様の密集した励起状態が計算される。また、各断熱状態のENOエネルギー分布には、ホウ素クラスタ同様の4層の構造が見られた（図2(c)）。ホウ素で得られた知見の炭素への適用等、比較検討を進めている。

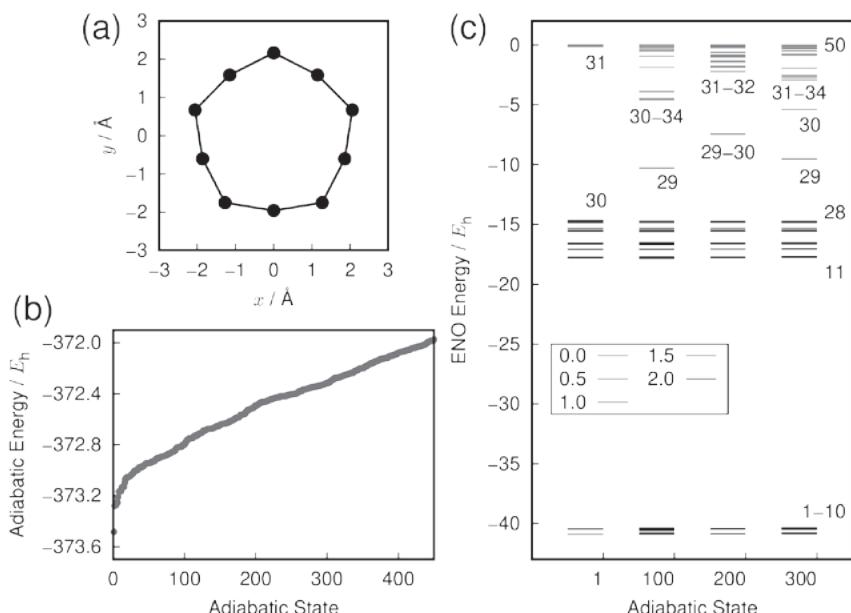


図2。(a) C10炭素クラスタ基底状態の最安定構造での、(b) 断熱状態エネルギー分布、および (c) 断熱基底状態、断熱励起状態 100、200、300 番での ENO エネルギー分布 (色は ENO ポピュレーションを示す)。ENO は core (1-10)、valence (11-28)、half-occupied (29-30)、flowing (31-50) の4つの層に大別できる。

【ENOXによる化学結合の解釈】 化学結合は電子エネルギーだけでなく、核核反発も含めたエネルギーの核座標依存性に規定され、ENOでは記述が不十分である。そこで、核核反発も含めたENOXでの化学結合記述の有用性を、種々の等核2原子分子について検討した [4]。その結果、結合性軌道・非結合性軌道・反結合性軌道といった分類や、結合次数といった、分子軌道描像で知られる概念が、大きな電子相関を含む高度な電子波動関数でどのように成立するかを示せた [2]。

	$(n_k)'$	$(T_e^k)'$	$(V_{ne}^k)'$	$(V_{ee}^k)'$	$(V_{nn}^k)'$	$(V_k)'$	$(V_{sum}^k)'$	$(V_k)''$
$1\sigma_g$	0.000	0.077	3.925	-2.209	-2.000	-0.208	-0.284	-0.143
$1\sigma_u$	0.000	0.030	3.960	-2.215	-2.000	-0.224	-0.254	-0.113
$2\sigma_g$	-0.014	-3.083	9.667	-2.946	-1.973	1.665	4.748	3.108
$1\pi_{ux}$	-0.057	-0.664	5.150	-2.043	-1.945	0.499	1.162	0.725
$1\pi_{uy}$	-0.057	-0.664	5.150	-2.043	-1.945	0.499	1.162	0.725
$2\sigma_u$	0.327	0.655	-1.139	0.002	-1.374	-1.856	-2.511	-1.257
$3\sigma_g$	-0.236	-0.328	1.791	-0.636	-0.449	0.378	0.706	0.410
$1\pi_{gx}$	0.077	0.128	-0.533	0.159	0.042	-0.203	-0.332	-0.183
$1\pi_{gy}$	0.077	0.128	-0.533	0.159	0.042	-0.203	-0.332	-0.183
$3\sigma_u$	0.016	0.018	-0.102	0.033	0.012	-0.040	-0.058	-0.030
Total	0.000	-3.445	27.194	-11.749	-11.999	0.000	3.445	2.734

図3。C2一重項分子の電子基底状態最安定核配置でのENOXの性質の空間座標微分。ENOXへの分解により、CI波動関数エネルギーを1電子軌道ごとの寄与として検討することができる。結合強度への寄与は電子運動エネルギーの空間微分に反映される。

【まとめと展望】 以上見てきたように非断熱相互作用の特異値分解 (geometric decomposition) による解析で、ホウ素クラスタの高励起状態のような、強い非断熱相互作用系の動力学にみられる瞬間的な状態拡散現象を解明することができ、これまでのENOによる解析などと合わせて強い非断熱相互作用系動力学の知見が深まった。同様の現象はホウ素クラスタに限ったことではなく、炭素クラスタなど、他の系にも一般化できる部分がある。また、ENOを拡張したENOX描像により高電子相関系での化学結合などの記述が進み、その適用が期待できるところである。

【文献】

- [1] K. Takatsuka and Y. Arasaki, J. Chem. Phys. 154, 094103 (2021).
- [2] Y. Arasaki and K. Takatsuka, Phys. Chem. Chem. Phys. Accepted Manuscript (2025).
- [3] K. Takatsuka, J. Chem. Phys. 160, 044112 (2024).
- [4] K. Takatsuka and Y. Arasaki, J. Chem. Phys. 161, 061101 (2024).

2. 論文

- (1) Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki,
“Mechanism of quantum chaos in molecular nonadiabatic electron dynamics,”
J. Chem. Phys. 161, 061101 (2024, 7 pages).

3. 学会発表

- 高塚和夫、新崎康樹
“電子状態・電子動力学の可聴化：電子エネルギーの実体論とその表現”
第26回理論化学討論会 筑波 2024/5/22 2L04
- 高塚和夫、新崎康樹
“多次元・多状態間非断熱過程の集団座標分解: Nonadiabatic chaosとNonadiabatic burst”
第18回分子科学討論会 京都 2024/9/21 4E10

藤城 新

特定研究員

1. 今年度の研究の要約

真核生物ゲノムの物理的実体は全長 $10^7\text{-}10^{10}$ 塩基におよぶDNAである。ゲノムDNAはヒストン蛋白質に巻き付いてヌクレオソーム粒子の鎖（クロマチン）をなし、さらに様々な生体高分子とともに染色体をつくる。染色体上の遺伝子制御の状態は細胞核内における染色体の三次元的な配置や構造と密接に関係することが知られている（文献¹）。真核生物ゲノムは生物学的機能が染色体（ポリマー・ソフトマター）の物理的な自己組織化と結びつく系として興味深く、我々はシミュレーションと理論によってその結びつきを理解することを目指している。今年度は分裂期の運動によって生み出される全ゲノム染色体の核内配置の偏向、活性遺伝子を界面活性とみなした凝縮体としての染色体ドメインの理論、およびコヒーレンスによるドメイン核形成についての研究を行った。

【細胞分裂による染色体配置の刷り込み理論】

最もマクロなスケールでは、遺伝子密度の高い染色体は細胞核の内側、そうでない染色体は細胞核の外側に分布する傾向が知られている（文献²）。我々が以前行った全ゲノムシミュレーション（文献³）によれば、相分離によって染色体の不活性領域は自発的に核の外側に分布する。実際の細胞では細胞分裂による状態の「リセット」があるため、染色体のグローバルな配置換えが起こるほど相分離が進行することはない。しかし、もし細胞分裂後の染色体配置に記憶が残るのであれば、相分離のバイアスが蓄積されていくのではないか？ この仮説を検証するため、我々は全ゲノムシミュレーションモデルに分裂期ステージを追加して、細胞サイクルをまたぐ染色体動態の計算モデルを構築した（文献⁴）。

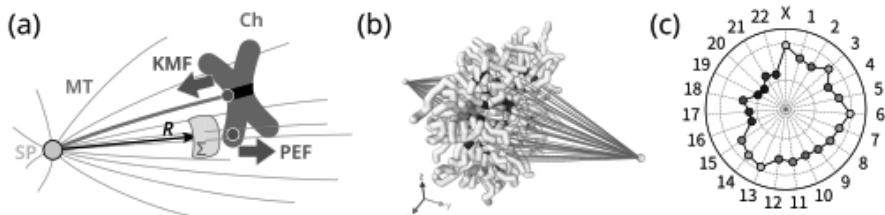


Figure 1 分裂期の染色体動態シミュレーション。(a) 染色体Chにかかる力場の模式図。セントロメアへの押し引き力（KMF）が重要。(b) 分裂期染色体運動のスナップショット。この状態から娘細胞（黄色点）へと染色体が引っ張られていく。(c) 分裂期動態によって作られるヒト第1-第22およびX染色体の核内配置を核中心からの平均距離で表示。全長の短い第16-第22染色体は内側に偏向する。

5世代をまたぐ動力学計算により染色体配置の時間発展を追うと、予想に反して、間期核内の染色体配置は分裂期の動態によってほとんど決まるという興味深い結果が得られた。分裂期染色体はロッド状に凝縮した構造をとるが、このロッド構造はセントロメアと呼ばれる領域を境にしてp-armとq-armと呼ばれる二腕に分かれる。分裂期にはモーター分子がセントロメアに結合して押し引きの外力をおよぼすことで、染色体が親細胞から娘細胞へと輸送される。我々のシミュレーションによれば、染色体の長さとp/q-armの腕長の違いに依存して輸送速度が変わるために、細胞分裂後の染色体の配置にバイアスが生まれる（Figure 1）。このバイアスが複数世代の細胞分裂を経るうちに蓄積し、実験で観測されるような染色体の三次元配置が生まれるのである。

【生物種普遍的なドメイン熱力学】

動物や多くの植物の染色体はTAD (topologically associating domain) と呼ばれる三次元ドメイン構造を作る。TADは染色体の平均コンタクトマップ上で定義されるが、類似した大きさをもつドメイン構造（クロマチンドメイン）が個別細胞の顕微鏡観察でも観測されている。こうしたドメインの成因には諸説あり、たとえばコヒーレンス等の蛋白質が染色体上にループ構造を作ったものという説や、ヌクレオソーム間の静電引力によってクロマチンが凝縮したものという説がある^(文献5)。我々は後者の説に関して興味深い理論を得た。

染色体は独立したドメインが連なった構造をとり、平均的なドメインサイズは生物種によって異なる。ショウジョウバエのTADサイズは100kb程度であるのに対し、ヒトやマウスは500kb程度、アホロートルでは10Mbにもおよぶ。もしもドメインが静電引力によるもの、すなわち貧溶媒条件でのポリマー凝縮で出来るのであれば、ドメインどうして融合して際限なく大きく成長するのが自由エネルギー的に有利なはずだが、実際は生物種に依存した何らかの限界がある。我々はその限界が、遺伝子の活性化に依存した界面活性作用により与えられると考えた。

ヌクレオソームは正電荷と負電荷の領域をもつため、ヌクレオソーム間には静電引力が作用する。特にH4ヒストン末端のリシン残基の正電荷が重要である^(文献6)。遺伝子が活性化されるクロマチンのエンハンサー領域では、ヌクレオソームのリシン残基がアセチル化を受けて負電荷をもち、ヌクレオソーム間相互作用が弱まる。これを、界面自由エネルギーを下げる因子、すなわち界面活性剤としてモデル化する。あるドメイン領域のアセチル化率が ϕ であるとき、体積中に含まれる活性領域の量は $\sim \phi V$ である。これがドメイン表面を覆うのに十分な量(臨界量)であれば界面自由エネルギーはキャンセルされ、ドメインの成長が止まる。この理論に基づくと臨界体積は $V^* \sim (1+\phi)/\phi^3$ と求められる。

体積 V^* をDNA量 L^* に変換し、アセチル化率に対する臨界ドメイン長 $L^*(\phi)$ をプロットすると、酵母、シロイヌナズナ、ショウジョウバエ、トマト、マウスという広範な生物種の実験データをただひとつの関数で統一的に記述できる(Figure 2)。この結果は、静電相互作用による凝集とアセチル化領域の界面活性による安定化が進化的に保存された普遍原理であることを示唆する。生物種によるTADサイズの違いは ϕ の違い、すなわち遺伝子の間に存在する不活性なDNA(ジャンクDNA)の量によって説明される。

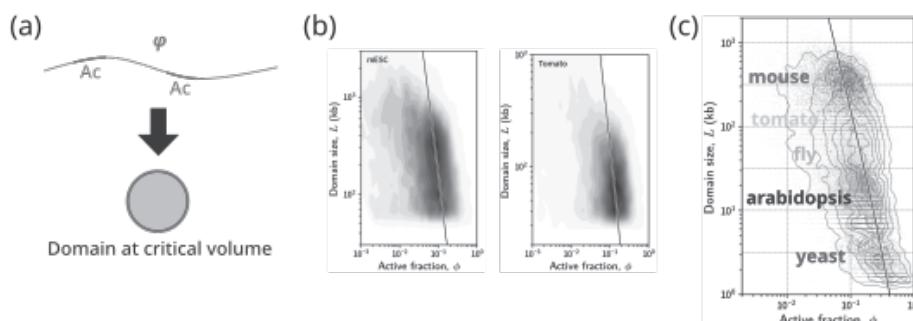


Figure 2 生物種普遍的なドメイン熱力学。(a) 理論モデル模式図。割合 ϕ でアセチル化された1次元鎖が球体ドメインに凝縮する。アセチル化領域が表面を覆いきる条件で安定。(b) 臨界ドメイン長の理論曲線と実験データの比較。マウス(左)とトマト(右)における実験のTAD長とアセチル化率の分布密度を例示。(c) 理論曲線とマウス、トマト、ショウジョウバエ、シロイヌナズナ、酵母の分布密度データを比較。

【コヒーレンによるドメイン核形成】

高等生物のTAD内にはCTCFおよびコヒーレンと呼ばれる蛋白質複合体に依存したループ構造が多く存在する。実験的に細胞内のコヒーレンを分解するとループとTADは消失し、コヒーレンを戻せば再び現れる(文献7)。しかし、コヒーレンを分解してもクロマチンドメインは残るのである(文献8)。このことは、コヒーレン欠失条件下では染色体上のランダムな位置にクロマチンドメインが形成されるため、多数の細胞に由来するコンタクトマップ上ではドメイン(TAD)が平均化されて検出されないと理解できる。

我々の自由エネルギーの理論によると、与えられたアセチル化プロファイルに対して安定なドメイン分割方法は多数存在する。どのようなドメイン分割で定常化するかは初期値依存である。コヒーレンはこの初期値を与える因子なのではないか? ドメイン内にループが複数存在するのは、ループを核として臨界長 L^* までドメインが成長した形跡なのではないか? 貧溶媒条件のポリマーモデルとコヒーレン結合の反応拡散を組み合わせたシミュレーションによると、コヒーレンが局在しやすいCTCF結合部位を境にしてドメインが分割されやすいという結果が得られた(Figure 3)。今後はクロマチンのアセチル化を考慮したモデルに拡張することで、コヒーレンとドメインの関係を明らかにしていく。



Figure 3 コヒーレンの結合を考慮したクロマチンドメイン形成シミュレーション。(a) クロマチンの1次元プロファイル。コヒーレンはCTCF結合部位(水色)に対する結合定数が大きく、他の蛋白質に占有された領域(赤色)には結合できない。コヒーレンはクロマチン上を拡散し、二量化によってループを形成する。この設定ではバリアの左側でループが形成されやすい($79\% > 21\%$)。(b) ポリマー構造のスナップショット。CTCFとコヒーレンにより核が形成され(左)、2つのクロマチンドメインに成長する(右)。(c) 平均コンタクトマップ。2つのTADが形成される。

【文献】

- 1) Misteli, T. The Self-Organizing Genome: Principles of Genome Architecture and Function. *Cell* **183**, 28–45 (2020).
- 2) Cremer, M. et al. Non-random radial higher-order chromatin arrangements in nuclei of diploid human cells. *Chromosome Res* **9**, 541–567 (2001).
- 3) 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).
- 4) Fujishiro, S. & Sasai, M. Three-dimensional memory of nuclear organization through cell cycles. *The Journal of Chemical Physics* **162**, 065103 (2025).
- 5) Fujishiro, S., Sasai, M. & Maeshima, K. Chromatin domains in the cell: Phase separation and condensation. *Current Opinion in Structural Biology* **91**, 103006 (2025).
- 6) Wakamori, M. et al. Intra- and inter-nucleosomal interactions of the histone H4 tail revealed with a human nucleosome core particle with genetically-incorporated H4 tetra-acetylation. *Sci Rep* **5**, 17204 (2015).

- 7) Rao, S. S. P. et al. Cohesin Loss Eliminates All Loop Domains. *Cell* **171**, 305-320.e24 (2017).
- 8) Miron, E. et al. Chromatin arranges in chains of mesoscale domains with nanoscale functional topography independent of cohesin. *Sci. Adv.* **6**, eaba8811 (2020).

2. 論文

- (1) Fujishiro, S. & Sasai, M. "Three-dimensional memory of nuclear organization through cell cycles." *The Journal of Chemical Physics* **162**, 065103 (2025).

3. 総説・本

- (1) Fujishiro, S. & Sasai, M. Three-Dimensional Simulation of Whole-Genome Structuring Through the Transition from Anaphase to Interphase. in *Computational Methods for 3D Genome Analysis* (ed. Nakato, R.) vol. 2856 293–308 (Springer US, New York, NY, 2025).
- (2) Fujishiro, S., Sasai, M. & Maeshima, K. "Chromatin domains in the cell: Phase separation and condensation." *Current Opinion in Structural Biology* **91**, 103006 (2025).

4. 学会発表

- (1) Fujishiro, S. & Sasai, M. "Formation of chromatin domains without loop extrusion: the chromatin capture model of interphase cohesion." 21st International Union for Pure and Applied Biophysics Congress 2024 京都 2024/6/27 S29-3 (招待講演)

5. その他

- (1) 藤城 新 「差分Hi-C解析に現れる多項バイアスの補正」
Hi-C研究会 千葉（千葉大学）2024/11/15

金丸 恒大

研究フェロー (佐藤啓文グループ)

1. 今年度の研究の要約

今年度は液体の前年度に引き続き積分方程式理論のハイブリッド法を用いたデータベース構築を行い、これを用いた機械学習に適用を行った。また、液体の積分方程式理論を用いた溶液中の分子の慣性半径の計算手法の開発を行った。

【始めに】 3D-RISM理論のような液体の積分方程式理論は溶質と溶媒間の相互作用を計算によって得られた相関関数をもとに解析的に計算できる手法で、分子認識メカニズムの解析やドラッグデザインにおける溶媒相互作用の解析などの幅広い領域で利用されている。

本研究では3D-RISM理論のハイブリッド法の応用としてテトラペプチドの熱力学量データベースの構築と溶液中高分子の慣性半径を計算する理論手法について紹介する。

【液体の積分方程式理論を用いたポリペプチドデータベースの構築】

ペプチド材料は環境負荷が小さく、化石燃料由来成分を含まないことから、持続可能な次世代材料として注目されている。こうしたペプチド材料の設計を加速するためには、構造情報や関連する物理量を体系的に収録したデータベースの整備が不可欠である。特に、溶媒和自由エネルギーをはじめとする熱力学量は、ポリペプチドの構造や機能に深く関与しており、データ駆動型材料開発において重要な指標となる。

3D-RISM理論は、溶質と溶媒の相関関数から熱力学量を解析的に評価できる理論手法であり、分子認識やドラッグデザインなどの分野でも広く応用されている。しかし、3D-RISM理論は静的な構造を前提としているため、構造揺らぎの影響を反映させるには、分子動力学シミュレーションとの組み合わせが有効である。

本研究では、3D-RISM理論と分子動力学シミュレーションを統合したMM/3D-RISM法を用い、20種類の天然アミノ酸から構成される全160,000種のテトラペプチドについて、構造揺らぎを考慮した溶媒和熱力学量のデータベースを構築した。

図1にハイブリッド法を用いて計算された溶媒和自由エネルギー(SFE)と部分モル体積(PMV)のデータ分布を示す。SFEでは、配列中の帶電アミノ酸の数が多いほど分布がより負の値へとシフトし、酸性または塩基性残基を多く含む配列ほど強い溶媒和効果を示す。一方、PMVは帶電残基の組み合わせに依存せず、配列の帶電組成に関わらず分布がほぼ重なっている。このデータベースは、配列情報と計

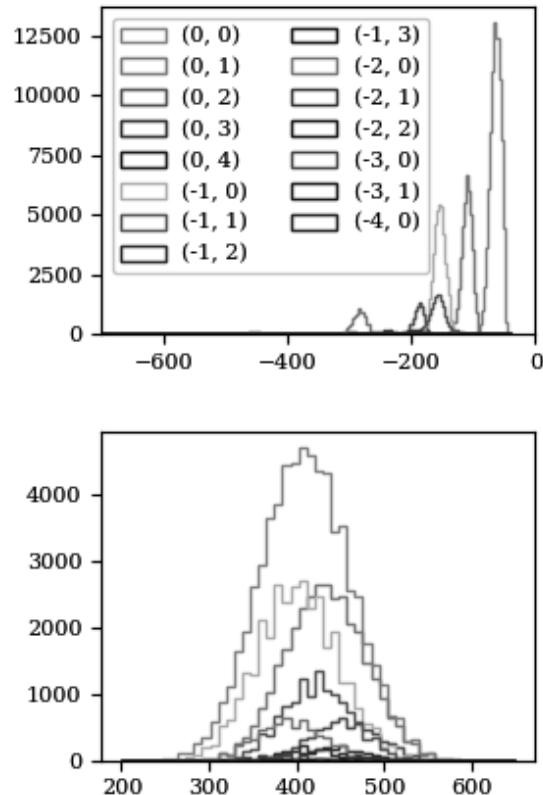


図 1. ハイブリッド法によるデータベースのデータ分布

算された物理化学的性質を統合しており、ペプチドベース材料の開発と最適化に資するリソースとなることが期待される。

このデータベースの有効性を検証するため、液-液相分離タンパク質の分類問題を題材とした機械学習による予測モデルを構築した。入力特徴量には、熱力学量に加え、各テトラペプチドに含まれる分岐鎖アミノ酸や含硫アミノ酸の出現数などを用いた。その結果、word2vecベースの先行研究に比べて予測精度は劣るもの、F1スコアは0.83と高い性能を示した。この結果は、熱力学的特徴量がタンパク質の機能的分類において有用であることを示唆しており、物理化学的情報を基盤とした材料開発の有効性を裏付けるものである。

現段階では、物理量の平均値のみを特徴量として使用しており、アミノ酸残基の配列順や局所的環境を考慮できていない。今後は位置エンコーディング等を導入し、配列構造情報を組み込んだモデル構築によって、さらなる性能向上を目指す予定である。

表1 液-液相分離タンパク質予測の機械学習モデルのスコア

	F1-score	Precision	Recall
This work	0.83	0.85	0.84
Previous Study	0.92	0.95	0.96

【液体の積分方程式理論を用いた溶液中高分子の慣性半径】

慣性半径は高分子の空間的広がりを表す物理量で、ゲルの膨張性や高分子の剛性などに関連する物理量である。溶液中高分子の慣性半径 R_g は高分子の末端原子間の距離Rから以下の式で算出できる。

$$R_g = \frac{0.665}{\sqrt{6}} \sqrt{\langle R \rangle^2} \quad (1)$$

ここで、 $\langle \rangle$ はアンサンブル平均を表す。

フローリーの理論に基づくと $\langle R \rangle$ はモノマー数に対する自由エネルギーを極小にする鎖長として計算でき、以下の式で与えられる。

$$F(r) = k_B T \left(2 \frac{r}{nl_p^{m^2}} - 3 \nu_{ex}^m \frac{n^2}{r^4} \right) \quad (2)$$

ここで、nは高分子のモノマー数、 $l_p^{m^2}$ はモノマー当たりの持続長の2乗、 ν_{ex}^m はモノマー当たりの排除体積である。式(2)を最小にする $\langle R \rangle$ を、式(1)代入すると、慣性半径は以下の式となる。

$$R_g = \frac{0.665}{\sqrt{6}} (l_p^{m^2} \nu_{ex}^m)^{\frac{1}{5}} n^{\frac{3}{5}} \propto M_w^{0.6} \quad (3)$$

ここで、 M_w は分子量である。これらのパラメーターは高分子主鎖の二面角分布を反映する。本研究ではポリエチレングリコール(PEG)を例として、水中とメタノール中の慣性半径について調査した。

PEGはエチレングリコールをモノマーとする高分子で、主鎖の二面角として、C-C結合を回転軸とする、OCCO二面角と、C-O結合を回転軸とするCCOC二面角の二種類がある。図2に二つの二面角の3D-RISM-SCFによるポテンシャル曲面を示す。孤立系では立体反発のため、どちらの二面角でもtrans配座のほうがgauche配座より安定である。一方溶液中では、OCCO二面角の場合、gauche配座はtrans配座より双極子モーメントが大きいため溶媒効果によって安定化する。一方CCOC二面角ではポテンシャル局面に対する溶媒効果は小さい。

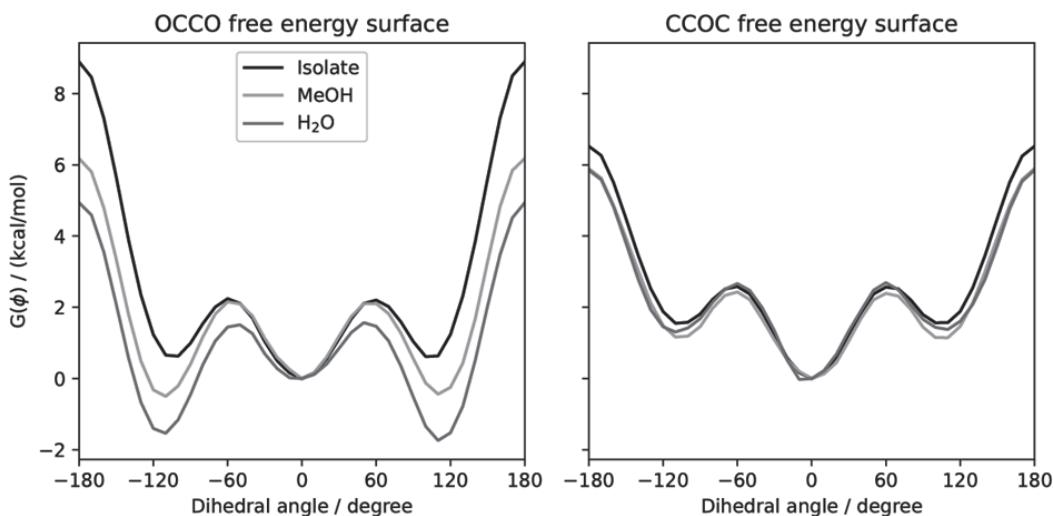


図2 OCCO,CCOC 二面角に沿ったポテンシャル曲面

次に、表2に本研究で得られた $l_p^{m^2}$ と v_{ex}^m および、べき乗則を示す。 $l_p^{m^2}$ ではメタノール中のほうが水中よりも大きい。これは、水中のほうがgauche配座をとりやすいことに起因する。一方、 v_{ex}^m は水中のほうが大きい。これら二つのパラメーターに基づいて得られたべき乗則を比較すると、水中のほうがメタノール中よりも慣性半径が大きい。

表2 水中、メタノール中の $l_p^{m^2}$ 、 v_{ex}^m およびべき乗則

	$l_p^{m^2}/\text{\AA}^2$	$v_{ex}^m/\text{\AA}^3$	Power law
MeOH	20.82	353.34	$0.180 \times M_w^{0.60}$
H ₂ O	15.10	747.27	$0.197 \times M_w^{0.60}$

図3に本研究,MDシミュレーションおよび実験で得られた分子量M_wに対する慣性半径のべき乗則を示す。本研究では、水中の慣性半径はメタノール中よりも大きいが、MDシミュレーションと実験では、メタノール中の慣性半径が水よりも大きい。このMDシミュレーションや実験との不一致は高分子鎖の端効果の取り扱いにおける違いに起因する可能性がある。本研究で得られるべき乗則は末端効果が表れないが、実験やシミュレーションでは有限のモノマーを含む高分子を扱うため末端効果が観測される。今後、本研究の理論の改善やPEGゲルなど末端効果が表れないような実験と比較し溶媒依存性を詳細に検討する予定である。

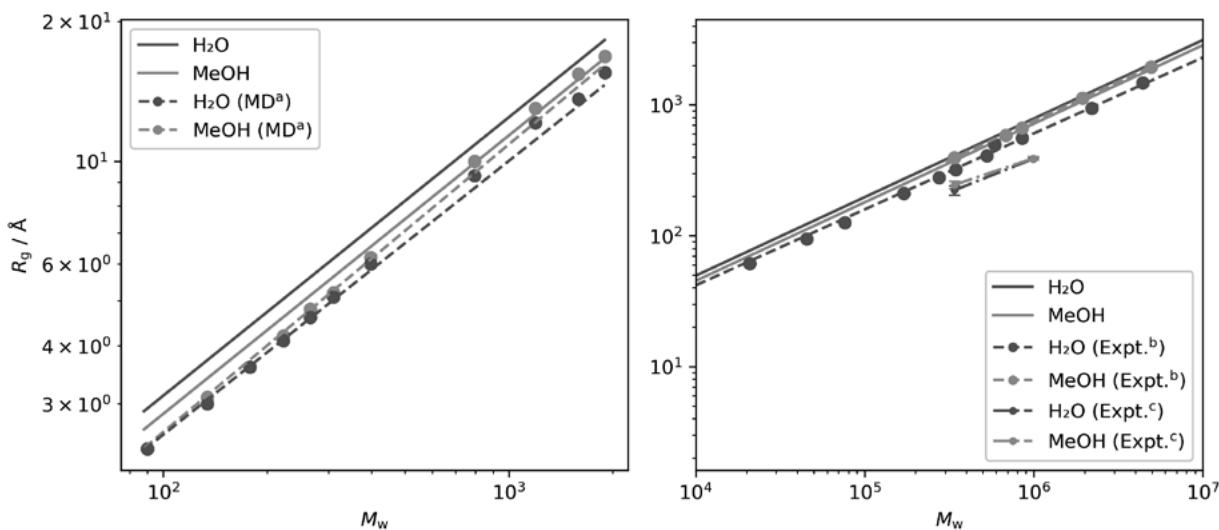


図3 R_g の分子量 M_w に対するべき乗則

2. 論文

- (1) Yuki Seno, Kodai Kanemaru, Shoichi Tanimoto, Tatsuhiko Miyata, Haruyuki Nakano, and Norio Yoshida, "Applicability of integral equation theory of molecular liquids to the hydration thermodynamic response to charged particles", Physica A 674(15), 130787

3. 学会発表

- (1) Kodai Kanemaru, Tsuyoshi Yamaguchi, Naoyuki Sakumichi, Takamasa Sakai, Norio Yoshida
"Theoretical analysis of the solvent effects on the PEG structure"
Gelsymposium 2024 Japan Naha 2024/11/20
- (2) Kodai Kanemaru, Norio Yoshida
"Theoretical analysis of solvent effects on the radius of gyration of PEG by the integral equation theory"
The 6th International Conference on Materials Research and Innovation Thai 2024/12/18

4. その他

- (1) 金丸 恒大, 吉田 紀生
「液体の積分方程式理論のハイブリッド手法によるテトラペプチドデータベース構築の試み」
マテリアルDX若手ワークショップ2024 鶴岡 2024/7/19
- (2) Kodai Kanemaru, Keisuke Shiroshita, Haruyuki Nakano, and Norio Yoshida
"Application of multi-scale molecular theory based on liquid theory to biomaterial modelling"
Mini-symposium in Chulalongkorn University Thai 2024/9/13
- (3) 金丸 恒大, 吉田 紀生
「積分方程式理論による溶液中高分子の慣性半径に関する理論的研究」
第20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 2025/2/6
金丸 恒大, 吉田 紀生

IV 研究業績 (2024)

「3D-RISMを用いたペプチドデータベースの構築」

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムDDCoMS 公開シンポジウム 仙台

2025/3/7

(4) 金丸 恒大, 吉田 紀生

「液体の積分方程式理論のハイブリッド手法によるペプチドデータベース構築」

凝縮系の理論化学 沖縄 2025/3/26

山田 一雄

特定研究員

1. 今年度の研究の要約

今年度は、前年度に確立した全原子分子動力学(MD)シミュレーションを用いた人工ポリペプチド溶解度計算手法の発展研究を行った。具体的には、(i)並列化計算と平均化計算によって平衡サンプリング領域を増やし、溶媒和自由エネルギー計算精度向上を目指した。(ii)また、得られた溶媒和自由エネルギーの自由エネルギー成分分解解析を用いて、ポリペプチド水溶解度を規定する成分を明らかにした。これによって人工ポリペプチド水和の物理的機構を考察した。(iii)さらに、重量分析で計測された実験によるポリペプチド水溶解度と本手法で推算された水溶解度の比較を行った。

【始めに】ヒト由来の天然アミノ酸で構成される人工ポリペプチドは、ポリエチレングリコール(PEG)と比較して生分解性・生体的合成に優れる。このことから、PEG医薬品の代替として医薬分野への応用が期待されている。医薬製品への展開の際に重要な薬物体内動態について最も基本的な物理量は水溶解度であるが、現時点で人工ポリペプチドの水溶解度データはほとんど存在しない。そこで、人工ポリペプチドの水への溶解性の系統的な推算について、実際の実験のような煩雑な合成過程を経由しない安価な方法を確立することが求められている。

我々は前年度の研究で、単一のアミノ酸4つから構成される4残基ホモポリペプチドを対象として、全原子MDシミュレーションと自由エネルギー計算を用いた水溶媒へのポリペプチド水溶解度推算手法を確立した。本手法では、4残基ホモポリペプチドのバルク（純固体）系および水溶液系における溶媒和自由エネルギーを計算し、その差から水溶解度を求めることができる。本研究では、(i)高分子系の研究を参考に、溶媒中の人工ポリペプチド平衡構造の効率的なサンプリングを行うことで計算精度の向上した溶媒和エネルギー計算を実施し、(ii)得られた溶媒和自由エネルギー結果について、自由エネルギー成分分析を行い、水溶解度を規定する物理的機構を明らかにする。(iii)重量分析によって計測されたポリペプチド水溶解度実験値と、本手法で計算された溶媒和自由エネルギー差との比較を行い、本手法の信頼性を考察することを目的とする。

【人工ポリペプチドの溶媒和自由エネルギーと水溶解度】溶媒に対する水溶解度は、溶質であるポリペプチドを真空相から溶媒相へ溶かす過程（溶媒和）の自由エネルギー変化である溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu_w$ と、ポリペプチドバルク（純固体系）へのポリペプチド自身への溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu_p$ の差 $\Delta\Delta\mu=\Delta\mu_w-\Delta\mu_p$ で評価することができる。 $\Delta\Delta\mu$ が正に大きいほどペプチドの水溶解度が低く、逆に値が小さいほど水溶解度は高くなる。

今年度はまず、前年度に確立した溶媒和自由エネルギー計算の精度向上を目指した。一般に、計算対象であるポリペプチドは柔らかく、溶媒中で決まった形を持たない不定形であるが故にかなりの数のコンフォメーション（空間的形態）を持つ。現在の計算機性能では、このような柔らかく、ある程度の原子数を持つ分子の緩和時間スケールは、全原子MD計算によって計算可能な時間スケールに比べて長くなることが多い。そのため、シミュレーション後の構造が初期状態に強く依存することが知られている。そこで、多数の独立な初期状態を用意して全原子MDシミュレーションを行い、得られた構造を平均化してサンプリングすることでこの問題を解決する試みがよく行われる。本研究ではこれ

に倣い、水溶媒中の人工ペプチド計算のために200個の独立な初期構造を用意し、平衡化MD計算後、各初期構造について5000回のサンプリングMD計算を行った。

【計算モデルと使用したプログラム】 本研究で扱った分子は前年度と同じく、人体を構成する15種類の天然中性アミノ酸から構成される4残基ホモペプチドおよび水分子である。ペプチド水溶液系として、4残基ホモペプチド1分子と水分子10000個を混合した系を、それぞれ異なる初期構造で200構造生成する作業を中性アミノ酸15種類分行った。対応するペプチド純固体系として、4残基ホモペプチド単成分系を15種類作成した。ペプチド分子と水分子はそれぞれAmber ff19SBモデルとOPCモデルでAmber¹⁻²を用いてモデル化した。全原子MD計算はGromacs³を用いて実施し、各系におけるペプチドの溶媒和自由エネルギー計算に関しては、溶媒和自由エネルギー計算ソフトウェアであるERmod⁴を用いて計算を行った。

【水溶液系、バルク純固体系の溶媒和自由エネルギーと水溶解度計算】

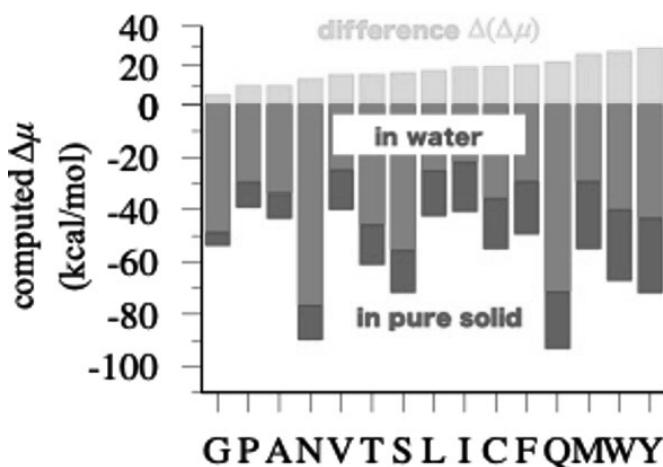


図1: ペプチドバルク固体(pure solid)及びペプチド水溶液系(water)におけるペプチド溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ とその差 $\Delta(\Delta\mu)=\Delta\mu_w-\Delta\mu_p$ 。横軸は15種類のテトラホモペプチドのラベルであり、ペプチドを構成するアミノ酸残基の略号を表す。左から右へ行くほど $\Delta(\Delta\mu)$ が大きく、疎水的であることを意味している。構成アミノ酸残基の疎水性インデックスが大きいペプチドほど疎水的な傾向を示している。

図1は、15種類の中性アミノ酸からなるテトラホモペプチドに関する、ペプチドバルク固体系およびペプチド水溶液系におけるペプチド分子の溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ およびその差 $\Delta(\Delta\mu)$ の結果をまとめたものである。横軸は、テトラホモペプチドを構成するアミノ酸残基の略号を示す。 $\Delta(\Delta\mu)$ が小さいほど親水性が高く、大きいほど疎水性が高いことを意味する。図1より、G,P,Aなど、アミノ酸疎水性インデックスの小さい親水性アミノ酸で構成されたテトラホモペプチドでは $\Delta(\Delta\mu)$ が小さく、YやWなど疎水性インデックスの大きい疎水性アミノ酸では $\Delta(\Delta\mu)$ が大きいという傾向が見られた。このことから、テトラホモペプチドの水溶解度が構成アミノ酸の疎水性インデックスの傾向と合致することが示唆された。

【溶媒和自由エネルギー成分分解と相関解析】 また、ERmod4では、(1)式のように $\Delta\mu$ のエネルギー成分分解解析を行うことができる。 $\langle u \rangle$ は溶質と溶媒分子間直接相互作用エネルギー項であり、 $\Delta\mu_{\text{excl}}$ は間接自由エネルギー成分の高エネルギー領域積分であり、溶質が溶液中で溶媒分子を押し除ける

排除体積効果のような高エネルギーなエントロピーロスを表している。ちなみに $\Delta\mu^{\text{other}}$ は間接自由エネルギー項の低エネルギー領域積分であり、溶質-溶媒水素結合などの低エネルギーなエントロピーロスを表す。

$$\begin{aligned}\Delta\mu &= \langle u \rangle + \int_{\epsilon_c}^{\infty} d\epsilon f(\epsilon) + \int_{-\infty}^{\epsilon_c} d\epsilon f(\epsilon) \\ &= \langle u \rangle + \Delta\mu^{\text{excl}} + \Delta\mu^{\text{other}}\end{aligned}\quad (1)$$

図2は、15種類のポリペプチドについて、(1)に従って水溶液系・純固体系 $\Delta\mu$ を $\langle u \rangle$, $\Delta\mu^{\text{excl}}$ に分解し、各成分の溶媒差と $\Delta(\Delta\mu)$ の溶媒差の相関解析を行ったものである。左側は排除体積効果などの高エネルギーな間接エントロピーロス項である $\Delta\mu^{\text{excl}}$ と $\Delta(\Delta\mu)$ の相関関係であり、相関係数 $r=0.86$ と高い相関を示した。一方、右側は溶質-溶媒分子間直接相互作用エネルギー項 $\langle u \rangle$ との相関関係であり、相関係数 $r=0.13$ とほぼ相関がないという結果になった。これにより、ポリペプチド水溶解度を規定するのは、直接的なペプチド-溶媒間相互作用エネルギーではなく、排除体積効果のような高エネルギー間接エントロピー効果 $\Delta\mu^{\text{excl}}$ であることが強く示唆された。排除体積効果は溶媒中のポリペプチド分子の溶質サイズで近似することができる量であり、溶媒中で柔らかく様々なコンフォメーションを取ることができるポリペプチドの特性が水溶解度に強く反映されることが明らかになった。

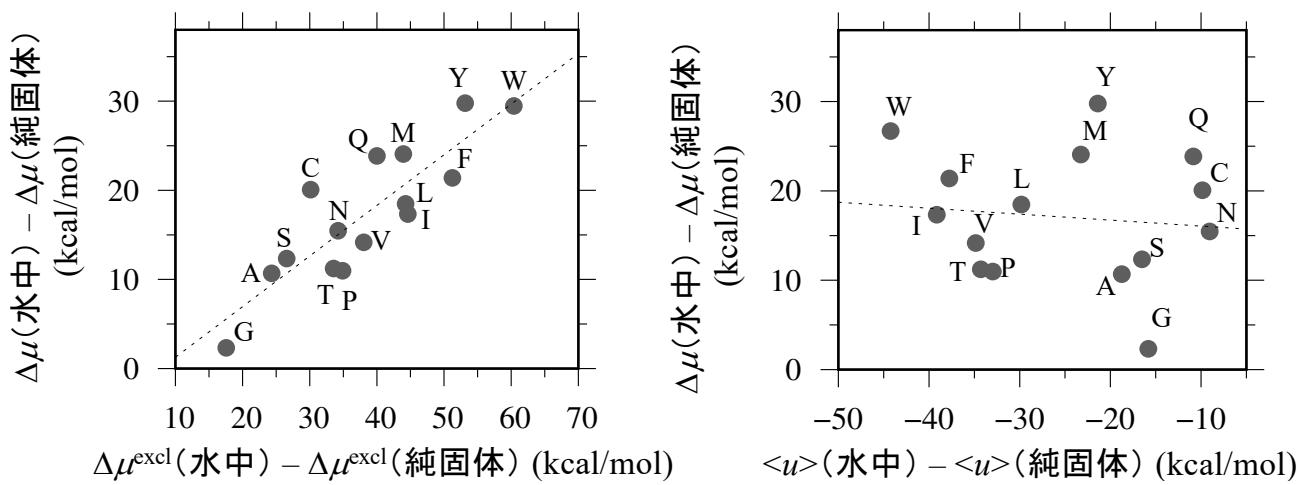


図2: (1)式に基づく、ポリペプチド水溶解度の自由エネルギー成分分解によるエネルギー相関解析。左は

間接自由エネルギー項の高エネルギー成分 $\Delta\mu^{\text{excl}}$ と $\Delta(\Delta\mu)$ の相関解析であり、相関係数 $r=0.86$ である。

右は溶質-溶媒直接エネルギー項 $\langle u \rangle$ と $\Delta(\Delta\mu)$ の相関解析であり、相関係数 $r=-0.13$ となった。

【重量測定実験によるポリペプチド水溶解度との比較】 図3は、 $\Delta(\Delta\mu)$ 計算から見積もった水溶解度と、京都大学グループの実験で合成された人工ポリペプチドを水に溶解させ、水溶液系のペプチド濃度 C_w (mM)を測定することにより評価したペプチド水溶解度の結果を比較したものである。実験値(exp)は $-RT \log(C_w)$ (kcal/mol)、計算値(comp)は $\Delta(\Delta\mu) - RT \log(C_b)$ (kcal/mol)であり、 C_b はペプチド固体系のペプチド濃度(mM)を表し、 R, T はそれぞれ気体定数及び温度(300 K)である。図中の破線は最小二乗法でフィッティングした近似直線、図中のアルファベットは人工ポリペプチドを構成するアミノ酸の略号である。S,T,L,Vといったペプチドを除いて親水性・疎水性ペプチド共に実験による水溶解度と計算から見積もった水溶解度の相関係数は0.5程度であり、定性的な相関があることが分かった。実験値と計算値で大きく乖離が見られたのは親水性アミノ酸であるS,T及び疎水性アミノ酸であるL,Vであり、S,Tでは実験よりも水溶解度を過小評価、L,Vでは過大評価する結果となった。本年度は計算の実施のみに留まっており、実験と計算の乖離に関する解析は今後の課題である。

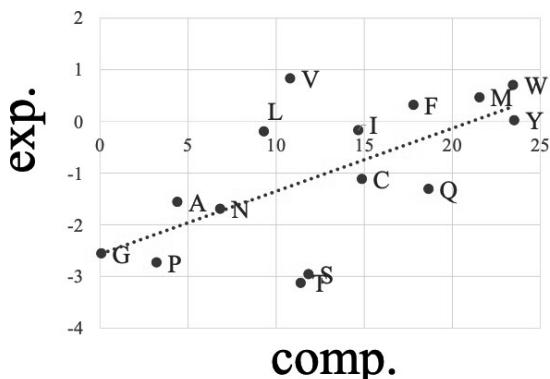


図3: $\Delta(\Delta\mu)$ から算出したペプチド水溶解度(comp.)と、京都大学グリーによって実施された重量分析によるテトラホモペプチド水溶解度測定結果(exp.)との比較。縦軸は実験で測定した $-RT \log(C_w)$ (kcal/mol)、横軸は計算から評価した $\Delta(\Delta\mu)-RT \log(C_b) = -RT \log(C_w)$ (kcal/mol)であり、 C_w, C_b はそれぞれペプチド水溶液中、ペプチド固体系のペプチド濃度(mM)を表す。破線は最小二乗法フィッティングによる近似直線であり、図中のアルファベットはペプチドを構成するアミノ酸の略号を表している。

【文献】

- 1) D.A. Case, et. al., Amber 2025, University of California, San Francisco. (2025).
- 2) D.A. Case, et. al., AmberTools. J. Chem. Inf. Model. 63, 6183-6191 (2023).
- 3) Abraham, M. et. al.: "GROMACS 2024 Manual", Zenodo. (2024).
- 4) S. Sakuraba and N. Matubayasi: J. Comput. Chem. 35, 1592–160 (2014).

2. 論文

3. 学会発表

4. その他

- (1) 「全原子モデルを用いた人工ポリペプチドの溶媒溶解性の系統的解析」
第11回「富岳」を中心とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会 THE GRANDHALL 東京都
2024/10/25-26
- (2) 「4残基ポリペプチドの水溶解度」理化学研究所和光事業所大河内ホール 埼玉県 2025/12/2-3
- (3) 「全原子モデルを用いた人工ポリペプチドの溶媒溶解性の解析」2024年度マテリアルDX全体報告会議 東京大学武田先端知ビル武田ホール 東京都 2025/3/17

V 資料

1. 研究業績一覧

2024(令和6)年度

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
佐藤 徹					
1	Yohei Haketa, Kaifu Komatsu, Hiroi Sei, Hiroki Imoba, Wataru Ota, Tohru Sato, Yu Murakami, Hiroki Tanaka, Nobuhiro Yasuda, Norimitsu Tohnai, Hiromitsu Maeda	Enhanced Solid-State Phosphorescence of Organoplatinum π -Systems by Ion-Pairing Assembly	<i>Chem. Sci.</i>	15(3), 964-973	2024
2	Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato	Intersystem Crossing as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes: A Unified View of Nonradiative Transitions in a Molecule	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	97(2), uoad020	2024
3	Yohei Haketa, Maho Kawami, Wataru Ota, Tohru Sato, Hiromitsu Maeda	Ion-Pairing Assemblies of Anion-Responsive Helical PtII Complexes	<i>Org. Chem. Front.</i>	11(23), 6651-6659	2024
4	Aoi Nakagawa, Wataru Ota, Takumi Ehara, Yusuke Matsuo, Kiyoshi Miyata, Ken Onda, Tohru Sato, Shu Seki, Takayuki Tanaka	Synthesis of Substituent-Free Dioxadi-aza[8]circulene to Investigate Intermolecular Interactions and Photophysical Properties	<i>Chem. Commun.</i>	60(99), 14770-14773	2024
5	Yohei Hattori, Daiya Suzuki, Wataru Ota, Tohru Sato, Rapenne Gwénaël, Yoshitane Imai	Magnetic Circular Dichroism of Luminescent Triarylmethyl Radicals	<i>J. Phys. Chem. Lett.</i>	15(47), 11696-11700	2024
春田 直毅					
1	Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato	Intersystem Crossing as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes: A Unified View of Nonradiative Transitions in a Molecule	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	97(2), uoad020	2024
2	Satoru Kosaka, Kentaro Kurebayashi, Naoki Yamato, Hiroshi Tanaka, Naoki Haruta, and Masanori Yamamoto	Thiyl chemistry: cysteine-catalyzed maleate isomerization via aqueous thiyl radical processes	<i>Green Chem.</i>	27, 2743-2750	2024
大田 航					
1	Yohei Haketa, Kaifu Komatsu, Hiroi Sei, Hiroki Imoba, Wataru Ota, Tohru Sato, Yu Murakami, Hiroki Tanaka, Nobuhiro Yasuda, Norimitsu Tohnai, Hiromitsu Maeda	Enhanced Solid-State Phosphorescence of Organoplatinum π -Systems by Ion-Pairing Assembly	<i>Chem. Sci.</i>	15(3), 964-973	2024
2	Wataru Ota, Motoyuki Uejima, Naoki Haruta, Tohru Sato	Intersystem Crossing as Vibronically Induced Phonon Emission and Absorption Processes: A Unified View of Nonradiative Transitions in a Molecule	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	97(2), uoad020	2024
3	Yohei Haketa, Maho Kawami, Wataru Ota, Tohru Sato, Hiromitsu Maeda	Ion-Pairing Assemblies of Anion-Responsive Helical PtII Complexes	<i>Org. Chem. Front.</i>	11(23), 6651-6659	2024
4	Aoi Nakagawa, Wataru Ota, Takumi Ehara, Yusuke Matsuo, Kiyoshi Miyata, Ken Onda, Tohru Sato, Shu Seki, Takayuki Tanaka	Synthesis of Substituent-Free Dioxadi-aza[8]circulene to Investigate Intermolecular Interactions and Photophysical Properties	<i>Chem. Commun.</i>	60(99), 14770-14773	2024
5	Yohei Hattori, Daiya Suzuki, Wataru Ota, Tohru Sato, Rapenne Gwénaël, Yoshitane Imai	Magnetic Circular Dichroism of Luminescent Triarylmethyl Radicals	<i>J. Phys. Chem. Lett.</i>	15(47), 11696-11700	2024

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
中村 泰司					
1	Taiji Nakamura, Hiromasa Tanaka, and Kazunari Yoshizawa	配位子構造のスクリーニングによる高活性な窒素固定錯体触媒の開発を目指した理論研究	<i>Organometallic News</i>	2月7日	2025
2	Taiji Nakamura, George Schoendorff, Dong-Sheng Yang, and Mark S. Gordon	Systematic Investigation of Electronic States and Bond Properties of LnO, LnO+, LnS, and LnS+ (Ln = La–Lu) by Spin–Orbit Multiconfiguration Perturbation Theory	<i>J. Chem. Theory Comput.</i>	21, 267-282	2025
3	Tamotsu Uchiyama, Taiji Nakamura, Miyabi Hiyama, and Takako Kudo	Theoretical study of Si/C mixed analogues of platonic hydrocarbons	<i>Comput. Theor. Chem.</i>	1246, 115116	2025
4	Akihito Egi, Hiromasa Tanaka, Taiji Nakamura, Kazuya Arashiba, Yoshiaki Nishibayashi, and Kazunari Yoshizawa	Computational screening of PCP-type pincer ligands for Mo-catalyzed nitrogen fixation	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	97, uoae041	2024
平尾 公彦					
1	Kimihiko Hirao, Takahito Nakajima, Bun Chan	Exploiting the Correlation between the 1s, 2s, and 2p Energies for the Prediction of Core-Level Binding Energies of Si P, S, and Cl species	<i>J. Phys. Chem. A “Trygve Helgaker Festschrift”</i>	128 (33) 6879-6897	2024
2	Ahn, Dae-Hwan; Nakajima, Takahito; Hirao, Kimihiko; Song, Jong-Won	Long-range corrected density functional theory including a two-Gaussian Hartree-Fock operator for high accuracy core-excitation energy calculations of both the 2nd- and 3rd-row atoms (LC2gau-core-BOP)	<i>Journal of Chemical Theory and Computation,</i>	20 (16), 7113-7125	2024
3	Mouna El Khabchi, Shi-Wei Liu, Hua-Jun Shawn Fan, Mohammed Mcharfi, Mohammed Benzakour, Jong-Won Song, Ho-Jin Lee, and Kimihiko Hirao	Neighbor Effect on Conformational Spaces of Alanine Residue in Azapeptides	<i>Heliyon</i>	10(12):e33159	2024
4	Hirao, K.; Nakajima, T.; Chan, B.; Lee, H-J	The verification of delta SCF and Slater's transition state theory for the calculation of core ionization energy	<i>J.Comput.Chem</i>	45, 183-192.	2024
高塚 和夫					
1	Kazuo Takatsuka	Analysis of quantum mechanics with real-valued Schrödinger equation, single-event quantum-path dynamics, Maupertuis path in parameter space, and branching paths beyond semiclassics	<i>arXiv:2501.08606</i>	https://doi.org/10.48550/arXiv.2501.08606	2025
2	Yasuki Arasaki, Kazuo Takatsuka	Orbital perspective of the nature of chemical bonds and potential energy surfaces: 55 years after Wahl's molecular orbital representation of homopolar diatomic molecules	<i>PCCP</i>	https://doi.org/10.1039/D5CP01870F	2025
3	Kazuo Takatsuka	Geometrical decomposition of nonadiabatic interactions to collective coordinates in many-dimensional and many-state mixed fast–slow dynamics	<i>J. Chem. Phys.</i>	160, 044112 (7 pages)	2024
4	Yasuki Arasaki, Kazuo Takatsuka	Sonification of molecular electronic energy density and its dynamics	<i>RSC Advances</i>	14, 9099-9109	2024
5	Kazuo Takatsuka, Yasuki Arasaki	Mechanism of quantum chaos in molecular nonadiabatic electron dynamics	<i>J. Chem. Phys. (2024)</i>	161, 061101 (6 pages)	2024
加藤 立久					
1	Tatsuya Higaki, Kanata Tanaka, Hitoshi Izu, Shunya Oishi, Koki Kawamoto, Mizuki Tada, W. M. C. Sameera, Ryo Takahata, Toshiharu Teranishi, Soichi Kikkawa, Seiji Yamazoe, Takuya Shiga, Masayuki Nihei, Tatsuhsisa Kato, Roger E. Cramer, Zihan Zhang, Karsten Meyer, and Yasuhiro Ohki	An Icosahedral 55-Atom Iron Hydride Cluster Protected by tri-tert-Butylphosphines	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	1470, 3215-3222	2025

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
笛井 理生					
1	Shiori Iida, Satoru Ide, Sachiko Tamura, Masaki Sasai, Tomomi Tani, Tatsuhiko Goto, Michael Shribak, and Kazuhiro Maeshima	Orientation-independent-DIC imaging reveals that a transient rise in depletion attraction contributes to mitotic chromosome condensation	<i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i>	121(36), 2403153121	2024
2	Shin Fujishiro and Masaki Sasai	Three-dimensional simulation of whole-genome structuring through the transition from anaphase to interphase	<i>Computational Methods for 3D Genome Analysis</i>	293-308	2024
3	Shin Fujishiro and Masaki Sasai	Three-dimensional memory of nuclear organization through cell cycles	<i>J. Chem. Phys.</i>	162(6), 065103	2025
4	Shin Fujishiro, Masaki Sasai, and Kazuhiro Maeshima	Chromatin domains in the cell: phase separation and condensation	<i>Current Opinion in Structural Biology</i>	91, 103006	2025
吉澤 一成					
1	Tomoya Ishizuka, Taichiro Nishi, Nanase Namura, Hiroaki Kotani, Yasuko Osakada, Mamoru Fujitsuka, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Takahiko Kojima	Photocatalytic Substrate Oxidation Catalyzed by a Ruthenium (II) Complex with a Phenazine Moiety as the Active Site Using Dioxygen as a Terminal Oxidant	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	146 (48), 33023-33034	2024
2	Ryoga Toyoshima, Yohei Kametani, Kazunari Yoshizawa, Yoshihito Shiota	The Effect of Intramolecular Proton Transfer on the Mechanism of NO Reduction to N2O by a Copper Complex: A DFT Study	<i>Inorg. Chem.</i>	63 (46), 22138-22148	2024
3	Yuta Tsuji, Kazuki Okazawa, Toshinobu Tatsumi, Kazunari Yoshizawa	σ Interference: Through-Space and Through-Bond Dichotomy	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	146 (47), 32506-32518	2024
4	Koichiro Nishimoto, Naoki Noto, Yohei Kametani, Bendik Grømer, Chihaya Murata, Hiroko Okuwa, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Susumu Saito	(PNCP) Ir vs (PNNP) Ir: Neutral Iridium Complex for Direct Hydrogenation of Carboxylic Acids	<i>Organometallics</i>	43 (23), 3013-3021	2024
5	Amit Shrestha, Yosuke Sumiya, Kazuki Okazawa, Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa	Density Functional Theory Study of Adhesion Mechanism between Epoxy Resin Cured with 4,4'-Diaminophenyl Sulfone and 4,4'-Diaminophenylmethane and Carboxyl Functionalized Carbon Fiber	<i>Langmuir</i>	40 (41), 21573-21586	2024
6	Taku Wakabayashi, Yohei Kametani, Eimi Tanahashi, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Jieun Jung, Susumu Saito	Ferrocenyl PNNP Ligands-Controlled Chromium Complex-Catalyzed Photocatalytic Reduction of CO2 to Formic Acid	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	146 (38), 25963-25975	2024
7	Shogo Kuriyama, Yuye Zhang, Hiromasa Tanaka, Asuka Konomi, Akihito Egi, Kazunari Yoshizawa, Yoshiaki Nishibayashi	Synthesis and Reactivity of Iron-Oxocyclohexadienyl Complexes toward Proton-Coupled Electron Transfer	<i>Organometallics</i>	43 (21), 2736-2746	2024
8	Kohei Kikkawa, Yosuke Sumiya, Kazuki Okazawa, Kazunari Yoshizawa, Yoshimitsu Itoh, Takuzo Aida	Thiourea as a “polar hydrophobic” hydrogen-bonding motif: application to highly durable all-underwater adhesion	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	146 (30), 21168-21175	2024
9	Yosuke Sumiya, Ryoma Kaji, Kazunari Yoshizawa	Surface treatment of poly (p-phenylene sulfide) and its impact on adhesion of epoxy resin: Theoretical insights	<i>Chem. Phys. Lett.</i>	847, 141370	2024
10	Satoru Yamamoto, Yuta Tsuji, Riichi Kuwahara, Kazunari Yoshizawa, Keiji Tanaka	Effect of condensed water at an alumina/epoxy resin interface on curing reaction	<i>Langmuir</i>	40 (24), 12613-12621	2024
11	Akihito Egi, Hiromasa Tanaka, Taiji Nakamura, Kazuya Arashiba, Yoshiaki Nishibayashi, Kazunari Yoshizawa	Computational screening of PCP-type pincer ligands for Mo-catalyzed nitrogen fixation	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i>	97 (5), uuae041	2024
12	Ryoji Hatakenaka, Nanami Nishikawa, Yuji Mikata, Hiroki Aoyama, Kohsuke Yamashita, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Yuuya Kawasaki, Katsuhiro Tomooka, Shin Kamijo, Fumito Tani, Toshihiro Murafuji	Efficient Synthesis and Structural Analysis of Chiral 4, 4 - Biazulene	<i>Chem. Eur. J.</i>	30 (24), e202400098	2024

No.	Authors	Title	Journal	Volume(Number), first page to last page	year
13	Shintaro Saeki, Daisuke Kawaguchi, Yuta Tsuji, Satoru Yamamoto, Kazunari Yoshizawa, Keiji Tanaka	Electronic interaction of epoxy resin with copper at the adhered interface	<i>Langmuir</i>	40 (18), 9725-9731	2024
14	Shinji Kanegawa, Shu-Qi Wu, Ziqi Zhou, Yoshihito Shiota, Takumi Nakanishi, Kazunari Yoshizawa, Osamu Sato	Polar Crystals Using Molecular Chirality: Pseudosymmetric Crystallization toward Polarization Switching Materials	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	146 (16), 11553-11561	2024
15	Hideki Sugimoto, Akira Yoneda, Mayuka Yano, Kazunobu Sato, Yoshihito Shiota, Mayuko Miyanishi, Kazunari Yoshizawa, Shinobu Itoh	Redox-active tin (ii) complexes with sterically demanding o-phenylenediamido ligands and their reactivity with organic azides	<i>Dalton Trans.</i>	54 (12), 5025-5034	2025
16	Taichi Mitsumoto, Taiji Nakamura, Hiromasa Tanaka, Kazunari Yoshizawa, Yoshiaki Nishibayashi	Cooperative Ammonia Formation Catalyzed by Molybdenum and Samarium Complexes	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>	e202507061	2025
17	中村 泰司、田中 宏昌、吉澤 一成	配位子構造のスクリーニングによる高活性な窒素固定錯体触媒の開発を目指した理論研究	<i>Organometallic News</i>	page 2-7	2025
18	Tsukasa Abe, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa	A Theoretical Approach for Investigating the Reaction Mechanism of Methane–Methanol Conversion, and Application of the Approach to Catalysts	<i>Redox-based Catalytic Chemistry of Transition Metal Complexes, Royal Society of Chemistry</i>	Chapter 9, 152-165	2024

新崎 康樹

1	Kazuo Takatsuka and Yasuki Arasaki	Mechanism of quantum chaos in molecular nonadiabatic electron dynamics	<i>J. Chem. Phys.</i>	161, 061101	2024
2	Yasuki Arasaki, Kazuo Takatsuka	Orbital perspective of the nature of chemical bonds and potential energy surfaces: 55 years after Wahl's molecular orbital representation of homopolar diatomic molecules	<i>PCCP</i>	https://doi.org/10.1039/D5CP01870F	2025
3	Yasuki Arasaki, Kazuo Takatsuka	Sonification of molecular electronic energy density and its dynamics	<i>RSC Advances</i>	14, 9099-9109	2024

藤城 新

1	Shin Fujishiro, and Masaki Sasai	Three-dimensional memory of nuclear organization through cell cycles	<i>The Journal of Chemical</i>	162(6), 065103:1-18	2025
2	Shin Fujishiro, Masaki Sasai, Kazuhiro Maeshima	Chromatin domains in the cell: Phase separation and condensation	<i>Current Opinion in Structural Biology</i>	91:103006	2025

金丸 恒大

1	Yuki Seno, Kodai Kanemaru, Shoichi Tanimoto, Tatsuhiko Miyata, Haruyuki Nakano, and Norio Yoshida	Applicability of integral equation theory of molecular liquids to the hydration thermodynamic response to charged particles	<i>Physica A</i>	674(15),130787	2025
---	---	---	------------------	----------------	------

2. 共同研究者受入れ状況

2024(令和6)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			2024/1/1-2024/12/31	ダイキン工業 (G A P ファンド) O I 機構	新規な熱電変換機構に基づくフレキシブル有機熱電変換材料の理論設計
佐藤 徹	上島 基之 大田 航	民間等共同研究員	2024/4/1-2025/3/31	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

2024(令和6)年度

職 名	氏 名	期間⑩	期間⑪	目的 地
研 究 員	笹 井 理 生	2024/6/30	2024/7/6	韓国
特 定 助 教	大 田 航	2024/6/17	2024/6/30	ドイツ
研 究 員	吉 澤 一 成	2024/9/1	2024/9/5	インドネシア
研 究 員	金 丸 恒 大	2024/9/9	2024/9/14	タイ
研 究 員	笹 井 理 生	2024/10/7	2024/10/14	中国
研 究 員	金 丸 恒 大	2024/12/17	2024/12/21	タイ

4. 留学生受入一覧

2024(令和6)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6年4月1日～ 令和7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



令和7年2月6日(木)

会場：京都大学 福井謙一記念研究センター

〒606-8103 京都市左京区高野西開町34-4

お申し込みにつきましては、以下のURLをご参照ください（2025年1月20日締切）

問合せ先：大田 航／E-mail: sympo2024@fukui.kyoto-u.ac.jp

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

<https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/sympo2024>



第 20 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 2025 年 2 月 6 日 (木) 13:00 – 17:25

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 徹 (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) :

●吉澤 一成 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 13:05 – 14:05

「複雑化学系の応用量子化学研究」

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)

●恩田 健 (九州大学大学院 理学研究院) 14:15 – 15:15

「時間分解分光と量子化学計算による光機能性材料の励起状態過程の解明」

座長：佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)

福井謙一奨励賞 受賞講演 (Award Lecture) :

●受賞者：清水 大貴 (京都大学大学院工学研究科) 15:25 – 15:55

「交換相互作用制御に基づく有機開殻電子系の機能開拓」

ポスターセッション (Poster Session) : **3 階大会議室**

16:05 – 17:25

懇親会 (Banquet) : **1 階多目的ルーム**

17:35 – 19:00

ポスターリスト (3 階大会議室 16:05 ~ 17:25)

- ✓ 番号が奇数の方は前半(16:05–16:45)、番号が偶数の方は後半(16:45–17:25)には、ポスター ボードの前で発表するようにしてください。
- ✓ Authors with odd and even poster numbers should be present at the poster during the first half (16:05–16:45) and the second half (16:45–17:25) of the session, respectively.

1. CASPT2/PCM による計算

○西本 佳央(京大院理)

2. [Ni(phen)3]2+のモデルハミルトニアンの開発と吸収スペクトルの解析

○杉村 怜音[1]、井内 哲[2]、佐藤 啓文[1,3](京大院工[1]、名古屋大院情報[2]、京大福井セ[3])

3. Scaled Schrödinger equation・静電力理論・SAC-CI 理論の複合理論

○中辻 博(量子化学研究協会)

4. キュバン異性化反応におけるJahn-Teller 効果

○杉村 潤輝[1,2]、春田 直毅[1,2]、竹邊 日和[2]、松原 誠二郎[2]、佐藤 徹[1,2](京大福井セ[1]、京大院工[2])

5. 液体の積分方程式理論を用いた溶液中高分子の慣性半径に関する理論的研究

○金丸 恒大[1,2]、山口 育[3]、吉田 紀生[2](京大福井セ[1]、名大院情報[2]、名大院工[3])

6. フェナレニル型配位子を有するガリレンの構造と電子状態に関する量子化学計算

○川崎 愛矢[1]、岸 亮平[1,2,3]、向井 虹渡[4]、兒玉 拓也[3,4]、鳶巣 守[3,4]、多田 幸平[1]、北河 康隆[1,2,3,5](阪大院基礎工[1]、阪大QIQB[2]、阪大ICS-OTRI[3]、阪大院工[4]、阪大OTRI-Spin[5])

7. 同符号帯電物質の運動曲率振動による質量固定

○杉山 順一(産総研)

8. PdCx ナノキューブの構造・電子状態に関する理論研究

○松山 快[1]、多田 幸平[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4](阪大院基礎工[1]、阪大QIQB[2]、阪大ICS-OTRI[3]、阪大OTRI-Spin[4])

9. 表面吸着ダブルデッカー型イットリウム(Ⅲ)–フタロシアニнат錯体に関する理論研究

○廣田 陸哉[1]、多田 幸平[2]、岸亮 平[2]、北河 康隆[2](阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2])

10. キラルアルコールとテルビウム(III)イオンからなる錯体の円二色性スペクトルに関する理論研究

○柴田 果歩[1]、太田 光城[1]、多田 幸平[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OTRI-Spin[6]）

11. ニトロキシドラジカルを配位子に含むランタノイド錯体の磁気特性に関する理論研究

○高 海斗[1]、井上 廉[1]、益田 晃希[1]、多田 幸平[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OTRI-Spin[5]）

12. ミオグロビン活性中心における環状 π 共役系の変化が酸素親和性に及ぼす影響に関する理論研究

○原田 茉依[1]、多田 幸平[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OTRI-Spin[6]）

13. Theoretical study on photophysical processes of triphenylamine-benzothiadiazole compounds

○Zhengnan Hu[1,2]、Naoki Haruta[1,2]、Tohru Sato[1,2]（Grad. Sch. of Eng., Kyoto Univ.[1]、FIFC, Kyoto. Univ.[2]）

14. ヘプタジン誘導体の発光機構と一重項-三重項ギャップ反転機構の理論的考察

○石戸 景[1]、浦谷 浩輝[2]、佐藤 啓文[2,3]（京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3]）

15. 第一原理DFT+U+V 法により補正した酸化パラジウムの電子構造

○石川 晃久[1,2]、大田 航[1,2]、佐藤 徹[1,2]（京大福井セ[1]、京大院工[2]）

16. 多熱浴系におけるスピニーボソン模型の動力学計算ソフトウェアの開発とその量子カルノーサイクルへの応用

○小柳 翔輝、谷村 吉隆（京大理）

17. Diels-Alder 反応のメカノケミカル反応性に関する理論的研究

○堺 稚菜[1,2]、ゴネ ロリ[3,4]、春田 直毅[1,2]、佐藤 徹[1,2]、バロン ミシェル[3]（京大福井セ[1]、京大院工[2]、アルビ国立高等鉱業学校[3]、バーミンガム大[4]）

18. ビスペリアズレン誘導体の構造および電子状態に関する理論研究

○松本 優太[1]、島田 魁智[2]、岸 亮平[2,3,4]、多田 幸平[2]、北河 康隆[2,3,4,5]（阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大QIQB[3]、阪大ICS-OTRI[4]、阪大OTRI-Spin[5]）

19. 熱活性型遅延蛍光を示すトリアジンコアカルバゾールデンドリマーの振電構造

○若林 未己[1,2]、大田 航[1,3]、安楽 混允[4]、アルブレヒト 建[5]、佐藤 徹[1,3]（京大福井セ[1]、京大工[2]、京大院工[3]、九大院総理工[4]、九大先導研[5]）

20. 粗断熱描像における共鳴Raman 散乱強度の定式化

- 八木 拓巳[1,2]、大田 航[1,3]、春田 直毅[1,3]、佐藤 徹[1,3](京大福井セ[1]、京大工[2]、京大院工[3])

21. 第一原理バンド計算を用いたLi-inserted trioxotriangulene 結晶の理論研究

- 北野 幸親[1]、多田 幸平[2]、岸 亮平[2,3,4]、北河 康隆[2,3,4,5](阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大QIQB[3]、阪大ICS-OTRI[4]、阪大OTRI-Spin[5])

22. Kekulé 構造を持ちながら高スピン基底状態を示す新奇Blatter ラジカル二量体の理論的考察

- 篠塚 智仁[1]、山田 孟[1]、清水 大貴[1]、松田 建児[1,2] (京大院工[1]、京大福井セ[2])

23. NBO 解析を用いたα フッ素化ジペプチドの立体配座に関する研究

- 大志茂 輝[1]、杉山 佳奈美[2]、吉謝 源太[3]、吾郷 友宏[4]、新垣 尚熙[5]、源河 理子[5]、有光 曜[6]、佐藤 啓文[2,7]、東 雅大[8](京大工[1]、京大院工[2]、琉大研究基盤統括セ[3]、兵庫県立大院理[4]、琉大院理工[5]、琉大理[6]、京大福井セ[7]、名大院情報[8])

24. 異種分子からなる対称3量体モデルにおけるシングレットフィッショナミクスに関する理論研究

- 宮本 孟[1]、岡田 健治[1]、多田 幸平[1,2]、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OTRI-Spin[5])

25. 縮環π 共役低分子の溶液状態における輻射および無輻射遷移速度のエネルギーギャップ則

- 佐藤 友揮[1]、三木江 翼[2]、尾坂 格[2]、大北 英生[1]([1] Grad. Sch. of Eng., Kyoto Univ., [2] Grad. Sch. of Adv. Sci. and Eng., Hiroshima Univ.)

26. 微視的溶質-溶媒相互作用を考慮したPasserini 反応中の水の特異な溶媒効果の解明

- 野竹 将司[1]、市川 雄大[2]、鈴木 さら[2]、杉山 佳奈美[2]、佐藤 啓文[2,3](京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3])

27. 反芳香族分子のπ 積層系の構造と電子状態に関する荷電状態依存性についての理論研究

- 西野 康生[1]、岸 亮平[2,3,4]、杉森 亮太[2]、川上 翔平[1]、多田 幸平[2]、北河 康隆[2,3,4,5](阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大QIQB[3]、阪大ICS-OTRI[4]、阪大OTRI-Spin[5])

28. 環状π 共役分子の磁場誘導環電流と磁気遮蔽定数の計算と解析

- 川上 翔平[1]、岸 亮平[2,3,4]、杉森 亮太[2]、多田 幸平[2]、北河 康隆[2,3,4,5](阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大QIQB[3]、阪大ICS-OTRI[4]、阪大OTRI-Spin[5])

29. AFIR 法を用いたGaN(0001)面上のNH₃分解過程の理論解析

- 角田 和貴[1]、杉山 佳奈美[2]、佐藤 啓文[2,3](京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3])

30. 高速な輻射冷却を示す炭素クラスター負イオンC₆の吸収スペクトルにおける振電構造の再帰属

○高見 哲理[1,2]、春田 直毅[1,2]、加藤 立久[1]、佐藤 徹[1,2]（京大福井セ[1]、京大院工[2]）

31. 逆水性ガスシフト反応に活性を示すSrTi_{1-x}Mn_xO₃へのPd合金添加効果

○後藤 啓太[1]、小林 みのり[1]、浪花 晋平[1]、井口 翔之[1]、寺村 謙太郎[1,2]（京大院工[1]、京大福井セ[2]）

32. Study of configuration space of water coordination structure using generalized-RMSD

○山本 裕生（京大院理）

33. 大環状分子を有するカーボンナノチューブ生成反応の理論追跡

○永田 周慈[1]、高畠 一真[1]、湯村 尚史[1]（京工纖大院工芸[1]）

34. 弱開殻性を有する縮環π共役分子系が示す非線形光学特性の周波数依存性に関する理論研究

○原田 知輝[1]、岸 亮平[1,2,3]、杉森 亮太[1]、多田 幸平[1]、北河 康隆[1,2,3,4]（阪大院基礎工[1]、阪大QIQB[2]、阪大ICS-OTRI[3]、阪大OTRI-Spin[4]）

35. Mixed-reference spin flip 方を用いた励起状態の解析

○中田 浩弥[1]、Choi Ho Cheol[2]（京大福井セ[1]、Kyungpook National University[2]）

36. 遺伝子制御の熱力学: クロマチンドメインの核形成理論

○藤城 新（京大福井セ）

6. セミナー

Seminar



Speaker: Professor Ram Kinkar Roy

(Dept. of Chemistry, BITS-PILANI, Pilani; India)

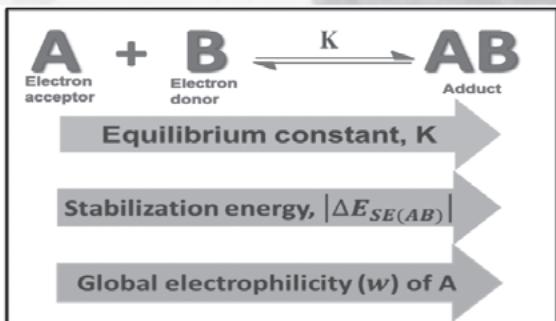
Title: Correlating Density Functional Reactivity Theory (DFRT) Based Stabilization Energy with Equilibrium Constant and Charge Transfer Limit of a Chemical Adduct

Date and Time: May 24 (Friday), 2024; PM 3:00 to 4:30

Place: The 1'st floor Room 106

Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University,
Nishi-biraki-cho 34-4, Takano, Sakyo-ku, 606-8103 Kyoto

Abstract: Some formal developments as well as applications of DFRT based CDASE (Comprehensive Decomposition Analysis of Stabilization Energy) scheme will be discussed. Topics which will be covered includes (i) Full profiles of the kinetic and thermodynamic energy components of the DFRT based stabilization energy while exploring the role of external potential in elucidating the charge-transfer limit in a chemical adduct (ii) Establishing the correlation of equilibrium constant with DFRT based stabilization energy through a combined approach based on chemical thermodynamics, statistical thermodynamics and density functional reactivity theory, and (iii) Validation of Hammett's Linear Free Energy Relationship (LFER) through DFRT.



Contact: Kimihiko Hirao

7. 京都大学 福井謙一記念研究センター 見学会

京都大学 福井謙一記念研究センター 見学会

対象 理工化学科1回生

(2回生以上や他学部他学科からの参加も歓迎します)

日時 令和6年4月13日（土）10時30分～12時

[注] 開催時刻が変更になりました。

集合場所 福井謙一記念研究センター 3階会議室

スケジュール

10:30～11:30 京都大学名誉教授 田中一義先生

「福井謙一博士の生い立ちとノーベル化学賞」

11:30～12:00 センター内見学



アジア初のノーベル化学賞を受賞された福井謙一博士

問い合わせ・連絡先

福井謙一記念研究センター教授 佐藤 徹

tsato@fukui.kyoto-u.ac.jp

必須ではありませんが、参加人数把握のため、上記まで連絡をいただけます。



当センター2階 福井謙一博士記念室



京都大学吉田キャンパスから：

市バス「京大正門前」、「百万遍」より65系統「高野・国際会館駅・岩倉行」または206系統「高野・北大路バスターミナル行」乗車。「高野橋東詰」で下車。川沿いに南へ徒歩5分。



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



京都大学

8. 2024 年度「産業応用のための基礎化学講座」パンフレット

京都大学福井謙一記念研究センター主催

2024年度 産業応用のための基礎化学講座

「応用をやるには、基礎をやれ」 福井謙一博士が“終生の師”と呼び化学の道に進むきっかけを作られた喜多源逸博士の言葉です。喜多博士は本学化学系における基礎重視の学風を築かれた方でもあります。2018年の福井博士誕百年をきっかけとして、喜多博士に源を発するこの伝統を再認識し、産業で研究開発を行っておられる技術者・研究者の方を対象とした「産業応用のための基礎化学講座」を2019年度より開講しております。

最先端化学を理解するための基礎概念や実験的手法の原理等を習得する全6回の講座内容となっています（詳細は裏面）。各回、懇親会も予定しております。ぜひ、ご参加ください。

対象：企業において研究開発に携わっておられる方

2024年6月～2025年1月

全6回12コマ（1コマ90分）

**京都大学福井謙一記念研究センター
3F 大会議室 / ハイフレックス (Zoom)
〒606-8103
京都市左京区高野西開町34-4**



各回、オンライン（Zoom）でも受講いただけます。
オンラインでご参加される回については、その都度、URLをお知らせします。

最新の情報ならびにWEB申込につきましては
以下のURLをご参照ください。
<https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/openlec2024.html>

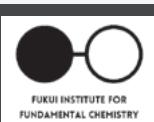
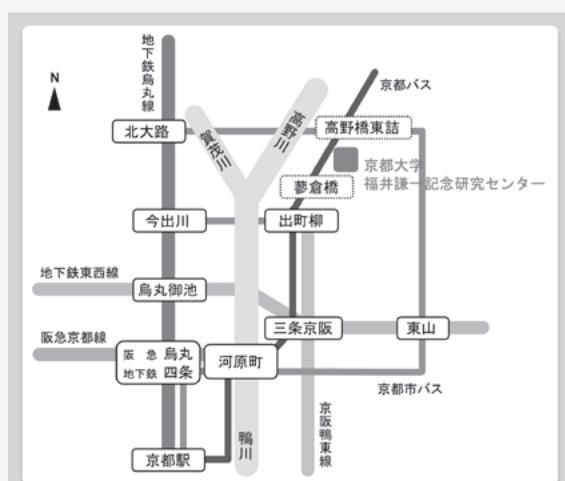


受講料：8,700円（懇親会会費は別途徴収）

お支払い後のご返金は致しかねますので
あらかじめご了承ください。

定員になり次第、締め切らせていただきます。

主催：京都大学福井謙一記念研究センター
共催：公益社団法人日本化学会



FUKUI INSTITUTE FOR
FUNDAMENTAL CHEMISTRY



京都大学

本講座では、最先端の研究とその底流にある基礎を学ぶことを通じて、企業での研究開発にも役立つと思われる知識や技術を習得していただくことを目指します。



【講座内容】

第1回 2024年6月26日（水）
水落 憲和（京都大学化学研究所 教授）
ダイヤモンドを用いた高感度量子センサ
13:30～16:45 講義（2コマ） 17:00～18:00 懇親会

第2回 2024年7月31日（水）
上高原 浩（京都大学大学院農学研究科 教授）
セルロース誘導体の合成と構造－物性－機能相関
13:30～16:45 講義（2コマ） 17:00～18:00 懇親会

第3回 2024年10月16日（水）
外輪 健一郎（京都大学大学院工学研究科 教授）
マイクロリアクタの理論と展開
13:30～16:45 講義（2コマ） 17:00～18:00 懇親会

第4回 2024年11月29日（金）
大場 優生（ENEOS株式会社）
AI力場が切り拓く材料設計の最前線：Matlantisの紹介と事例
13:30～16:45 講義・実習（1コマずつ） 17:00～18:00 懇親会

第5回 2024年12月18日（水）
杉野目 道紀（京都大学大学院工学研究科 教授）
動的らせん高分子の機能開拓
13:30～16:45 講義（2コマ） 17:00～18:00 懇親会

第6回 2025年1月29日（水）
佐藤 啓文（京都大学大学院工学研究科 教授）
凝縮系の分子理論化学
13:30～16:45 講義（2コマ） 17:00～18:00 懇親会

お問い合わせ 京都大学福井謙一記念研究センター
E-mail : openlec2024@fukui.kyoto-u.ac.jp

京都大学福井謙一記念研究センター 年報 2024

2025年12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
(京都府京都市西京区桂浅原町 226)

(無断転載を禁ずる)