自己点検・評価報告書

京都大学
福井謙一記念研究センター
2011

京都大学福井謙一記念研究センター

Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University

自己点検・評価報告書　2011

Self-check evaluation report 2011

は じ め に

京都大学福井謙一記念研究センターの自己点検・評価報告書をお届けします.

当センターは京都大学のひとつの独立部局として，工学研究科，理学研究科，化学研究所のご協力を得ながら活発な活動を行っております.

その重要なミッションは，以下の３項目にまとめることができます.

１．基礎化学で世界を先導する研究を進めること

２．次世代を担う若手人材を育成すること

３．国内外の研究交流の拠点となること

本報告書を通じて，現在までの具体的な活動状況を把握いただけると存じます.

まず当センターの歴史を簡単にご紹介します．ご承知のように故福井謙一京都大学名誉教授はフロンティア軌道理論を提案したご功績により，1981 年（昭和 56 年）にわが国で最初のノーベル化学賞を受賞されました．福井先生が京都大学ご退官後に研究を続けられるため，京都市と産業界などのご支援で 1985 年（昭和 60 年）に財団法人「基礎化学研究所」が設立されました．これは専任研究員数名の規模でしたが，研究のレベルは高く，当時の研究員は現在，東京大学，名古屋大学，分子科学研究所の教授になり，理論化学分野のリーダーとして活躍しておられます．この基礎化学研究所は 1998 年（平成 10 年）の福井先生のご逝去の後，2002 年（平成 14 年）に本学に寄贈され, 2003 年（平成 15 年）に文部科学省の省令施設として福井謙一記念研究センターと称されるようになり，その後の大学法人化を経て，現在にいたっています.

本センターは，専任教員としては理論研究部門と総合研究部門に准教授各 1 名を持っているに過ぎませんが，センター長のほか，2 名の副センター長と 10 名のスーパーバイザーとして工学研究科，理学研究科，化学研究所所属の教員にご協力頂いており，これらのメンバーが運営委員会を構成しています．そして優れた博士研究員に研究活動の機会を与える制度を持っており，若手研究者が国際的な雰囲気の中で日夜研究にいそしんでいます．この博士研究員のうち 8 名はセンターの雇用で，福井センターフェローと呼ばれ，自分自身のアイデアで一定期間，自由闊達に研究できる身分を保証しています．また次世代を担う研究者育成のために設立された京都大学次世代研究者育成支援事業「白眉プロジェクト」の第一期研究者も受け入れております．さらに福井謙一記念研究部第一のリサーチリーダーとして世界的に高名な理論化学者の諸熊奎治氏（分子科学研究所名誉教授）を米国エモリー大学から招聘し，研究面でのリーダーシップを発揮して頂いております．諸熊氏は，科学技術振興機構の戦略的創造研究推進事業（CREST）の予算で 7 名の博士研究員を採用され，全員がセンターで研究に励んでいます（2011 年（平成 23 年）11 月現在）．2009 年度（平成 21 年度）には福井謙一記念研究部第二を設置し，名古屋大学名誉教授（前副学長）の大峯巖氏をリサーチリーダーとして招聘し，研究体制を拡大しました．大峯氏は 2010 年（平成 22 年）4 月に分子科学研究所長に転出され，その後，2011 年（平成 23 年）4 月に京都大学物質―細胞統合システム拠点（iCeMS）特任教授の榊茂好氏が研究部第二のリサーチリーダーに着任されました．榊氏は科学研究費補助金の特別推進研究「d- 電子複合系の理論化学」を推進中であり，この予算により 7 名の博士研究員を採用され，研究部第一と同様に全員がセンターで研究に励んでいます．私達は，センターが若手研究者の登竜門となることを期待しています．実際に，これまでにセンターの博士研究員が，京都大学准教授，名古屋大学教授，Tartu 大学（エストニア共和国）教授，分子科学研究所助教（3 名），Illinois 工科大学客員助教，早稲田大学准教授，九州大学助教，Northwestern 大学研究員，神戸大学准教授などに就任し，それぞれの分野での研究・教育活動に大きく貢献しています.

当センターでは国際活動も活発です．2005 年（平成 17 年）よりチェコおよびスロバキアと理論化学・計算化学シンポジウムを定期的に開催しております．日本学術振興会・若手研究者交流支援事業として，タイ，シンガポール，ベトナム，マレーシア，フィリピンの東アジア首脳会議参加国からの若手研究者招聘，ベルギーおよびロシアとの 2 国間共同研究も行っております．2010 年度（平成 22 年度）からは，日本学術振興会・頭脳循環を活性化する若手研究者海外派遣プログラムの拠点として，わが国の若手研究者の海外派遣にも貢献しております．今後も理論化学・計算化学分野におけるわが国の窓口の役割を果たし，国際協力活動を展開して行きたいと考えております．これらの国際連携を更に推進するため，2011 年（平成 23 年）10 月に「国際連携機能強化プロジェクト」を立ち上げ，国際連携研究室を設置して特定准教授 1 名および特定助教 1 名を配置しました．

国内での学界あるいは産業界との共同研究も積極的に行っております．2010 年度（平成 22 年度）より文部科学省の高性能汎用計算機（次世代スパコン）高度利用事業が開始しましたが，その教育拠点のひとつとしての活動も行っております．

例年初冬に福井センターシンポジウムを開催しており，学外のトップクラスの研究者による特別講演，運営委員の講演，ならびに京都大学内外からのポスター発表を行っております．研究発表のレベルは高く，特別講演に来られた講師からも毎年高い評価を得ております．

当センターは，面積や人員といった物理的な規模は大きくありませんが，国内外に拡げたネットワークは大きく，研究活動は活発で順調です．2018 年（平成 30 年）の福井先生の生誕 100 年に向けて，上記の 3 つのミッションを通じて，「知の湧源」としての役割をさらに深めたいと考えております．

今後とも，皆様のご理解とご支援を，なにとぞよろしくお願い申し上げます．

平成 23 年 11 月

京都大学福井謙一記念研究センター長

田　中　　功

目　　次

はじめに　　京都大学福井謙一記念研究センター長　田中　功…… i

第Ⅰ章　総論・機構

1．センターの目標、研究理念…… 1
2．組織…… 3
3．管理運営…… 4

第Ⅱ章　研究活動

1．研究活動…… 7
2．専任教員・スーパーバイザー組織…… 9
3．教員・スーパーバイザー　プロフィール…… 10
4．博士研究員組織…… 30
5．博士研究員プロフィール…… 31
6．外部資金…… 54
7．シンポジウム・セミナー…… 55
8．国内交流・国際交流…… 65
9．学会賞等受賞…… 67

第Ⅲ章　教育・社会貢献活動

1．学部・大学院教育…… 69
2．学外非常勤講師等…… 70
3．福井謙一記念研究センターシンポジウム…… 71
4．公開講座…… 71
5．福井謙一博士記念展示コーナー…… 71
6．学会関係役員…… 71
7．雑誌類エディター…… 72
8．社会貢献事業…… 72

第Ⅳ章　研究設備・資産

1．土地・建物…… 73
2．設備…… 73
3．資産…… 74

資料編

１．沿革…… 75
２．歴代センター長…… 76
３．過去に在籍した博士研究員…… 77
４．論文数・外部資金の推移…… 78
５．招へい外国人学者・外国人共同研究者受入れ状況…… 79
６．各種委員会委員…… 84
７．センター会議開催状況…… 85
８．センター内規等一覧…… 93
９．福井謙一博士記念展示コーナー　パンフレット…… 111

（本冊子は下記アドレス（ＵＲＬ）にて、ウェブ上でも閲覧いただけます。
http:www.fukui.kyoto-u.ac.jp/publication/SelfEvaluationReport2011.pdf）

第Ⅰ章　総論・機構

第Ⅰ章　総論・機構

１．センターの目標、研究理念

福井謙一記念研究センターは、昭和 56 年（1981 年）に福井謙一博士がノーベル賞を受賞されたことを記念して設立された財団法人基礎科学研究所が京都大学に寄附移管されたことを受けて、平成 14 年（2002 年）4 月に学内措置により発足した。

翌平成 15 年度（2003 年度）予算成立に伴い、文部科学省の省令施設としての基礎化学研究センターとなった。京都大学では、基礎化学研究センターを福井謙一記念研究センターと称することとしている。

前身の（財）基礎化学研究所は、福井謙一京都大学名誉教授が京都大学退官後も研究を継続するために設立されたものであることから、本センターでは、化学を中心とした自然科学の基礎的な発展を担うための創造的・独創的な研究の推進を目的としている。また、福井謙一先生は若い時代に、量子力学を有機化学反応の研究に応用され、成果をあげられた。それらを踏まえ、具体的な目的の一つとして、優秀な若手研究者の育成を掲げている。同時に将来の自然科学は閉ざされた個別の分野内での発展でなく、開かれた融合的な分野、総合的な分野でより大きく発展すべきであるとの考え方から、理論化学・計算化学との融合的な分野での研究を中心に据えている。

本センターは、福井謙一博士の研究理念を継承し、最先端の基礎化学並びに関連する諸分野の科学を融合し、次世代の化学理念の構築を行うことで、世界を先導する新たな物質観の創造を目指している。

センターは「総合研究部門」、「理論研究部門」、「福井謙一記念研究部第一」および「福井謙一記念研究部第二」で構成され、理論化学・計算化学・シミュレーション化学を推進し、次世代化学理論の構築と計算システムの開発を行っている。

また、平成 15 年度より若手研究者の独創的な研究に対する支援と助成を行っている。

『知の湧源』

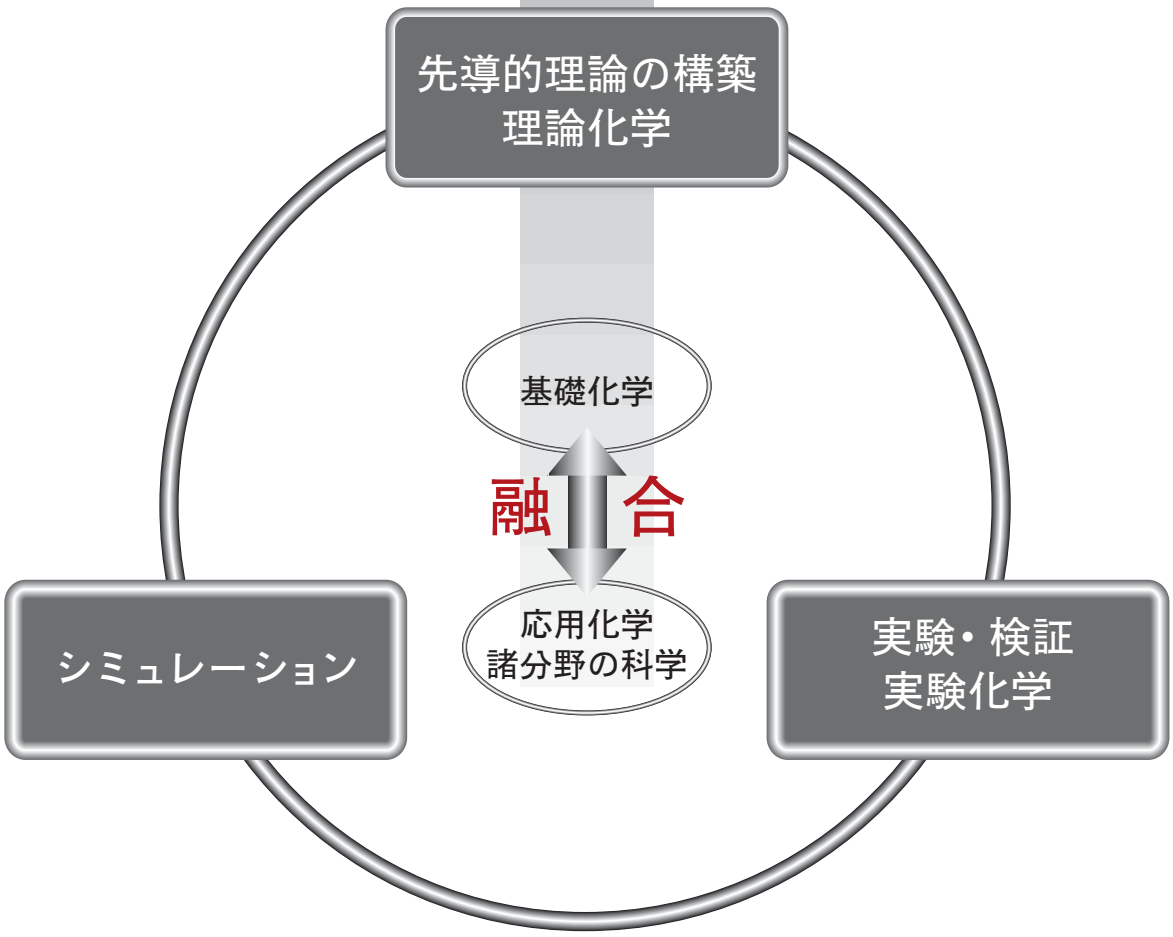
物質的理論的世界観の創造

理　念

福井謙一博士の研究理念を継承・発展させ、世界の学術の進歩に寄与することを目的として、世界を先導する新たな物質的理論的世界観の創造を目指す。

目　的

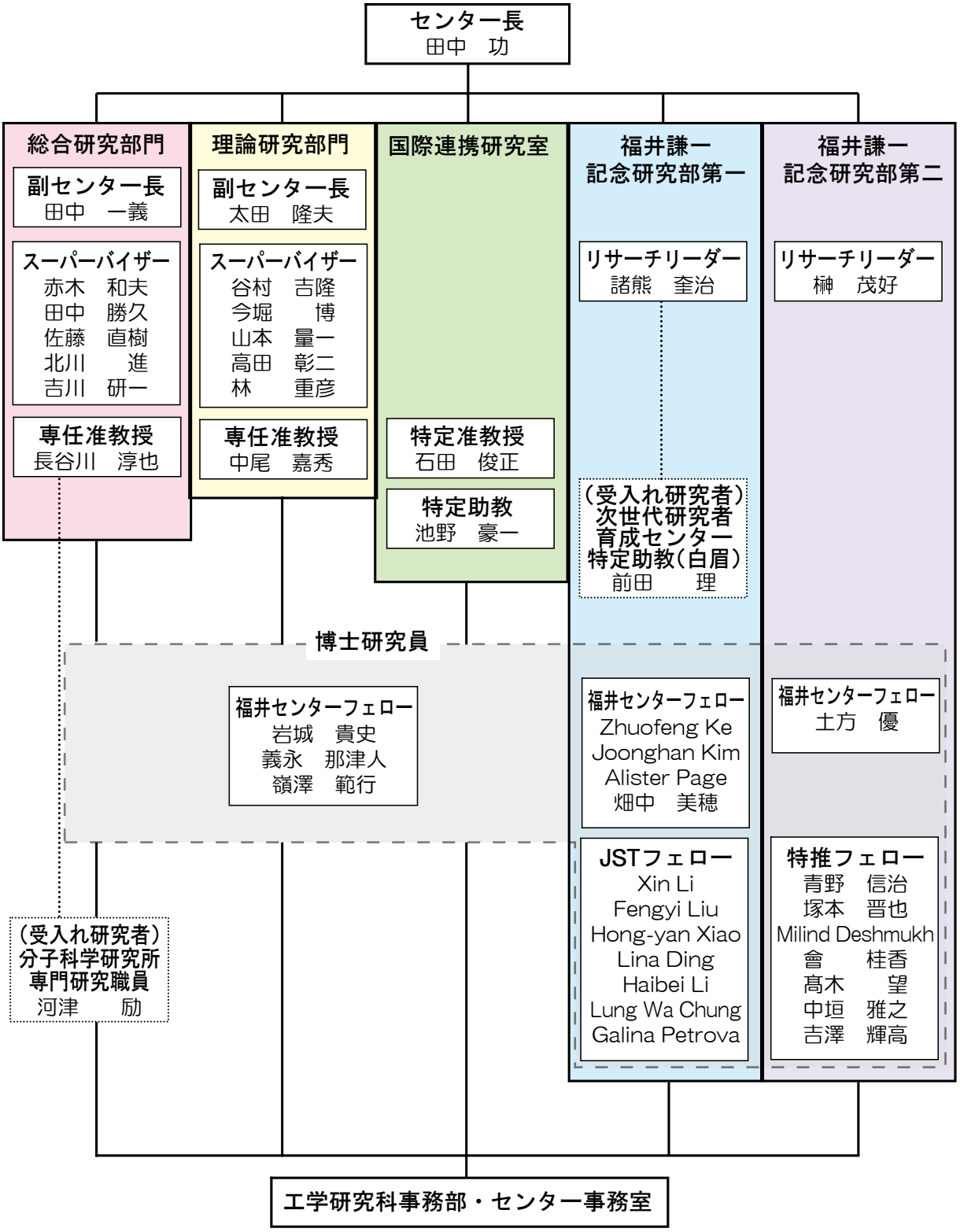
最先端の基礎化学と応用化学や関連する諸分野の科学を融合し、次世代の化学理論の構築を行い、独創的な研究を展開する。また若い研究者による発展的な研究を支援、助成する。



２．組織

【組織図】

（平成 23 年 11 月 1 日現在）



３．管理運営

本センターではセンター内の人事関連、予算関連、中期計画関連業務などを決定する機関として、部局の教授会に相当する協議員会を設置している。この協議員会は、センター長（1 名）、副センター長（2 名）、専任教員（2 名）、工学、理学研究科長（各 1 名）、化学研究所長（1 名）から構成されている。

この協議員会の下に、運営委員会を設置している。運営委員会は協議員会の指示の下で、本センターの人事、博士研究員選考、予算、シンポジウム、セミナーなどの研究活動の具体案を作成、実施している。運営委員会はセンター長、副センター長（2 名）、専任准教授（2 名）、工学研究科、理学研究科、化学研究所の教員 10 名からなる運営委員から構成されている。なお、運営委員は博士研究員のスーパーバイザーとしての役割も果たしている。

平成 23 年 11 月 1 日現在の組織構成は、以下のとおりである。

センター長（兼任 1 名）、副センター長（兼任 2 名）
スーパーバイザー（兼任 10 名）
専任准教授 2 名
特定准教授 1 名
特定助教 1 名
リサーチリーダー 2 名
福井センターフェロー 8 名
JST フェロー 7 名
特推研究フェロー 7 名
次世代研究者育成センターからの受入れ研究者　特定助教 (白眉) 1 名
分子科学研究所からの受入れ研究者　専門研究職員 1 名
事務補佐員 3 名
オフィス・アシスタント 7 名

○協議員会協議員（平成 23 年 11 月 1 日現在：8 名）

所属・職名	氏　名	備　考
センター長	田　中　　功	工学研究科・教授
総合研究部門・副センター長	田　中　一　義	工学研究科・教授
理論研究部門・副センター長	太　田　隆　夫	理学研究科・教授
総合研究部門・准教授	長谷川　淳　也	（専任）
理論研究部門・准教授	中　尾　嘉　秀	（専任）
工学研究科長	小　森　　悟	工学研究科・教授
理学研究科長	山　極　壽　一	理学研究科・教授
化学研究所長	時　任　宣　博	化学研究所・教授

○運営委員会委員（平成 23 年 11 月 1 日現在：15 名）

所属・職名		氏　名	備　考
センター長		田　中　　功	工学研究科・教授
総合研究部門・副センター長		田　中　一　義	工学研究科・教授
理論研究部門・副センター長		太　田　隆　夫	理学研究科・教授
総合研究部門	教授 (スーパーバイザー)	赤　木　和　夫	工学研究科・教授
	教授 (スーパーバイザー)	田　中　勝　久	工学研究科・教授
	教授 (スーパーバイザー)	佐　藤　直　樹	化学研究所・教授
	教授 (スーパーバイザー)	北　川　　進	物質―細胞統合システム拠点 （工学研究科・教授）
	教授 (スーパーバイザー)	吉　川　研　一	理学研究科・教授
理論研究部門	教授 (スーパーバイザー)	谷　村　吉　隆	理学研究科・教授
	教授 (スーパーバイザー)	今　堀　　博	物質―細胞統合システム拠点 （工学研究科・教授）
	教授 (スーパーバイザー)	山　本　量　一	工学研究科・教授
	准教授 (スーパーバイザー)	高　田　彰　二	理学研究科・准教授
	准教授 (スーパーバイザー)	林　　重　彦	理学研究科・准教授
総合研究部門・准教授		長谷川　淳　也	（専任）
理論研究部門・准教授		中　尾　嘉　秀	（専任）

第Ⅱ章　研究活動

第Ⅱ章　研究活動

１．研究活動

本センターは、「最先端の化学理論を構築し、基礎化学と応用化学や関連する諸分野の科学を融合し、独創的な研究を展開すること」ならびに「若い研究者による発展的・独創的な研究を支援、助成すること」、さらに最終的に「物質的理論的世界観の創造」を達成することを目的としている。これらの目的を達成するために、本センターでは、専任准教授による基礎的研究、それに関連した博士研究員を採用し、化学反応ダイナミクスおよび電子状態と構造、物性の理論的研究を行う体制を整えている。

若手研究者の育成と支援を目的に、自由な発想で独立して研究の出来る博士研究員ポストを用意し、博士後期課程修了から数年以内のすぐれた研究者を採用した。これまで、延べ 24 名採用し、独立して研究を行い、その内から、京都大学准教授、名古屋大学教授、Tartu 大学（エストニア共和国）教授、分子科学研究所助教（3 名）、Illinois 工科大学客員助教、早稲田大学准教授、九州大学助教、Northwestern 大学研究員、神戸大学准教授などに採用されている。本研究センターの博士研究員は途中の更新審査を経て、4 年間の任期であり、これは日本学術振興会研究員の原則 2 年任期に比べて長いため、十分腰を落ち着けて大きな課題に取り組めることも利点の一つである。一方、専任准教授にも任期を設けている。専任准教授の任期は５年であり、再任により 2 年の延長が可能であるが、再々任は行わないこととして、研究の活性化と研究者の流動化をめざしているのも特色である。

理論化学の方法論の開発および周辺化学分野との融合を目指して、平成 18 年に福井謙一記念研究部第一を新たに組織し、リサーチリーダーとして、世界的な量子化学・理論化学者である諸熊奎治氏（当時、米国エモリー大学教授）を招聘し、博士研究員４名からなるグループを立ち上げた。諸熊グループは 23 年度（2011 年）には合計 12 名のグループに成長し、この分野において世界的レベルで見ても強力であり、多くの成果を上げている。一つの現れは、JST による CREST 研究の採択であり、「複雑分子系の複合分子理論シミュレーション」について活発な研究を展開中である。

平成 21 年には研究部第二を新たに設置し、現在の理論化学、分子科学研究の進展に幅広く対応できる体制に整備した。研究部第二のリサーチリーダーには分子動力学の第一人者である大峯巖・名古屋大学名誉教授（前名古屋大学副学長）を招聘した。

大峯　巖氏は 22 年（2010 年）4 月に分子科学研究所長に転出され、その後任として、23 年（2011 年）4 月に京都大学物質―細胞統合システム拠点（iCeMS）特任教授の榊　茂好氏が研究部第二のリサーチリーダーに就任した。榊　茂好氏は、遷移金属化合物や類縁化合物に関する研究で顕著な業績を挙げており、現在は科学研究費補助金の特別推進研究「d- 電子複合系の理論化学：新しい高精度大規模計算法による微視的理解と予測」を推進している。榊　茂好氏はこの予算で 7 名の博士研究員を採用し、全員がセンターで研究に励んでいる。

理論化学とその周辺分野との融合的研究を行うために、当研究センターでは工学研究科、理学研究科、化学研究所の教授、准教授合計 10 名からなる運営委員に、運営や研究活動への参加をお願いしている。この運営委員の周辺から優れた博士研究員が誕生しており、共同研究の発展にもつながっている。さらに、融合的研究、共同研究を活発に行うため、福井謙一記念研究センター

シンポジウムを毎年開催している。これまで、ノーベル化学賞受賞の Yuan T. Lee 先生、野依良治先生、日本化学会会長（当時）藤嶋昭先生、尾池和夫京都大学総長をはじめ、新庄輝也先生、赤井久純先生、原田明先生、江原正博先生、中村栄一先生、中村宏樹先生など多くの分野から優れた研究者を招いて講演をしていただき、また、運営委員を中心とした研究者のグループからポスター発表を行っている。このシンポジウムから共同研究の芽も生まれている。また、准教授を中心として、若手の研究者を呼び、センター内の博士研究員の研究成果の発表も兼ねた「福井センターセミナー」も毎年 1 回以上開催している。

なお、本センターの目的を達成するためには、当研究センターのみの活動では不十分であり、わが国はもちろん国際的にも研究交流を活発に行う必要がある。そのため、量子論に基づく理論化学が盛んなチェコ及びスロバキアとの国際シンポジウムを平成 17 年、19 年および 21 年に開催している。このシンポジウムにはわが国の多くの研究者が参加し、当研究センターはわが国の国際活動の窓口的な役割を果たしている。

このほか、学振若手研究者交流支援事業―東アジア首脳会議参加国からの若手研究者招へい―（JENESYS プログラム）に平成 21 年 9 月 1 日から平成 22 年 12 月 31 日まで参加し、東南アジアから約 30 名の若手研究者を福井センターに招待し、共同研究および日本の計算化学研究室の訪問旅行に参加させた。

こうした国際連携活動をさらに活性化するという観点から、平成 23 年（2011 年）10 月に本センターに国際連携研究室を設置し、その運営上必要となるコーディネーター役として、特定准教授 1 名および特定助教 1 名を配置した。

以上のように、本センターはその設置理念の達成に向けて、着々と研究活動を進めてきたものである。

2　専任教員・スーパーバイザー組織

平成２３年１１月１日現在

職　　名		氏　名	備　考
センター長		田中　　功	工学研究科材料工学専攻
総合研究部門	副センター長	田中　一義	工学研究科分子工学専攻
理論研究部門	副センター長	太田　隆夫	理学研究科物理学・宇宙物理学専攻
協　議　員	工学研究科長	小森　　悟	工学研究科機械理工学専攻
	理学研究科長	山極　壽一	理学研究科生物科学専攻
	化学研究所長	時任　宣博	化学研究所物質創製化学研究系
総合研究部門 スーパーバイザー	教　　授	赤木　和夫	工学研究科高分子化学専攻
	教　　授	田中　勝久	工学研究科材料化学専攻
	教　　授	佐藤　直樹	化学研究所複合基盤化学研究系
	教　　授	北川　　進	物質－細胞統合システム拠点 (工学研究科合成・生物化学専攻)
	教　　授	吉川　研一	理学研究科物理学・宇宙物理学専攻
理論研究部門 スーパーバイザー	教　　授	谷村　吉隆	理学研究科化学専攻
	教　　授	今堀　　博	物質－細胞統合システム拠点 (工学研究科分子工学専攻)
	教　　授	山本　量一	工学研究科化学工学専攻
	准教授	高田　彰二	理学研究科生物科学専攻
	准教授	林　　重彦	理学研究科化学専攻
総合研究部門	准教授	長谷川淳也	専任 (工学研究科合成・生物化学専攻協力講座)
理論研究部門	准教授	中尾　嘉秀	専任 (工学研究科分子工学専攻協力講座)
国際連携研究室	特定准教授	石田　俊正	専任
	特定助教	池野　豪一	専任
福井謙一 記念研究部第一	リサーチ リーダー	諸熊　奎治	研究員（学術研究奨励）
福井謙一 記念研究部第一	特定助教	前田　　理	次世代研究者育成センター 特定助教（白眉）
福井謙一 記念研究部第二	リサーチ リーダー	榊　　茂好	研究員（学術研究奨励）

３．教員・スーパーバイザー　プロフィール

【氏名（ふりがな）】	田中　功　（たなか　いさお）
【職名】	センター長、教授
【所属】	工学研究科　材料工学専攻
【研究室】	吉田キャンパス　工学部物理系校舎　量子材料学研究室
【直通電話】	075-753-5465
【FAX】	075-753-5447
【電子メールアドレス】	tanaka@cms.MTL.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://cms.mtl.kyoto-u.ac.jp/tanaka.html
【研究分野】	材料科学
【現在の研究課題】	ｾﾗﾐｯｸｽ基礎科学，計算材料科学
【研究内容キーワード】	量子材料設計，第一原理計算，電子ｴﾈﾙｷﾞｰ損失分光，Ｘ線吸収分光
【最終学歴】	1987 年 3 月　大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻博士後期課程修了
【学位】	1987 年 3 月　大阪大学工学博士
【略歴】	1987 年 4 月日本学術振興会特別研究員 (PD)、1987 年 6 月大阪大学産業科学研究所・助手、1993 年 4 月京都大学工学部・助手、1996 年 5 月京都大学大学院エネルギー科学研究科・助教授、2001 年 7 月京都大学大学院工学研究科・助教授、2003 年 12 月京都大学大学院工学研究科・教授
【在外研究歴】	1992 年 4 月－ 1993 年 3 月　ドイツ マックスプランク金属研究所・客員研究員（アレキサンダー・フォン・フンボルト財団奨学研究員）
【所属学会】	日本金属学会、日本セラミックス協会、日本鉄鋼協会，応用物理学会、American Ceramic Society、Materials Research Society
【学会活動】	*Journal of American Ceramics Society* フェロー・編集委員、*World Academy of Ceramics* 会員、*Journal of Physics : Condensed Matter* 編集委員、日本金属学会評議員
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	[1] A. Seko, F. Oba, I. Tanaka, Classification of spinel structures based on first-principles cluster expansion analysis, *Phys. Rev.* B 81 (2010) 054114 [2] A. Matsumoto, Y. Koyama, I. Tanaka, Structures and energetics of Bi_2O_3 polymorphs in a defective fluorite family derived by systematic first-principles lattice dynamics calculations, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 094117 [3] M. Choi, F. Oba, I. Tanaka, Role of Ti Antisitelike Defects in $SrTiO_3$, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 185502 [4] First-principles investigation of atomic structures and stability of proton-exchanged layered sodium titanate M. Mori, Y. Kumagai, K. Matsunaga, and I. Tanaka, *Phys. Rev. B* ,79 (2009) 144117 [5] W. Olovsson, I. Tanaka, T. Mizoguchi, P. Puschnig, and C. Ambrosch-Draxl, All-electron Bethe-Salpeter calculations for shallow-core x-ray absorption near-edge structures *Phys. Rev. B* 79, (2009) 041102. [6] K. Yuge, A. Seko, Y. Koyama, F. Oba, and I. Tanaka, First-principles-based phase diagram of the cubic BNC ternary system *Phys. Rev. B* **77**, (2008) 094121 [7] I. Tanaka and F. Oba, First principles calculations for modern ceramic science and engineering *J. Phys: Condens. Matter* **20**, (2008) 064215 [8] A. Seko, A. Togo, F. Oba, and I. Tanaka, Structure and stability of a homologous series of tin oxides *Phys. Rev. Lett.* **100,** (2008) 045702
【学術関係の受賞】	ドイツ政府　ﾌｨﾘｯﾌﾟ・ﾌﾗﾝﾂ・ﾌｫﾝ・ｼﾞｰﾎﾞﾙﾄ賞（2008 年） ﾙｰﾏﾆｱ科学ｱｶﾃﾞﾐｰ　ﾄﾞﾗｺﾞﾐｰﾙ・ﾌﾙﾑｾﾞｽｺ賞（2006 年） 米国ｾﾗﾐｯｸｽ学会　ﾘﾁｬｰﾄﾞ・ﾌﾙﾗｰｽ賞（2004 年）

【氏名（ふりがな)】	田中　一義　（たなか　かずよし）
【職名】	副センター長、教授
【所属】	工学研究科分子工学専攻
【研究室】	桂 A4 棟 205
【直通電話】	075-383-2549
【FAX】	075-383-2555
【電子メールアドレス】	ktanaka@moleng.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng_03/index_J.html
【研究分野】	物理化学・量子化学
【現在の研究課題】	分子ナノ工学、量子機能化学
【研究内容キーワード】	単一分子スピン、単一分子発光、元素化学の量子論
【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
【所属学会】	日本化学会・日本物理学会・高分子学会
【学会活動】	フラーレン・ナノチューブ・グラフェン学会幹事
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. 分子エレクトロニクスの基盤技術と将来展望（共監修および共著 , シーエムシー出版 , 2009） 2. 物理化学（化学マスター講座）（共著 , 丸善 , 2010） （以上著書） 1. A. Ito, Y. Nakano, M. Urabe, T. Kato, and K. Tanaka, “Triradical Cation of *p*-Phenylenediamine Having Two Nitroxide Radical Groups: Spin Alignment Mediated by Delocalized Spin”, *J. Am. Chem. Soc.,* **128**, 2948-2953 (2006). 2. Y. Hirao, M. Urabe, A. Ito, and K. Tanaka, “Intramolecular Spin Transfer in a Spiro-Fused Bis(triarylamine)”, *Angew. Chem., Int. Ed.,* **46**, 3300-3303 (2007). 3. A. Ito, Y. Yamagishi, K. Fukui, S. Inoue, Y. Hirao, K. Furukawa, T. Kato, and K. Tanaka, “Trimacrocyclic Arylamine and Its Polycationic States”, *Chem.Commun.,* **2008,** Issue 48 (December 28), 6573-6575 (2008). 4. A. Ito, D. Sakamaki, H. Ino, A. Taniguchi, Y. Hirao, K. Tanaka, K. Kanemoto, and T. Kato, “Polycationic States of Oligoanilines Based on Wurster’s Blue”, *Eur. J. Org. Chem.,* **2009**, Issue 26 (September), 4441-4450 (2009). 5. A. Ito, Y. Yokoyama, R. Aihara, K. Fukui, S. Eguchi, K. Shizu, T. Sato, and K. Tanaka, “Preparation and Characterization of N-Anisyl-Substituted Hexaaza[1_6]paracyclophane”, *Angew. Chem. Int. Ed.,* **49**, 8205-8208 (2010). 6. K. Suzuki, T. Matsuo, D. Hashizume, H. Fueno, K. Tanaka, and K. Tamao, “A Planar Rhombic Charge-Separated Tetrasilacyclobutadiene”, *Science,* **331**, 1306-1309 (2011). （以上学術論文）

【氏名（ふりがな)】	太田　隆夫　（おおた　たかお）
【職名】	副センター長、教授
【所属】	福井謙一記念研究センター　理論研究部門
【研究室】	理学部５号館４２２
【直通電話】	075-753-3740
【FAX】	075-753--3811
【電子メールアドレス】	takao@scphys.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.ton.scphys.kyoto-u.ac.jp/nonlinear/
【研究分野】	相転移理論・非平衡系の統計物理学
【現在の研究課題】	非平衡ソフトマター物理学
【研究内容キーワード】	高分子共重合体・ミクロ相分離・共連結構造・パターン形成
【最終学歴】	1977 年 1 月　京都大学大学院理学研究科物理学第一専攻博士課程修了
【学位】	1977 年 1 月　理学博士（京都大学）
【略歴】	1979 年 7 月九州大学理学部助手、1987 年 8 月お茶の水女子大学理学部助教授、1991 年 1 月お茶の水女子大学理学部教授、1999 年 4 月広島大学大学院理学研究科教授、2004 年 1 月京都大学基礎物理学研究所教授、2006 年 7 月京都大学大学院理学研究科教授
【在外研究歴】	1978年9月-1979年6月　米国Pittsburgh大学物理（David. Jansnow教授）（Mellon財団研究員）
【所属学会】	日本物理学会、中性子科学会、数理生物学会
【学会活動】	JPSJ Head Editor
【主な著書、学術論文】（過去５年以内）	1. T. Ohkuma and T. Ohta, Deformable self-propelled particles with a global coupling, *Chaos 20, 023101(1-13) (2010)* 2. T. Hiraiwa and T. Ohta, Viscoelasticity of a Single Semiflexible Polymer Chain, Macromolecules 42, 7553-7562 (2009) 3. T. Ohta, T. Ohkuma and K. Shitara, Deformation of a self-propelled domain in an excitable reaction-diffusion system, *Phys. Rev.* E 80, 056203 (2009) 4. T. Sakaue and T. Ohta, Probing Nonequilibrium Fluctuations through Linear Response, *Phys. Rev.* E 77, 050102R (2008) 5. Y. Tonosaki, H. Tokuda, V. Zykov and T. Ohta, Phase Dynamics for Nonlinear Dissipative Waves under Symmetric Feedback, *Europhysics Letters* 83 50011-1-6 (2008) 6. R. Tamate, K. Yamada, J. Vinals, and T. Ohta, Structural rheology of microphase separated diblock copolymers, *J. Phys. Soc. Jpn.,*77 034802 (2008) 7. M. Yanagisawa, M. Imai, T. Masui, S. Komura, Takao Ohta, Growth Dynamics of Domains in Ternary Fluid Vesicles, *Biophysical Journal* 92, 115-125 (2007) 8. H. Shoji, K. Yamada, D. Ueyama and Takao Ohta, Turing patterns in three dimensions, *Phys. Rev.* E 75, 046212(13) (2007)
【学術関係の受賞】	アレキサンダー・フォン・フンボルト賞（２００８年）

【氏名（ふりがな）】	赤木　和夫　（あかぎ　かずお）
【職名】	教授
【所属】	工学研究科高分子化学専攻
【研究室】	赤木研究室
【直通電話】	075-383-2595
【FAX】	075-383-2760
【電子メールアドレス】	akagi@fps.polym.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fps.polym.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	高分子化学、液晶化学、物質化学
【現在の研究課題】	導電性、液晶性、発光性、階層らせん性の共役系高分子の合成と性質
【研究内容キーワード】	導電性高分子、液晶性共役高分子、不斉液晶反応場、階層構造制御
【最終学歴】	京都大工学研究科博士後期課程
【学位】	工学博士
【略歴】	福井大工助手、筑波大物質工講師、助教授、教授、同大学院数理物質科学研究科教授、学際物質科学研究センター長
【在外研究歴】	カリフォルニア大学サンタバーバラ校交換研究員、コーネル大学客員研究員
【所属学会】	日本化学会、高分子学会、日本液晶学会、アメリカ化学会
【学会活動】	文部科学省科研費（特定領域研究、2005-2008）「次世代共役ポリマーの超階層制御と革新機能」領域代表、Chair of 18th Iketani Conference, International Conference on Control of Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-Generation Conjugated Polymers (2008)、Chair of International Conference on Science and Technolgy of Synthetic Metals (2010).
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1) H. Hayasaka, T. Miyashita, K. Tamura, K. Akagi, “Helically π-Stacked Conjugated Polymers Bearing Photoresponsive and Chiral Moieties in Side Chains: Reversible Photoisomerization-Enforced Switching between Emission and Quenching of Circularly Polarized Fluorescence”, *Adv. Func. Mater.,* **20**, 1243 (2010). 2) M. Goh, G. Piao, M. Kyotani, K. Akagi, “*Cis*-Rich Helical Polyacetylene Synthesized in Low-Temperature Chiral Nematic Liquid Crystal”, *Macromolecules,* **42**, 8590 (2009). 3) K. Akagi, “Helical Polyacetylene - Asymmetric Polymerization in a Chiral Liquid Crystal Field”, *Chem. Rev.,* **109,** 5354 (2009). 4) T. Mori, T. Sato, M. Kyotani, K Akagi, “Macroscopically Aligned Helical Conjugated Polymers in Orientation-Controllable Chiral Nematic Liquid Crystal Field”, *Macromolecules*, **42,** 1817 (2009). 5) M. Kyotani, S. Matsushita, T. Nagai, Y. Matsui, M. Shimomura, A. Kaito. K. Akagi, “Helical Carbon and Graphitic Films Prepared from Iodine-Doped Helical Polyacetylene Film using Morphology-Retaining Carbonization”, *J. Am. Chem. Soc.,* **130**, 10880 (2008). 6) M. Goh, M. Kyotani, K. Akagi, “Highly Twisted Helical Polyacetylene with Morphology Free From Bundle of Fibrils Synthesized in Chiral Liquid Crystal Reaction Field”, *J. Am. Chem. Soc.,* **129**, 8519 (2007).
【学術関係の受賞】	日本化学会学術賞（1999 年度）、日産科学賞（2000 年度）、日本液晶学会賞論文賞（2001 年度）、つくば賞（2001 年度）、高分子学会賞（2002 年度）、文部科学大臣表彰科学技術賞（2005 年度）、筑波大学名誉教授称号授与（2009 年度）、日本液晶学会賞業績賞（2010 年度）

【氏名（ふりがな)】	田中　勝久　（たなか　かつひさ）
【職名】	教授
【所属】	工学研究科 材料化学専攻
【研究室】	桂キャンパス A3 クラスター 018
【直通電話】	075-383-2801
【FAX】	075-383-2420
【電子メールアドレス】	tanaka@dipole7.kuic.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://dipole7.kuic.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	無機固体化学
【現在の研究課題】	酸化物薄膜および非晶質酸化物の磁気的性質・表面プラズモンを利用した光機能材料の作製
【研究内容キーワード】	酸化物、薄膜、非晶質、表面プラズモン、磁気的性質、光学的性質
【学歴】	1984 年 3 月　京都大学工学部工業化学科卒業 1986 年 3 月　京都大学大学院工学研究科工業化学専攻修士課程修了
【学位】	1991 年 3 月　京都大学工学博士
【略歴】	1986 年 4 月　三重大学工学部助手 1989 年 4 月　京都大学工学部助手 1999 年 7 月　京都工芸繊維大学工芸学部助教授 2004 年 4 月　京都大学大学院工学研究科教授 2009 年10月　豊橋技術科学大学客員教授
【所属学会】	日本セラミックス協会、日本化学会、応用物理学会、日本物理学会、粉体粉末冶金協会、日本材料学会、Materials Research Society、Optical Society of America
【学会活動】	粉体粉末冶金協会 理事、日本材料学会 理事
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Y. Hasegawa, T. Adachi, A. Tanaka, M. Afzaal, P. O'Brien, T. Doi, Y. Hinatsu, K. Fujita, K. Tanaka, and T. Kawai, "Remarkable Magneto-Optical Properties of Europium Selenide Nanoparticles with Wide Energy Gaps", Journal of the American Chemical Society **130** (2008) 5710-5715. 2. X. Meng, K. Fujita, S. Murai, and K. Tanaka, "Coherent Random Lasers in Weakly Scattering Polymer Films Containing Silver Nanoparticles", Physical Review A **79** (2009) 053817-1-7. 3. H. Akamatsu, S. Oku, K. Fujita, S. Murai, and K. Tanaka, "Magnetic Properties of Mixed-Valence Iron Phosphate Glasses", Physical Review B **80** (2009) 134408-1-9. 4. H. Akamatsu, K. Fujita, S. Murai, and K. Tanaka, "Ferromagnetic Eu^{2+}-Based Oxide Glasses with Reentrant Spin Glass Behavior", Physical Review B **81** (2010) 014423-1-9. 5. X. Meng, K. Fujita, S. Murai, T. Matoba, and K. Tanaka, "Plasmonically Controlled Lasing Resonance with Metallic-Dielectric Core-Shell Nanoparticles", Nano Letters **11** (2011) 1374-1378.
【学術関係の受賞など】	The Australasian Ceramic Society/Ceramic Society of Japan (ACS/CJS) Joint Ceramic Award (1997 年)、日本セラミックス協会学術賞 (2005 年)

【氏名（ふりがな）】	佐藤　直樹　（さとう　なおき）
【職名】	教授
【所属】	化学研究所　複合基盤化学研究系　分子集合解析研究領域
【研究室】	宇治キャンパス化学研究所本館 N-324C 号室
【直通電話】	0774-38-3080
【FAX】	0774-38-3084
【電子メールアドレス】	naokis@e.kuicr.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.kuicr.kyoto-u.ac.jp/labos/is2/scope_J.html
【研究分野】	有機物性化学
【現在の研究課題】	有機結晶・薄膜の構造・電子構造・電子物性の相関研究
【研究内容キーワード】	有機半導体・有機薄膜・分子集合体・電子分光・界面物性・分子系構築
【最終学歴】	1976 年 3 月　東京大学大学院理学系研究科化学専門課程修士課程修了
【学位】	1983 年 3 月　理学博士（東京大学）
【略歴】	1976 年 4 月 分子科学研究所分子集団研究系技官、1984 年 4 月熊本大学理学部助手、1987 年 4 月東京大学教養学部助教授、1992 年 5 月京都大学化学研究所教授
【在外研究歴】	1989 年 5 月－ 7 月 スウェーデン Linköping 大学物理学科（William R. Salaneck 教授）（Visiting Scholar）
【所属学会】	日本化学会、日本物理学会、日本分光学会、分子科学会
【学会活動】	日本化学会有機結晶部会長、日本化学会有機結晶ディビジョン主査、分子科学会運営委員
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. H. Yoshida, K. Inaba and N. Sato, X-ray diffraction reciprocal space mapping study of the thin film phase of pentacene, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 181930. 2. H. Yoshida and N. Sato, The crystallographic and electronic structures of three different polymorphs of pentacene, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 235205. 3. R. Murdey, M. Bouvet, M. Sumimoto, S. Sakaki and N. Sato, Direct observation of the energy gap in lutetium bisphthalocyanine thin films, *Synth. Met.* **159** (2009) 1677-1681. 4. T. Hiramatsu, H. Yoshida and N. Sato, Solvent-dependent structural and electronic behaviors of a push-pull molecule: {4-[4,5-bis(methylsulfanyl)-1,3-dithiol-2-ylidene]cyclohexa-2,5-dien-1-ylidene}malononitrile, *J. Phys. Chem. A* **113** (2009) 9174-9179. 5. J. Tsutsumi, H. Yoshida, R. Murdey, S. Kato and N. Sato, An accurate calculation of electronic contribution to static permittivity tensor for organic molecular crystals on the basis of the charge response kernel theory, *J. Phys. Chem. A* **113** (2009) 9207-9212. 6. J. Tsutsumi, H. Yoshida, R. Murdey and N. Sato, Decay mechanism of spontaneously built-up surface potential in a thin film of a zwitterionic molecule having noncentrosymmetric crystal structure, *J. Phys. Chem. C* **115** (2011) 2356-2359. 7. H.Yoshida and N. Sato, The depth profile of core energy levels: Electoronic structure of buried organic/metal interfaces examined by X-ray photoemission and target factor analysis, *Chem. Phys. Lett.* **511**(2011) 146-150.
【学術関係の受賞】	1985 年 4 月日本化学会（第 34 回）進歩賞受賞

【氏名（ふりがな）】	北川　進　（きたがわ　すすむ）
【職名】	副拠点長
【所属】	物質－細胞統合システム拠点
【研究室】	桂キャンパス A4 棟 319 号室
【直通電話】	075-383-2733
【FAX】	075-383-2732
【電子メールアドレス】	kitagawa@icems.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/kitagawa-lab/index.html
【研究分野】	錯体化学、無機化学
【現在の研究課題】	新規多孔性材料の開拓とその応用
【研究内容キーワード】	多孔性配位高分子、金属有機構造体、光機能、超分子構造
【最終学歴】	1979 年 3 月　京都大学大学院石油化学専攻博士課程修了
【学位】	1979 年 7 月　工学博士（京都大学）
【略歴】	1979 年 4 月近畿大学理工学部助手、1983 年 4 月近畿大学理工学部講師、1988 年 4 月近畿大学理工学部助教授、1992 年 4 月東京都立大学理学部化学教室無機化学第一講座教授、1998 年 6 月京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻教授、2007 年 10 月京都大学物質 - 細胞統合システム拠点・副拠点長および京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻（兼任）教授
【在外研究歴】	1986 年 -1987 年 Texas A&M 大学 Cotton 研究室博士研究員
【所属学会】	日本化学会、錯体化学会、物理学会、高分子学会、米国学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. “One-dimensional imidazole aggregate in aluminum porous coordination polymers with high proton conductivity”, S. Bureekaew, S. Horike, M. Higuchi, M. Mizuno, T. Kawamura, D. Tanaka, N. Yanai and S. Kitagawa, *Nature Materials,* **2009**, 8, 831-836. 2. “Selective sorption of oxygen and nitric oxide by an electron-donating flexible porous coordination polymer”, S. Shimomura, M. Higuchi, R. Matsuda, K. Yoneda, Y. Hijikata, Y. Kubota, Y. Mita, J. Kim, M. Takata and S. Kitagawa, *Nature Chemistry,* **2010,** 2, 633-637. 3. “Photoactivation of a nanoporous crystal for on-demand guest trapping and conversion”, H. Sato, R. Matsuda, K. Sugimoto, M. Takata and S. Kitagawa, *Nature Materials,* **2010**, 9, 661-666. (Highlighted in News & Views in the same issue.).
【学術関係の受賞】	1. 2002 年第 19 回日本化学会学術賞 2. 2007 年 Earl L. Muetterties Memorial Lectureship (University of California, Berkeley) 3. 2007 年平成 19 年度錯体化学会賞 4. 2008 年 Humboldt Research Award, Germany 5. 2009 年第 61 回日本化学会賞 6. 2010 年トムソン・ロイター引用栄誉賞受賞 7. 2011 年平成 23 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰研究部門 8. 2011 年平成 23 年度春の紫綬褒章受章

【氏名（ふりがな)】	吉川　研一　（よしかわ　けんいち）
【職名】	教授
【所属】	理学研究科　物理学・宇宙物理学専攻
【研究室】	理学研究科　吉川研究室
【直通電話】	075-753-3749
【FAX】	075-753-3779
【電子メールアドレス】	yoshikaw@scphys.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.chem.scphys.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	非線形科学・生命物理学
【現在の研究課題】	１）非平衡開放系での時間的・空間的秩序の自発的生成に関する研究 ２）生命現象の物理学
【研究内容キーワード】	非平衡開放系・時空間的秩序の自己生成・自己組織化・高分子物理学
【最終学歴】	1976 年 5 月　京都大学大学院工学研究科博士課程修了
【学位】	1976 年 5 月　工学博士（京都大学）
【略歴】	1976 年 10 月 徳島大学教養部講師、1979 年 4 月 徳島大学教養部助教授、1988 年 4 月 名古屋大学教養部助教授、1990 年 11 月 名古屋大学教養部教授、1991 年 4 月 名古屋大学大学院人間情報学研究科教授、1998 年 4 月 京都大学大学院理学研究科教授、2002 年 9 月　京都大学福井謙一記念研究センター兼任教授（現在に至る)、1998 年 10 月 ~1999 年 6 月　Universite Louis Pasteur　客員教授、2009 年 2 月 ENS, Paris 客員教授
【在外研究歴】	長期のものはなし
【所属学会】	物理学会、日本化学会、生物物理学会など
【学会活動】	Vise Chair, Commission C-6, International Union of Pure and Applied Physics、など
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. M.Horning, A.Isomura, K.Agladze, K.Yoshikawa, “Liberation of a pinned spiral wave by a single stimulus in excitable media”, Phys. Rev. E, 79, 026218(2009). 2. T.Saito, T.Iwaki, K.Yoshikawa, “Small anion with higher valency retards the compaction of DNA in the presence of multivalent cation”, Biophys. J., 96, 1068(2009). 3. A. Estevez, C. Crozatier, A. Diguet, T. Hara, H. Saito, K. Yoshikawa and D. Baigl, “ Sequence-independent and reversible photocontrol of transcription/ expression systems using a photosensitive nucleic acid binder”, Proc.Natl. Acad.Sci., 106, 12219(2009). 4. M. Negishi, T. Sakaue and K. Yoshikawa,”Mismatch of bulk viscosity reduces interfacial diffusivity at an aqueous/oil system”, Phys. Rev. E, 81, 020901(2010). 5. M. Takinoue, Y. Atsumi and K. Yoshikawa, “Rotary motion driven by a direct current electric field, Appl. Phys. Lett., 96, 104105(2010).
【学術関係の受賞】	日本 IBM 科学賞 (1991)

【氏名（ふりがな)】	Tanimura Yoshitaka （たにむら　よしたか）
【職名】	Professor
【所属】	Department of Chemistry
【研究室】	Faculty of Science, 6th building #256
【直通電話】	075-753-4017
【FAX】	075-753-4018
【電子メールアドレス】	tanimura@kuchem.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://theochem.kuchem.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Chemical Physics
【現在の研究課題】	nonlinear optical response
【研究内容キーワード】	statistical physics
【学歴】	Keio University
【学位】	Ph. D
【所属学会】	Japanese Physical Soc, America Physical Soc. 日本化学会 America chemical Soc.
【学会活動】	2004-2004　日本物理学会理事
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. A. G. Dijkstra and Y. Tanimura, *Correlated fluctuations in the exciton dynamics and spectroscopy of DNA*, New J. of Phys. **12**, 055005 (19pages) (2010). 2. M. Tanaka and Y. Tanimura, *Multistate Electron Transfer Dynamics in the Condensed Phase: Exact Calculations from the Reduced Hierarchy Equations of Motion Approach,* J. Chem. Phys. **132**, 214502 (11pages) (2010) 3. A. G. Dijkstra and Y. Tanimura, *Non-Markovian entanglement dynamics in the presence of system-bath coherence,* Phys. Rev. Lett 104, 250401 (4 pages) (2010). 4. A. Sakurai and Y. Tanimura, *Does hbar play a role in multidimensional spectroscopy? Reduced hierarchy equations of motion approach to molecular vibrations,* J. Phys. Chem. A **115**, 4009-4022 (2011) 5. T. Hasegawa and Y. Tanimura, *A polarizable water model for intramolecular and intermolecular vibrational spectroscopies,* J. Phys. Chem. B **115**, 5545-5553(2011).
【学術関係の受賞など】	Morino Foundation Humboldt Research Award

【氏名（ふりがな)】	今堀　博（いまほり　ひろし）
【職名】	教授
【所属】	物質－細胞統合システム拠点（工学研究科　分子工学専攻）
【研究室】	桂キャンパス　A4 棟　002 号室
【直通電話】	075-383-2566
【FAX】	075-383-2571
【電子メールアドレス】	imahori@scl.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng_05/
【研究分野】	有機化学・光化学
【現在の研究課題】	人工光合成・有機太陽電池・ドラッグデリバリー
【研究内容キーワード】	ポルフィリン・フラーレン・ナノチューブ・自己組織化・電子移動
【最終学歴】	1990 年 3 月　京都大学大学院理学研究科博士後期課程修了
【学位】	1990 年 3 月　理学博士（京都大学）
【略歴】	1990 年 4 月　米国ソーク生物学研究所博士研究員、1992 年 4 月大阪大学産業科学研究所助手、1999 年 11 月大阪大学大学院工学研究科助教授、2001 年 12 月科学技術振興機構さきがけ研究代表者（兼任)、2002 年 2 月京都大学大学院工学研究科教授、2002 年 9 月京都大学福井謙一記念研究センタースーパーバイザー（兼任)、2007 年 10 月京都大学物質―細胞統合システム拠点教授
【所属学会】	日本化学会、光化学協会、米国化学会、米国電気化学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. T. Sagawa, S. Yoshikawa, and H. Imahori, “1-D Nanostructured Semiconducting Materials for Organic Photovoltaics,” *J. Phys. Chem. Lett.* (Perspective), **1**, 1020-1025 (2010). 2. H. Imahori, T. Umeyama, and S. Ito, “Large π Aromatic Molecules as Potential Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells,” *Acc. Chem. Res.* **42,** 1809-1818 (2009). 3. Y. Matano and H. Imahori, “Phosphole-Containing Calixpyrroles, Calilxphyrins, and Porphyrins: Synthesis and Coordination Chemistry,” *Acc. Chem. Res.* **42,** 1193-1204 (2009). 4. H. Imahori, T. Umeyama, “Donor-Acceptor Nanoarchitecture on Semiconducting Electrodes for Solar Energy Conversion,” *J. Phys. Chem. C* (Feature Article), **113**, 9029-9039 (2009). 5. A. Kira, T. Umeyama, Y. Matano, K. Yoshida, S. Isoda, J.-K. Park, D. Kim, H. Imahori, “Supramolecular Donor-Acceptor Heterojunctions by Vectorial Stepwise Assembly of Porphyrins and Coordination-Bonded Fullerene Arrays for Photocurrent Generation,” *J. Am. Chem. Soc.,* **131,** 3198-3200 (2009).
【学術関係の受賞】	1. 2004 年　光化学協会賞 2. 2006 年　日本学術振興会賞 3. 2006 年　日本化学会学術賞 4. 2007 年　東京テクノ・フォーラム 21 ゴールド・メダル賞 5. 2007 年　大阪科学賞 6. 2007 年　ナイスステップ研究者

【氏名（ふりがな）】	山本　量一　（やまもと　りょういち）
【職名】	教授
【所属】	工学研究科　化学工学専攻
【研究室】	桂キャンパス　A 棟 118 号室
【直通電話】	075-383-2661
【FAX】	075-383-2651
【電子メールアドレス】	ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	ソフトマターの移動現象
【現在の研究課題】	コロイド分散系の計算機シミュレーション
【研究内容キーワード】	ソフトマター、コロイド、計算機シミュレーション、ガラス転移
【最終学歴】	1992 年 3 月　神戸大学大学院 工学研究科修士課程化学工学専攻修了
【学位】	1996 年 3 月　博士（工学）京都大学
【略歴】	1994 年 9 月 神戸大学大学院自然科学研究科物質科学専攻助手、1996 年 3 月 京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻助手、2000 年 1 月 同講師、2004 年 10 月 京都大学大学院工学研究科化学工学専攻助教授、2007 年 4 月 同准教授、2008 年 10 月 同教授
【在外研究歴】	2000 年 9 月－2001 年 8 月　英国ケンブリッジ大学化学教室（J-P. Hansen 教授）（文部省在外研究員（若手））
【所属学会】	日本物理学会、化学工学会、高分子学会、分子シミュレーション研究会、日本液晶学会、紛体工学会、日本レオロジー学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. S. Yasuda and R. Yamamoto, "Dynamic rheology of a supercooled polymer melt in nonuniform oscillating flows between rapidly oscillating plates", Phys. Rev. E 84, 031501 (2011). 2. H. Mizuno and R. Yamamoto, "Dynamical heterogeneity in a highly supercooled liquid: Consistent calculations of correlation length, intensity, and lifetime", Phys. Rev. E 84, 011506 (2011). 3. H. Kobayashi and R. Yamamoto, "Implementation of Lees-Edwards periodic boundary conditions for direct numerical simulations of particle dispersions under shear flow", J. Chem. Phys. 134, 064110 (2011). 4. S. Yasuda and R. Yamamoto, "Rheological properties of polymer melt between rapidly oscillating plates: an application of multiscale modeling", Europhys. Lett. 86, 18002 (2009). 5. Y. Nakayama, K. Kim and R. Yamamoto, "Simulating (electro) hydrodynamic effects in colloidal dispersions: smoothed profile method", Eur. Phys. J. E 26, 361 (2008).
【学術関係の受賞】	2007 年 1 月 ホソカワ研究奨励賞、2002 年 12 月 分子シミュレーション研究会学術賞

【氏名（ふりがな）】	高田　彰二　（たかだ　しょうじ）
【職名】	准教授
【所属】	理学研究科　生物科学専攻　生物物理学教室
【研究室】	理学部 1 号館 205 号室
【直通電話】	075-753-4220
【FAX】	075-753-4222
【電子メールアドレス】	takada@biophys.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://theory.biophys.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	理論生物物理学
【現在の研究課題】	生体分子の構造機能についての理論およびコンピュータシミュレーション研究
【研究内容キーワード】	タンパク質、分子モーター、分子動力学、生体分子モデリング
【最終学歴】	1991 年 9 月　総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻 博士後期課程退学
【学位】	1994 年 3 月　理学博士（総合研究大学院大学）
【略歴】	1991 年～ 1995 年岡崎国立共同研究機構技官（分子科学研究所）、1995 年～ 1998 年日本学術振興会研究員（イリノイ大学化学科）、1998 年～ 2001 年神戸大学理学部化学科講師、2001 年～ 2007 年神戸大学理学部化学科助教授、2007 年～京都大学理学研究科生物科学専攻生物物理教室准教授。
【在外研究歴】	1995 年 5 月－ 1998 年 3 月　米国イリノイ大学化学科（日本学術振興会研究員）
【所属学会】	日本生物物理学会、日本物理学会
【学会活動】	日本生物物理学会運営委員
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Wenfei Li and Shoji Takada, Self-learning multiscale simulation for achieving high accuracy and high efficiency simultaneously, *Journal of Chemical Physics,* 130: 214108(6 pages), 2009 2. Naoto Hori, George Chikenji, R. Stephen Berry, and Shoji Takada, Folding energy landscape and network dynamics of small globular proteins, *Proceedings of the National Academy of Sciences USA,* 106: 73-78, 2009 3. Kei-ichi Okazaki, and Shoji Takada, Dynamic energy landscape view of coupled binding and protein conformational change: Induced-fit versus population-shift mechanisms, Proceedings of the National Academy of Sciences USA, 105: 11182-11187, 2008. 4. Kei-ichi Okazaki, Nobuyasu Koga, Shoji Takada, Jose N Onuchic, and Peter G Wolynes, Multiple-basin energy landscapes for large amplitude conformational motions of proteins: Structure-based molecular dynamics simulations, Proceedings of the National Academy of Sciences USA, 103(No.32):11844-11849, 2006. 5. Nobuyasu Koga and Shoji Takada, Folding-based molecular simulations reveal mechanisms of the rotary motor F1-ATPase, Proceedings of the National Academy of Sciences USA, 103(No.14):5367-5372, 2006.

【氏名（ふりがな）】	林　重彦　（はやし　しげひこ）
【職名】	准教授
【所属】	理学研究科　化学専攻
【研究室】	理学研究科 6 号館 154 号室
【直通電話】	075-753-4006
【FAX】	075-753-4000
【電子メールアドレス】	hayashig@kuchem.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/riron/hayashig
【研究分野】	理論化学・生物物理学
【現在の研究課題】	タンパク質分子機能の理論的研究
【研究内容キーワード】	タンパク質機能・分子シミュレーション
【学歴】	1997 年 11 月　京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了
【学位】	1997 年 11 月　博士（理学）（京都大学）
【略歴】	1998 年 4 月日本学術振興会特別研究員（名古屋大学）、2000 年 4 月米国イリノイ大学ベックマン研究所博士研究員、2003 年 6 月京都大学福井謙一記念研究センター博士研究員、2003 年 10 月科学技術振興機構さきがけ研究員、2005 年 5 月京都大学大学院理学研究科准教授
【所属学会】	生物物理学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Local entropy difference upon a substrate binding of a psychrophilic α-amylase and a mesophilic homologue. Takahiro Kosugi and Shigehiko Hayashi, Chem. Phys. Lett., 501, 517-522 (2011). 2. Protein collective motions coupled to ligand migration in myoglobin. Yasutaka Nishihara, Shigeki Kato, and Shigehiko Hayashi, Biophys. J., 98, 1649-1657 (2010). 3. Electronic coulombic coupling of excitation-energy transfer in xanthorhodopsin. Kazuhiro Fujimoto, and Shigehiko Hayashi, J. Am. Chem. Soc., 131, 14152-14153 (2009). 4. Proton transfer reactions in reaction center of photosynthetic bacteria, Rhodobacter sphaeroides. Yu Kaneko, Shigehiko Hayashi, and Iwao Ohmine, J. Phys. Chem. B, 113, 8993-9003 (2009). 5. Photochemical reaction dynamics of the primary event of vision studied by a hybrid molecular simulation. Shigehiko Hayashi, Emad Tajkhoshid, and Klaus Schulten, Biophys. J., 96, 403-416 (2009).

【氏名（ふりがな）】	長谷川　淳也　（はせがわ　じゅんや）
【職名】	准教授
【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 206
【直通電話】	075-711-7867
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	hasegawa@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/users/hasegawa/
【研究分野】	理論化学・量子化学
【現在の研究課題】	光機能性蛋白質における機能発現メカニズムの解明、励起状態理論の開発
【研究内容キーワード】	光機能性蛋白質、励起状態理論、電子相関理論
【最終学歴】	1998 年 3 月　京都大学工学研究科合成・生物化学専攻博士後期課程修了
【学位】	1998 年 3 月　博士（工学）、京都大学
【略歴】	1999 年 11 月京都大学工学研究科合成・生物化学専攻助手、2007 年 4 月京都大学工学研究科合成・生物化学専攻助教、2008 年 12 月京都大学工学研究科合成・生物化学専攻講師、2011 年 10 月京都大学福井謙一記念研究センター准教授
【在外研究歴】	1998 年 4 月 -1999 年 10 月　Lund 大学理論化学科（B. O. Roos 教授、スウェーデン）
【所属学会】	日本化学会、分子科学会、理論化学研究会、生物物理学会
【学会活動】	量子化学研究協会　理事
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. T. Kawatsu, K. Matsuda, and J. Hasegawa, “Bridge-Mediated Excitation Energy Transfer Pathways through Protein Media: a Slater Determinant-Based Electronic Coupling Calculation Combined with Localized Molecular Orbitals”, J. Phys. Chem. A 115(39), 10814-10822 (2011). 2. K. Fujimoto, K. Asai, and J. Hasegawa, “Theoretical Study of the Opsin Shift of Deprotonated Retinal Schiff Base in the M state of Bacteriorhodopsin”, Phys. Chem. Chem. Phys. 12(40), 13107-13116 (2010). 3. J. Hasegawa, T. Ise, K. Fujimoto, A. Kikuchi, E. Fukumura, A. Miyawaki, and Y. Shiro, “Excited States of Fluorescent Proteins, mKO and DsRed: Chromophore-protein Electrostatic Interaction Behind the Color Variations”, J. Phys. Chem. B, 114(8), 2971-2979 (2010). 4. K. Fujimoto, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, “Color tuning mechanism in human red, green, and blue cone visual pigments: SAC-CI theoretical study”, Bull. Chem. Soc. Jpn. 82(9), 1140-1148 (2009). 5. N. Nakatani, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, “Red Light in Chemiluminescence and Yellow-green Light in Bioluminescence: Color-tuning Mechanism of Firefly, Photinus pyralis, studied by the SAC-CI method”, J. Am. Chem. Soc. 129, 8756-8765 (2007).
【学術関係の受賞】	平成 9 － 11 年 日本学術振興会特別研究員、平成 21 年 9 月　分子科学会奨励賞、平成 23 年 9 月　QSCP Promising Scientist Prize of CMOA

【氏名（ふりがな)】	中尾　嘉秀　（なかお　よしひで）
【職名】	准教授
【所属】	福井謙一記念研究センター　理論研究部門
【研究室】	京都市西京区京都大学桂 A4 棟 024 号室
【直通電話】	075-383-2546
【FAX】	075-383-2799
【電子メールアドレス】	nakao@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/~moleng_10/index_J.html
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	物性の理論化学・計算化学
【研究内容キーワード】	機能性分子・励起状態・スピン物性
【学歴】	2003 年 3 月　東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻博士課程 修了
【学位】	2003 年 3 月　博士（工学）東京大学
【略歴】	2003 年 4 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻助手、2007 年 4 月 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻助教、2011 年 1 月 京都大学福井謙一記念研究センター准教授
【所属学会】	日本化学会、分子科学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. H. Ando, Y. Nakao, H. Sato and S. Sakaki, Theoretical Study of Low-Spin, High-Spin, and Intermediate-Spin States of $[Fe^{III}(pap)_2]^+$ (pap = N-2-pyridylmethylidene-2-hydroxyphenylaminato). Mechanism of Light-Induced Excited Spin State Trapping. J. Phys. Chem. A 111, 5515-5522 (2007). 2. K. Umakoshi, T. Kojima, K. Saito, S. Akatsu., M. Onishi, S. Ishizaka, N. Kitamura, Y. Nakao, S. Sakai, Y. Ozawa, Heteropolynuclear Complexes of 3,5-Dimethylpyrazolate $[Pt_2M_4(Me_2pz)_8]$ (M = Ag, Cu). Highly Luminescent Character of the Triplet Excited State Based on Mixed-Metal Cores. Inorg. Chem. 47, 5033-5035 (2008). 3. Y. Nakao, K. Saito, S. Sakaki, Theoretical investigation of μ-O-bridged dinuclear Re complexes. Electronic structure, bonding nature, and absorption spectra, Int. J. Quant. Chem. 109, 2319-2327 (2009). 4. Y. I. Kurokawa, Y. Nakao, S. Sakaki, Bonding nature of open-lantern-type dinuclear Cr(II) complexes. Theoretical study with the MRMP2 method. J. Phys. Chem. A 113, 3202-3209 (2009). 5. Y. I. Kurokawa, Y. Nakao, S. Sakaki, Inverted Sandwich Type Dinuclear Chromium(I) Complex and Its Analogues of Scandium(I), Titanium(I), Vanadium(I), Manganese(I), and Iron(I): Theoretical Study of Electronic Structure and Bonding Nature, J. Phys. Chem. A, 114, 1191-1199 (2010).

【氏名（ふりがな)】	石田　俊正　（いしだ　としまさ）
【職名】	特定准教授
【所属】	福井謙一記念研究センター　国際連携研究室
【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】	ishida@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/~ishida
【研究分野】	計算化学・理論化学
【現在の研究課題】	光機能分子・生体分子の反応・ポテンシャル面生成法
【研究内容キーワード】	光機能分子・生体分子・ポテンシャル面・非断熱遷移
【最終学歴】	1989 年 3 月　東京大学理学系大学院相関理化学専攻博士課程修了
【学位】	1989 年 3 月　理学博士（東京大学）
【略歴】	1989 年 4 月静岡大学教養部助手、1995 年 4 月静岡大学教養部助教授、1995 年 10 月静岡大学工学部助教授、2002 年 4 月岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助教授（流動部門)、2004 年 4 月静岡大学工学部助教授、2004 年 10 月京都大学福井謙一記念研究センター助教授、2007 年 4 月同准教授、2011 年 10 月同特定准教授
【在外研究歴】	1996 年 4 月 － 1997 年 3 月　米国 Northwestern 大学化学（George C. Schatz 教授）（文部省在外研究員（若手)）
【所属学会】	日本化学会、日本分子化学会、日本コンピュータ化学会、American Physical Society
【主な著書、学術論文】（5 年以内）	1. Hiroshi Kohguchi, Toshinori Suzuki, Shinkoh Nanbu, Toshimasa Ishida, Gennady V. Mil'nikov, Ponmile Oloyede, Hiroki Nakamura, "Collision Energy Dependence of the $O(^1D) + HCl \rightarrow OH + Cl(^2P)$ Reaction Studied by Crossed Beam Scattering and Quasiclassical Trajectory Calculations on ab initio Potential Energy Surfaces", *J. Phys. Chem. A* **112**(5), 818-825 (2008). 2. Toshimasa Ishida, Shinkoh Nanbu, and Hiroki Nakamura, Non-adiabatic ab initio dynamics of two models of Schiff base retinal *J. Phys. Chem. A,* **113**(16), 4356–4366 (2009). 3. Toshimasa Ishida and Jun-ichi Aihara, Aromaticity of neutral and doubly charged polyacenes, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, 7197 - 7201 (2009) 4. Wilfredo C. Chung, Shinkoh Nanbu, and Toshimasa Ishida, "Nonadiabatic ab Initio Dynamics of a Model Protonated Schiff Base of 9-cis Retinal", *J. Phys. Chem. A,* **114** (32), 8190–8201 (2010). 5. Shinkoh Nanbu, Toshimasa Ishida and Hiroki Nakamura, "Future Perspectives of Nonadiabatic Chemical Dynamics" *Chemical Science,* **1**, 663-674 (2010)

【氏名（ふりがな)】	池野　豪一（いけの　ひでかず)
【職名】	特定助教
【所属】	福井謙一記念研究センター　国際連携研究室
【研究室】	福井謙一記念研究センター 204
【直通電話】	075-711-7863
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	ikeno@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/~ikeno
【研究分野】	計算材料化学・電子分光の理論
【現在の研究課題】	電子分光法の理論および第一原理計算による解析
【研究内容キーワード】	X 線分光・電子線エネルギー損失分光・多重項・強相関
【学歴】	京都大学大学院工学研究科材料工学専攻博士後期課程修了
【学位】	2007 年 3 月　京都大学 博士 (工学)
【略歴】	2007 年 4 月－2009 年 3 月 京都大学大学院工学研究科 博士研究員 2009 年 4 月－2010 年 3 月ユトレヒト大学（オランダ）博士研究員 2010 年 4 月－福井謙一記念研究センター フェロー 2011 年11月－同特定助教
【所属学会】	日本物理学会，日本金属学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Hidekazu Ikeno, Teruyasu Mizoguchi and Isao Tanaka, “Ab initio charge transfer multiplet calculations on the $L_{2,3}$ XANES and ELNES of 3d transition metal oxides”, *Phys. Rev. B* **83**, 155107 (2011). 2. Teruyasu Mizoguchi, Weine Olovsson, Hidekazu Ikeno and Isao Tanaka, “Theoretical ELNES using one-particle an multi-particle calculations”, *Micron* **41**, 695-709, (2010). 3. Hidekazu Ikeno , Frank M.F. de Groot, Eli Stavitski and Isao Tanaka, “Multiplet calculations of $L_{2,3}$ x-ray absorption near-edge structures for 3d transition-metal compounds”, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 104208 (2009). 4. Hidekazu Ikeno, Teruyasu Mizoguchi, Yukinori Koyama, Yu Kumagai and Isao Tanaka, “First-principles calculations for $L_{2,3}$ ELNES/XANES of 3d transition metal monooxides, *Ultramicroscopy* **106**, 970-975 (2006). 5. Hidekazu Ikeno, Isao Tanaka, Yukinori Koyama, Teruyasu Mizoguchi and Kazuyoshi Ogasawara, “First-principles calculations of Ni $L_{2,3}$ NEXAFS for $LiNiO_2$ and related compounds”, *Phys. Rev. B* **72**, 075123 (2005).
【学術関係の受賞など】	日本学術振興会特別研究員 (DC2) 2005-2006

【氏名（ふりがな)】	諸熊　奎治　（もろくま　けいじ）
【職名】	リサーチリーダー
【所属】	福井謙一記念研究センター　福井謙一記念研究部門第一
【研究室】	福井謙一記念研究センター 202
【直通電話】	075-711-7843
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	morokuma@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/~morokuma; http://kmweb.fukui.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	複雑分子系の複合分子理論によるシミュレーション
【研究内容キーワード】	複合分子理論。複雑分子系、シミュレーション、ナノ構造、酵素反応
【最終学歴】	1962 年 3 月　京都大学大学院工学研究科博士課程単位修得退学
【学位】	1963 年 3 月　工学博士（京都大学）
【略歴】	1962 年 4 月京都大学工学部助手、1964 年 9 月 Columbia 大学客員助教授、1966 年 9 月 Harvard 大学博士研究員、1967 年 9 月 Rochester 大学助教授、1971 年 9 月同教授、1976 年 12 月分子科学研究所教授、1993 年 1 月 Emory 大学 William H. Emerson 教授、2006 年 9 月 Emory 大学名誉教授、2006 年 9 月京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー
【所属学会】	日本化学会、American Chemical Society、分子科学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	過去５年間に約１３０報 1. S. Sekharan and K. Morokuma, QM/MM Study of the Structure, Energy Storage and Origin of the Bathochromic Shift in Vertebrate and Invertebrate Bathorhodopsins. J. Am. Chem. Soc, 133, 4734-4737 (2011). 2. S. Maeda, S. Komagawa, M. Uchiyama, and K. Morokuma. Finding Reaction Pathways for Multicomponent Reactions: The Passerini Reaction Is a Four-Component Reaction. Angew, Chem. Int. Ed. 50, 644-649. (2011). 3. A. J. Page, K. R. S. Chandrakumar, S. Irle, and K. Morokuma, SWNT Nucleation from Carbon-Coated SiO_2 Nanoparticles via a Vapor-Solid-Solid Mechanism. J. Am. Chem. Soc. 133, 621-628 (2011). 4. H. Hirao and K. Morokuma, Ferric Superoxide and Ferric Hydroxide Are Used in the Catalytic Mechanism of Hydroxyethylphosphonate Dioxygenase (HEPD): A Density Functional Theory Investigation, J. Am. Chem. Soc. 132, 17901-17909 (2010). 5. X. Li, L. W. Chung, A. Miyawaki and K. Morokuma, Primary Events of Photodynamics in Reversibly Photoswitching Fluorescent Protein Dronpa, J. Phys. Chem. Lett. 1, 3328–3333 (2010). 6. K. Nozaki, S. Kusumoto, S. Noda, T. Kochi, L. W. Chung, and K. Morokuma, Why Did Incorporation of Acrylonitrile to a Linear Polyethylene Become Possible? Comparison of Phosphine-Sulfonate Ligand with Diphosphine and Imine-Phenolate Ligands in the Pd-Catalyzed Ethyelene/Acrylonitrile Copolymerization; J. Am. Chem. Soc. 132, 16030-16042 (2010). 7. A. J. Page, Y. Ohta, S. Irle and K. Morokuma, Mechanisms of Single-Walled Carbon Nanotube Nucleation, Growth and Healing Determined Using QM/MD Methods, Acc. Chem. Res. 43. 1375-1385 (2010).
【学術関係の受賞】	Alfred P. Sloan Research Fellowship, 1970-72; International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS); 日本化学会賞, 1992; The Schrödinger Medal, The World Association of Theoretical Organic Chemists (WATOC), 1993; The Fukui Medal, Asian Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists, 2005; 恩賜賞、日本学士院賞、2008; 瑞宝中綬章、2010

【氏名（ふりがな)】	前田　理（まえだ　さとし）
【職名】	特定助教
【所属】	京都大学次世代研究者育成センター・京都大学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・208 号室
【直通電話】	075-711-7894
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	smaeda@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/~maeda https://sites.google.com/site/satoshimaedakyotouniv/
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	化学反応経路自動探索法の開発と応用
【研究内容キーワード】	ポテンシャルエネルギー曲面・遷移状態・反応経路・非断熱反応経路
【学歴】	2004 年 3 月　東北大学大学院理学研究科修士課程　修了 2007 年 3 月　東北大学大学院理学研究科博士課程　修了
【学位】	2007 年 3 月　理学博士（東北大学）
【略歴】	2004 年 4 月　日本学術振興会特別研究員（DC1） 2007 年 4 月　日本学術振興会特別研究員（PD） 2010 年 4 月　京都大学次世代研究者育成センター（特定助教）
【所属学会】	日本化学会・日本物理学会・分子科学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Maeda, S.; Ohno, K.; Morokuma, K. Updated Branching Plane for Finding Conical Intersections without Coupling Derivative Vectors. *J. Chem. Theory Comput.* **2010**, 6, 1538-1545. 2. Maeda, S.; Ohno, K.; Morokuma, K. A Theoretical Study on the Photodissociation of Acetone: An Insight into the Slow Intersystem Crossing and Exploration of Nonadiabatic Pathways to the Ground State. *J. Phys. Chem. Lett.* **2010**, 1, 1841-1845. 3. Maeda, S.; Morokuma, K. Communications: A Systematic Method for Locating Transition Structures of A + B → X Type Reactions. *J. Chem. Phys.* **2010,** 132, 241102/1-4. 4. Maeda, S.; Komagawa, S.; Uchiyama, M.; Morokuma, K. Finding Reaction Pathways for Multicomponent Reactions: The Passerini Reaction Is a Four-Component Reaction. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011,** 50, 644-649. 5. Maeda, S.; Saito, R.; Morokuma, K. Finding Minimum Structures on Seam of Crossing in Reactions of Type A + B → X: Exploration of Nonadiabatic Ignition Pathways of Unsaturated Hydrocarbons. *J. Phys. Chem. Lett.* **2011**, 2, 852-857.
【学術関係の受賞など】	2004 年度－ 2006 年度　日本学術振興会特別研究員（DC1） 2007 年 3 月　青葉理学振興会賞 2007 年 3 月　東北大学総長賞 2004 年度－ 2006 年度　日本学術振興会特別研究員（PD） 2008 年 10 月　平成 20 年度分子科学討論会優秀講演賞 2010 年度－現在　京都大学白眉研究者

【氏名（ふりがな）】	榊　茂好　（さかき　しげよし）
【職名】	リサーチリーダー
【所属】	福井謙一記念研究センター：福井謙一記念研究部第２
【研究室】	303
【直通電話】	075-711-7907
【FAX】	075-711-4757
【電子メールアドレス】	sakaki@moleng.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.users.iimc.kyoto-u.ac.jp/~z59354/
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	遷移金属元素を含む複合電子系の構造、電子状態、反応過程の理論化学
【研究内容キーワード】	電子状態理論・遷移金属錯体・反応解析・触媒作用・励起状態
【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11月　工学博士（京都大学）
【略歴】	1975年４月熊本大学工学部助手、1982年１月 同助教授、1990年４月同教授を経て、2002年４月より京都大学工学研究科教授、2010年３月定年、現在に至る。
【所属学会】	日本化学会、触媒学会、近畿化学協会、ケイ素化学協会、American Chemical Society
【主な著書、学術論文】（過去５年以内）	1. Pd(II)-Promoted Direct Cross-Coupling Reaction of Arenes via Highly Regioselective Aromatic C-H Activation: A Theoretical Study, A. Ishikawa, Y. Nakao, H. Sato, S. Sakaki, *Dalton Trans.,* **39**, 3279-3289 (2010). 2. Comparison of Electronic Structures and Light-induced Excited Spin State Trapping between $[Fe(2\text{-picolylamine})_3]^{2+}$ and Its Iron(III) Analogue, H. Ando, Y. Nakao, H. Sato, S. Sakaki, *Dalton Trans.,* **39**, 1836-1845 (2010). 3. Spin-orbit coupling in a model Hamiltonian for d-d excited states of Ni^{2+} ion aqueous solution, S. Iuchi, S. Sakaki, *Chem. Phys. Lett.,* **485,** 114-118 (2010). 4. Inverted Sandwich Type Dinuclear Chromium(I) Complex and Its Analogues of Scandium(I), Titanium(I), Vanadium(I), Manganese(I), and Iron(I): Theoretical Study of Electronic Structure and Bonding Nature, Y.-I. Kurokawa, Y. Nakao, S. Sakaki, *J. Phys. Chem. A, 114*, 1191–1199 (2010). 5. Theoretical Study of Excited States of Pyrazolate- and Pyridinethiolate-Bridged Dinuclear Platinum(II) Complexes: Relationship between Geometries of Excited States and Phosphorescence Spectra, K. Saito, Y. Nakao, K. Umakoshi, S.Sakaki, *Inorg. Chem.,* **49**, 8977–8985 (2010). 6. Multi-State CASPT2 Study of Native Iron(III)-dependent Catechol Dioxygenase and Its Functional Models: Electronic Structure and Ligand-to-Metal Charge-Transfer Excitation, N. Nakatani, Y. Hitomi, S. Sakaki, *J. Phys. Chem. B,* 115, 4781–4789 (2011). 7. Theoretical Study of Photoinduced Epoxidation of Olefins Catalyzed by Ruthenium Porphyrin, A. Ishikawa, S. Sakaki, *J. Phys. Chem. A*, 115, 4774–4785 (2011). 8. Noble Reaction Features of Bromoborane in Oxidative Addition of B−Br σ−Bond to $M(PMe_3)_2$ (M= Pt or Pd): Theoretical Study, G. Zeng, S. Sakaki, *Inorg. Chem.,* 50, 5290-5297 (2011). 9. Theoretical Study of $Pt(PR_3)_2(AlCl_3)$ (R=H, Me, Ph, or Cy) Including an Unsupported Bond between Transition Metal and Non-Transition Metal Elements; Geometry, Bond Strength, and Prediction, S. Tsukamoto, S. Sakaki, *J. Phys. Chem. A,* 115, 8520-8527 (2011). 10. Heterolytic σ-Bond Activation by Transition Metal Complexes, S. Sakaki, N. Ochi, Y. Ohnishi, Computational Modeling for Homogeneous and Enzymatic Catalysis, K. Morokuma, D. J. Musaev, Ed. Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 265-284 (2008).
【学術関係の受賞など】	第１回分子科学会賞（2009年９月）

４．博士研究員組織（平成２３年１１月１日）

職名		氏名	在職期間
福井謙一記念研究部第一	福井センターフェロー	Zhuofeng　Ke	平成 21. 7. 7 －
		Joonghan Kim	平成 22. 11. 8 －
		Alister Page	平成 22. 12. 1 －
		畑中　美穂	平成 23. 4. 1 －
	（ＪＳＴ）フェロー	Xin Li	平成 19. 6. 1 －
		Fengyi Liu	平成 21. 9.15 －
		Hong-yan Xiao	平成 22. 7.1 －
		Lina Ding	平成 22. 7.1 －
		Haibei Li	平成 22. 7.27 －
		Lung Wa Chung	平成 22. 10.16 －
		Galina Petrova	平成 22. 12.1 －
福井謙一記念研究部第二	福井センターフェロー	土方　優	平成 23. 10. 1 －
	特推研究フェロー	青野　信治	平成 23. 4. 1 －
		塚本　晋也	平成 23. 4. 1 －
		Milind Deshmukh	平成 23. 4. 1 －
		會　桂香	平成 23. 4. 1 －
		髙木　望	平成 23. 4. 1 －
		中垣　雅之	平成 23. 4. 1 －
		吉澤　輝高	平成 23. 4. 1 －
福井センターフェロー		岩城　貴史	平成 22. 3. 1 －
		義永　那津人	平成 22. 4. 1 －
		嶺澤　範行	平成 23.10. 1 －
（受入れ研究者） 分子科学研究所　専門研究職員		河津　励	平成 23.10. 1 －

５．博士研究員プロフィール

【氏名】	Zhuofeng KE
【職名】	FIFC Fellow
【所属】	Morokuma Group, Fukui Institute For Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 207
【直通電話】	075-711-7893
【電子メールアドレス】	zhuofeng.ke@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	DNA-based asymmetric catalysis, pMMO enzymatic catalysis.
【研究内容キーワード】	Computational study of catalysis processes in organometallic systems and bio-systems
【学歴】	2002 B.Sc. in Chemistry, Sun Yat-sen University, 2005 M.Sc. in Polymer Chemistry and Physics, Sun Yat-sen University 2007 Jointly Educating Ph.D. in computational organometallic chemistry, University of North Texas, 2009 Ph.D. in Physical Chemistry (Theoretical and Computational Chemistry), Sun Yat-sen University
【学位】	Ph.D. in Physical Chemistry (Theoretical and Computational Chemistry), Sun Yat-sen University
【所属学会】	American Chemical Society
【学会活動】	241st ACS National Meeting in Anaheim, CA.
【主な著書、学術論文】（過去５年以内）	1. Ke Zhuofeng, Abe, Satoshi, Ueno, Takafumi, & Morokuma, Keiji, Rh-catalyzed Polymerization of Phenylacetylene: Theoretical Studies of the Reaction Mechanism, Regioselectivity and Stereoregularity. *J. Am. Chem. Soc.,* Accepted. 2. Gao, H., Ke, Zhuofeng, DeYonker N. J., Wang J., Xu H., Mao Z.-W., Phillips, D.L., & Zhao C., Dinuclear Zn(II) Complex Catalyzed Phosphodiester Cleavage Proceeds via a Concerted Mechanism: A Density Functional Theory Study. *J. Am. Chem. Soc.,* 2011, 133 (9), 2904–2915 3. Ke, Zhuofeng & Cundari, T.R., Palladium-Catalyzed C-H Activation/C-N Bond Formation Reactions: DFT Study of Reaction Mechanisms and Reactive Intermediates. Organometallics 29 (4), 821-834 (2010). (*Top10 Most Accessed Articles of Organometallics in 2010*) 4. Guo, Z.; Xue, Jiadan; Ke, Zhuofeng; Phillips, D. L.*; Zhao, C.Y.* “Influence of Water Hydrogen Bonding on the Reactions of Arylnitrenium Ions With Guanosine: Hydrogen-Bonding Effects Can Favor Reaction at the C8 Site” *J. Phys. Chem. B,* 2009, *113,* 6528–6532. 5. Foley, N. A.; Lee, J. P.; Ke, Zhuofeng; Gunnoe, T. B.*; and Cundari, T. R.* “Ru(II) Catalysts Supported by Hydridotris(pyrazolyl)borate for the Hydroarylation of Olefins: Reaction Scope, Mechanistic Studies, and Guides for the Development of Improved Catalysts” *Acc. Chem.* Res. 2009, *42,* 585–597 6. Lee, J. P.; Ke, Zhuofeng; Ramrez M. A.; Gunnoe, T. B.*; Cundari T. R.*; Boyle, P. D.; Petersen, J. L. “Six-, Five-, and Four-Coordinate Ruthenium(II) Hydride Complexes Supported by N-Heterocyclic Carbene Ligands: Synthesis, Characterization, Fundamental Reactivity, and Catalytic Hydrogenation of Olefins, Aldehydes, and Ketones” *Organometallics* 2009, 28, 1758–1775 7. Liu, Yan; Ke, Zhuofeng; Cui, Jianfang; Chen, Wen-Hua; Ma, Lin; Wang Bo*. “Synthesis, Inhibitory Activities and QSAR Study of Xanthone Derivatives as α-Glucosidase Inhibitors” *Bioorg. Med. Chem.* 2008, 16, 7185–7192. 8. Foley, Nicholas A.; Ke, Zhuofeng; Gunnoe, T. Brent*; Cundari, Thomas R.*; and Petersen, Jeffrey L. “Aromatic C-H Activation and Catalytic Hydrophenylation of Ethylene by TpRu{$P(OCH_2)_3CEt$}(NCMe)Ph” *Organometallics* 2008, 27, 3007–3017. 9. Guo, Zhen; Ke, Zhuofeng; Phillips, David Lee*; Zhao, Cunyuan*. “Intrinsic Reaction Coordinate Analysis of the Activation of CH4 by Molybdenum atoms: A Density Functional Theory Study of the Crossing Seams of the Potential Energy Surfaces” *Organometallics* 2008, 27, 181–188. 10. Gao, Haiyang; Ke, Zhuofeng; Pei, Lixia; Song, Keming; Wu, Qing*. “Drastic ligand electronic effect on anilidoeimino nickel catalysts toward ethylene polymerization” *Polymer* 2007, 48, 7249-7254. 11. Lin, Xufeng; Zhao, Cunyuan; Che, Chi-Ming*; Ke, Zhuofeng; Phillips, David Lee. “A DFT Study on the Mechanism of Rh2II,II-Catalyzed Intramolecular Amidation of Carbamates” *Chem. Asian J.* 2007, 2, 1101 – 1108 12. Ke, Zhuofeng; Zhou, Yubing; Gao, Hui; Zhao, Cunyuan*, Phillips, David Lee. “On the Mechanism and Stereochemistry of Chiral Lithium Carbenoid Promoted Cyclopropanation Reactions” *Chem. Eur. J.* 2007, 13, 6724 – 6731. 13. Fang, Ran; Ke, Zhuofeng; Shen, Yong; Zhao, Cunyuan*; Phillips, David Lee. “Concurrent Cyclopropanation by Carbenes and Carbanions? A Density Functional Theory Study on the Reaction Pathways” *J. Org. Chem.* 2007, 72, 5139−5145. 14. Ke, Zhuofeng; Zhao, Cunyuan*; Phillips, David Lee. “Methylene Transfer or Carbometalation? A Theoretical Study to Determine the Mechanism of Lithium Carbenoid Promoted Cyclopropanation Reactions in Aggregation and Solvation States.” *J. Org. Chem.* 2007, 72, 848−860.
【学術関係の受賞など】	Sun Yat-sen University Fellow 2009 State Scholarship Funds, China Scholarship Council (CSC) 2007

【氏名】	Joonghan Kim
【職名】	FIFC Fellow
【所属】	Fukui Kenichi Memorial Research Group 1, Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 216
【直通電話】	075-711-7708
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	Joonghan@fukui.kyoto-u.ac.jp; quatum99@gmail.com
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	DFTB-MD simulation of chirality controlled carbon nanotube growth, determination of local chirality of carbon nanotube
【研究内容キーワード】	Carbon nanotube, density-functional tight-binding, chirality
【学歴】	2004 B. Sc., Hanyang University, Seoul, Korea 2010 Ph. D., KAIST, Daejeon, Korea
【学位】	Doctor of Philosophy, KAIST, Daejeon, Korea
【略歴】	2010, Postdoctoral fellow, KAIST, Daejeon, Korea
【所属学会】	Korean Chemical Society
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Qingyu Kong, Michael Wulff, Savo Bratos, Rudolphe Vuilleumier, Joonghan Kim and Hyotcherl Ihee, “Structure of the Photodissociation Products of CCl_4, CBr_4 and CI_4 in Solution Studied by DFT and Ab Initio Calculations”, J. Phys. Chem. A 110, 11178-11187 (2006). 2. Joonghan Kim, Yoon Sup Lee and Hyotcherl Ihee, “Density Functional and Ab Initio Studies on Structures and Energies of the Ground State of CrCO”, Int. J. Quant. Chem. 107, 458 (2007). 3. Joonghan Kim, Tae Kyu Kim, Jangbae Kim, Yoon Sup Lee and Hyotcherl Ihee, “Density Functional and Ab Initio Study of $Cr(CO)_n$ (n = 1−6) Complexes”, J. Phys. Chem. A 111, 4697-4710 (2007). 4. Joonghan Kim, Sunhong Jun, Jeongho Kim and Hyotcherl Ihee, “Density Functional and Ab Initio Investigation of CF_2ICF_2I and CF_2CF_2I Radicals in Gas and Solution Phases”, J. Phys. Chem. A 113, 11059-11066 (2009). 5. Joonghan Kim, Tae Kyu Kim and Hyotcherl Ihee, “Theoretical Study on the Reaction of Ti^+ with Acetone and the Role of Intersystem Crossing”, J. Phys. Chem. A 113, 11382-11389 (2009). 6. Jeewon Kang, Joonghan Kim, Hyotcherl Ihee and Yoon Sup Lee, “Molecular Structures, Energetics and Electronic Properties of Neutral and Charged Hg_n Clusters (n= 2–8)", J. Phys. Chem. A 114, 5630-5639 (2010). 7. Joonghan Kim, Hyotcherl Ihee and Yoon Sup Lee, “Spin-Orbit Density Functional and Ab Initio Study of HgX_n (X=F, Cl, Br, and I; n=1, 2, and 4)”, J. Chem. Phys. 133, 144309 (2010). 8. Joonghan Kim, Hyotcherl Ihee and Yoon Sup Lee, “Spin-orbit ab initio study of two low-lying states of chloroiodomethane cation”, Theor. Chem. Acc. DOI 10.1007/s00214-010-0849-9. 9. Joonghan Kim, Tae Kyu Kim and Hyotcherl Ihee, “Density Functional and Spin-Orbit Ab Initio Study of CF_3Br: Molecular Properties and Electronic Curve-Crossing”, J. Phys. Chem. A 115, 1264-1271 (2011). 10. Joonghan Kim and Hyotcherl Ihee, “Theoretical Study on the Reaction of Butadiynyl Radical (C_4H) with Ethylene (C_2H_4) to Form C_6H_4 and H”, Int. J. Quant. Chem. Accepted for the publication (co-corresponding author).

【氏名】	Alister Page
【職名】	FIFC Fellow
【所属】	Fukui Kenichi Memorial Research Group 1, Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 203
【直通電話】	075-711-7831
【FAX】	095-781-4757
【電子メールアドレス】	alisterpage@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	Molecular Dynamics simulations and electronic structure calculations of nanoscale self-assembly processes (in particular, carbon nanotube nucleation and growth).
【研究内容キーワード】	Single-walled carbon nanotube, self-assembly, nucleation, growth, healing, (*n,m*)chirality, density-functional tight-binding
【学歴】	2004, Bachelor of Mathematics (Honours Class I), The University of Newcastle, Australia 2004, Bachelor of Science (Honours Class I), The University of Newcastle, Australia 2008, Doctor of Philosophy, The University of Newcastle, Australia
【学位】	Doctor of Philosophy, The University of Newcastle, Australia
【略歴】	2008, Postdoctoral Research Associate, Priority Research Centre for Energy, Department of Chemical Engineering, The University of Newcastle, Australia 2009-2010, CREST Postdoctoral Research Fellow, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Japan
【所属学会】	American Chemical Society, Royal Australian Chemistry Institute
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. A. J. Page, K.R.S. Chandrakumar, S. Irle, K. Morokuma, “SWNT Nucleation from Carbon-Coated SiO_2 Nanoparticles via a Vapor-Solid-Solid Mechanism”. *J. Am. Chem. Soc.,* **132**, 15699, (2011) 2. A. J. Page, Y. Ohta, S. Irle, K. Morokuma, “Mechanisms of Single-Walled Carbon Nanotube Nucleation, Growth and Healing Determined using QM/MD Methods”, *Acc. Chem. Res.,* **43**, 1375, (2010) 3. A. J. Page, Y. Ohta, Y. Okamoto, S. Irle, K. Morokuma, “Defect Healing During Single-Walled Carbon Nanotube Growth: A Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Investigation”, *J. Phys. Chem. C,* **113**, 20198, (2009) 4. A. J. Page, B. Moghtaderi, “Molecular Dynamics Simulation of the Low-Temperature Partial Oxidation of CH_4”, *J. Phys. Chem. A*, **20**, 1539, (2009) 5. A. J. Page, E. I. von Nagy-Felsobuki, “Rovibrational Spectra of LiH_2^+, $LiHD^+$ and LiD_2^+ Determined using FCI Property Surfaces”, *J. Phys. Chem. A*, **111**, 4478, (2007)
【学術関係の受賞など】	Australian Post-Graduate Award (2005-2008) RACI Chemistry Honours Prize (2004) Deans Medal, Faculty of Science and IT, The University of Newcastle (2004)

【氏名（ふりがな)】	畑中　美穂　（はたなか　みほ）
【職名】	福井センターフェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	福井記念研究センター 212 号室
【直通電話】	075-711-7647
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	miho@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	ランタニド系化合物の蛍光に関する理論的研究 生体内酵素による反応の機構解明
【研究内容キーワード】	ランタニド、蛍光、エネルギー移動、タンパク質、酵素反応
【学歴】	2011 年 3 月　慶應義塾大学大学院理工学研究科 基礎理工学専攻後期博士課程修了
【学位】	2011 年 3 月　博士（理学）　慶應義塾大学
【略歴】	2009 年 4 月　慶應義塾大学大学院理工学研究科助教（有期･研究奨励） 2011 年 4 月　京都大学福井謙一記念研究センターフェロー
【所属学会】	日本化学会、分子科学会
【主な著書、学術論文】 （過去 5 年以内）	1. **M. Hatanaka**, S. Yabushita, “An ab initio study on the f−f hypersensitive transition intensities of lanthanide tribromide molecules”, *Chemical Physics Letters* **504**, pp 193-198 (2011). 2. **M. Hatanaka**, S. Yabushita, “Theoretical Study on the f−f Transition Intensities of Lanthanide Trihalide Systems”, *Journal of Physical Chemistry A* **113**, pp 12615-12625 (2009). 3. T. Ikeno, I. Iwakura, A. Shibahara, **M. Hatanaka**, A. Kokura, S. Tanaka, T. Nagata, T. Yamada, “Newly Designed Catalysts for the Enantioselective Borohydride Reduction: Prediction from the Theoretical Analysis”, *Chemistry Letters* **36**, pp 738-739 (2007). 4. I. Iwakura, **M. Hatanaka**, A. Kokura, H. Teraoka, T. Ikeno, T. Nagata, T. Yamada, “The Reactive Intermediate of Catalytic Borohydride Reduction by Schiff Base-Cobalt Comples”, *Chemistry – An Asian Journal* **1**, pp 656-663 (2006).
【学術関係の受賞など】	2009 年 3 月　日本化学会第 89 春季年会　学生講演賞 2010 年 4 月　公益信託　林女性自然科学者研究助成基金　林フェロー

【氏名】	Xin LI
【職名】	JST Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 212
【直通電話】	075-711-7647
【電子メールアドレス】	lixin@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	1. Radical Reaction Mechanism in B_{12}-Dependent Methylmalonyl-CoA Mutase 2. Reversibly Photoswitchable Fluorescent Protein: Dronpa 3. Irreversible Photoconversion Fluorescent Protein: Kaede
【研究内容キーワード】	Reaction mechanisms of metalloenzymes and photobiology
【学歴】	June 2005, Ph. D., College of Chemistry, Liaoning Normal University
【学位】	Ph. D. in Physical Chemistry from Liaoning Normal University
【略歴】	July 2005-May 2007, Postdoctoral Fellow, Peking University
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Ling Xu, Xin Li, et al., “Ion-Specific Swelling of Poly (Styrene Sulfonic Acid) Hydrogel”, J. Phys. Chem. B 111(13), 3391-3397 (2007). 2. Fu-Qiang Shi, Xin Li, et al., “DFT Study of the Mechanisms of In Water Au(I)-Catalyzed Tandem [3,3]-Rearrangement/Nazarov Reaction/[1,2]-Hydrogen Shift of Enynyl Acetates: A Proton-Transport Catalysis Strategy in the Water-Catalyzed [1,2]-Hydrogen Shift”, J. Am. Chem. Soc. 129, 15503-15512 (2007). 3. Xin Li, Si-Yu Ye, Chuan He, and Zhi-Xiang Yu, “Mechanisms of Brønsted Acid Catalyzed Additions of Phenols and Protected Amines to Olefins: A DFT Study”, Eur. J. Org. Chem. 4296-4303 (2008). 4. Lung Wa Chung, Xin Li, Hiroshi Sugimoto, Yoshitsugu Shiro, Keiji. Morokuma, “A DFT Study on a Missing Piece in Understanding of Heme Chemistry: The Reaction Mechanism for Indoleamine 2,3-Dioxygenase (IDO) and Tryptophan 2,3-Dioxygenase (TDO)” J. Am. Chem. Soc. 131, 12298 (2008). 5. Xin Li, Lung Wa Chung, Piotr Paneth, and Keiji Morokuma, “DFT and ONIOM(DFT:MM) Studies on Co-C Bond Cleavage and Hydrogen Transfer in B_{12}-Dependent Methylmalonyl-CoA Mutase. Stepwise or Concerted Mechanism?” J. Am. Chem. Soc. 131, 5115-5125 (2009). 6. Xin Li, Lung Wa Chung, Hideaki Mizuno, Atsushi Miyawaki, and Keiji Morokuma, “A Theoretical Study on the Nature of On- and Off-States of Reversibly Photoswitching Fluorescent Protein Dronpa: Absorption, Emission, Protonation and Raman”, J. Phys. Chem. B 114, 1114-1126 (2010). 7. Xin Li, Lung Wa Chung, Hideaki Mizuno, Atsushi Miyawaki, and Keiji Morokuma, “Primary Events of Photodynamics in Reversible Photoswitching Fluorescent Protein Dronpa”, J. Phys. Chem. Lett. 1, 3328-3333 (2010). 8. Xin Li, Lung Wa Chung, Hideaki Mizuno, Atsushi Miyawaki, and Keiji Morokuma, “Competitive Mechanistic Pathways for Green-to-Red Photoconversion in the Fluorescent Protein Kaede: A Computational Study”, J. Phys. Chem. B 114, 16666-16675 (2010).
【学術関係の受賞など】	Postdoctoral Science Fund of China in Peking University, 2006.

【氏名】	Fengyi Liu
【職名】	JST Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 207
【直通電話】	075-711-7893
【電子メールアドレス】	fengyiliu@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	Theoretical calculation of molecular motor and switch
【研究内容キーワード】	Artificial/biological molecular motor, molecular switch
【学歴】	Jun. 1998, B. Sc. in Chemistry, Hebei Normal University, China Jun. 2001, M. Sc. in Chemistry, Hebei Normal University, China Dec. 2005, Ph.D. in Chemistry, Beijing University of Chemical Technology, China
【学位】	Ph. D. in Applied Chemistry, Beijing University of Chemical Technology
【略歴】	Sep. 2007-Jun. 2009, Postdoctoral researcher, Lund University, Sweden
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Fengyi Liu and Keiji Morokuma, Rationalization of Light-Driven Rotary Molecular Motor: An Theoretical Study on the Photoisomerization of an Stiff Stilbene, *manuscript in preparation.* 2. Fengyi Liu, Yajun liu, Luca De Vico, Roland Lindh, A CASSCF/CASPT2 Approach to the Decomposition of Thiazole-Substituted Dioxetanone: Substitution Effects and Charge-Transfer Induced Electron Excitation, Chem. Phys. Lett. 2009,484,69-75. 3. Fengyi Liu, Yajun Liu, Luca De Vico, Roland Lindh, Theoretical Study of the Chemiluminescent Decomposition of Dioxetanone, J. Am. Chem. Soc., 2009, 131, 6181-6188. 4. Shu-Feng Chen,Feng-Yi Liu, Ya-Jun Liu, An ab initio investigation of the mechanisms of photodissociation in bromobenzene and iodobenzene, J. Chem. Phys., 2009, 131, 124304. 5. Fengyi Liu, Lingpeng Meng, Shijun Zheng, Small Fullerenes with BN Belts: a Density Functional Theory Investigation, J. Phys. Chem. B, 2006, 110, 6666-6672. 6. Fengyi Liu, Lingpeng Meng, Zheng Sun, Shijun Zheng, Insights into the Mechanism of BN Generation via Boron Triazide Precursor: A Theoretical Study, J. Phys. Chem. A, 2006, 110, 10591-10600.

【氏名】	Hong-Yan Xiao
【職名】	JST Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 208
【直通電話】	075-711-7894
【電子メールアドレス】	hyxiao@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	Exploring photodissociation mechanism of small molecules by GRRM and AFIR programs
【研究内容キーワード】	Photodissociation, excited state, conical intersection, nonadiabatic transition
【学歴】	Jun. 2002, B. Sc. in Chemistry, Liaoning Normal University, China Jun. 2005, M. Sc. in Physical Chemistry, Liaoning Normal University, China Jun. 2008, Ph.D. in Physical Chemistry, Beijing Normal University, China
【学位】	Ph. D. in Physical Chemistry, Beijing Normal University
【略歴】	Since July 2008, working as an assistant researcher at Technical Institute of Physics and Chemistry, Chinese Academy of Science
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Hong-Yan Xiao, Jun Cao, Ya-Jun Liu, Wei-Hai Fang, Hiroto Tachikawa, Masaru Shiotani. Structures and cis-to-trans photoisomerization of hexafluoro-1,3-butadiene radical cation: electron spin resonance and computational studies. J. Phys. Chem. A 111, 5192-5200 (2007) 2. Hong-Yan Xiao, Ya-Jun Liu, Wei-Hai Fang. Multireference theoretical investigation on selectivity of the bond fissions in photodissociation of acetyl cyanide. J. Chem. Phys. 127, 244313-1~244313-7 (2007) 3. Ya-Jun Liu, Hong-Yan Xiao, Meng-Tao Sun, Wei-Hai Fang. Spin-orbit ab initio investigation of the photodissociation of dibromomethane in the gas and solution phases. J. Comput. Chem. 29, 2513-2519 (2008) 4. Isabelle Navizet, Ya-Jun Liu, Nicolas Ferré, Hong-Yan Xiao, Wei-Hai Fang and Roland Lindh. Color-tuning mechanism of firefly investigated by multi-configurational perturbation method. J. Am. Chem. Soc. 132, 706-712 (2010) 5. Hong-Yan Xiao, Zhen Zhen, Huan-Quan Sun, Xu-Long Cao, Zhen-Quan Li, Xin-Wang Song, Xiao-Hong Cui and Xin-Hou Liu. Molecular dynamics simulation of anionic surfactant at the water/n-alkane interface. Acta Phys. -Chim. Sin. 26, 422-428 (2010) 6. Hong-Yan Xiao, Satoshi Maeda and Keiji Morokuma. Excited-state roaming dynamics in photolysis of a nitrate radical. J. Phys. Chem. Lett. 2, 934-938 (2011)
【学術関係の受賞など】	Qiu Shi Graduate Student Scholarship in Beijing Normal University (2007) National Natural Science Foundation of China (2010)

【氏名】	Lina Ding
【職名】	JST Fellow
【所属】	Fukui Institute For Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 212
【直通電話】	075-711-7631
【電子メールアドレス】	ding@fukui.kyoto-u.ac.jp
【現在の研究課題】	photobiology
【研究内容キーワード】	Reaction mechanism of photobiology
【学歴】	Jun. 2004, B. Sc. in Chemistry, Zhengzhou University, China Jun. 2007, M. Sc. in Organic Chemistry, Zhengzhou University, China Jun. 2010, Ph.D. in Physical Chemistry, Beijing Normal University, China
【学位】	Ph.D. in Physical Chemistry, Beijing Normal University, China
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Lina Ding, Wei-Hai Fang*, Exploring Light-Induced Decarboxylation Mechanism of o-Acetylphenyl-Acetic Acid from the Combined CASSCF and DFT Studies, ***J. Org. Chem.*** *2010, 75, 1630-1636.* 2. Lina Ding, Lin Shen, Xue-Bo Chen, Wei-Hai Fang*, Solvent Effects on photoreactivity of Valerophenone: A Combined QM and MM Study, ***J. Org. Chem.*** **Featured Article** 2009, 74, 8956-8962. 3. Lina Ding, Xue-Bo Chen*, Wei-Hai Fang*, Ultrafast Asynchronous Concerted Excited-State Intramolecular Proton Transfer and Photodecarboxylation of o-Acetylphenylacetic Acid Explored by Combined CASPT2 and CASSCF Studies, ***Org. Lett.*** 2009, 11(7), 1495-1498. 4. Ganglong Cui, Lina Ding, Feng Feng, Yajun Liu, and Weihai Fang, Insights into Mechanistic Photochemistry of Urea, ***J. Chem. Phys.*** 2010, 132, 194308;
【学術関係の受賞など】	Beijing Normal University, Academic Excellence Award, 2009. Beijing Normal University, Scientific Achievement Award, 2010.

【氏名】	Haibei Li
【職名】	JST Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 203
【直通電話】	075-711-7834
【電子メールアドレス】	hpli@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	MD simulations of the formation and growth of carbon nanostructures: fullerenes, and nanotubes
【研究内容キーワード】	Fullerene, Hydrocarbon combustions, Self-assembly, Single-walled carbon nanotube, Chirality, Density-functional tight-bingding
【学歴】	2004, Bachelor of Chemistry, Qufu Normal University, China 2007, Master of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, China 2010, Doctor of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, China
【学位】	Doctor of Chemical Physics, University of Science and Technology of China
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Haibei Li, Shanxi Tian, and Jinlong Yang. Theoretical study of the stepwise protonation of the dioxo Manganese (V) porphyrin, J. Phys. Chem. B, 112, 15807, 2008 2. Haibei Li, Shanxi Tian, and Jinlong Yang. Chemical bonds and electronic strucures of the methonium cations CH_6^{2+} and CH_7^{3+}, J. Theor. Comp. Chem. 7, 139, 2008 3. Haibei Li, Yubin Bai, Shanxi Tian, and Jinlong Yang. Electron topological and energetic study of the intermolecular non-hydrogen bonding interactions in complexes $H_2O\cdots M$ (M=F_2, ClF, and CF_4), J. Theor. Comp. Chem. 8, 615, 2009 4. Haibei Li, Shanxi Tian, and Jinlong Yang. Propene oxidation with anionic cluster $V_4O_{11}^-$: selective epoxidation, Chem. Eur. J (communications) 15, 10747, 2009 5. Haibei Li, Shanxi Tian, and Jinlong Yang. Propene oxidation on $V_4O_{11}^-$ cluster: reaction dynamics to acrolein, J. Phys. Chem. A, 114, 6542, 2010
【学術関係の受賞など】	Qiu Shi Graduate Student Scholarship (2009) Supported by the Scientific Research Foundation of Graduate School of USTC (2008)

【氏名】	Lung Wa Chung
【職名】	FIFC Fellow (till Oct 2010); JST Fellow (Oct 2010-)
【所属】	Fukui Kennichi Memorial Research Group 1, Fukui Institute For Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 212
【直通電話】	075-711-7631
【電子メールアドレス】	chung@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry, Biochemistry and Biophysics
【現在の研究課題】	Metalloenzymes, photobiology, multi-scale simulations
【研究内容キーワード】	Reaction mechanism of metalloenzymes, photobiology, bio-inspired systems and catalysis; multi-scale simulations development
【学歴】	Aug. 2000, B.Sc. in Chemistry (1st Hon.), The Hong Kong University of Science & Technology; Aug. 2003, M. Phil. in Chemistry, The Hong Kong University of Science & Technology; Aug. 2006, Ph. D. in Chemistry, The Hong Kong University of Science & Technology
【学位】	Ph. D. in chemistry, The Hong Kong University of Science & Technology
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Chung, L. W.; Li, X.; Sugimoto, H.; Shiro, Y.; Morokuma, K. “A DFT Study on a Missing Piece in Understanding of Heme Chemistry: The Reaction Mechanism for Indoleamine 2,3-Dioxygenase (IDO) and Tryptophan 2,3-Dioxygenase (TDO)” *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 12298. 2. Chung, L. W.; Hayashi, S.; Lundberg, M.; Nakatsu, T.; Kato, H.; Morokuma, K. “Mechanism of Efficient Firefly Bioluminescence via Adiabatic Transition State and Seam of Sloped Conical Intersection” *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130,* 12880. 3. Li. X.; Chung, L. W.; Paneth, P.; Morokuma, K. “DFT and ONIOM(DFT: MM) Studies on Co-C Bond Cleavage and Hydrogen Transfer in B12-Dependent Methylmalonyl-CoA Mutase. Stepwise or Concerted Mechanism?” *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 5115. 4. Li. X.; Chung, L. W.; Mizuno, H.; Miyawaki, A.; Morokuma, K. “A Theoretical Study on the Natures of On- and Off-States of Reversibly Photoswitching Fluorescent Protein Dronpa: Absorption, Emission, Protonation and Raman” *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114*, 1114 5. Noda, S.; Nakamura, A.; Kochi, T.; Chung, L. W.; Morokuma, K.; Nozaki, K. “Mechanistic Studies on the Formation of Linear Polyethylene Chain Catalyzed by Palladium Phosphine-Sulfonate Complexes: Experiment and Theoretical Studies”, *J. Am. Chem. Soc.* **2009,** *131*, 14088 6. Chung, L. W.; Li, X.; Sugimoto, H.; Shiro, Y.; Morokuma, K. “ONIOM Study on a Missing Piece in Our Understanding of Heme Chemistry: Bacterial Tryptophan 2,3-Dioxygenase with Dual Oxidants”, *J. Am. Chem. Soc*. **2010**, *115*, 11993. 7. Nozaki, K.; Kusumoto, S.; Noda, S.; Kochi, T.; Chung, L. W.; Morokuma, K.; “Why Did Incorporation of Acrylonitrile to a Linear Polyethylene Become Possible? Comparison of Phosphine–Sulfonate Ligand with Diphosphine and Imine–Phenolate Ligands in the Pd-Catalyzed Ethyelene/ Acrylonitrile Copolymerization”, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 16030. 8. Li, X.; Chung, L. W.; Mizuno, H.; Miyawaki, A.; Morokuma, K. “Primary Events of Photodynamic in Reversibly Photoswitching Fluorescent Protein Dronpa” *J. Phys. Chem. Lett.* **2010,** *1*, 3328. 9. Nakamura, A.; Munakata, K.; Ito, S.; Kochi, T.; Chung, L. W.; Morokuma, K.; Nozaki, K. “Pd-Catalyzed Copolymerization of Methyl Acrylate with Carbon Monoxide: Structures, Properties and Mechanistic Aspects toward Ligand Design” *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 6761. 10. Chung, L. W.; Hirao, H.; Li, X.; Morokuma, K. “The ONIOM Method: Its Foundation and Applications to Metalloenzymes and Photobiology”, submitted to Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science (revision).

【氏名】	Galina Petrova
【職名】	JST fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 214
【FAX】	075-711-7838
【電子メールアドレス】	petrova@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	Hetero- and homogeneous catalysis
【研究内容キーワード】	metalloenzymes, reaction mechanism, transition metal clusters, zeolites
【学歴】	2009, Ph.D. degree in Organic chemistry, University of Sofia, Bulgaria 2003, B.Sc. in Chemistry (Theoretical and physical chemistry), University of Sofia, Bulgaria
【学位】	Ph.D. in Organic chemistry, University of Sofia, Bulgaria
【略歴】	02-11/2010, Postdoctoral Scholar at the Faculty of Chemistry, University of Sofia 06/2009–01/2010, Postdoctoral Scholar at the Faculty of Chemistry, University of Sofia & Excellence Centre for Advanced Materials UNION 7/2008–5/2009, Research chemist at the Faculty of Chemistry, University of Sofia
【所属学会】	Bulgarian Catalytic Club, Bulgarian Zeolite Association
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. N. Rösch, G. P. Petrova, P. St. Petkov, A. Genest, S. Krüger, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, “Impurity Atoms on Small Transition Metal Clusters. Insights from Density Functional Model Studies”, Topics in Catalysis, 54, 363-377 (2011). 2. M. A. Rangelov, G. P. Petrova, V. M. Yomtova, G. N. Vayssilov, “Catalytic Role of Vicinal OH in Ester Aminolysis - Proton Shuttle versus Hydrogen-Bonds Stabilization”, J. Org. Chem., 75, 6782–6792 (2010). 3. G. P. Petrova, G. N. Vayssilov, N. Rösch, “Redox behavior of small metal clusters with respect to hydrogen. The effect of the cluster charge from density functional results”, Phys. Chem. Chem. Phys., 12, 11015–11020 (2010). 4. G. P. Petrova, G. N. Vayssilov, N. Rösch, “Hydrogen Adsorption on Zeolite-Supported Tetrairidium Clusters. Thermodynamic Modeling from Density Functional Calculations”, J. Phys. Chem/ C, 112, 18572–18577 (2008). 5. G. N. Vayssilov, H. A. Aleksandrov, G. P. Petrova, P. St. Petkov, “Computational Modelling of Nanoporous Materials”, Chapter 8 in Ordered Porous Solids; Valchev, Mintova, Tsapacis (Eds.), Elsevier, Amsterdam, pp. 209-236 (2008). 6. G. P. Petrova, G. N. Vayssilov, N. Rösch, “Density Functional Modeling of Reverse Hydrogen Spillover on Zeolite-Supported Tetrairidum Clusters”, Chem. Phys. Lett., 444, 215-219 (2007).
【学術関係の受賞など】	Student award for high academic achievements of the Foundation for support of the Bulgarian Higher Education named after Prof. Michael Klett (2003)

【氏名（ふりがな）】	Yuh Hijikata（ゆう　ひじかた）
【職名】	FIFC Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 303
【直通電話】	075-711-7907
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	hijikata@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational chemistry
【現在の研究課題】	Theoretical calculation of host-guest interaction in porous coordination polymers
【研究内容キーワード】	Coordination chemistry, Adsorption
【学歴】	Mar., 2006, B. of Eng., Undergraduate School of Engineering, Kyoto University Mar., 2008, M. of Eng., Graduate School of Engineering, Kyoto University May, 2011, Ph. D. of Eng., Graduate School of Engineering, Kyoto University
【学位】	Ph. D. of Engineering from Kyoto University
【略歴】	Apr., 2008, JSPS Fellow (DC1), Kyoto University Apr., 2011, SPR Fellow, Kyoto University Oct., 2011, FIFC Fellow, Kyoto University
【所属学会】	Chemical Society of Japan Japan Society of Molecular Science Japan Society of Coordination Chemistry
【主な著書、学術論文】（過去５年以内）	1. Hiroyuki NAKASHIMA, Yuh HIJIKATA, and Hiroshi NAKATSUJI “Solving the electron and electron-nuclear Schrödinger equations for the excited states of helium atom with the free iterative-complement-interaction method” *J. Chem. Phys.,* 128, 154108-1-10 (2008) 2. Yuh HIJIKATA, Hiroyuki NAKASHIMA, and Hiroshi NAKATSUJI “Solving non-Born-Oppenheimer Schrödinger equation for hydrogen molecular ion and its isotopomers using the free complement method” *J. Chem. Phys.,* 130, 024102-1-11 (2009) 3. Yuh HIJIKATA, Satoshi HORIKE, Masayuki SUGIMOTO, Hiroshi SATO, Ryotaro MATSUDA and Susumu KITAGAWA “Relationship between Channel and Sorption Properties in Coordination Polymers with Interdigitated Structures” *Chem. Eur. J.,* 17, 5138-5144 (2011) 4. Yuh HIJIKATA, Satoshi HORIKE, Daisuke TANAKA, Juergen GROLL, Motohiro MIZUNO, Jungeun KIM, Masaki TAKATA, and Susumu KITAGAWA “Differences of crystal structure and dynamics between soft porous nanocrystal and bulk crystal” *Chem. Commun.*, 47, 7632-7634 (2011) 5. Nobuhiro YANAI, Koji KITAYAMA, Yuh HIJIKATA, Hiroshi SATO, Ryotaro MATSUDA, Yoshiki KUBOTA, Masaki TAKATA, Motohiro MIZUNO, Takashi UEMURA, and Susumu KITAGAWA “Reporting structural transformation of soft porous crystals for detection of CO_2” *Nat. Mater.,* 10, 787-793 (2011)
【学術関係の受賞など】	JSPS Research Fellowships for Young Scientists (DC1) Apr, 2008-Mar, 2011

【氏名（ふりがな)】	青野　信治（あおの　しんじ）
【職名】	特推研究フェロー
【所属】	京都大学 福井謙一記念研究センター
【研究室】	福井記念研究センター 303 号室
【直通電話】	075-711-7907
【電子メールアドレス】	saono@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	溶液化学・計算化学・理論化学
【現在の研究課題】	溶液中の遷移金属錯体の化学反応の理論的解析
【研究内容キーワード】	3D-RISM-SCF 法、平均場 QM/MM 法、自由エネルギー解析、溶媒和構造解析、周期的結晶解析
【学歴】	2010 年 3 月　京都大学大学院理学研究科化学専攻博士後期課程研究指導認定退学
【学位】	2010 年 9 月　理学博士（京都大学）
【略歴】	2010 年 4 月　京都大学大学院理学研究科化学専攻 研修員 2010 年 5 月　京都大学 物質 - 細胞統合システム拠点 教務補佐員 2010 年10月　京都大学 物質 - 細胞統合システム拠点 特定研究員 2011 年 4 月　京都大学 福井謙一記念研究センター 特定研究員
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Aono S., Yamamoto T. and Kato S. “Solution reaction space Hamiltonian based on an electrostatic potential representation of solvent dynamics” J. Chem. Phys. 134 144108 (2011). 2. Aono S., Kato S. “Proton Transfer in Phenol-Amine Complexes: Phenol Electronic Effect on Free Energy Profile in Solution” J. Comput. Chem. 31 2924-2931 (2010). 3. Aono S., Minezawa N. and Kato S. “Electronic spectra of coumarin-151 in polar solvents: Linear response free energy approach” Chem. Phys. Lett. 492 193-197 (2010).

【氏名（ふりがな)】	塚本　晋也　（つかもと　しんや）
【職名】	特推研究フェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター　福井謙一研究部第二　榊グループ
【研究室】	福井記念研究センター 301
【直通電話】	075-753-9780
【電子メールアドレス】	stsukamoto@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	計算化学・理論化学
【現在の研究課題】	遷移金属錯体の理論研究
【研究内容キーワード】	遷移金属
【最終学歴】	2010 年九州大学大学院総合理工学府量子プロセス理工学専攻 博士後期課程修了
【学位】	2010 年 3 月博士（理学）（九州大学）
【所属学会】	分子科学会、American Chemical Society
【主な著書、学術論文】 （過去 5 年以内）	1. “Revised Model Core Potentials of s-Block Elements” H. Anjima, S. Tsukamoto, H. Mori, M. Mine, M. Klobukowski, and E. Miyoshi, *J. Comp. Chem.* **2007**, 28, 2424. 2. “Experimental and Theoretical Approaches Toward Anion-responsive Tripode-Lanthanide Complexes: Mixed Donor Ligand Effects on Highly Coordinated Complexation and Luminescence Sensing Profiles” Y. Kataoka, D. Paul, H. Miyake, T. Yaita, E. Miyoshi, H. Mori, S. Tsukamoto, H. Tatewaki, S. Shinoda, and H. Tsukube, *Chem. A Eur. J* **2008**, 14, 5258 3. “CASSCF and CASPT2 calculations for lanthanide trihalides LnX3 using model core potentials”, S. Tsukamoto, H. Mori, H. Tatewaki, and E. Miyoshi, *Chem. Phys. Lett.* **2009,** 474, 28 4. “Theoretical Study of Pt(PR3)2(AlCl3) (R=H, Me, Ph, or Cy) Including an Unsupported Bond between Transition Metal and Non-Transition Metal Elements; Geometry, Bond Strength, and Prediction”, S. Tsukamoto and S. Sakaki, *J. Phys. Chem. A,* **2011**, 115, 8520. 5. “Theoretical Study of Metallasilatranes; Bonding Nature and Prediction of New Metallasilatrane”, S. Sakaki, D. Kawai, and S. Tsukamoto, *Collect. Czech. Chem. Comm,* **2011**, 76, 619.

【氏名】	Milind Madhusudan Deshmukh
【職名】	SPR Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 303
【直通電話】	075-711-7907
【電子メールアドレス】	milind@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.users.iimc.kyoto-u.ac.jp/~z59354/member_j/milind.html
【研究分野】	Theoretical and Computational Chemistry
【現在の研究課題】	Trapping gas molecules in Metal Organic Framework, Non covalent Interactions
【研究内容キーワード】	Metal-Organic Framework, Binding Energy, Potential Energy Surface
【学歴】	March 2001, Master of Sci., University of Pune, India October 2008, Doctor of Philosophy, Department of Chemistry, University of Pune, India
【学位】	Doctor of Philosophy from Department of Chemistry, University of Pune, India
【略歴】	August 2008 to April 2010: Postdoctoral Research Fellow, Tata Institute of Fundamental Research, Mumbai, India June 2010 to present: Postdoctoral Research Fellow, Kyoto University, Japan
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Milind M. Deshmukh and Shigeyoshi Sakaki, “Two-step Evaluation of Potential Energy Surface and Binding Energy of van der Waals Complexes” J. Comput. Chem. *In press* (2011). 2. Milind M. Deshmukh and Shigeyoshi Sakaki, “Binding Energy of Gas Molecule with Two Pyrazine Molecules as Organic Linker in Metal-Organic Framework: Its Theoretical Evaluation and Understanding of Determining Factors” Theo. Chem. Acc. *In press* (2011). 3. Milind M. Deshmukh, Bartolotti Libero Jr., and Shridhar R. Gadre, “Intramolecular Hydrogen Bond Energy and Cooperative Interactions in α-, β-, and γ-Cyclodextrin Conformers”, J. Comput. Chem. 32, 2996 (2011). 4. Milind M. Deshmukh and Shridhar R. Gadre, “Estimation of N-H···O=C Intramolecular Hydrogen Bond Energy in Polypeptides”, J. Phys. Chem. A. 113, 7927 (2009). 5. Milind M. Deshmukh, Shridhar R. Gadre, Ralph Tonner and Gernot Frenking, “Molecular Electrostatic Potential of Divalent Carbon(0) Compounds”, Phys. Chem. Chem. Phys. 10, 2298 (2008).
【学術関係の受賞など】	Senior Research Fellowship of Council of Scientific and Industrial Research (CSIR) 2005-2008. Senior Research Fellowship of Centre for Developing Advanced Computing (CDAC), Pune, 2004-2005.

【氏名】	Guixiang Zeng
【職名】	SPR Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 303
【直通電話】	075-711-7907
【電子メールアドレス】	guixang.zeng@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	Theoretical Study on Transition-Metal Oxoboryl Complex: M-BO Bonding Nature, Mechanism of the Formation Reaction, and Prediction of New Complex
【研究内容キーワード】	Multiple bond, oxoboryl complex, oxidative addition, transition metal
【学歴】	June 2010, Ph. D., School of Chemistry & Chemical Engineering, Nanjing University
【学位】	Ph. D. in Physical Chemistry from Nanjing University
【略歴】	Sep. 2010~, Postdoctoral Fellow, Kyoto University
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. Guixiang Zeng, Yong Guo, Shuhua Li, “H2 activation by a (PNP)Ir(C6H5)complex via the dearomatization/aromatization process of the PNP ligand: A computational study” *Inorg. Chem.* 48, 10257 (**2009**). 2. Guixiang Zeng, Shuhua Li, “Mechanistic insight on the hydrogenation of conjugated alkenes with H2 catalyzed by early main-group metal catalysts” *Inorg. Chem.* 49, 3361 (**2010**). 3. Guixiang Zeng, Shuhua Li, “H2 activation by a (PNP)Ir(C6H5) complex via the dearomatization/aromatization process of the PNP ligand: A computational study” *Inorg. Chem.* 50, 10572 (**2011**). 4. Guixiang Zeng, Shigeyoshi Sakaki, “Noble Reaction Features of Bromoborane in Oxidative Addition of B−Br σ−Bond-to [M(PMe3)2] (M= Pt or Pd): Theoretical Study” *Inorg. Chem.* 50, 5290 (**2011**).

【氏名（ふりがな）】	高木　望（たかぎ　のぞみ）
【職名】	特推研究フェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	福井謙一記念研究センター　榊研究室
【直通電話】	075-711-7907
【電子メールアドレス】	takagi@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	計算化学・理論化学
【現在の研究課題】	d- 電子複合系の理論化学、新規な化学結合を有する分子の設計と結合解析
【研究内容キーワード】	遷移金属元素、高周期典型元素、
【学歴】	2002 年 3 月　東京都立大学大学院理学研究科化学専攻博士課程　修了
【学位】	2002 年 3 月　理学博士（東京都立大学）
【略歴】	2002 年 4 月　日本学術振興会　特別研究員 (PD) 2005 年 4 月　自然科学研究機構・分子科学研究所　専門研究職員 2007 年 5 月　ドイツ・フィリップス＝マールブルク大学　博士研究員 2011 年 1 月　自然科学研究機構・分子科学研究所　専門研究職員 2011 年 4 月　京都大学・福井謙一記念研究センター　特定研究員
【在外研究歴】	2007 年 5 月－ 2010 年 12 月　ドイツ・フィリップス＝マールブルク大学　博士研究員（Gernot Frenking 教授）
【所属学会】	日本化学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. "Carbodiphosphorane-Analogues $E(PPh_3)_2$ with E = C - Pb. A Theoretical Study with implications for ligand design" N. Takagi, R. Tonner, and G. Frenking, *Chem. Eur. J., in press.* 2. "Bonding Situation in "Early-Late" Transition Metal Complexes $Cl_3M\text{-}M'(PCl_3)_4$ (M = Ti, Zr, Hf; M' = Co, Rh, Ir) - Theoretical Study for a Ligand Fine Tuning of M-M' Bonds -" N. Takagi, A. Krapp, G. Frenking, *Z. Anorg. Alleg. Chem.* **637**, 1728-1735 (2011). 3. "Divalent Pb(0) Compounds" N. Takagi, G. Frenking, *Theor. Chem. Acc.,* **129**, 615-623 (2011). 4. "Bonding Analysis for Metal-Metal Multiple bonds in $R_3M\text{-}M'R_3$ (M, M' = Cr, Mo, W; R = Cl, NMe_2)" N. Takagi, A. Krapp, G. Frenking, *Inorg. Chem.,* **50**, 819-826 (2010). 5. "On the nature of homo- and heterodinuclear metal-metal quadruple bonds – Analysis of the bonding situation and benchmarking DFT against wavefunction methods" N. Takagi, A. Krapp, and G. Frenking, *Can. J. Chem.,* **88**, 1079-1093 (2010). 6. "Divalent E(0) Compounds (E = Si - Sn)" N Takagi, T. Shimizu, and G. Frenking, *Chem. Eur. J.,* **15**, 8593-8604 (2009). 7. "Divalent Si(0) Compounds" N Takagi, T. Shimizu, and G. Frenking, *Chem. Eur. J.,* **15**, 3448-3456 (2009). 8. "Do Lead Analogues of Alkynes Take a Multiply Bonded Structure? " N. Takagi, and S. Nagase, *Organometallics,* **26**, 3627-3629 (2007). 9. "Tin Analogues of Alkynes. Multiply Bonded Structures vs Singly Bonded Structures" N. Takagi, and S. Nagase, *Organometallics,* **26**, 469-471 (2007). 10. "Effects of Bulky Substituent Groups on the Si-Si Triple Bonding in RSi≡SiR and the Short Ga-Ga Distance in Na_2[RGaGaR]. A Theoretical Study" N. Takagi, and S. Nagase, *J. Organomet. Chem.* **692**, 217-224 (2007).
【学術関係の受賞など】	2002 年 -2005 年　日本学術振興会　特別研究員 (PD)

【氏名（ふりがな）】	Masayuki Nakagaki （まさゆき　なかがき）
【職名】	SPR Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 303
【直通電話】	075-711-7907
【電子メールアドレス】	nakagaki@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/
【研究分野】	Computational Chemistry
【現在の研究課題】	Electronic Structure of Inverted Sandwich Type Complexes
【研究内容キーワード】	Electronic Structure of Metal Complex, Multireference Theory
【学歴】	March 2005, Master of Sci., Graduate School of Science, Kyushu University March 2009, Doctor of Sci., Graduate School of Science, Kyushu University
【学位】	Doctor of Science from Kyushu University
【略歴】	Apr. 2009, Postdoctoral Fellow, Kyushu University
【所属学会】	Japan Society for Molecular Science
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. M. Nakagaki, E. Nishi, K. Sakota, H. Nakano, H. Sekiya, “A model two-dimensional potential for internal rotation of 9-methylanthracene studied by electronic spectroscopy and DFT calculations” Chem. Phys. 328, 190-196 (2006) 2. K. Sakota, Y. Komoto, M. Nakagaki, W. Ishikawa, H. Sekiya “Observation of a catalytic proton/hydrogen atom relay in microsolvated 7-azaindole-methanol cluster enhanced by a cooperative motion of the hydrogen-bonded network” Chem. Phys. Lett. 435, 1-4 (2007) 3. X. Zhang, Y. Komoto, K. Sakota, M. Nakagaki, H. Nakano, T. Shinmyozu, H. Sekiya “Heavy mass effect on excited-state double-proton transfer in 7-azaindole dimer by Cl substitution” Chem. Phys. Lett. 441, 176-180 (2007) 4. X. Zhang, Y. Komoto, K. Sakota, N. Masayuki, T. Shinmyozu, S. Nanbu, H. Nakano, H. Sekiya “Remarkable suppression of the excited-state double-proton transfer in the 7-azaindole dimer due to substitution of the dimethylamino group studied by electronic spectroscopy in the gas phase” Chem. Phys. Lett. 443, 194-198 (2007)

【氏名（ふりがな）】	Terutaka Yoshizawa（てるたか　よしざわ）
【職名】	SPR Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 303
【直通電話】	075-711-7907
【FAX】	075-711-4757
【電子メールアドレス】	yoshizawa@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.users.iimc.kyoto-u.ac.jp/~z59354/
【研究分野】	Theoretical chemistry
【現在の研究課題】	Relativistic quantum chemical calculations of NMR shielding constants
【研究内容キーワード】	NMR, DFT, Douglas–Kroll–Hess method, Transition metal complexes
【学歴】	March 2006, Master of Sci., Graduate School of Science, Tokyo Metropolitan University March 2009, Doctor of Sci., Graduate School of Science and Engineering, Tokyo Metropolitan University
【学位】	Doctor of Science from Tokyo Metropolitan University
【略歴】	Apr. 2009, Postdoctoral Fellow, Kyushu University Jan. 2010, Postdoctoral Fellow, RIKEN Apr. 2011, (SPR) Fellow, Kyoto University
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. T. Yoshizawa and M. Hada, “Calculations of Frequency-Dependent Molecular Magnetizabilities with Quasi-Relativistic Time-Dependent Generalized Unrestricted Hartree-Fock Method”, J. Comput. Chem. 28, 740−747, (2007) 2. T. Yoshizawa and M. Hada, “Relativistic quantum-chemical calculations of magnetizabilities of noble gas atoms using the Douglas–Kroll–Hess method”, Chem. Phys. Lett. 458, 223−226, (2008) 3. T. Yoshizawa and M. Hada, “Relativistic and Electron–Correlation Effects on Magnetizabilities Investigated by the Douglas–Kroll–Hess Method and the Second-Order Møller–Plesset Perturbation Theory”, J. Comput. Chem. 30, 2550−2566, (2009) 4. T. Yoshizawa and T. Nakajima, “Second-order generalized unrestricted Moller–Plesset perturbation theory for the spin–orbit part of zero-field splitting tensors”, Chem. Phys. Lett. 515, 296−301, (2011)
【学術関係の受賞など】	JSPS Research Fellowships for Young Scientists(DC) 2007-2009

【氏名（ふりがな）】	Takafumi Iwaki（たかふみ　いわき）
【職名】	FIFC Fellow
【所属】	Fukui Institute for Fundamental Chemistry
【研究室】	Room 209
【直通電話】	075-711-7902
【電子メールアドレス】	iwaki@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	Soft Matter, Biological Physics
【現在の研究課題】	Interfacial Phenomena, Simulation Method
【研究内容キーワード】	Polyelectrolyte, DNA folding transition, Thermofluid, Photophoresis
【学歴】	March 2001, Master of Sci., Graduate School of Science, Kyoto University March 2004, Doctor of Sci., Graduate School of Science, Kyoto University
【学位】	Doctor of Science from Kyoto University
【略歴】	Apr. 2004, Postdoctoral Fellow at The City University of New York, USA Apr. 2005, Okayama Institute for Quantum Physics
【所属学会】	The Physical Society of Japan
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. T. Iwaki, N. Makita and K. Yoshikawa, “Folding transition of a single semiflexible polyelectrolyte chain through toroidal bundling of loop structures”, The Journal of Chemical Physics **129**(6), 065103 (13 pages) (2008) 2. T. Saito, T. Iwaki, and K. Yoshikawa, “DNA compaction induced by neutral polymer is retarded more effectively by divalent anion than monovalent anion”, Chemical Physics Letters **465**(1-3), 40-44(2008) 3. T. Saito, T. Iwaki, and K. Yoshikawa, “Small anion with higher valency retards the compaction of DNA in the presence of multivalent cation”, Biophysical Journal **96**(3), 1068-1075 (2009) 4. S Araki, K. Hizume, T. Iwaki, Y. Suzuki, K. Takeyasu, and K. Yoshikawa, “Nucleosomal arrays reconstituted from ring and linear DNA”, Chemical Physics Letters **479**, 284-289 (2009) 5. T. Iwaki, “Effect of internal flow on the photophoresis of a micron-sized liquid droplet”, Physical Review E **81**, 066315 (13 pages) (2010)

【氏名（ふりがな)】	義永　那津人（よしなが　なつひこ）
【職名】	FIFC フェロー
【所属】	京都大学　福井謙一記念研究センター
【直通電話】	075-711-7863
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	yoshinaga@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://daisy.phys.s.u-tokyo.ac.jp/yoshinaga/
【研究分野】	ソフトマター物理、生物物理
【現在の研究課題】	Self-propulsion and deformation of reactive droplet
【研究内容キーワード】	Self-propulsion, free boundary problem, hydrodynamics, thermophoresis
【学歴】	2007 年 3 月京都大学理学研究科　物理学・宇宙物理学専攻　博士課程修了
【学位】	2007 年 3 月理学博士（京都大学）
【略歴】	2007 年 4 月　東京大学理学系研究科　日本学術振興会特別研究員 PD、 2010 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】	日本物理学会
【主な著書、学術論文】 （過去 5 年以内）	1. Hong-Ren JIANG, Natsuhiko YOSHINAGA, and Masaki SANO, "Active Motion of Janus Particle by Self-thermophoresis in Defocused Laser Beam", Physical Review Letters, 105, 268302 (2010) Editor's suggestion and Viewpoint in Physics, 3, 108 (2010) Debut of a hot “fantastic voyager” 2. Natsuhiko YOSHINAGA, Jean-Francois JOANNY, Jacques PROST and Pilippe MARCQ, "Polarity patterns of stress fibers", Physical Review Letters, 105, 238103 (2010) 3. Takahiro SAKAUE and Natsuhiko YOSHINAGA, "Dynamics of Polymer Decompression: Expansion, Unfolding and Ejection", Physical Review Letters, 102, 148302 (2009). 4. Hong-Ren JIANG, Hirofumi WADA, Natsuhiko YOSHINAGA, and Masaki SANO, “Manipulation of Colloids by Nonequilibrium Depletion Force in Temperature Gradient”, Physical Review Letters, 102, 208301 (2009). 5. Natsuhiko YOSHINAGA, Efim KATS and Avraham HALPERIN, “On the Adsorption of Two-State Polymers”, Macromolecules, 41, 7744-7751 (2008) 6. Natsuhiko YOSHINAGA, “Folding and unfolding transition in a single semiflexible polymer “, Physical Review E, 77, 061805 (2008)

【氏名（ふりがな)】	嶺澤　範行　（みねざわ　のりゆき）
【職名】	福井センターフェロー
【所属】	福井謙一記念研究センター
【研究室】	福井謙一記念研究センター 209 号室
【直通電話】	075-711-7902
【FAX】	075-781-4757
【電子メールアドレス】	minezawa@fukui.kyoto-u.ac.jp
【研究分野】	理論化学・計算化学
【現在の研究課題】	時間依存密度汎関数法による非断熱遷移の解析
【研究内容キーワード】	時間依存密度汎関数法・円錐交差・非断熱分子動力学
【学歴】	2008 年 3 月　京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了
【学位】	2008 年 3 月　京都大学理学博士
【略歴】	2008 年 5 月　米国アイオワ州立大学（Mark S. Gordon 教授） 2011 年10月　京都大学福井謙一記念研究センター・センターフェロー
【所属学会】	アメリカ化学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. A. Defusco, N. Minezawa, L. V. Slipchenko, F. Zahariev, and M. S. Gordon, “Modeling solvent effects on electronic excited states”, *J. Phys. Chem. Lett.* **2**, 2184-2192 (2011). 2. N. Minezawa and M. S. Gordon, “Photoisomerization of stilbene: A spin-flip density functional theory approach”, *J. Phys. Chem. A* **115**, 7901-7911 (2011). 3. N. Minezawa, N. De Silva, F. Zahariev, and M. S. Gordon, “Implementation of the analytic energy gradient for the combined time-dependent density functional theory/effective fragment potential method: Application to excited-state molecular dynamics simulations”, *J. Chem. Phys.* **134**, article No. 054111 [12 pages] (2011). 4. S. Aono, N. Minezawa, and S. Kato, “Electronic spectra of coumarin-151 in polar solvents: Linear response free energy approach”, *Chem. Phys. Lett.* **492,** 193-197 (2010). 5. N. Minezawa and M. S. Gordon, “Optimizing conical intersections by spin-flip density functional theory: Application to ethylene”, *J. Phys. Chem. A* **113**, 12749-12753 (2009).

【氏名（ふりがな）】	河津　励（かわつ　つとむ）
【職名】	分子科学研究所 専門研究職員
【所属】	総合研究部門
【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】	kawatsu@fukui.kyoto-u.ac.jp
【ホームページ】	http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/ users/kawatsu/index.html
【研究分野】	生物物理化学
【現在の研究課題】	革命的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築
【研究内容キーワード】	電子移動、励起エネルギー移動、蛋白質科学、自由エネルギー計算
【学歴】	1999年 3 月　名古屋大学理学研究科物質理学専攻博士前期課程修了 2002年 2 月　名古屋大学理学研究科物質理学専攻博士後期課程修了
【学位】	2002年 2 月　理学博士（名古屋大学）
【略歴】	2002年 3 月　デューク大学化学科 ポスドク 2005年 9 月　ジョージア工科大学化学生化学科 ポスドク 2006年11月　京都大学福井謙一記念研究センター JST フェロー 2010年 4 月　京都大学工学研究科合成・生物専攻 特定研究員 2011年10月　自然科学研究機構分子科学研究所 専門研究職員
【所属学会】	American Physical Society、日本生物物理学会
【主な著書、学術論文】（過去 5 年以内）	1. T. Kawatsu, J. Hasegawa, K. Matsuda, “Bridge-mediated excitation energy transfer pathways through protein media: a Slater determinant-based electronic coupling calculation combined with localized molecular orbitals,” *J. Phys. Chem. A* **2011**, 115, 10814-10822. 2. J. Hasegawa, T. Kawatsu, K. Toyota, K. Matsuda, “Chemical-intuition based LMO transformation simplifies excited-state wave functions of peptides,” *Chem. Phys. Lett.* **2011**, 508, 171-176. 3. T. Kawatsu, M. Lundberg, K. Morokuma, “Protein free energy corrections in ONIOM QM:MM modeling: A case study for isopenicillin N synthesis (IPNS),” *J. Chem. Theory Comput.* **2011**, 7, 390-401. 4. M. Lundberg, T. Kawatsu, T. Vreven, M. J. Frisch and K. Morokuma, “Transition states in the protein environment – ONIOM QM:MM modeling of isopenicillin N synthesis,” *J. Chem. Theory Comput.* **2009**, 5, 222-234. 5. T. Kawatsu, V. Coropceanu, A. Ye, J.-L. Brédas, “A Quantum-Chemical Approach to Electronic Coupling: Application to Charge Separation and Charge Recombination Pathways in a Model Molecular Donor-Acceptor System for Organic Solar Cells,” *J. Phys. Chem. C* **2008**, 112, 3429-3433.

６．外部資金

平成 23 年 3 月 31 日現在

年度別受入額　　【単位：円】

区　分	プロジェクト名称	研究代表者	H19(2007)	H20(2008)	H21(2009)	H22(2010)
寄附金　※1	佐藤徹に対する工学研究助成	佐藤　　徹	400,000	400,000		400,000
	分子シミュレーション研究のため	諸熊　奎治	2,800,000	2,800,000	2,800,000	
	「代謝酵素シトクロムＰ４５０の反応メカニズムの定量的理解」の研究	平尾　　一			1,200,000	
	「酵素によるイノシトール生合成機構の計算化学的解明」の研究	平尾　　一				3,000,000
	計		3,200,000	3,200,000	4,000,000	3,400,000
科学研究費補助金	局所内挿法と分子力学法を組み合わせた大規模系ポテンシャル面構築法の開発	石田　俊正	600,000			
	会合高分子レオロジーの分子機構	印出井　努	1,200,000	1,400,000		
	振電相互作用理論の新展開	佐藤　　徹		1,700,000	1,400,000	
	有機ＥＬ材料における電子・ホール輸送機構の解明と新規材料設計	佐藤　　徹		1,600,000	1,100,000	1,100,000
	光に応答する生体分子の非断熱動力学シミュレーション	石田　俊正		2,000,000	500,000	600,000
	長鎖ＤＮＡの高次構造移転とその生物学的意義	坂上　貴洋		1,230,000		
	非断熱現象を利用した物質の機能発現と反応制御	石田　俊正		300,000	100,000	
	マイクロ波高温非平衡加熱の研究総括	大峯　　巌			300,000	
	ナノ細孔とイオンチャンネル中のイオンの水和と輸送現象	大峯　　巌			1,000,000	
	計		1,800,000	8,230,000	4,400,000	1,700,000
受託研究費	複雑分子系の複合分子理論シミュレーション	諸熊　奎治	61,620,000	45,485,000	47,497,000	45,587,000
	計		61,620,000	45,485,000	47,497,000	45,587,000
受託事業費	新炭素材料の電子物性における振電効果の解明を目指した量子化学的方法の開拓	佐藤　　徹		2,500,000	2,500,000	
	ナノ量子クラスターの構造、性質、生成機構に関する量子化学・分子動力学的研究	諸熊　奎治			2,500,000	2,500,000
	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流(第１回)	諸熊　奎治			6,543,000	
	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流(第２回)	諸熊　奎治			9,346,000	
	計		0	2,500,000	20,889,000	2,500,000
間接経費　※2			18,666,000	15,604,500	16,170,100	14,186,100
	計		18,666,000	15,604,500	16,170,100	14,186,100

※1　寄附金の受入額には、本部全学経費徴収分も含まれている。

※2　間接経費の受入額には、本部全学経費徴収分も含まれている。

7．シンポジウム・セミナー

⑴ 福井謙一記念研究センターシンポジウム

第 5 回センターシンポジウム（2007/12/13　10：00-17：00）

日時　平成19年12月13日（木）　10：00 － 17：00
場所　京都大学福井謙一記念研究センター　（3F　大会議室）

開会の辞　10：00 ～
　榊　茂好（センター長）

ご挨拶　10：10 ～
　西本清一（京大・工学研究科長）

講演
　赤井久純（阪大・理）　10：20 ～
　「計算機マテリアルデザインと未知の探求」
　今堀　博（京大・iCeMS・工）　11：30 － 12：30
　「分子設計に基づいた人工光合成」
　太田隆夫（京大・理）　13：30 － 14：30
　「ソフトマターにおけるメゾスコピック構造形成」

ポスターセッション　15：00 － 17：00

懇親会（１Ｆ多目的ルーム）　17：30 － 19：30

第 6 回センターシンポジウム（2008/12/2　10:00-18:00）

日時　平成20年12月２日（火）
場所　京都大学福井謙一記念研究センター　（３Ｆ　大会議室）

開会の辞
　榊　茂好　（センター長）　10：00 － 10：10

ご挨拶
　大嶌　幸一郎（京大・工学研究科長）　10：10 － 10：20

講演
　原田　明　（阪大・理）　10：20 － 11：20
　「ロタキサンの化学－分子マシンへの道」
　江原正博　（分子研）　11：30 － 12：30
　「高精度電子状態理論の開発と応用　－理論精密分光と光物性科学への展開－」

吉川研一　（京大・理）　　13：30 － 14：30
「長鎖 DNA の折り畳み相転移：その物理化学と生物的意義」

ポスターセッション　　14：45 － 17：15

懇親会（１Ｆ多目的ルーム）　　17：30 － 19：30

第 7 回センターシンポジウム（2009/12/4　9:30-17:40）

日時　平成21年12月４日（金）
場所　京都大学福井謙一記念研究センター　（３Ｆ　大会議室）

開会の辞
榊　茂好　（センター長）　　9：30 － 9：40

ご挨拶
大嶌　幸一郎　（京大・工学研究科長）　9：40 － 9：50

講演
中村　栄一　（東大・理）　　9：50 － 10：50
「単一有機分子の動きを見る－化学物理学の新しい世界－」
大峯　　巖　（京大・福井センター）　　11：00 － 12：00
「水、その豊かな世界：ミクロの水の性質」
石田　俊正　（京大・福井センター）　　13：30 － 14：20
「光化学反応のシミュレーション－非断熱遷移反応動力学」
佐藤　　徹　（京大・福井センター）　　14：30 － 15：20
「振電相互作用と Jahn-Teller 効果」

ポスターセッション　　15：40 － 17：40

懇親会（１Ｆ多目的ルーム）　　18：00 － 19：30

第 8 回センターシンポジウム（2010/12/3　10：00-17：15）

日時　平成22年12月３日（金）　10:00 － 19:00
場所　京都大学福井謙一記念研究センター（３Ｆ　大会議室）

開会の辞
田中　功（センター長）　　10：00 － 10：05

ご挨拶
小森　悟　（京大・工学研究科長）　　10：05 － 10：15

講演

中村　宏樹（国立交通大学（台湾)、前分子科学研究所長）　10：15 － 11：15
「非断熱化学動力学―分子科学に新次元を」

谷村　吉隆　（京大・院理）　11：30 － 12：30
「散逸系の階層型量子運動方程式と多次元分光」

山本　量一　（京大・院工）　14：00 － 15：00
「粗視化モデリングのすすめ：分子科学とソフトマター科学の接点」

ポスターセッション　15：15 － 17：15

懇親会（１Ｆ多目的ルーム）　17：30 － 19：00

⑵　国際合同シンポジウム

The 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/ Computational Chemistry （2007/12/7-9）

Dec. 6(Thur.) Welcome party at Fukui Institute

First Day, Friday, December 7

9:00-9:10 Opening（S. Kato, S. Sakaki）

9:10-9:40 K. Morokuma (Kyoto)
Theoretical Studies of Chemical Reactions

9:40-10:10 P. Carsky (Heyrovsky Institute, Prague)
Recent Progress in the Calculations of Vibrational Electron Energy Spectra. What Can be Learned from it for Quantum Chemistry?

10:10-10:40 M. Ehara (Kyoto)
Theoretical Spectroscopy of Photo-functional Materials, Photo-Biological Materials, and Inner-shell Electronic Processes

11:00-11:30 R. Curik (Heyrovsky Institute, Prague)
Role of Correlation and Polarization Forces in Electron Energy Loss Spectroscopy

11:30-12:00 M. Nakano (Osaka)
Theoretical study on open-shell nonlinear optical systems: relationship between magnetic interaction and second hyperpolarizability

12:00-12:30 V. Kelloe (Comenius University, Bratislava)
Nuclear quadrupole moments from calculations of electric field gradient and experimental microwave data

14:00-14:30 S. Sklenak (Heyrovsky Institute, Prague)
Combined QM/MM and ^{27}Al NMR Study of Al Siting in Silicon Rich Zeolites

14:30-15:00 M. Okumura (Osaka)
Theoretical study on the characteristics and the geometry of metal culsters'

15:00-15:30 P. Nachtigall (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prague)
Vibrational Dynamics of Small Molecules Adsorbed in Confined Space of Zeolite Channels

15:30-16:00 T. Nakajima (Tokyo)
Large-scale Molecular Theory

16:30-17:00 I. Paidarova (Heyrovsky Institute, Prague)
Comparison of Moller-Plesset Perturbation Theory, Polarization Propagator Approximation and Coupled Cluster Linear Response Theory Methods for the Calculation of C6 Dispersion Coefficients

17:00-17:30 T. Yanai (IMS, Okazaki)
Quantum chemistry with canonical transformation and renormalization group
17:30-18:00 V. Spirko (Institute of Organic and Biochemistry, Prague)
Is There Any Prospect for a Few-Dimensional Modeling of Complex Systems?
18:00-20:00 Banquet at Fukui Center

Second Day, Saturday, December 8

9:00-9:30 H. Sato (Kyoto)
Chemical Reaction in Solution Phase: A combined method of ab initio MO and integral equation theory for liquids
9:30-10:00 J. Hasegawa (Kyoto)
Color-tuning mechanism of human visual cone pigments
10:00-10:30 S. Hayashi (kyoto)
Chemical Reaction dynamics of Rhodopsin Photoreceptor Proteins
10:45-11:15 P. Hobza (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prague)
Weak Non-Covalent Interactions Among Biomolecules Building Blocks Can Be Surprisingly Strong
11:15-11:45 J. Vondrasek (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prague)
Aromatic Amino Acids Is a Most Important Stabilizing Factor in Protein Structure. By Means of Computational Chemistry
11:45-12:15 M. Pitonak (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prague)
Hydrogen Bonding and Stacking interaction in Uracil Dimer. Comparison of CCSD (T), DFT-SAPT and DFT Methods.
13:45-14:15 T. Ishida (Kyoto)
Theoretical study on photoisomerization of cyclohexadiene to hexatriene
14:15-14:45 J. Pittner (Heyrovsky Institute, Prague)
Analytic gradients for multireference Hilbert-space coupled-cluster methods
14:45-15:15 N. Mori (Osaka City Univ)
Quasirelativistic DFT calculations for magnetic tensors of ^{63}Cu(II) octaethylporphyrin: Strong metal-ligand covalency
15:15-15:45 L. Rulisek (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prague)
An effect of spin-orbit coupling (SOC) on the values of reduction potentials of octahedral Ru2+/3+ and Os2+/3+ complexes
16:15-16:45 A. Morita (Tohoku)
Electrolyte Solution Interfaces Explored by the Combination of Sum Frequency Generation and Molecular Simulation
16:45-17:15 K. Kitaura (Kyoto)
Fragment MO-based 2nd order Möller-Plesett perturbation theroy for large molecules
17:15-17:45 S. Nagase (IMS, Okazaki)
MP2 Calculations of Large Molecules
17:45-18:15 Z. Havlas and J. Michl (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prague)
Search for π-chromophores for singlet fission
18:30-20:30 Poster with Beer and Sandwitch

Third Day, Sunday, December 9

9:00-9:30 S. Yabushita and M. Masato (Keio, Tokyo)
Calculations of photoionization cross sections with the variationally optimized qaussian-type complex basis functions
9:30-10:00 K. Yoshizawa (Fukuoka)
Frontier Orbital View of the Quantum Transport in Molecular Nanowire
10:00-10:30 K. Yamashita (Tokyo)
Ultrafast Vibrationally-Induced Dephasing of Electronic Excitations in PbSe Quantum Dots

10:30-10:45	K. Takatsuka (Tokyo) Nonadiabatic electron wavepacket dynamics in intense laser field
11:15-11:45	M. Urban (Comenius University, Bratislava) Van der Waals complexes of Cu, Ag and Au with lone pair ligands. The bonding character
11:45-12:15	H. Nakatsuji (Kyoto) Towards Accurately Predictive Quantum Chemistry with the Solutions of the Schroedinger Equation
12:15-1 2:45	J. Michl (Colorado, USA; Academy of Sciences of the Czech Republic) Bubbles in Molecular Cages
Closing	H. Nakatsuji

CREST International Symposium on Theory and Simulations of Complex Molecular Systems & International Symposium on Theory of Molecular Structure, Function and Reactivity, Celebrating Prof. Morokuma's 75th Birthday(2009/ 7/ 19-21)

July 19 (Sun): CREST Symposium

9:00 Shigeyoshi Sakaki, FIFC Director Opening Remarks

Chair: Shigehiko Hayashi

9:10 Richard A. Friesner C-01 Density functional based QM/MM studies of metalloprotein active sites

9:40 Kazunari Yoshizawa C-02 QM/MM Study on Oxygenation Enzymes

10:10 Todd Martinez C-03 Photobiology and mechanochemistry from first principles

10:40 Break

Chair: Toshiaki Matsubara

11:00 Junya Hasegawa C-04 Excited states of photofunctional molecules in protein environments

11:30 Qiang Cui C-05 Multi-scale models of biomolecular processes: developments and applications

12:00 Weitao Yang C-06
Free energies and mechanism of chemical reactions in solution and in enzymes with ab initio QM/MM method

12:30-13:30 Lunch

Chair: Djamaladdin G. Musaev

13:30 Feliu Maseras C-07 Cross-coupling reactions: calculations do help mechanistic understanding

14:00 Chantal Daniel C-08 From small to large transition metal complexes: quantum theory of electronic excited states

14:30 Christophe Bichara C-09 Modeling Nickel-Carbon alloys to study the catalytic synthesis of Carbon Nanotubes

15:00 Break

Chair: Alister Page

15:30 Gustavo E. Scuseria C-10 Carbon nanotubes and grapheme nanoribbons

16:00 Kim Bolton C-11 Computational studies of single-walled carbon nanotube growth

16:30 Susumu Saito C-12 Abundance of C60 revisited: A microscopic formation process of fullerenes

17:00 Stephan Irle C-13
Density-functional tight-binding molecular dynamics simulations of carbon nanotube formation

17:30 Shigeo Maruyama C-14 Nucleation of a Single-Walled Carbon
Nanotube inside a Nanotube

18:00 Keiji Morokuma Welcome Reception

July 20 (Mon): "Birthday" Symposium

Chair: Seiji Mori

9:00 Shigeyoshi Sakaki B-01 CCSD（T）Study of Large Transition Metal Complexes with Frontier-Orbital-Consistent Effective Potential

9:30 Suehiro Iwata B-02 Perturbation Expansion Based on Absolutely Local Excited Molecular Orbitals and Application to Molecular Clusters

Chair: Alexander Mebel

10:00 Masanori Tachikawa B-03 Nuclear Quantum Effect on Hydrogen Bonded Systems

10:30 Break

11:00 Michael J. Frisch B-04 Recent Advances in the Exploration of Potential Energy Surfaces and the Prediction of Vibrational Spectra

Chair: Ulf Ryde

11:30 Seiji Mori B-05 Important insight into Reaction Mechanisms of Organic Syntheses and Biosyntheses from View of Computational Chemistry

12:00 Kazuo Kitaura B-06
Quantum-chemical calculations of large biomolecules with the fragment molecular orbital method

12:30-13:30 Group Picture & Lunch

13:30-15:30 2hr poster session

Chair: Junya Hasegawa

15:30 Djamaladdin G. Musaev B-07 Computation aided catalyst design: visible lightdriven water oxidation

16:00 Koichi Yamashita B-08 Quantum transport of single molecules and solid interfaces

16:30 Alexander M. Mebel B-09 Growth mechanisms of large organic molecules in low-temperature conditions of Titan's atmosphere: from polyynes to PAH

17:00 Break

17:20 Toshiaki Matsubara B-10 Application of the ONIOM-molecular dynamics method to the chemical reactions. A new theory of chemical reactivity

17:50 Satoshi Yabushita B-11 Theoretical study on the f-f transition intensities of lanthanide

trihalide systems

18:20 Mori, Tachikawa Poster Award Ceremony

19:00-21:00 Kazuo Kitaura, Stephan Irle Birthday Party

July 21 (Tue): CREST Symposium

Chair: Stephan Irle

9:00 Boris I. Yakobson C-15 Relaxation mechanisms in nanostructures through theory and computations

9:30 Henryk A. Witek C-16 When finite becomes infinite...

10:00 Atsushi Oshiyama C-17 Nanometer-scale shapes that produce unusual properties of carbon nanomaterials

10:30 Break

11:00 Younghee Lee C-18 Engineering electronic structures of carbon nanotubes: Theory and experiment

11:30 Shigeru Nagase C-19 Structures and reactions of endohedral metallofullerenes

Chair: Masanori Tachikawa

12:00 Shinichiro Nakamura C-20 Theoretical Chemistry in Chemical industrial researches

12:30-13:30 Lunch

Chair: Kazunari Yoshizawa

13:30 Ulf Ryde C-21 A comparison of different methods to calculate reaction energies in proteins

14:00 Shigehiko Hayashi C-22 Molecular mechanisms of enzymatic activities in motor and photoreceptor proteins

14:30 Shigenori Tanaka C-23 Large-scale biomolecular simulations based on the fragment molecular orbital method

15:00 Lung Wa Chung C-24 Our ONIOM journey of metalloenzymes and photobiology

15:30 Walter Thiel C-25 QM/MM studies of enzymatic reactions

16:00 Adjourn

Fukui International Symposium for Theoretical and Computational Chemistry

PROGRAM

First Day 2011/8/31			
1:00-1:10	Opening		
	Chair: Koji Ohta (Osaka)		
1:10-1:40	①	Koichi Yamashita(Tokyo)	Theoretical study on the surface states and charge transport at metal interfaces
1:40-2:20	②	Kwang S. Kim(Pohan)	Functional Molecules, Molecular Electronics/Spintronics/Photonics, and Ultrafast DNA Sequencing

2:20-3:00	③		Masayoshi Nakano(Toyonaka)	Open-shell characters and second hyperpolarizabilities of polyaromatic hydrocarbons
3:00-3:20	Break			
	Chair: Yasuteru Shigeta (Osaka)			
3:20-4:00	④		Josef Noga(Bulatislava)	Alternative Orbital Optimization Sheme Based on Non-Unitary Transformation
4:00-4:40	⑤		Kiyoshi Yagi(Illinois)	Static and Dynamic Correlations in Molecular Vibrational Theory
4:40-5:00		①	Toshimasa Ishida(Kyoto)	Photoisomerization dynamics of 11-cis and 9-cis retinal. An origin of difference between rhodopsin and its analogue
5:00-5:20	Break			
	Chair: Koichi Yamashita (Tokyo)			
5:20-5:40	Shorter Contribution	②	Shusuke Yamanaka, Keita Kanda,Toru Saito,Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Masahiro Ehara, Mitsutaka Okumura, Haruki Nakamura, Kizashi Yamaguchi (Toyonaka)	Density functional study of manganese complexes
5:40-6:00		③	Yuhki Ohtsuka, Seiichiro Ten-no, Shigeru Nagase (Okazaki-Kobe)	Projector Monte Carlo method based on Slater determinants
6:00-6:20		④	Satoshi Maeda(Kyoto)	Finding Chemical Reaction Pathways: Toward Systematic Prediction of Reaction Mechanisms
6:20-6:40		⑤	Yoshihide Nakao(Kyoto)	Theoretical Study of Structures and Absorption Spectra of Thermochromic Copper(II) Complex
7:00-9:00	Banquet@Hotel Avanshell Kyoto			
Second Day 2011/9/1				
	Chair: Hirofumi Sato (Kyoto)			
9:00-9:40	⑥		Kazunari Yoshizawa(Fukuoka)	Frontier Orbital Views of Molecular Conductance
9:40-10:20	⑦		Gernot Frenking(Marburg)	Molecules With Unusual Bonds
10:20-10:30	Break			
	Chair: Mitsutaka Okumura (Osaka)			
10:30-11:10	⑧		Shigehiko Hayashi (Kyoto)	Hybrid molecular simulations toward understanding enzymatic catalysis
11:10-11:50	⑨		Marcus Elstner(Karlsruhe)	The approximate SCC-DFTB method: performance and challenges
11:50-12:30	⑩		Junya Hasegawa(Kyoto)	Excited states of photo-functional proteins
12:30-2:00	Lunch (Saisai or Uoko@Hotel Avanshell Kyoto)			
	Chair: Masayoshi Nakano (Osaka)			
2:00-2:40	⑪		Kazuo Kitaura (Kyoto)	Large scale computations with the fragment molecular orbital method

2:40-3:20	⑫	Shuhua Li(Nanjing)	New developments and applications of the generalized energy-based fragmentation approach
3:20-3:40	Break		
	Chair: Shigeyoshi Sakaki (Kyoto)		
3:40-4:20	⑬	Hirofumi Sato(Kyoto)	Using Statistical Mechanics in Chemistry: Chemical Phenomena in Solution Phase
4:20-5:00	⑭	Jurgen Gauss(Mainz)	Interplay of Theory and Experiment in Rotational Spectroscopy
5:00-5:10	Closing		
7:00-9:00	Dinner for Invited Speaker@Takuma(Gion Shijo)		

⑶ 諸熊奎治リサーチリーダー恩賜賞・日本学士院賞受賞記念講演会および祝賀会

（2008/6/28　16:00-20:00）

・講演会

日　　時　　平成 20 年 (2008) 6 月 28 日（土）16:00-
会　　場　　京都大学福井謙一記念研究センター　大会議室（３階）
開会の辞　　センター長
祝　　辞　　丸山　正樹（京都大学副学長）
祝　　辞　　長倉　三郎
講　　演　　諸熊　奎治（センター　リサーチリーダ）
「分子の構造･機能･反応設計の魅力 ― 理論化学･計算化学研究の五十年間」

・記念撮影会

日　　時　　平成20年 (2008) 6 月28日（土）講演会終了後
福井謙一記念研究センター正面玄関にて

・祝賀会

日　　時　　平成 20 年 6 月 28 日（土）18:00-
会　　場　　ホリデイ・イン京都　大文字の間（４階）

⑷ センターセミナー

第 5 回福井センターセミナー　（2008/11/18　15:00-17:00）

日時　平成20年11月18日（火）15:00-17:00
場所　京都大学福井謙一記念研究センター　3F 大会議室
15：00 ～ 15：30　Wilfredo C. Chung（福井センター）
"Theoretical Study on the Photochemical Dynamics of the Low-Lying Excited States of 9H-Adenine and Short All-Trans Polyenes through Conical Intersections"
15：30 ～ 16：00　Motomichi Tashiro（福井センター）
「低エネルギー電子と分子の衝突過程に関する理論的研究」
16：00 ～ 17：00　Liviu F. Chibotaru（University of Leuven）
"Spin-vibronic superexchange and dynamical vibronic order in ammoniated cubic fullerides"

第 6 回福井センターセミナー （2009/1/13　15:00-17:00）

日時　平成 21 年 1 月 13 日（火）15:00-17:00
場所　京都大学福井謙一記念研究センター　3F 大会議室
15：00 ～ 15：30　Lung Wa Chung（FIFC）
"Theoretical Studies on the Reaction Mechanism of Metalloenzyme and Photobiology"
15：30 ～ 16：00　Biswajit Saha（FIFC）
“Fullerene self-assembly during combustion: DFTB MD simulations”
16：00 ～ 17：00　Slawomir Grabowski（University of Łódź ）
“The nature of hydrogen bond – is it covalent or electrostatic interaction?”

第 7 回福井センターセミナー （2010 年 2 月 4 日（木） 15:00-17:00）

15：00 ～ 15：30　Zhuofeng Ke （福井センター）
"Theoretical Study of the Rh-Catalyzed Polymerization of Phenylacetylene"
15：30 ～ 16：00　Hajime Hirao （福井センター）
"QM/MM Computational Studies of Metalloenzymes: Characterization of Elusive Intermediates and Elucidation of Reaction Mechanisms"
16：00 ～ 17：00　Arnout Ceulemans（Catholic University of Leuven）
"Frustration in Jahn-Teller systems"

第 8 回福井センターセミナー （2010 年 6 月 21 日（月） 15:00-17:00）

15：00 ～ 15：30　Satoshi Maeda（Hakubi Center, FIFC）
“Systematic Exploration of Photochemical Reaction Pathways: Applications to Ketones and Aldehydes"
15：30 ～ 16：00　Alister Page（FIFC）
“Carbon Nanotube Nucleation on Traditional and Non-Traditional Catalysts: Insights from QM/MD Simulations”
16：00 ～ 17：00　Alexey Timoshkin（St. Petersburg State University）
“From Donor-Acceptor Complexes to Nanorods”

８．国内交流・国際交流

⑴　学内共同研究

・理論研究部門 佐藤徹 准教授は、分子工学専攻 田中一義教授との共同研究を行った。

・理論研究部門 中尾嘉秀 准教授は、分子工学専攻 佐藤啓文教授および分子工学専攻　俣野善博准教授との共同研究を行っている。

・総合研究部門 長谷川淳也准教授は、合成・生物化学専攻　北川進教授、理学研究科化学専攻の林重彦准教授との共同研究を行った。また､合成･生物化学専攻　松田建児教授とは「機能性有機化合物の磁性と電気伝導性に関する理論的研究」を共同で行っている。

諸熊奎治リサーチリーダー

・物質－細胞統合システム拠点（iCeMS）上野隆史准教授と「蛋白場中の遷移金属触媒にフェニルアセチレン重合反応の理論的研究」を共同で行っている。

・理学研究科化学専攻 杉山弘教授と「核酸場における遷移金属触媒有機反応のキラリティ制御の理論的研究」を共同で行っている。

・理学研究科化学専攻 林重彦准教授と「蛋白場中の自由エネルギー反応路の理論研究」を共同で行っている。

榊茂好リサーチリーダー

・合成・生物化学専攻村上正浩教授と「ニッケル（0）錯体によるカップリング反応の理論的研究」、北川進教授と「Hofmann 型 MOF(Metal-Organic Framework) の気体分子相互作用と物性変化の理論的研究」、化学研究所小澤文幸教授、同中島由美子助教と「４配位鉄（IV）錯体の構造と電子状態」の共同研究を行った。

⑵　国内交流

総合研究部門 石田俊正准教授

上智大学理工学部 南部伸孝教授ほかと共同研究を行っている。

理論研究部門 中尾嘉秀准教授

長崎大学工学部 馬越啓介准教授ほかと共同研究を行っている。

総合研究部門 長谷川淳也准教授

・大阪大学工学部　林教授と共同研究を行っている。

・岡山大学工学部　依馬准教授と共同研究を行っている。

・量子化学研究協会　中辻博理事長（京都大学名誉教授）と科学技術振興機構（JST）の戦略的創造研究推進事業（CREST）研究領域「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」､研究課題｢マルチスケール･マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」において、共同研究を行っている。

諸熊奎治リサーチリーダー

・Stephan IRLE 教授（名大院理）と科学技術振興機構（JSTS）の戦略的創造研究推進事業（CREST）研究領域「マルチスケール･マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」研究課題「複雑分子系の複合分子理論シミュレーション」において、共同研究を行っている。

・野崎京子教授（東大院工）と「金属錯体による CO_2 固定化反応の理論的研究」を共同で行っている。

・内山真伸教授（東大院薬）と｢金属錯体による有機合成反応の理論的研究」を共同で行っている。

・柳井毅准教授（国立自然科学研究機構分子科学研究所）と「金属錯体による CO_2 固定化反応の理論的研究」を共同で行っている。

榊茂好リサーチリーダー

飛田博美教授および橋本久子准教授（東北大院工）と「タングステンーケイ素化学種の反応過程の理論的研究」、坂場裕之教授（東北大院工）と「タングステンーシリレン　錯体の構造と結合性の理論的研究」、馬越啓介教授（長崎大工学部）と「金（I)、銀（I)、銅（I）多核錯体の励起状態と発光スペクトルの理論的研究」を共同で行っている。

⑶　国際交流

①国際シンポジウム

・第１回日本・チェコ理論化学・計算化学シンポジウム開催（平成１７年度）
平成 17 年度に第 1 回日・チェコ理論化学・計算化学シンポジウムを、日本側は本センターが、チェコ側は Institute of Organic Chemistry and Biochemistry が中心となってプラハで開催した。わが国からは 20 名が参加、チェコ側は 30 名が参加し、3 日間に亘って開催された。

・第 2 回日本・チェコ・スロバキア理論化学・計算化学シンポジウム開催（平成 19 年度）
平成 19 年度には規模を拡大し、福井謙一記念研究センターで 3 日間に亘って開催した。わが国からは若手研究者を中心に講演依頼し 72 名が参加、チェコおよびスロバキア側からは 16 名が参加した。

・第 3 回日本・チェコ・スロバキア理論化学・計算化学シンポジウム開催（平成 21 年度）
平成 21 年度はコメニウス大学(スロバキア)が中心となって、ブラチスラバで 3 日間に亘って開催された。わが国からは 15 名が参加、チェコおよびスロバキア側は 35 名が参加した。

・第一回福井センター理論化学・計算化学国際シンポジウム　平成２３年８月３１日から９月１日までの２日間、国内外（主に、ドイツ、東欧、中国、韓国）から第１線の理論化学・計算化学研究者による国際シンポジウムを開催した。新しい試みとして、若手セッションも開催し、我が国の優秀な若手研究者に発表の機会を与え、参加者から好評を得た。

これらの国際活動を通して、当研究センターはわが国の理論化学・計算化学の窓口、当該分野の取りまとめ的な重要な役割を果たしてきた。

②国際共同研究

佐藤　徹准教授

日本学術振興会の二国間交流事業により、ベルギー・ルーヴァンカトリック大学との間で、「新炭素材料の電子物性における振電効果の解明を目指した量子化学的方法の開拓」の共同研究を行った。（平成 19 年度― 20 年度）

諸熊奎治リサーチリーダー

・米国エモリー大学化学教室との間で複雑分子計算の共同研究を行っている。(平成19年度～)
・Djamalladin G. Musaev 博士（エモリー大エマーソンセンター）と「金属錯体に触媒反応の理論的研究」を共同で行っている。
・Shozo Yokoyama 教授（エモリー大生物学教室）と「視色素のスペプトル調整機構の理論的研究」を共同で行っている。
・Valentin V. Ananikov 教授（ロシア科学アカデミーゼリンスキー有機化学研究所）と「金属錯体による小分子活性化反応の理論的研究」を共同で行っている。
・Jiayun Pang 博士（英国マンチェスター大学）と「B １２依存酵素の反応の際のドメイン大規模変化の理論的研究」を共同で行っている。

・日本学術振興会ロシアとの共同研究事業により、ロシア科学アカデミー･L.V. キレンスキー物理学研究所との間で、「ナノ量子クラスターの構造、性質、生成機構に関する量子化学･分子動力学的研究」の共同研究を行った。（平成 21 年度― 22 年度）

③若手研究者交流支援事業

―東アジア首脳会議参加国からの招へい（通称・JENESYS プログラム：外務省）―

平成 21 年 9 月 1 日から平成 22 年 12 月 31 日まで、タイ、シンガポール、ベトナムから約 30 名の若手研究者を福井センターに受け入れ、共同研究および日本の計算化学研究室の訪問旅行に参加させた。また、これら３か国に研究者を派遣して、分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流（Collaboratory Research and Exchange of Researchers in Simulations of Complex Molecules Using Molecular Theoretical Methods）を行った。（平成 21 － 22 年度）

④広州交通大学量子化学夏季スクール支援

榊茂好リサーチリーダーは中国　広州交通大学において開催された量子化学夏季スクールに招待講師として参加し、中国の大学院生や若手研究者向けに講義を行った。

９．学会賞等受賞

長谷川　淳也　准教授	第３回分子科学会奨励賞　平成２１年
長谷川　淳也　准教授	QSCP Promising Scientist Award of CMOA 平成２３年
諸熊　奎治リサーチリーダー	恩賜賞・日本学士院賞　平成２０年
諸熊　奎治リサーチリーダー	瑞宝中綬章　平成２１年度
諸熊　奎治リサーチリーダー	日本化学会名誉会員　平成２１年度
榊　茂好リサーチリーダー	第１回分子科学会賞　平成２１年

第Ⅲ章　教育・社会貢献活動

第Ⅲ章　教育・社会貢献活動

１．学部・大学院教育

本センターは教育を本来の目的にしていないが、以下の通り、本学の教育にも貢献している。

専任准教授２名は、工学研究科分子工学専攻協力講座、分子材料化学講座電子材料化学分野および合成・生物化学専攻協力講座、反応生命化学講座反応生命化学分野の担当として、学部および大学院教育に貢献してきた。担当した科目は以下の通りである。また、工学研究科修士課程の大学院生の研究指導にも直接当たっており、これまでに 13 名の学生を指導した。また、工学研究科博士後期課程の大学院生の研究指導にあたり、これまで４名の博士号取得者を輩出した。

佐藤徹准教授は、工学部の授業科目および総合人間学部において全学共通科目である自然現象と数学を担当している。これまで学部４回生３名の特別研究の指導を行っている。

中尾嘉秀准教授は、工学部の授業科目を担当している。これまで学部４回生２名の特別研究の指導を行っている。

長谷川淳也准教授は､工学部の授業科目において専門科目である「物理化学Ⅱ」「量子化学概論」「工業化学実験」、全学共通科目である「基礎情報処理演習」を、大学院科目においては「合成・生物化学特論 9」を担当している。これまで、学部１１名の特別研究の指導を行った。

学部教育　学部担当・授業科目

佐藤徹准教授
- 化学数学 II
- 物理化学 I
- 自然現象と数学（工業化学）（総合人間学部・全学共通科目）
- 工業基礎化学実験第二

中尾嘉秀准教授
- 物理化学 II
- 量子化学概論
- 工業基礎化学実験第二

長谷川淳也准教授
- 物理化学 II
- 量子化学概論
- 基礎情報処理演習
- 工業基礎化学実験第二

大学院教育　研究科担当・授業科目

佐藤徹准教授
- 量子化学 I
- 実践的科学英語演習（留学ノススメ）
- 先端科学機器分析及び演習 I

中尾嘉秀准教授
- 量子化学 II

長谷川淳也准教授

合成・生物化学特論９

“Research Opportunities for Freshman”プログラム。

諸熊グループは、Research Opportunities for Freshman と呼ぶ , 学部１－２年生に研究に直接参加してもらうユニークなプログラムを過去６年間行っている。本プログラムでは、先ず分子シミュレーション研究補助アルバイトとして主に１年生（２年生も含む）の希望者を募集、面接のうえ優秀な学生を採用し、研究の補助をしてもらう。勤労条件は週８時間から１２時間まで、時給１０００円である。雇用期間は１年だが、多くの場合、学部で研究室配属になる３年生前期あるいは後期終了まで継続する。この６年間で既に 10 名の１－２年生が参加し、現在は５名が継続中である。参加者は、グループの博士研究員（研究者は外国人が多いので、討論は英語が中心になる）の直接の指導を受けて研究に参加し、２ヶ月に１回程度の英文 progress report の提出、英語による討論、又期間終了時には英語による 30 分のセミナーをすることが習慣になっている。採用後３ヶ月もすると、研究に大いに興味を持ち始め、熱心に研究を進められるようになる例が多い。研究の成果が特に著しい場合には､学術論文に共著者として名前を含めることとしており、現在までに下記の４論文が学生（太字）を共著者として、国際的学術雑誌に出版されている。

B. Saha, **S. Shindo**, S. Irle and K. Morokuma, Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Dynamic Fullerene Self-Assembly in Benzene Combustion, ACS Nano 3, 2241–2257 (2009).. Errata, ACS NAno, 4, 583-583 (2010).

P. V. Avramov, **S. Minami,** S. Irle, L. A. Chernozatonskii, and K. Morokuma. Atomic Structure and Energetic Stability of Complex Chiral Silicon Nanowires, J. Phys. Chem. C, 114, 16692-14696 (2010).

A. J. Page, **S. Minami**, Y. Ohta, S. Irle and K. Morokuma, Comparison of Single-Walled Carbon Nanotube Growth from Fe and Ni Nanoparticles using quantum chemical molecular dynamics methods, Carbon, 48, 3014-3026 (2010).

A. J. Page, **H. Yamane**, Y. Ohta, S. Irle, and K. Morokuma, QM/MD Simulation of SWNT Nucleation from Transition-Metal Carbide Nanoparticles, J. Am. Chem. Soc. 132, 15699–15707 (2010).

２．学外非常勤講師等

石田俊正准教授

静岡大学理学部 「化学特別講義（ 計算化学 ）」平成 23 年度

長谷川淳也准教授

大阪教育大学教育学部教養学科 「応用物質科学」平成 19 年度―平成 23 年度

諸熊奎治リサーチリーダー

慶應義塾大学理工学部化学科 「化学科特別講義」平成 21 年度

榊　茂好リサーチリーダー

神戸大学大学院 システム情報学研究科 計算科学専攻 協定講座 客員教授

３．福井謙一記念研究センターシンポジウム

毎年一回開催している京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウムの開催を京都新聞を通じて一般に広報し、公開している（第２章７節参照)。

なおその際に、希望者には故福井謙一博士が使用していた遺品を保存している記念室を公開している。

４．公開講座

⑴　若い人に贈る福井謙一先生ノーベル化学賞受賞３０周年記念公開講座
　―最近の基礎化学の進展―
　平成２３年７月３０日に開催し、高校生を中心にして４９名の参加者があった。なお、この公開講座は京都大学ジュニアキャンパス２０１１特別協賛ゼミとしても提供した。

⑵　京都大学ジュニアキャンパス２０１１
　平成２３年９月１７日に「化学―フロンティア軌道理論と電子計算機で化学が分かる？」を開催し、中学生を中心にして、４６名の参加者があった。

５．福井謙一博士記念展示コーナー

平成２３年は福井謙一博士のノーベル化学賞受賞３０周年にあたるため、これを節目として本センター玄関ロビーに博士ゆかりの文物の展示コーナーを設置した。コーナーでは博士が使用された机、椅子、ノーベル賞メダル・賞状（複製)、研究ノート・メモ、写真などを展示し、常設展示として一般に公開している。(資料編９参照)

６．学会関係役員

長谷川淳也准教授

量子化学研究協会　理事

日本化学会近畿支部「化学への招待」委員

計算物質科学イニシアティブ　戦略課題小委員会　第４部会

諸熊奎治リサーチリーダー

International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS): Member (1985-), President (2000-2006), Vice President (1991-1997),

World Association of Theoretical and Computational Chemists（WATOC): Fellow and Board Member (1988-), Vice President (1988-1991),

Asian Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists: Board Member (2007-),

榊茂好リサーチリーダー

Pacifichem2010 Molecular Theory for Real Systems and Chemical Reactions (#138)

Organizer (President); Co-organizers; Mark Gordon, Martin Head-Gordon, Yoon Sup Lee, and Shuhua Li

International Conference on Computational Science (ICCS-2011), Workshop: Large

scale computational molecular science: Co-chair with S. Nagase, Nangyang Technical University, Singapole, 2011, 6/1-3.

The 1’st Fukui International Symposium for Theoretical and Computational Chemistry, Co-chair with K. Morokuma, Kyoto University, 2011, 8/31-9/1.

７．雑誌類エディター

石田俊正准教授、佐藤徹准教授

J.Phys. Chem., J. Polm. Sci., J. Mol. Str. J. Comput. Chem. などの国際的なレベルの高い学術雑誌の審査に協力している。

中尾嘉秀准教授

J. Organomet., Bull. Chem. Soc. Japan などの国際的なレベルの高い学術雑誌の審査に協力している。

長谷川淳也准教授

J. Phys. Chem. A, J. Phys. Chem. B, J. Phys. Chem. Letters, Chem. Phys. Letters, PCCP, ChemPhysChem, J. Comput. Chem. Bull. Chem. Soc. Japan などの高水準な国際的学術雑誌の審査に協力している。

諸熊奎治リサーチリーダー

Journal of Chemical Theory and Computation, editorial advisory board, 2005-present

Chemical Physics Letters, advisory editorial board, 1979-present

Theoretical Chemistry Accounts, editorial board, 1997-present

Journal of Computational Chemistry, editorial advisory board, 1980-present

Chemistry, an Asian Journal, international advisory board, 2006-present.

榊　茂好リサーチリーダー

学術雑誌 J. Comput. Chem. の editor であり、また、J. Am. Chem. Soc., J. Phys. Chem., Inorg. Chem. など多数の論文審査に協力している。文部科学省特定領域研究「実在系の分子理論」領域代表を 2010 年度まで勤め、2010 年度はその総括を行った。また、次世代スーパーコンピュータ分子科学ワーキンググループ主査を務めており、2010 年からは、文部科学省革新的ハイパフォーマンス・スーパーコンピューター・インフラ (HPCI) における戦略分野２の計算物質科学イニシアテイブおよび計算分子科学拠点の運営委員を務めている。

８．社会貢献事業

長谷川淳也准教授

日本化学会近畿支部「化学への招待」委員として、平成 21,22 年度に清風高校（大阪）での講演会世話役を務めた。また、平成 21,22 年度に量子化学研究協会が主宰する「SAC-CI 講習会」にて講師を務めた。

諸熊奎治リサーチリーダー

2010 年７月 10 日午後２時より４時まで NPO 法人科学カフェ京都 主催の市民向け講演会（湯川記念館１階の Panasonic 国際交流ホール）において“シミュレーションで分子の世界を探る”を約１２０名の聴衆を前に行った。

第Ⅳ章　研究設備・資産

第Ⅳ章 研究設備・資産

１．土地・建物

土地　　3,307m^2
建物　鉄筋コンクリート建
　全体　　2,558 m^2
　（内訳）
　　研究センター　2,493 m^2
　　設備室　　95 m^2

研究センター
　大会議室１室（３階)、小会議室１室（１階)、
　セミナー室２室（３階)、談話室１室、書庫１室（３階)、
　センター長室１室（１階)、スーパーバイザー室３室（２階)、
　准教授室２室（２階)、研究室１３室（２階)、
　多目的室１室（１階)、事務室１室（１階)、倉庫２室（１階、３階)。

２．設備

計算機

CPU	クロック周波数	１ノード当たりメモリ	１ノード当たりHDD	ノード数	備考
Opteron	2.2GHz	16GB	500GB	18	
Opteron	2.6GHz	16GB	500GB	4	
Pentium D (EM64T)	3.2GHz	4GB	160GB	14	
Pentium 4	3.2GHz	1GB	400GB(/home)	2	ファイルサーバ

ネットワーク

100baseT 有線 LAN（センター長室、スーパーバイザー室、研究室、多目的室、事務室）
ワイヤレス LAN（3F 大会議室、2F 研究室、1F 多目的室）

大会議室（3F）

液晶プロジェクター、プロジェクター用スクリーン、OHC、マイクロフォン、DVD-HDD レコーダ、黒板、ワイヤレス LAN、カメラ、バトン照明、OHP

多目的室（1F）

液晶プロジェクター、プロジェクター用スクリーン、OHC、マイクロフォン、DVD-HDD レコーダ、黒板、ワイヤレス LAN、遠隔会議システム

３．資産

寄附金の受入・支出

受入（千円）

年度	H14（2002）	H15（2003）	H16（2004）	H17（2005）	H18（2006）	H19（2007）	H20（2008）	H21（2009）	H22（2010）
寄附金受け入れ	1,764,635		1,234	1,372	392	3,200	3,200	4,000	3,400

支出（千円）

年度	H14（2002）	H15（2003）	H16（2004）	H17（2005）	H18（2006）	H19（2007）	H20（2008）	H21（2009）	H22（2010）
人件費	—	10,740	14,562	15,033	27,565	43,655	46,207	45,774	45,420
施設管理費	—	6,204	32,140	15,132	4,177	5,104	3,651	3,008	6,620
光熱水料	—	5,850	2,635	7,088	7,856	8,682	10,789	10,388	11,350
研究費	—	10,382	7,831	23,602	8,887	6,413	8,960	9,228	18,210
事務費	—	684	371	453	550	906	2,296	1,424	2,140
支出　計	—	33,860	57,539	61,308	49,035	64,760	71,903	69,822	83,740

資　料　編

資料編

1．沿革

財団法人基礎化学研究所は、福井謙一博士が昭和 56 年 (1981 年) に化学反応の経路に関する研究でコーネル大学の R.Hoffmann 博士と共にノーベル化学賞を受賞されたことを記念して、基礎化学分野の研究を推進するとともに今後の化学の発展に貢献することを目的として設立された。

基礎化学研究所は、昭和 59 年 9 月に文部省（現・文部科学省）より設立の許可を受け、稲山嘉寛氏を初代理事長として、経済団体連合会、日本化学工業協会などの援助による募金に基づいて昭和 63 年 5 月に建物が完成し、福井謙一研究所長の指導のもとに活発な研究活動を展開した。平成 10 年 1 月福井謙一研究所長が逝去され、基礎化学研究所は京都大学に寄附移管されることとなり、平成 14 年 4 月学内措置による京都大学福井謙一記念研究センターとして再発足した。

翌平成 15 年度（2003 年度）予算成立に伴い、文部科学省の省令施設の基礎化学研究センターとなった。京都大学では、基礎化学研究センターを福井謙一記念研究センターと称することとしている。

現在までにセンターシンポジウム 8 回、国際合同シンポジウム 3 回、センターセミナー 8 回、市民向け公開シンポジウム 3 回を開催している。

（基礎化学研究所として）

年　・　月	事　項
昭和 56 年 (1981)　10 月	福井謙一博士、R.Hoffmann 博士とともにノーベル化学賞受賞
昭和 59 年 (1983)　9 月	文部省（現・文部科学省）より基礎化学研究所の設立の許可
昭和 63 年 (1988)　5 月	基礎化学研究所の建物が完成 福井謙一研究所長のもとで研究活動を開始
平成 10 年 (1998)　1 月	福井謙一研究所長逝去

（京都大学移管後）

年　・　月	事　項
平成 14 年 (2002)　4 月 1 日	京都大学福井謙一記念研究センター発足 森島　績 初代センター長就任
平成 15 年 (2003)　11 月 19 日	第 1 回センターシンポジウム開催
平成 16 年 (2004)　4 月 1 日	中辻　博 第二代センター長就任
12 月 6 日	第 2 回センターシンポジウム開催
平成 17 年 (2005)　6 月 20 日	第 1 回福井センターセミナー開催
10 月 31 日	第 2 回福井センターセミナー開催
11 月 30 日	第 3 回センターシンポジウム開催
平成 18 年 (2006)　4 月 1 日	榊　茂好 第三代センター長就任
6 月 26 日	第 3 回福井センターセミナー開催
9 月 16 日	福井謙一記念研究部第一が新たに発足 本研究部のリサーチリーダーとして諸熊奎治エモリー大学エマーソン科学計算センターおよび化学科教授が就任
11 月 29 日	福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞 25 周年記念シンポジウム開催（第 4 回センターシンポジウムと共催）
平成 19 年 (2007)　3 月 29 日	市民向け公開シンポジウム「フロンティア軌道理論と現代の理論化学」開催

	11 月 2 日	第 4 回福井センターセミナー開催
	12 月 7-9 日	The 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/ Computational Chemistry 開催
	12 月 13 日	第 5 回センターシンポジウム開催
平成 20 年 (2008)	6 月 28 日	諸熊奎治リサーチリーダー恩賜賞・日本学士院賞受賞記念講演会および祝賀会開催
	11 月 18 日	第 5 回福井センターセミナー開催
	12 月 2 日	第 6 回センターシンポジウム開催
平成 21 年 (2009)	1 月 13 日	第 6 回福井センターセミナー開催
	4 月 1 日	福井謙一記念研究部第二が新たに発足 本研究部のリサーチリーダーとして大峯　巖名古屋大学名誉教授（前副学長）が就任
	7 月 19-21 日	CREST International Symposium on Theory and Simulations of Complex Molecular Systems & International Symposium on Theory of Molecular Structure, Function and Reactivity, Celebrating Prof. Morokuma's 75th Birthday 開催
	12 月 4 日	第 7 回センターシンポジウム開催
平成 22 年 (2010)	2 月 4 日	第 7 回福井センターセミナー開催
	4 月 1 日	田中　功 第四代センター長就任
	4 月 1 日	大峯　巖 福井謙一記念研究部第二リサーチリーダーが分子科学研究所長に転出
	6 月 21 日	第 8 回福井センターセミナー開催
	12 月 3 日	第 8 回センターシンポジウム開催
平成 23 年 (2011)	4 月 1 日	福井謙一記念研究部第二のリサーチリーダーとして榊　茂好 京都大学物質―細胞統合システム拠点 (iCeMS) 特任教授が就任
	7 月 30 日	若い人に贈る福井謙一先生ノーベル化学賞受賞 30 周年記念公開講座　―最近の基礎化学の進展―
	7 月 30 日	福井謙一博士記念展示コーナー設置
	8 月 31 日 -9 月 1 日	Fukui International Symposium for Theoretical and Computational Chemistry
	9 月 17 日	京都大学ジュニアキャンパス 2011 「化学―フロンティア軌道理論と電子計算機で化学が分かる？」
	10 月 1 日	国際連携研究室設置

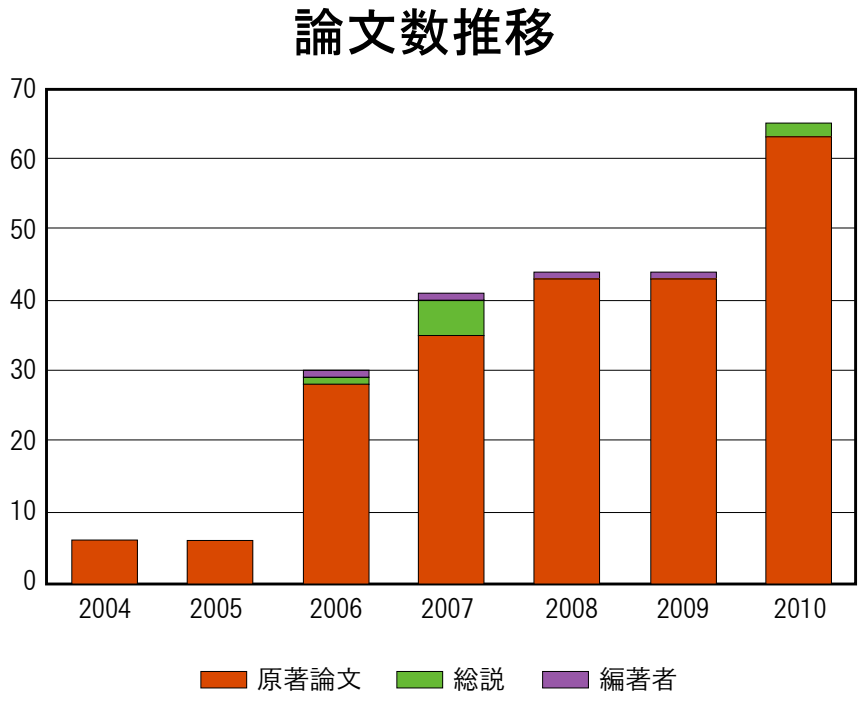
2．歴代センター長

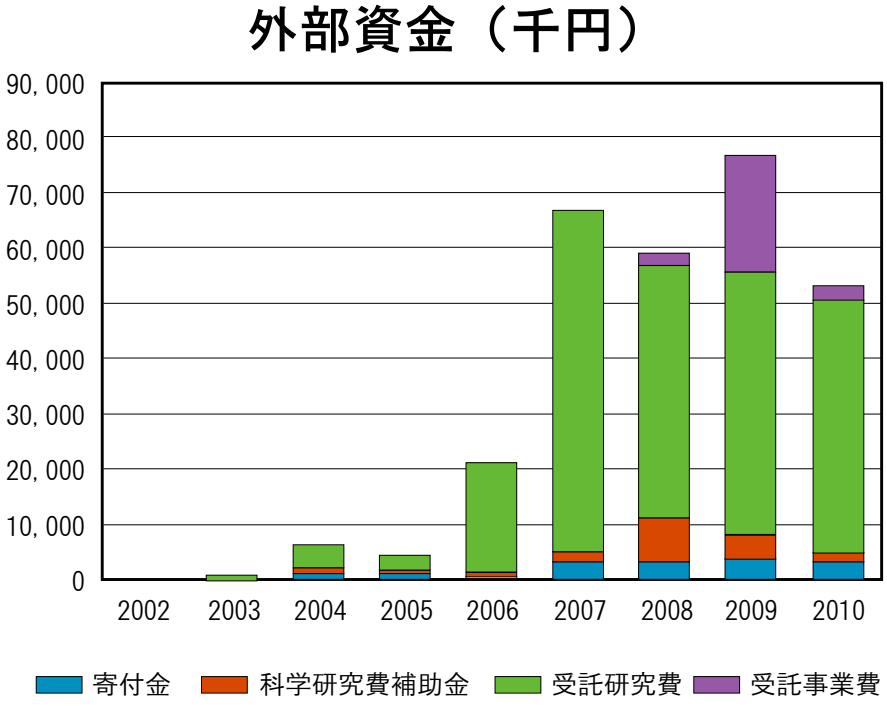
初　代　森島　績（平成 14 年 4 月－平成 16 年 3 月）
第二代　中辻　博（平成 16 年 4 月－平成 18 年 3 月）
第三代　榊　茂好（平成 18 年 4 月－平成 22 年 3 月）
第四代　田中　功（平成 22 年 4 月－現在）

３．過去に在籍した博士研究員

職　　名		氏　　名	在職期間
福井センターフェロー （* は福井謙一記念研究部第一所属）		林　重彦	平成 15.6. 1- 平成 17.5.31
		大塚　勇起	平成 15.6. 1- 平成 18.3.31
		安池　智一	平成 17.4. 1- 平成 17.6.30
		印出井　努	平成 17.4. 1- 平成 20.6.30
		Stephan Irle*	平成 18.5. 1- 平成 18.10.31
		Marcus Lundberg*	平成 18. 5. 8-20.11.21
		柳尾　朋洋	平成 18.7. 1- 平成 20.1.31
		Lung Wa Chung*	平成 18.10.16 -22. 10.15
		田代　基慶	平成 18.10.23-21. 7.15
		Mikhail G.Brik	平成 18.11. 6- 平成 19.6.30
		Biswajit Saha*	平成 18.11. 8-22. 4.30
		Wilfredo Credo Chung	平成 19.10. 1-23. 9.30
		Thomas V. Grimes*	平成 20. 1. 4-21. 2.28
		坂上　貴洋	平成 20. 4. 1-21. 5.15
		平尾　一*	平成 21. 4. 1-22.10.31
		池野　豪一	平成 22. 4. 1-23.10.31
福井謙一記念 研究部第一	（ＪＳＴ）フェロー	河津　励	平成 18.11. 1 -22. 3.31
		太田　靖人	平成 18.12. 1-21. 2.28
		岡本　佳子	平成 19. 4. 1-21. 5.31
		Pavel V. Avramov	平成 20. 2. 1-20.12.25
		Safwat Abdel-Azeim	平成 20.10. 9-21. 9.30
		Alister Page	平成 21. 1. 5-22.11.30
		K.R.S. Chandrakumar	平成 21. 5.11-23.5.10
		Parameswaran Pattiyil	平成 21.10.12-22. 6.15
		Raman Kumar Singh	平成 23. 4. 1-23. 8.31
福井謙一記念 研究部第二	特推研究フェロー	中谷　直輝	平成 23. 4. 1-23. ５.10
		土方　優	平成 23. 4. 1-23. 9.30

４．論文数・外部資金の推移





５．招へい外国人学者・外国人共同研究者受入れ状況

平成１９年度

氏　　名	受入れ身分	受入れ期間	所属機関・職名	受入れ責任者	研究内容
Mou Chun-Hao	外国人 共同研究者	平成19年 4月2日～ 平成19年 10月4日	国立中正大学・ 大学院生	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Wang Baoshan	招へい 外国人学者	平成19年 5月21日～ 平成19年 6月20日	武漢大学・教授	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Paneth Piotr	招へい 外国人学者	平成19年 10月1日～ 平成19年 11月14日	ウッジ工科大学 ・教授	諸熊　奎治	金属酵素反応機構におけるタンパク質環境の直接関与に関する計算科学的研究
Knaup Jan M.	外国人 共同研究者	平成19年 10月22日～ 平成19年 11月4日	ブレーメン大学 ・研究員	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション

平成２０年度

Chan Inntam	招へい 外国人学者	平成20年 4月16日～ 平成20年 5月31日	Ubon Ratchathani University（タイ）・Lecturer	諸熊　奎治	ナノ分子システムの計算化学研究
Benjamin Fink	外国人 共同研究者	平成20年 6月5日～ 平成20年 8月13日	Emory University（アメリカ）・Undergraduate	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Ching Yeh Lin	招へい 外国人学者	平成20年 9月23日～ 平成20年 10月23日	The Australian National University（オーストラリア）・Postdoctral	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Liviu Chibotaru	招へい 外国人学者	平成20年 11月5日～ 平成20年 11月28日	Katholieke Universiteit Leuven（ベルギー）・Associate Professor	佐藤　　徹	新炭素材料の電子物性における振電効果の解明を目指した量子化学的方法の開拓

平成２１年度

Chun Zhang	招へい 外国人学者	平成21年 5月22日～ 平成21年 6月20日	National Univ. of Singapore（シンガポール）・Associate Professor	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Viwat Vchirawangkwin	招へい 外国人学者	平成21年 7月1日～ 平成21年 9月28日	Chulalongkorn University（タイ）・Lecturer	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流

Witcha Treesuwan	招へい外国人学者	平成21年7月1日～平成21年9月28日	Kasetsart University（タイ）・Lecturer	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Pham Cam Nam	招へい外国人学者	平成21年7月1日～平成21年9月28日	Danang University of Technology（ベトナム）・Lecturer	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Hung Tien Nguyen	外国人共同研究者	平成21年7月1日～平成21年9月28日	HoChimign City Institute for Computational Science & Technology（ベトナム）・院生	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Anurak Udomvech	招へい外国人学者	平成21年7月1日～平成21年9月28日	Thaksin University（タイ）・Lecturer	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Arthit Vongachariya	外国人共同研究者	平成21年7月8日～平成21年7月23日	Chulalongkorn University（タイ）・院生	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Patchreenart Saparpakon	招へい外国人学者	平成21年7月8日～平成21年7月23日	Kasetsart University（タイ）・Lecturer	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Xie Huifang	外国人共同研究者	平成21年7月8日～平成21年7月23日	National University of Singapore（シンガポール）・院生	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Le Minh Duc	招へい外国人学者	平成21年7月8日～平成21年7月23日	Danang University of Technology（ベトナム）・Senior Lecturer	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Mehdi D. Esrafili	外国人共同研究者	平成21年8月24日～平成22年5月23日	Tarbiat Modares University（イラン）・Academic Staff	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Liviu Chibotaru	招へい外国人学者	平成21年9月7日～平成21年9月21日	Katholieke Universiteit Leuven（ベルギー）・Associate Professor	佐藤　徹	新炭素材料の電子物性における振電効果の解明を目指した量子化学的方法の開拓

Pavel Avramov	外国人 共同研究者	平成21年 10月12日～ 平成21年 11月12日	L.V. Kirensky Institute of Physics,SBRAS（ロシア）・Research Associate	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Nguyen Hoa My	外国人 共同研究者	平成21年 11月8日～ 平成21年 12月7日	HaNoi University of Science（ベトナム）・Researcher	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Ramon Orlando Valencia Maturana	外国人共同研究者	平成22年 2月10日～ 平成22年 8月10日	Universitat Rovira i Virgili（スペイン）・院生	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Patchreenart Saparpakon	招へい外国人学者	平成22年 3月9日～ 平成22年 6月7日	Kasetsart University（タイ）・Lecturer	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流

平成２２年度

Sivakumar Sekharan	外国人共同研究者	平成22年 4月3日～ 平成22年 4月24日	Emory University（アメリカ）・研究員	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Hasmerya Maarof	招へい外国人学者	平成22年 4月4日～ 平成22年 7月3日	Universiti Teknologi Malaysia（マレーシア）・講師	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Thanyarat	外国人共同研究者	平成22年 4月16日～ 平成22年 7月15日	Chulalongkorn University（タイ）・研究員	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Chatchawal Wongchoosuk	外国人 共同研究者	平成22年 6月15日～ 平成22年 9月13日	Mahidol University（タイ）・D2	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Marvin Jose F. Fernandez	外国人 共同研究者	平成22年 6月3日～ 平成22年 8月31日	Ateneo de Manila University（フィリピン）・大学院生	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Hoa My Nguyen	外国人 共同研究者	平成22年 6月7日～ 平成22年 9月4日	HaNoi University of Science（ベトナム）・研究員	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流

Pham Quoc Buu	外国人 共同研究者	平成22年 6月7日～ 平成22年 9月4日	HCMCInsititute for Computational Science & Tech.（ベトナム）・研究員	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Panita Decha	招へい 外国人学者	平成22年 6月15日～ 平成22年 6月30日	Thaksin University(タイ)・講師	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Darinee Sea-tang	招へい 外国人学者	平成22年 6月15日～ 平成22年 6月30日	College of KMITL Nanotechnology（タイ）・講師	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Thang Ho Viet	外国人 共同研究者	平成22年 6月16日～ 平成22年 6月30日	Danang University of Technology,（ベトナム）・講師	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Bokun Cho	外国人 共同研究者	平成22年 6月16日～ 平成22年 6月30日	シンガポール国立大学（シンガポール）・大学院生	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Rozana Othman	招へい 外国人学者	平成22年 6月16日～ 平成22年 6月30日	Universiti Malaya（マレーシア）・上級講師	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Higinio R. Barros, Jr.	外国人 共同研究者	平成22年 6月16日～ 平成22年 6月30日	Ateneo de Manila University（フィリピン）・大学院生	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Benjoe Rey B. Visayas	外国人 共同研究者	平成22年 9月20日～ 平成22年 12月18日	MSU-Illigan Institute of Technology（フィリピン）・大学院生	諸熊　奎治	分子理論による複雑分子のシミュレーションに関する共同研究と研究者交流
Natercia Fernandes Bras	外国人 共同研究者	平成22年 10月17日～ 平成22年 12月18日	The University of Porto（ポルトガル）・大学院生	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション

平成２３年度

Burger, Steven K.	外国人 共同研究者	平成 23 年 4 月 11 日～平成 23 年 5 月 26 日	McMaster University（カナダ）・研究員	諸熊　奎治	複雑分子系のシミュレーション
Jiayun Pang	外国人 共同研究者	平成 23 年 4 月 9 日～平成 23 年 5 月 12 日	Univ. of Birmingham（イギリス）・研究員	諸熊　奎治	酵素触媒反応の計算化学研究
Victor Travis Harris	外国人 共同研究者	平成 24 年 1 月 20 日～平成 24 年 1 月 19 日	Montana State University（アメリカ）・院生	諸熊　奎治	フェリチン蛋白中でのバイオミネラリゼーションの計算化学的研究

６．各種委員会委員

⑴　学内

委員会名	氏　名	任　期
大学評価委員会委員	榊　　茂好	H19.4.1～H22.3.31
全学情報セキュリティ委員会委員	榊　　茂好	H19.4.1～H22.3.31
京都大学情報環境機構ＫＵＩＮＳ利用負担金検討委員会委員	石田　俊正	H19.4.1～H21.3.31
物質－細胞総合システム拠点アドバイザリー・コミティ委員	諸熊　奎治	H20.8.25～H22.3.31
京都大学情報環境機構ＫＵＩＮＳ利用負担金検討委員会委員	石田　俊正	H21.4.1～H23.3.31
高等教育研究開発推進機構全学共通教育システム委員会化学部会委員	田中　　功	H19.4.1～H21.3.31
大学評価委員会点検・評価実行委員会委員	田中　　功	H18.7.7～

⑵　学外

委員会名	氏 名	任 期
財団法人　ファインセラミックスセンター　客員主管研究員	田中　　功	H19.4.1 ～ H20.3.31
文部科学省研究振興局　科学技術・学術審議会専門委員	田中　　功	H19.12.14 ～ H20.12.13
文部科学省研究振興局　科学技術・学術審議会専門委員	榊　　茂好	H20.2.1 ～ H21.1.31
財団法人　ファインセラミックスセンター　客員主管研究員	田中　　功	H20.4.1 ～ H21.3.31
大学共同利用機関法人自然科学研究機構　次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発運営委員会委員	榊　　茂好	H20.7.1 ～ H21.3.31
財団法人化学技術戦略推進機構 「交流連携推進委員会　機能性材料分科会」委員	榊　　茂好	H20.9.1 ～ H21.3.31
財団法人未来工学研究所 「No.9 分科会」メンバー	田中　　功	H20.11.6 ～ H21.3.31
財団法人化学技術戦略推進機構 「交流連携推進委員会　機能性材料分科会」委員	榊　　茂好	H21.4.1 ～ H21.9.30
財団法人　ファインセラミックスセンター　客員主管研究員	田中　　功	H21.4.1 ～ H22.3.31
大学共同利用機関法人自然科学研究機構　次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発運営委員会委員	榊　　茂好	H21.5.1 ～ H22.3.31
財団法人高輝度光科学研究センター　利用研究課題審査委員会分科会レフェリー	田中　　功	H21.6.1 ～ H23.3.31
独立行政法人日本学術振興会　特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査員	榊　　茂好	H21.8.1 ～ H22.3.31
財団法人未来工学研究所 「No.9 分科会」メンバー	田中　　功	H21.8.25 ～ H22.3.31
文部科学省研究振興局　科学研究費補助金における評価に関する委員会の評価者	田中　　功	H21.12.1 ～ H22.11.30
財団法人本多記念会　平成 22 年度本多記念賞委員会委員	田中　　功	H21.12.11 ～ H22.1.25
独立行政法人日本学術振興会　特別研究員等審査会専門委員	田中　　功	H22.1.1 ～ H22.12.31

7．センター会議開催状況

協　議　員　会	運　営　委　員　会
平成１９年度	
第１回 ○開催日：平成 19 年 7 月 20 日（金）10：00 ～ ○出席者：6 名 ○報　告：1. 福井センターフェロー等について 2. その他 ○議　事：1. 副センター長（理論研究部門担当）の選考について 2. 運営委員会委員（スーパーバイザー）の選考について 3. 平成 18 年度決算について 4. 平成 19 年度予算について **第２回** ○開催日：平成 20 年 2 月 25 日（月）13：30 ～ ○出席者：6 名 ○報　告：1. 福井センターフェロー等について 2. 福井謙一記念研究センター「年報 2006」及び「平成 19 年度自己点検・評価報告書」について 3. 第 2 回日本－チェコースロバキア合同シンポジウムについて 4. 第 5 回福井センターシンポジウムについて ○議　事：1. 次期センター長候補者の選考について 2. 副センター長の選出について 3. 運営委員会委員（スーパーバイザー）の選出について 4. 協議員会協議員の選出について	**第１回** ○開催日：平成 19 年 5 月 7 日（月）16:30 ～ ○出席者：10 名 ○報　告：1. 福井センターフェローについて 2. 平成 19 年度福井センターシンポジウムについて 3. 福井センターセミナーについて 4. その他 ○議　事：1. 運営委員会委員（スーパーバイザー）の選出について 2. 自己点検・評価について 3. 平成 19 年度予算について 4. 招へい外国人学者の受入れについて 5. 受託研究の受入れについて 6. 福井センターフェローの公募について **第２回** ○開催日：平成 19 年 8 月 23 日（木）9：00 ～ ○出席者：9 名 ○報　告：1. 平成 18 年度決算及び平成 19 年度予算について ○議　事：1. 福井センターフェローの公募について（7 ／ 31 締切分） 2. 招へい外国人学者・外国人共同研究者の受け入れについて 3. 平成 19 年度福井センターシンポジウムについて 4. 福井センター自己点検・評価等について **第３回** ○開催日：平成 20 年 1 月 24 日（木）9:00 ～ ○出席者：9 名 ○報　告：1. 第 2 回日本－チェコースロバキア合同シンポジウムについて 2. 第 5 回福井センターシンポジウムについて 3. 福井センターフェローの現状について ○議　事：1. 次期センター長候補者の推薦について 2. 自己点検・評価報告書及び年報の作成について 3. 福井センターフェローの再任審査について 4. 寄附金の受け入れについて 5. 危機管理計画の作成について 6. その他 **第４回** ○開催日：平成 20 年 3 月 18 日（火）16：30 ～ ○出席者：9 名 ○報　告：1. 福井謙一記念研究センター年報 2006 及び平成 19 年度自己点検・評価報告書について 2. その他 ○議　事：1. 福井センター任期制教員の再任審査について

	2. 福井センターフェローの公募について（2／29 締切分） 3. 招へい外国人学者の受け入れについて 4. 平成 20 年度予算について 5. その他
平成２０年度	
第１回 ○開催日：平成 20 年 7 月 18 日（金）10：27 ～ ○出席者：8 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現状について 2. 年報及び自己点検・評価報告書の発行について ○議　事：1. 平成 19 年度決算について 2. 平成 20 年度予算について 3. 運営委員会委員（スーパーバイザー）の選考について 4. 任期制准教授の再任可否の審議について 5. その他 **第２回** ○開催日：平成 21 年 2 月 4 日（水）13:30 ～ ○出席者：5 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現状について 2. 第 6 回福井謙一記念研究センターシンポジウムについて 3. その他 ○議　事：1. 任期制准教授の再任可否の審議について 2. その他	**第１回** ○開催日：平成 20 年 6 月 27 日（金）9：03 ～ ○出席者：９名 ○報　告：1. 諸熊奎治リサーチリーダー恩賜賞・日本学士院賞受賞記念講演会および祝賀会の開催について 2. 福井センターフェローの現状について 3. 福井センター情報セキュリティ委員会について 4. 自己点検・評価報告書 2007 の発行について ○議　事：1. 平成 19 年度決算について 2. 運営委員会委員（スーパーバイザー）について 3. 任期制准教授の再任審査委員会の報告・再任可否の審議について 4. 福井センターフェローの再任審査について 5. 寄附金の受け入れについて 6. 博士研究員の給与について 7. その他 ①福井センターセミナーについて ②福井センターシンポジウムについて **第２回（文書会議）** ○開催日：平成 20 年 7 月 7 日（月） ○議　事：1. 福井謙一記念研究センター運営委員会委員（スーパーバイザー）候補者について **第３回（文書会議）** ○開催日：平成 20 年 7 月 14 日（月） ○議　事：1. 福井センターフェローの再任審査について **第４回（文書会議）** ○開催日：平成 20 年 7 月 22 日（火） ○議　事：1. 福井センターフェローの再任審査について 2. 外国人共同研究者の受け入れについて **第５回** ○開催日：平成 20 年 10 月 22 日（水）10:25 ～ ○出席者：10 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現況について 2. 第 6 回福井謙一記念研究センターシンポジウムについて 3. その他 ○議　事：1. 任期制准教授の再任申請について 2. 招へい外国人学者の受け入れについて

	3. 福井センターフェローの公募について 4. 福井センターの将来構想について 5. その他第 6 回（文書会議） ○開催日：平成 20 年 12 月 8 日（月） ○議　事：1. 奨学寄附金の受け入れについて **第７回** ○開催日：平成 21 年 1 月 28 日（水）10:30 ～ ○出席者：11 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現況について 2. 第 6 回福井謙一記念研究センターシンポジウムについて 3. その他 ○議　事：1. 任期制准教授の再任審査委員会の報告・再任可否の審議について 2. 福井センターフェローの採用について 3. リサーチリーダーの採用について 4. 福井センターの将来構想について
平成２１年度	
第１回 ○開催日：平成 21 年 7 月 15 日（水）10：30 ～ ○出席者：6 名 ○報　告：1. 福井謙一記念研究センター研究部第２リサーチリーダーについて 2. 福井センターフェローの現状について 3. その他 ①外部評価の時期について ②分子ナノサイエンス戦略拠点体制への参画について ③次期センター長候補者の選考について ○議　事：1. 平成 20 年度決算について 2. 平成 21 年度予算について **第２回** ○開催日：平成 22 年 2 月 16 日（火）9：00 ～ ○出席者：7 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現状について 2. 第 7 回福井謙一記念研究センターシンポジウムの開催について 3. 白眉プロジェクト内定者について 4. その他（管理下にない放射性同位元素等に関する一斉点検の実施及び報告依頼について） ○議　事：1. 次期センター長候補者の選考について 2. 次期副センター長の選出について 3. 次期協議員会協議員の選出について 4. 次期運営委員会委員（スーパーバイザー）の選出について 5. 福井センター諮問委員会の設置について 6. その他（センター長の代理者の決定について）	**第１回（文書会議）** ○開催日：平成 21 年 4 月 27 日（月） ○議　事：1. 招へい外国人学者の受け入れについて **第２回** ○開催日：平成 21 年 5 月 26 日（火）15:30 ～ ○出席者：8 名 ○報　告：1. 福井謙一記念研究センター研究部第２リサーチリーダーについて 2. 福井センターフェローの現況について ○議　事：1. 平成 20 年度決算について 2. 平成 21 年度予算について 3. 招へい外国人学者及び外国人共同研究者の受入について 4. 福井センターフェローの再任審査について 5. 外部評価の実施について 6. 副センター長の辞任及び候補者選考について 7. その他 ①福井センターセミナーについて ②福井センターシンポジウムについて **第３回（文書会議）** ○開催日：平成 21 年 6 月 11 日（木） ○議　事：1. 招へい外国人学者及び外国人共同研究者の受け入れについて **第４回（文書会議）** ○開催日：平成 21 年 7 月 2 日（木） ○議　事：1. 福井センターフェローの再任について **第５回（文書会議）** ○開催日：平成 21 年 8 月 6 日（木） ○議　事：1. 招へい外国人学者の受入について

	第６回（文書会議） ○開催日：平成 21 年 9 月 7 日（月） ○議　事：1. 福井センターフェローの募集について 2. 寄付金の受け入れについて 3. 外国人共同研究者の受け入れについて 4. 研究経費の納入を伴わない共同研究の申請について **第７回（文書会議）** ○開催日：平成 21 年 9 月 30 日（水） ○議　事：1. 京都大学次世代研究者育成支援事業「白眉プロジェクト」における研究者の受入等について **第８回** ○開催日：平成 21 年 12 月 17 日（木）9：25 ～ ○出席者：9 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現状について 2. 第 7 回福井謙一記念研究センターシンポジウムの開催について 3. その他（部局情報セキュリティ実施手順書について） ○議　事：1. 次期センター長候補者の推薦について 2. 次期副センター長候補者の推薦について 3. 次期協議員会協議員候補者の推薦について 4. 次期運営委員会委員候補者の推薦について 5. 福井謙一記念研究センター運営委員会の審議事項について 6. その他 ①中期目標・中期計画に対する部局の行動計画について ②福井謙一記念研究センターの今後の体制について **第９回** ○開催日：平成 22 年 1 月 21 日（木）10：45 ～ ○出席者：10 名 ○議　事：1. 次期センター長候補者の推薦について 2. 次期副センター長候補者の推薦について 3. 次期協議員会協議員候補者の推薦について 4. 次期運営委員会委員候補者の推薦について 5. 外国人共同研究者の受入について 6. 受託研究費の受入について 7. 福井センターフェローの採用について 8. 福井センター諮問委員会（仮称）の設置について 9. その他 ①福井センター運営委員会オブザーバーについて ②福井センター年報及びパンフレットの作成について

	第10回（文書会議） ○開催日：平成 22 年 2 月 5 日（金） ○報　告：1. 寄付金からの全学経費の徴収について 2. 白眉プロジェクト内定者について ○議　事：1. 福井謙一記念研究センター運営委員会委員の推薦について 2. 招へい外国人学者及び外国人共同研究者の受入について 3. 寄付金の受入について
平成２２年度	
第１回 ○開催日：平成 22 年 6 月 29 日（火）10:30 ～ ○出席者：6 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現状について 2. その他 ○議　事：1. 加藤副センター長ご逝去にともなう次期副センター長候補者について 2. スーパーバイザー候補者について 3. 平成 21 年度決算について 4. 平成 22 年度予算について 5. その他 **第２回** ○開催日：平成 22 年 11 月 19 日（金）10：00 ～ ○出席者：7 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現状について 2. その他 ○議　事：1. 教員転勤について 2. 教員の選考について **第３回（文書会議）** ○開催日：平成 23 年 3 月 4 日（金） ○議　事：1. 副センター長の交替について 2. 運営委員会委員（スーパーバイザー）の選出について	**第１回（文書会議）** ○開催日：平成 22 年 4 月 21 日（水） ○議　事：1. 外部資金受入について 2. 招へい外国人学者及び外国人共同研究者の受入について **第２回** ○開催日：平成 22 年 6 月 11 日（金）9:30 ～ ○出席者：9 名 ○報　告：1. 福井センターフェローの現状について 2. その他 ○議　事：1. 加藤副センター長ご逝去にともなう次期副センター長候補者の推薦について 2. 平成 21 年度決算について 3. 平成 22 年度予算について 4. センターフェロー公募案について 5. その他 ①福井センターフェローの待遇等について ②今後の展望について **第３回（文書会議）** ○開催日：平成 22 年 7 月 22 日（木） ○議　事：1. 寄附金の受け入れについて **第４回** ○開催日：平成 22 年 8 月 25 日（水）16:00 ～ ○出席者：13 名 ○議　事：1. 福井センターフェローの採用について 2. 招へい外国人学者の受入について 3. 研究費の納入を伴わない共同研究の申請について 4. 福井謙一記念研究センター情報セキュリティポリシー実施手順書について 5. その他 ①予算について ②シンポジウムの開催について ③福井センターの今後のあり方について **第５回（文書会議）** ○開催日：平成 22 年 9 月 13 日（月） ○議　事：1. 受託研究費の受入について **第６回（文書会議）** ○開催日：平成 22 年 9 月 30 日（木） ○議　事：1. 准教授候補者の選考について

	第７回（文書会議） ○開催日：平成 22 年 10 月 8 日（金） ○議　事：1. 招へい外国人学者及び外国人共同研究者の受入について **第８回** ○開催日：平成 22 年 10 月 29 日（金）11:00 ～ ○出席者：13 名 ○報　告：1.JCSOS 緊急事故支援システムの利用について 2. 第 8 回福井謙一記念研究センターシンポジウムについて ○議　事：1. 福井センター准教授候補者 (1) の選考について 2. 福井センター准教授候補者 (2) の選考について 3. 福井センターフェローの選考について **第９回** ○開催日：平成 22 年 1 月 26 日（水）9:00 ～ ○出席者：10 名 ○報　告：1. 福井センター諮問委員会について ○議　事：1. 副センター長の交替について 2. 福井センター准教授候補者の公募について 3. 福井センターフェローの選考について 4. 福井謙一記念研究部リサーチリーダーについて 5. 福井センターセミナーの強化について 6. 福井センター共同研究員制度の創設について 7. 福井センター連絡会議制度の創設について 8. 福井謙一記念奨励賞の創設について 9. その他 **第10回（文書会議）** ○開催日：平成 23 年 1 月 31 日（月） ○議　事：1. 福井謙一記念研究センターリサーチリーダー選任に関する申合せについて 2. リサーチリーダーの選考について **第11回（文書会議）** ○開催日：平成 23 年 2 月 16 日（水） ○議　事：1. 福井謙一記念研究センターリサーチリーダー選任に関する申合せについて 2. 外国人共同研究者の受入について **第12回（文書会議）** ○開催日：平成 23 年 3 月 15 日（火） ○報　告：1. 福井センターフェロー再任審査委員会の設置について ○議　事：1. 外国人共同研究者の受入について
平成２３年度	
第１回（文書会議） ○開催日：平成 23 年 6 月 27 日（月） ○議　事：1. 平成 22 年度決算案について 2. 平成 23 年度予算案について	**第１回（文書会議）** ○開催日：平成 23 年 4 月 14 日（木） ○議　事：1. 外部資金受入れについて 2. フェローの再任審査結果について 3. 東日本大震災被災研究者支援について

第２回（文書会議）
○開催日：平成 23 年 7 月 28 日（木）
○議　事：1. 准教授候補者の選考について

第３回（文書会議）
○開催日：平成 23 年 9 月 7 日（水）
○議　事：1. 特定准教授候補者の選考について

第４回（文書会議）
○開催日：平成 23 年 10 月 11 日（火）
○議　事：1. 特定助教候補者の選考について

第２回
○開催日：平成 23 年 6 月 10 日（金）15:30 ～
○出席者：12 名
○報　告：1. 外国人共同研究者の受入期間等の変更について
2. その他
○議　事：1. 平成 22 年度決算について
2. 平成 23 年度予算について
3. 准教授選考について
4. 国際連携研究室の設置について
5. 福井センター共同研究者制度の創設について
6. 福井センター連絡会議制度の創設について
7. シニアリサーチフェロー制度の創設について
8. 福井センターセミナーの強化について
9. センターフェロー公募について

第３回（文書会議）
○開催日：平成 23 年 6 月 20 日（月）
○議　事：1. 奨学寄附金の受入れについて
2. 研究費の納入を伴わない共同研究の受入れについて

第４回（文書会議）
○開催日：平成 23 年 7 月 11 日（月）
○議　事：1. 福井センター連携アドバイザー会議制度について
2. 福井センターシニアリサーチフェロー制度について
3. 福井センターセミナーの強化について

第５回（文書会議）
○開催日：平成 23 年 7 月 15 日（金）
○議　事：1. 准教授候補者の選考について
2. 奨学寄附金の受入れについて（２件）

第６回（文書会議）
○開催日：平成 23 年 8 月 17 日（水）
○報　告：1. 吉田事業場産業医等の巡視について
○議　事：1. 福井センター特定准教授の選考方針について
2. 福井センター特定准教授の人事選考予備検討委員会について
3. 福井センター特定助教の選考方針について

第７回
○開催日：平成 23 年 8 月 30 日（火）16:00 ～
○出席者：13 名
○報　告：1. 福井センターにおける展示開始について
2. 公開講座報告
○議　事：1. 福井センターフェローの選考について
2. 特定有期雇用教員の選考について
3. 福井センターセミナーついて
4. その他

	第８回（文書会議） ○開催日：平成 23 年 9 月 28 日（水） ○議　事：1. メール会議による特定助教候補者選考の是非について 2. 特定助教候補者の選考について **第９回（文書会議）** ○開催日：平成 23 年 11 月 11 日（金） ○報　告：1. 福井センターフェロー再任審査委員会の設置について ○議　事：1. 福井センターフェローの公募について 2. 外国人共同研究者の受入れについて

８．京都大学福井謙一記念研究センター内規等一覧

１．京都大学福井謙一記念研究センター規程

２．京都大学福井謙一記念研究センター協議員会内規

３．京都大学福井謙一記念研究センター諮問委員会内規

４．京都大学福井謙一記念研究センター運営委員会内規

５．京都大学福井謙一記念研究センター長候補者選考内規

６．京都大学福井謙一記念研究センター准教授候補者選考内規

７．京都大学福井謙一記念研究センター任期制教員の再任審査に関する内規

８．京都大学福井謙一記念研究センター共同研究者受入れ内規

９．京都大学福井謙一記念研究センター連携アドバイザー会議内規

１０．任期制教員の再任審査に係る提出書類に関する申合せ

１１．福井謙一記念研究センター博士研究員再任審査に関する申し合わせ

１２．福井謙一記念研究センターリサーチリーダー選任に関する申合せ

１３．京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の選任に関する申合せ

１４．京都大学福井謙一記念研究センターセミナー等実施要項

京都大学福井謙一記念研究センター規程

（平成１６年４月１日全部改正）

（趣旨）

第１条　この規程は、京都大学福井謙一記念研究センター（以下「福井謙一記念研究センター」という。）の組織等に関し必要な事項を定めるものとする。

（目的）

第２条　福井謙一記念研究センターは、福井謙一博士の功績を記念し、基礎化学に関する研究調査を行うことを目的とする。

（センター長）

第３条　福井謙一記念研究センターに、センター長を置く。

２　センター長は、京都大学の専任の教授をもって充てる。

３　センター長の任期は、２年とし、再任されることができる。

４　センター長は、福井謙一記念研究センターの所務を掌理する。

５　センター長に事故があるときは､あらかじめセンター長が指名する者がその職務を代理する。

６　センター長が欠けたときは、あらかじめセンター長が指名する者がその職務を行う。

（協議員会）

第４条　福井謙一記念研究センターに、その重要事項を審議するため、協議員会を置く。

２　協議員会の組織及び運営に関し必要な事項は、協議員会が定める。

（運営委員会）

第５条　福井謙一記念研究センターに、その運営に関する事項についてセンター長の諮問に応ずるため、運営委員会を置く。

２　運営委員会に関し必要な事項は、運営委員会が定める。

（研究部門）

第６条　福井謙一記念研究センターに、次に掲げる研究部門を置く。

総合研究部門

理論研究部門

（研究科の教育への協力）

第７条　福井謙一記念研究センターは、工学研究科の教育に協力するものとする。

（事務組織）

第８条　福井謙一記念研究センターに置く事務組織については、京都大学事務組織規程（平成１６年達示第６０号）の定めるところによる。

（内部組織）

第９条　この規程に定めるもののほか、福井謙一記念研究センターの内部組織については、センター長が定める。

附　則

１　この規程は、平成１６年４月１日から施行する。

２　次に掲げる規程は、廃止する。

⑴　京都大学福井謙一記念研究センター協議員会規程（平成１５年達示第１３号）

⑵　京都大学福井謙一記念研究センター運営委員会規程（平成１５年達示第１４号）

⑶　京都大学福井謙一記念研究センター長候補者選考規程（平成１５年達示第１５号）

京都大学福井謙一記念研究センター協議員会内規

（平成１６年４月１日制定）

第１条　この内規は、京都大学福井謙一記念研究センター規程（平成１６年達示第５７号）第４条第２項の規定に基づき、福井謙一記念研究センター（以下「センター」という。）の協議員会に関し必要な事項を定めるものとする。

第２条　協議員会は、次の各号に掲げる協議員で組織する。

⑴　センター長

⑵　センター所属の専任の教授及び准教授

⑶　前２号以外の京都大学の教授及び准教授のうちから、協議員会の議を経てセンター長の委嘱した者　若干名

２　第１項第３号の協議員の任期は、２年とし、再任されることができる。ただし、補欠の協議員の任期は、前任者の残任期間とする。

第３条　センター長は、協議員会を招集し、議長となる。

２　センター長に事故があるときは、あらかじめセンター長が指名した協議員が前項の職務を代行する。

第４条　協議員会は、協議員（海外渡航中の者を除く。）の過半数が出席しなければ、開くことができない。

２　協議員会の議事は、出席協議員の過半数で決する。

３　前２項の規定にかかわらず、協議員会の指定する重要事項については、協議員（海外渡航中の者を除く。）の３分の２以上が出席する協議員会において、出席協議員の４分の３以上の多数で決する。

第５条　協議員会に、センターの将来計画、研究評価及び運営方針等に関する事項について、センター長の諮問に応ずるため、諮問委員会を置く。

２　諮問委員会に関し必要な事項は、別に定める。

第６条　協議員会の事務を処理するため、協議員会に幹事を置き、事務職員を充てる。

第７条　この内規に定めるもののほか、協議員会の運営に関し必要な事項は、協議員会が定める。

附　則

１　この内規は、平成１６年４月１日から施行する。

２　この内規の施行後初めて委嘱する協議員の任期は、第２条第２項本文の規定にかかわらず、京都大学福井謙一記念研究センター協議員会規程（平成１５年４月１日達示第１３号）に基づき置かれた任期とする。

附　則

この内規は、平成１９年４月１日から施行する。

附　則

この内規は、平成２２年４月１日から施行する。

京都大学福井謙一記念研究センター諮問委員会内規

（平成２２年２月１６日制定）

第１条　京都大学福井謙一記念研究センター協議員会内規第５条第２項の規定に基づき、福井謙一記念研究センター（以下、「センター」という。）の諮問委員会に関し必要な事項を定める。

第２条　諮問委員会は、次の各号に掲げる者で組織する。

⑴　センター長

⑵　京都大学の専任の教員　若干名

⑶　基礎化学に関し広くかつ高い識見を有する学外の学識経験者　若干名

２　前項第２号及び第３号の委員は、センター長が委嘱する。

３　第１項第２号及び第３号の委員の任期は、２年とし、再任されることができる。ただし、委嘱したセンター長の任期の終期を超えることができない。

４　前項の規定にかかわらず、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

第３条　諮問委員会に委員長を置き、委員の互選によって選出する。

２　委員長は、諮問委員会を招集し、議長となる。

３　委員長に事故があるときは、あらかじめ委員長が指名した委員がその職務を代行する。

第４条　諮問委員会の事務を処理するため、諮問委員会に幹事を置き、事務職員を充てる。

第５条　この内規に定めるもののほか、諮問委員会の運営に関し必要な事項は、諮問委員会の議を経てセンター長が定める。

附　則

この内規は、平成２２年４月１日から施行する。

京都大学福井謙一記念研究センター運営委員会内規

（平成１６年４月１日制定）

第１条　この内規は、京都大学福井謙一記念研究センター規程（平成１６年達示第５７号）第５条第２項の規定に基づき、福井謙一記念研究センター（以下「センター」という。）の運営委員会に関し必要な事項を定めるものとする。

第２条　運営委員会は、次の各号に掲げる委員で組織する。

⑴　センター所属の教員のうちからセンター長の命じた者　若干名

⑵　前号以外の京都大学の専任の教員のうちからセンター長の委嘱した者　若干名

２　前項第２号の委員の任期は、２年とし、再任されることができる。ただし、委嘱したセンター長の任期の終期を超えることができない。

３　前項の規定にかかわらず、補欠の委員の任期は、前任者の残任期間とする。

第３条　センター長は、運営委員会を招集し、議長となる。

２　センター長に事故があるときは、あらかじめセンター長が指名した委員が前項の職務を代行する。

第４条　運営委員会は、委員の過半数が出席しなければ、開くことができない。

第５条　運営委員会に必要に応じて専門委員会を置くことができる。

２　専門委員会の委員は、運営委員会の議に基づきセンター長が委嘱する。

第６条　運営委員会は、必要があるときは、委員以外の者の出席を求めて意見を聴くことができる。

第７条　運営委員会の事務を処理するため、運営委員会に幹事を置き、事務職員を充てる。

第８条　この内規に定めるもののほか、運営委員会の運営に関し必要な事項は、運営委員会が定める。

附　則

１　この内規は、平成１６年４月１日から施行する。

２　この内規の施行後初めて委嘱する委員の任期は、第２条第２項本文の規定にかかわらず、京都大学福井謙一記念研究センター運営委員会規程（平成１５年４月１日達示第１４号）に基づき置かれた任期とする。

附　則

この内規は、平成１９年３月２９日から施行し、平成１８年１０月３０日から適用する。

京都大学福井謙一記念研究センター長候補者選考内規

（平成１６年４月１日制定）

第１条　福井謙一記念研究センターのセンター長候補者の選考については、この内規の定めるところによる。

第２条　センター長候補者は、京都大学の専任の教授のうちから、福井謙一記念研究センターの協議員会において選出する。

第３条　前条の協議員会は、協議員（海外渡航中の者を除く。）の３分の２以上の出席を必要とする。

第４条　センター長候補者の選出は、出席協議員の単記無記名投票による選挙によって行う。

第５条　投票における過半数の得票者を当選者とする。

２　前項の投票において過半数の得票者がないときは、得票多数の２名について決選投票を行い、得票多数の者を当選者とする。ただし、得票同数のときは、年長者を当選者とする。

３　第１項の投票の結果、得票同数の者があることにより決選投票における被投票者の２名を定めることができないときは、年長者を先順位として定める。

４　決選投票には、被投票者は加わらないものとする。

第６条　センター長候補者の選出を行う協議員会は、センター長の任期満了による場合には満了の日の３０日以前に、その他による場合には速やかに開催するものとする。

第７条　この内規に定めるもののほか、この内規の実施に関し必要な事項は、協議員会の議を経てセンター長が定める。

附　則

この内規は、平成１６年４月１日から施行する。

京都大学福井謙一記念研究センター准教授候補者選考内規

（平成１５年７月３０日協議員会制定）

第１条　京都大学福井謙一記念研究センターの専任の准教授候補者（以下「候補者」という。）の選考については、この内規の定めるところによる。

第２条　候補者の選考の必要が生じたときは､福井謙一記念研究センター長（以下「センター長」という。）は、福井謙一記念研究センター運営委員会（以下「運営委員会」という。）に選考の開始を提案するものとする。

２　候補者の選考に際しては、広く学内外に最適の人材を求めるものとする。

第３条　運営委員会は、前条の提案を相当と認めたときは、人事選考委員会を設置する。

第４条　人事選考委員会は、次の委員で構成する。

⑴　センター長

⑵　副センター長

⑶　運営委員会委員のうちから互選により選出された者　若干名

⑷　その他運営委員会が必要と認めた者　若干名

２　人事選考委員会に委員長を置き、センター長をもって充てる。

第５条　選考過程において、委員が候補者の対象となったときは、あらかじめ運営委員会が指定する者が代わって委員となる。

第６条　人事選考委員会は、専攻分野に関し、優れた研究業績を有する者のうちから候補者となるべき者を決め、運営委員会の議を経て協議員会に附議する。

第７条　候補者の任期は､「京都大学教員の任期に関する規程」の定めによる。

第８条　この内規に定めるもののほか、この内規の実施に関し必要な事項は、協議員会の議を経てセンター長が定める。

附　則

この内規は、平成１５年７月３０日から施行する。

附　則

この内規は、平成１９年４月１日から施行する。

京都大学福井謙一記念研究センター任期制教員の再任審査に関する内規

（平成１８年１０月３０日制定）

（目的）

第１条　この内規は、福井謙一記念研究センター（以下「センター」という。）において、京都大学教員の任期に関する規程（平成１０年達示第２３号）に基づき雇用された教員（以下「任期制教員」という。）について行う再任審査に関し必要な事項を定めるものとする。

（再任申請）

第２条　任期制教員で再任を希望する者は、任期満了の１２ヶ月前までに再任審査申請書（別紙様式１）によりその旨センター長に申請しなければならない。

２　再任申請者は、前項の再任審査申請書のほかに次に掲げる書類をセンター長に提出しなければならない。

⑴　任期中（任期満了時までの見込みを含む。以下この項において同じ。）の学術的業績

⑵　任期中の研究及び本学、センター並びに学外への貢献、活動等に関する報告書

⑶　その他前２号の評価に関し必要な資料

⑷　再任後の研究計画書

第３条　再任を申請した者（以下「再任申請者」という。）は、再任審査を経て協議員会での再任可否の審議を得なければならない。

第４条　第２条に規定する期日までに所定の書類の提出がなかった場合、任期制教員の身分は任期の末日をもって終了する。

（再任審査の開始）

第５条　センター長は、第２条に基づく書類の提出があったときは、運営委員会に再任審査の開始を提案するものとする。

（再任審査委員会）

第６条　運営委員会は、前条の提案を受けたときは、再任審査委員会（以下「委員会」という。）を設置し、委員会は、再任申請者の業績等、再任後の研究計画に関する評価及び再任の可否に関する評価について審査する。

２　委員会は、次の各号に掲げる委員で組織する。

⑴　総合研究部門の運営委員会委員　１名

⑵　理論研究部門の運営委員会委員　１名

⑶　他部局の教員　１名

⑷　その他センター長が必要と認める者　若干名

３　前項各号に掲げる委員会の委員は、運営委員会で選任する。ただし、前項第３号に規定する委員は、運営委員会で審議して委嘱するものとする。

４　委員会に委員長を置き、委員長は委員の互選によって選出する。

５　委員長は、委員会を招集し、その議長となる。

６　委員会の開催は、構成員の４分の３以上の出席を必要とする。

７　委員会は、再任申請者を出席させ、評価に必要な情報の提供を求めることができる。

８　委員会は、評価に必要な事項に関して、委員以外の者を出席させ、意見を聴取することができる。

９　委員会は、再任申請者の評価について、任期満了の９ヶ月前までに、再任評価報告書（別紙様式２）により運営委員会に報告するものとする。

10　委員は、評価の過程で知ることのできた秘密を漏らしてはならない。
11　前各項に定めるもののほか、委員会の運営に関し必要な事項は、運営委員会の議を経てセンター長が定める。

（運営委員会）

第７条　運営委員会は、委員会による再任申請者の評価を尊重しながら、当該再任申請者の所属部門の設立趣旨に基づき、再任の可否について審議する。
２　運営委員会は、前項の審議に際して、再任審査申請書及び再任評価報告書を参考にするものとする。
３　再任申請者は、再任を審議する運営委員会の定足数から除く。
４　再任申請者は、運営委員会における再任の審議に参加することができない。
５　運営委員会は、再任申請者を出席させ、審議に必要な情報の提供を求めることができる。
６　センター長は、運営委員会の審議結果、再任審査申請書及び再任評価報告書（第８条第１項において「資料」という。）を協議員会に提出する。

（協議員会）

第８条　協議員会は、センター長から提出された資料をもとに審議を行い、再任の可否を決する。
２　再任申請者は、再任を審議する協議員会の定足数から除く。
３　再任申請者は、協議員会における再任の審議に参加することができない。
４　協議員会は、再任申請者を出席させ、審議に必要な情報の提供を求めることができる。

（可否決定の期限）

第９条　再任の可否決定は、任期満了の６ヶ月前までに行うものとする。ただし、特別の事情により再任の可否決定を行うことが困難なときは、再任申請者の同意を得てこの期日を変更することができる。

（通知）

第10条　センター長は、協議員会により再任の可否決定がされたときは、直ちに再任審査結果通知書（別紙様式３－１又は別紙様式３－２）を再任申請者に通知しなければならない。

（再任再審査）

第11条　再任申請者は、前条の決定に不服がある場合、通知を受けた日から２週間以内に再任再審査申請書（別紙様式４）をセンター長に提出することができる。
２　センター長は、再任再審査申請書の提出があったときは、直ちに運営委員会を招集し、再任再審査の開始を提案するものとする。
３　運営委員会は、前項の提案を受けたときは、委員会の委員と異なる者からなる再任再審査委員会を設置する。このとき第６条第２項から第１１項までの規定を準用し、これらの規定中「委員会」を「再任再審査委員会」と読み替えるものとする。
４　再任再審査委員会は、再任申請者の評価を行い、任期満了の４ヶ月前までに再任再評価報告書（別紙様式５）により評価結果を運営委員会に報告するものとする。
５　運営委員会における再任の可否の審議については、第７条の規定を準用し、これらの規定中「委員会」を「再任再審査委員会」、「再任審査申請書及び再任評価報告書」を「再任審査申請書、再任再審査申請書、再任評価報告書及び再任再評価申請書」と読み替えるものとする。
６　協議員会における再任の可否の審議及び決定については、第８条の規定を準用する。
７　再任再審査における再任の可否決定の期限については、第９条の規定を準用し、規定中「委員会」を「再任再審査委員会」、「６ヶ月前」を「３ヶ月前」と読み替えるものとする。
８　センター長は、再任の可否決定後直ちに再任再審査結果通知書（別紙様式６－１又は別紙様式６－２）により、再任再審査の結果を再任申請者に通知しなければならない。

（再任再々審査）

第12条　再任再々審査は行わない。

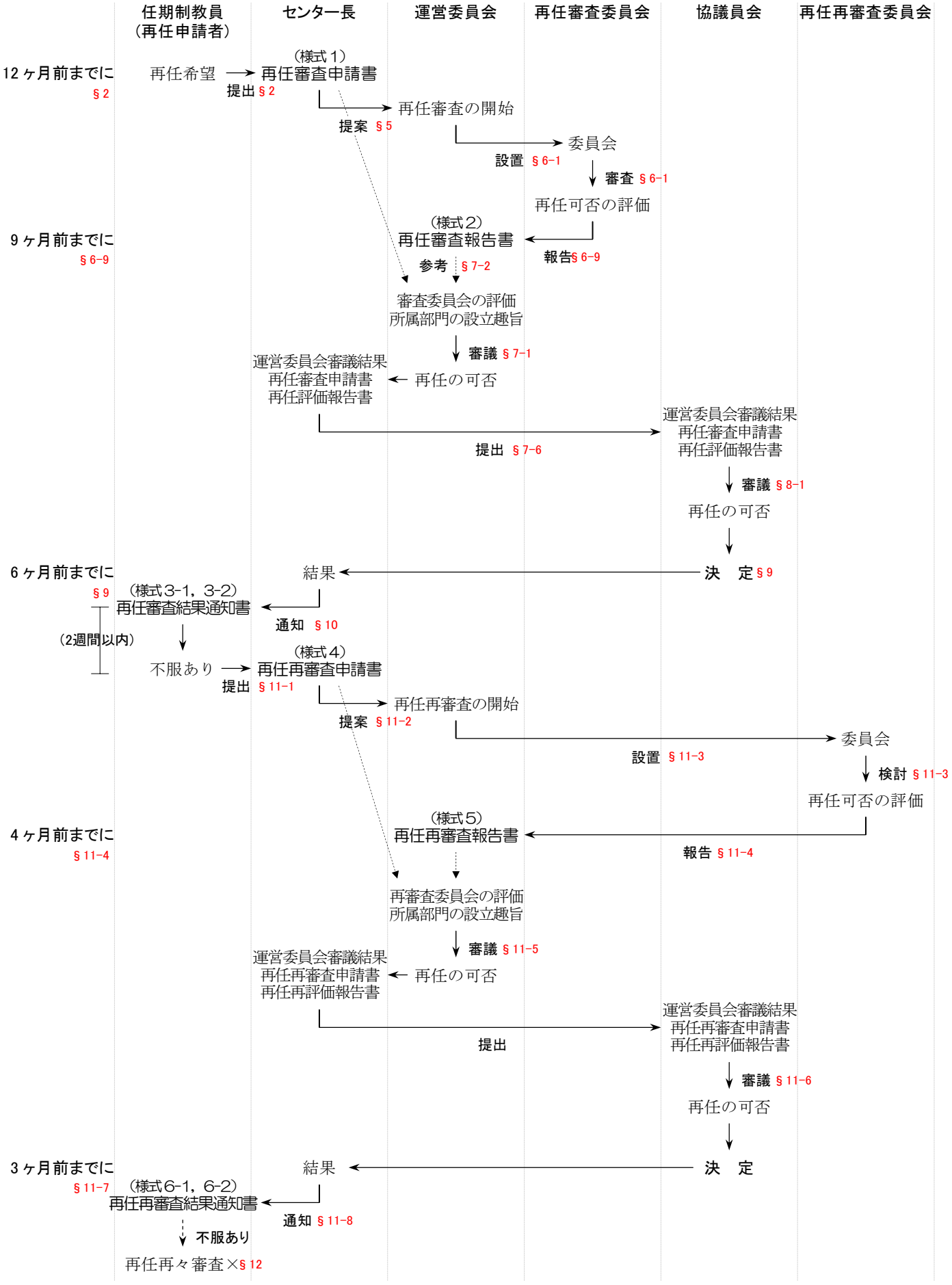
（その他）

第13条　この内規に定めるもののほか、任期制教員の再任審査に関し必要な事項は、協議員会の議を経てセンター長が定める。

附　則

この内規は、平成１８年１０月３０日から施行する。

福井謙一記念研究センター任期制教員の再任審査の流れ



京都大学福井謙一記念研究センター共同研究者受入れ内規

（平成２３年６月１０日　運営委員会決定）

第１条　この内規は、京都大学福井謙一記念研究センター（以下「センター」という。）における共同研究者の受入れについて必要な事項を定めるものとする。

第２条　学外の研究者と共同研究を行うことによって、センターの研究の進展に寄与すると認められるときは、先方の研究者を共同研究者として受け入れることができる。

第３条　共同研究者は、他の大学又は研究機関に所属する研究者であって、センターが行う共同研究者の公募に応募し、選考を経て採択された者とする。

第４条　共同研究者の受入れ期間は、１年以内とする。ただし、必要があると認められる場合は、延長を認めることができる。

第５条　共同研究者には、１年につき１０万円を上限として、センターへの旅費を支給する。

第６条　共同研究者は、センターの業務に支障のない範囲で、センター備付けの機械器具等を使用することができる。

第７条　共同研究者の服務については、特殊の事情がある場合を除き、センターの職員に準ずるものとする。

第８条　この内規に定めるもののほか、共同研究者の受入れその他に関し必要な事項は、運営委員会の議を経てセンター長が定める。

附　則

この内規は、平成２３年６月１０日から施行する。

京都大学福井謙一記念研究センター連携アドバイザー会議内規

（平成２３年７月１５日　運営委員会決定）

第１条　福井謙一記念研究センター（以下「センター」という。）に、連携アドバイザー会議（以下「会議」という。）を置く。

第２条　会議は、基礎化学に関する学外の研究機関、学会、学術団体等のコミュニティとセンターとの連携について情報及び意見の交換を行い、その在り方を検討して、センター長に提言を行うものとする。

第３条　会議は、次の各号に掲げる者で組織する。

⑴　センター長

⑵　副センター長

⑶　京都大学の専任の教員　若干名

⑷　基礎化学に関し、広くかつ高い識見を有する学外の学識経験者　若干名

２　前項第３号及び第４号の構成員は、センター長が委嘱する。

３　第１項第３号及び第４号の構成員の任期は、２年とし、再任することができる。ただし、委嘱したセンター長の任期の終期を超えることができない。

４　前項の規定にかかわらず、補欠の構成員の任期は、前任者の残任期間とする。

第４条　会議に議長を置き、構成員の互選によって選出する。

２　会議は、議長が招集する。

３　議長に事故があるときは、あらかじめ議長が指名した構成員がその職務を代行する。

第５条　会議の事務を処理するため、会議に幹事を置き、事務職員を充てる。

第６条　この内規に定めるもののほか、会議の運営に関し必要な事項は会議の議を経てセンター長が定める。

附　則

この内規は、平成２３年７月１５日から施行する。

任期制教員の再任審査に係る提出書類に関する申合せ

（平成１８年８月１１日運営委員会決定）

京都大学福井謙一記念研究センター任期制教員の再任審査に関する内規（平成１８年１０月３０日協議員会決定）第２条第２項に規定するセンター長に提出する書類は、次に掲げるものとする。

１　任期中の学術業績説明書（2000 字程度）
２　学術業績リスト（原著論文、国際会議論文集等に印刷された論文、総説、書籍類）
３　任期中の主要論文の別刷２部（論文５編程度）
４　任期中の研究及び本学、センター並びに学外への貢献、活動等に関する報告書（形式自由）
５　評価に有用なその他資料
６　再任後の研究計画書（2000 字程度）

附　記

この申合せは、平成１８年１０月３０日から実施する。

福井謙一記念研究センター博士研究員再任審査に関する申し合わせ

（平成１９年２月２３日運営委員会決定）

１．博士研究員は再任（１回限り）を希望する場合、任期満了４ヶ月前までにセンター長に以下の書類を提出し、再任希望を申し出ること。

２．再任希望の申し出があった場合、センター長は、福井センターフェロー再任審査委員会（以下「委員会」という。）を設置する。

　委員会は、センター長もしくは副センター長、１名、関連分野の運営委員、２名で構成するが、必要であれば学内外の研究者を１名加えることが出来る。委員の構成は、センター長が副センター長と協議して決める。

３．委員会は提出された書類で審査し、必要に応じて、面接あるいはインタビューを行い、再任の可否を任期満了３ヶ月前までにセンター長に報告する。

４．センター長は委員会から再任の可否の報告があった場合、直ちに、運営委員会を開催し、再任の可否を最終的に決定する。ただし、大きな問題が無いと判断される場合は、運営委員会をメール会議で開催する。

５．運営委員会で再任の可否が決定された場合、センター長はただちに本人に結果を文書で連絡する。

提出書類：

⑴　再任願い（形式自由）

⑵　履歴書（形式自由）

⑶　任期中の研究成果　本文（Ａ４）２ページ。それとは別に、研究発表（原著論文、総説、著書、学会発表など）

⑷　今後の研究計画（図、スキームなどを含め）Ａ４　１ページ。

附　則

この申し合わせは、平成１９年２月２３日から適用する。

京都大学福井謙一記念研究センターリサーチリーダー選任に関する申合せ

（平成２３年２月４日運営委員会決定）

（任務）

１．福井謙一記念研究センター(以下､｢センター｣という｡)の研究部に配置するリサーチリーダーは､卓越した研究業績と研究能力を有してセンターの顕著な研究活動を牽引しうる者であって､自身が推進する分野の研究を積極的に推し進めるにあたって研究上のリーダーシップをとり､福井謙一博士の研究理念を創造的に発展させるものとする。

（任期）

２．リサーチリーダーの任期は、５年とし、原則として再任しない。ただし、その任期の末日が、平成２５年４月１日以後となる場合については、センターの設置時限が到来する平成２５年３月３１日までとする。なお、センターは設置延長を申請する予定であり、これが認められた場合には通算で任期５年とする。

（選考方法）

３．リサーチリーダーの選考にあたっては、センター長、副センター長及び運営委員会委員のうちから互選により選出された者（若干名）から構成される予備検討委員会において適任者の人選を行う。運営委員会は、予備検討委員会における選考を経た者について可否の審議を行い、出席者の３分の２以上の同意をもって決する。

（身分）

４．リサーチリーダーは、特定研究員、有期雇用研究員又は時間雇用研究員として雇用する。

（研究部の条件）

５．リサーチリーダーが担当する研究部の研究費、研究スペース及び配置する福井センターフェローの員数は、センター長が原案を策定し、運営委員会において承認する。

附　記

この申合せは、平成２３年２月４日から実施する。

附　記

この申合せは、平成２３年２月２２日から実施する。

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の選任に関する申合せ

（平成２３年７月１５日　運営委員会決定）

（任務）

１．京都大学福井謙一記念研究センター（以下「センター」という。）のシニアリサーチフェローは、卓越した研究業績と研究能力を有する者であって、自身が担当する分野の研究を積極的に推進するとともに、センターの他の研究者との共同研究や討論によって、センターの研究の進展に貢献するものとする。

（制度の試行）

２．シニアリサーチフェローの制度は、センターの設置時限が到来する平成２５年３月３１日まで、試行として実施する。なお、センターは設置延長を申請する予定であり、それが認められた場合には、改めて本制度の在り方について検討する。

（任期）

３．シニアリサーチフェローの任期は、平成２５年３月３１日までとする。なお、センターの設置延長が認められ、かつ、本制度が存続される場合には、前項なお書きに関わらず、シニアリサーチフェローの任期は、通算で３年とし、再任しないこととする。

（選考方法）

４．シニアリサーチフェローの選考にあたっては、センター長及び副センター長を含む運営委員会委員から構成される予備検討委員会において適任者の人選を行う。運営委員会は、予備検討委員会における選考を経た者について可否の審議を行い、出席者の３分の２以上の同意をもって決する。

（身分）

５．シニアリサーチフェローは、時間雇用研究員として雇用する。ただし、本人の所属機関の事情等により、時間雇用研究員として雇用することができない場合は、本人及び所属長に対してシニアリサーチフェローの委嘱依頼を行い、その承諾を得るものとする。

（条件）

６．シニアリサーチフェローの研究費及び研究スペースは、センター長が原案を策定し、運営委員会において承認する。

附　記

この申合せは、平成２３年７月１５日から実施する。

京都大学福井謙一記念研究センターセミナー等実施要項

（平成２３年７月１５日　運営委員会決定）

１．京都大学福井謙一記念研究センター（以下「センター」という。）が主催するセミナー、研究会、ワークショップその他センターにおける研究を推進するための会議・集会（以下「セミナー等」という。）は、この実施要項に基づき実施するものとする。

２．センターの構成員（運営委員会委員、リサーチリーダー、博士研究員、国際連携研究室員、シニアリサーチフェロー、連携アドバイザー及び共同研究者をいう。）は、積極的にセミナーを企画することに努めることとする。

３．センターの構成員がセミナー等を企画するときは、セミナー等ごとに企画世話人会を設け、世話人が連携してこれに当たるものとする。

⑴　企画世話人会は、センターの構成員のうちから、若干名により構成する。

⑵　企画世話人会に座長を置き、世話人の互選によって選出する。

⑶　企画世話人会がセミナー等を企画したときは、座長からセンター長に申し出て、運営委員会の承認を得るものとする。

４．セミナー等１企画につき、旅費、印刷費、会場設営費等として、２０万円（英語により行う国際セミナーの場合は、３０万円）を上限として、センターから措置する。この措置は、１年度につき５企画程度を上限とする。

５．セミナー等は、学術団体等との共催も可能とする。

６．セミナー等の開催場所は、原則としてセンターとする。

附　記

この実施要項は、平成２３年７月１５日から実施する。

FUKUI

── その人と学問 ──

福井謙一博士記念展示コーナー

福井謙一博士は、1981年に日本人として初めてノーベル化学賞を受賞されました。
本センターでは、ノーベル化学賞受賞３０周年という節目の年に、博士の生い立ちから研究生活を通して、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を設置しました。
博士の人間としての奥行きの広さや学問への情熱を感じとっていただければと思います。

KENICHI

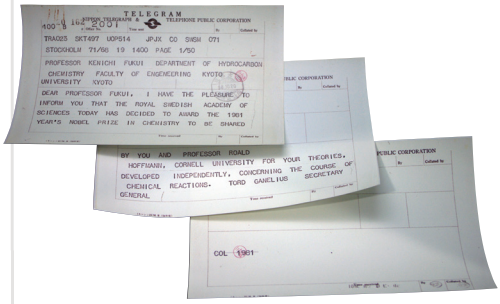
福井謙一（1918年〜1998年）
1981年ノーベル化学賞受賞

化学反応がおきるすべての仕組みが示せるような理論がなかったころ、福井謙一とロアルドホフマンは「フロンティア軌道理論」という、化学反応のほとんどをカバーできる画期的な理論を共同で導きました。この理論が全ての化学における根源的なものになりました。

ノーベル賞メダル（レプリカ）：1981 年
ノーベル賞受賞者に贈られる。
メダルの表にはアルフレッド・ノーベルの横顔、裏には自然の女神と科学の女神が刻まれている。
Nobel Prize Medal, 1981, replica

ノーベル賞賞状（レプリカ）：1981 年
メダルと同時に授与される。
受賞者一人一人に対して、異なる絵が手書きされている。
福井博士のものは、サフラン（クロッカス）である。
Nobel Prize Diploma,1981, replica

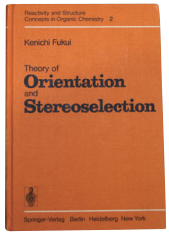
カエルの勲章（レプリカ）：1981 年
ノーベル賞受賞者時に、スウェーデンの大学生主催のパーティ席上でノーベル賞受賞者たちがカエル跳びをさせられた。そのときのご褒美。
Frog Prize Gifted by Swedish Students, 1981, replica



ノーベル化学賞授賞通知電報（コピー）：1981 年
Information Telegram for Nobel Prize in Chemistry, 1981, copy

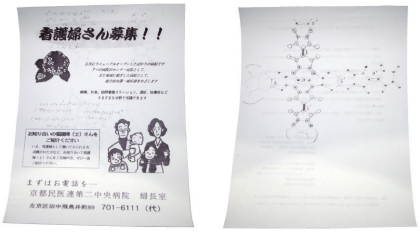
愛読書（中学時代）
ファーブル「昆虫記」（コピー）
赤鉛筆で書き込みが見える。1925 年版。
Favorite Book, Souvenirs Entomologiques, by J-H.Fabre, 1925,copy

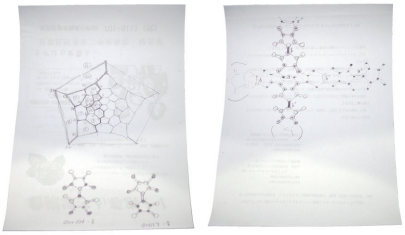
愛用の旅行用小辞書（レプリカ）
博士は語学が好きで、海外旅行のときにはこのような辞書をいつも携帯していた。
Portable Dictionaries during World Travels; replica



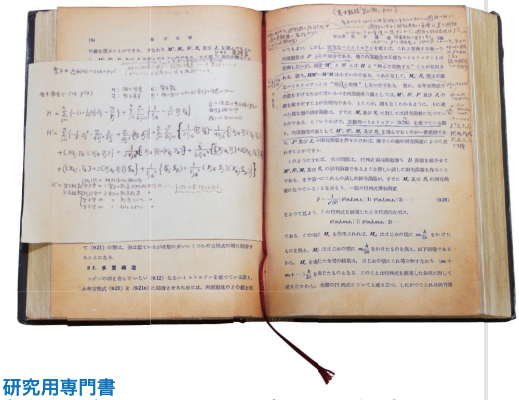
著書「Theory of Orientation and Stereoselection」（ドイツから出版）
Theory of Orientation and Stereoselection Written by K. Fukui Published in Germany

著書「化学反応と電子の軌道」
Chemical Reactions and Electron Orbitals Written by K. Fukui





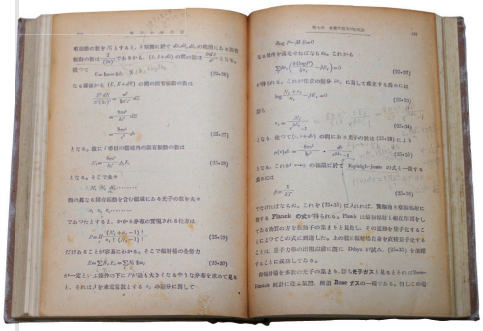
絶筆研究メモ（コピー）：1997 年
フラーレン分子の軌道相互作用の解析である。
Final Research Memo, Analysis of Orbital Interaction of Fullerenes, 1977, copy



研究用専門書
（アイリング・ウォルター・キムボール 量子化学）（コピー）
多くの書き込みメモがある。1953 年版。
Quantum Chemistry
by H. Eyring, J. Walter, and G. E. Kimball, 1953, copy

研究メモ
湯川博士「相対性理論Ⅰ」
説明用（コピー）
Research Memos for
“Theory of Relativity I”
by Dr. H. Yukawa, copy

モンロー電動式計算機
福井研究室での研究に使われた。
Monroe Electric Calculator used in Fukui’s Laboratory

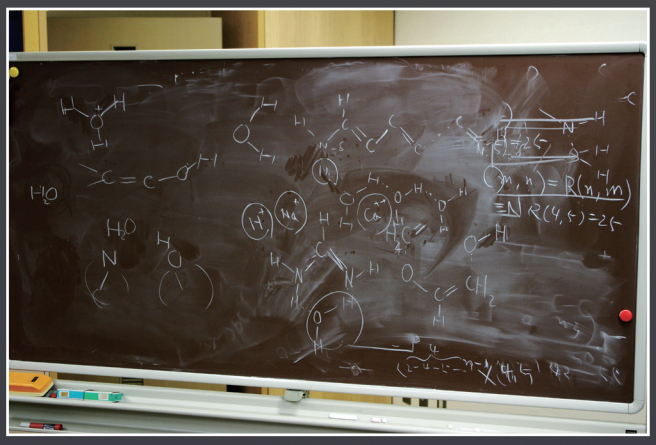


研究用専門書
（湯川秀樹 量子力学序説）（コピー）
この中の数式を誘導したものが研究メモとして残っている。
1947 年版。
Introduction to Quantum Mechanics by H. Yukawa, 1947, copy

工学博士の学位論文
「化学工業装置の温度分布に関する理論的研究」（コピー）
1948 年
Dissertation, 1948, copy

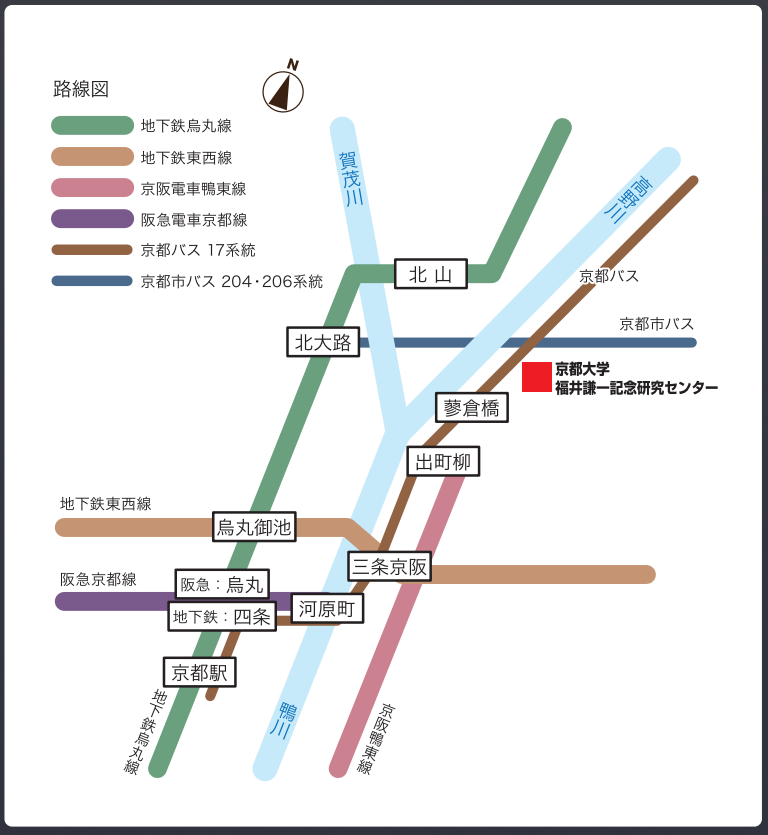
肖像切手（5 ケ国）（コピー）
福井博士の肖像をデザインした切手が各国から出ている。
Postage Stamps Featuring Dr. Fukui from Five Countries, copy

福井謙一博士記念室



博士が記述した黒板をそのまま保存している

地図



京都大学福井謙一記念研究センター

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

京都大学福井謙一記念研究センター
自己点検・評価報告書 2011

2011年12月　発行

発行人　田　中　　功

編　者　石　田　俊　正

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）エヌジーピー
（京都市右京区太秦森ヶ東町 21-10）

（無断転載を禁ず）

www.fukui.kyoto-u.ac.jp