

第 12 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム -諸熊奎治先生傘寿記念-

プログラム

日時 平成 27(2015)年 1 月 23 日 (金)
場所 京都大学福井謙一記念研究センター

講演会 (3 階大会議室 10:00~12:30)

- 開会の辞 田中 一義 (京都大学 福井謙一記念研究センター長) . . . 10:00-10:05
- ご挨拶 伊藤 紳三郎 (京都大学 工学研究科長) . . . 10:05-10:15
- 北川 進 (京都大学 物質-細胞統合システム拠点) 司会: 永瀬 茂 (福井センター)
「多孔性金属錯体の化学と応用」 . . . 10:15-11:15
- 休憩 —
- 田中 肇 (東京大学 生産技術研究所) 司会: 山本 量一 (京大院工)
「水の局所構造化と熱力学異常・結晶化におけるその役割」 . . . 11:30-12:30

— 昼休み —

傘寿記念講演 (3 階大会議室 14:00~15:00)

- 諸熊 奎治 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 司会: 榊 茂好 (福井センター)
Keiji Morokuma (Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University)
「**Chemical Theory of Complex Molecular Systems: Discovery and Insights from Computational Studies of Chemical Reactions**」 . . . 14:00-15:00

— 休憩 —

ポスターセッション (3 階大会議室 15:30~17:20)

お祝いの会・懇親会 (1 階多目的ルーム 17:30~19:00)

ポスターリスト (3 階大会議室 15:30～17:20)

- ✓ 番号が奇数の方は前半(15:30-16:25)、番号が偶数の方は後半(16:25-17:20)には、ポスターボードの前で発表するようにしてください。
- ✓ Authors with odd and even poster numbers should be present at the poster during the first half (15:30-16:25) and the second half (16:25-17:30) of the session, respectively.

1. $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n < 26$) クラスター中の水素結合ネットワークの解析

○岩田 末廣 (慶応大理工)

2. 低障壁水素結合の量子化学 ―多成分系分子理論の応用―

○立川 仁典 (横浜市大院生命ナノ)

3. 分子を対象とした第一原理経路積分分子動力学法の実装と応用

○河津 励[1,2]、立川 仁典[1] (横市大生命ナノ[1]、東大総文[2])

4. 基底関数に含まれる軌道指数を用いた解析接続法による光イオン化断面積の変分計算

森田 将人、松崎 黎、○藪下 聡 (慶大理工)

5. CS_2 光解離反応の真空紫外サブ 20fs 光電子イメージング

○堀尾 琢哉、Roman Spesyvtsev, 鈴木 俊法 (京大院理)

6. GRRM 法による未知化学の探索: H_4C_4

○大野 公一[1]、佐藤 寛子[2]、岩本 武明[1] (東北大院理[1]、国立情報学研究所[2])

7. 単成分人工力誘起反応 (SC-AFIR) 法とその応用

○前田 理[1]、原渕 佑[1]、武次 徹也[1]、諸熊 奎治[2] (北大院理[1]、京大福井セ[2])

8. New Insights in Isocyanides Multicomponent Reactions

○Romain Ramozzi and Keiji Morokuma (FIFC, Kyoto Univ.)

9. Unveiling the Essence of Pd(II)-Catalyzed $\text{C}(\text{sp}^3)\text{-H}$ Activation: Is the CMD Mechanism Still Applicable?

○Julong Jiang[1], Jin-Quan Yu[2] and Keiji Morokuma[1] (FIFC, Kyoto Univ.[1], Depart. of Chem., The Scripps Research Institute[2])

10. The Biginelli Reaction: An Organocatalyzed Multicomponent Reaction

○ Maneeporn Puripat[1,2], Romain Ramozzi[1], Miho Hatanaka[1], Vudhichai Parasuk[2,3] and Keiji Morokuma[1,4] (FIFC[1], Nanosci. & Tech. Chulalongkorn Univ.[2], Chem. Chulalongkorn Univ.[3], Chem & Emerson Center for Sci. Comp. Emory Univ.[4])

11. Glucose Transformation to 5-Hydroxymethylfurfural in Acidic Aqueous and Ionic Liquid Solvents

○ Arifin[1], Maneeporn Puripat [3], Daisuke Yokogawa[1,2], Vudhichai Parasuk[3], Stephan Irle[1,2] (Grad. School. of Sci. Nagoya Univ.[1], WPI-ITbM[2], Chula longkorn Univ. [3])

12. Exploring Full Catalytic Cycle of Rh(I)-BINAP Catalyzed Isomerization of Allylamines

○ 吉村 誠慶[1], 前田 理[2], 澤村 正也[2], 武次 徹也[2], 諸熊 奎治[3], 森 聖治[1] (茨城大理[1], 北大院理[2], 京大福井セ[3])

13. Spin-Flip Time-Dependent Density Functional Theory (SF-TDDFT) Study of TokyoMagenta (TM) and TokyoGreen (TG)

○ W. M. C. Sameera, F. Lui, S. Maeda, K. Morokuma (FIFC)

14. Theoretical Study of Excitation Energy Transfer in Thermo-Sensitive Lanthanide Luminescence Sensors

○ Miho Hatanaka, Keiji Morokuma (FIFC, Kyoto Univ.)

15. 緑色蛍光タンパク質の蛍光スペクトルに関する理論的研究

○ 内田 芳裕[1]、東 雅大[2]、林 重彦[1] (京大院理[1]、琉球大理[2])

16. hCRBP II 及びその変異体の構造とスペクトルに関する QM/MM 理論計算

○ 成 せい、神谷 基司、内田 芳裕、林 重彦 (京大院理)

17. 両親媒性有機分子の自己組織化・包接のシミュレーション

○ 田中 大地、林 重彦 (京都大学理科学研究科)

18. 海ホタルルシフェリン類縁分子の化学発光における溶媒効果に関する理論的研究

○ 福田 源大[1]、佐藤 啓文[2] (京大院工[1]、京大院工[2])

19. 電荷移動錯体の分子間相互作用に関する理論的研究

○坂本 純一[1], 佐藤 啓文[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2])

20. 分子内電荷移動反応における状態固有の溶媒和効果

○嶺澤 範行 (京大福井セ)

21. 引き伸ばされていく過渡的過程の高分子の揺らぎ

○齋藤 拓也[1]、坂上 貴洋[2] (京大福井セ[1]、九大理[2])

22. ガラス転移における構造とフラジリティの関係：レプリカ理論によるアプローチ

○栢井 基典[1]、佐藤 啓文[1,2]、池田 昌司[3] (京大院工[1]、京都大学電池元素戦略ユニット[2]、京大福井センター[3])

23. Theoretical Study on Effect of Si-bridging on Electronic Properties of Cyclooligothienylenes

○Eisuke Ohta[1,2], Takuya Ogaki[1], Toru Aoki[1], Yukiko Oda[1], Yasunori Matsui[1,2], and Hiroshi Ikeda[1,2] (Grad. Sch. of Eng., Osaka Pref. Univ. [1], RIMED, Osaka Pref. Univ.[2])

24. FMO 法における酵素 NylB と基質の残基間相互作用エネルギー変化の統計的解析

○安東 寛之[1]、馬場 剛史[1]、重田 育照[2]、渡邊 千鶴[3]、沖山 佳生[3]、福澤 薫[4]、望月 祐志[3,5]、中野 雅由[1] (阪大院・基礎工[1]、筑大院・数理[2]、東大・生産技術研[3]、日大・歯[4]、立教大・理[5])

25. BODIPY の光吸収スペクトルに関する理論的研究

○浅岡 瑞稀、宮城 公磁、竹林 拓、北河 康隆、中野 雅由 (阪大院基礎工)

26. TbPc₂ 錯体における Pc 環の回転障壁に関する理論的研究

○北河 康隆[1,4]、倉橋 裕幸[2]、加藤 恵一[3,4]、奥村 光隆[2,4]、山下 正廣[3,4]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]・阪大院理[2]・東北大院理[3]・JST CREST[4])

27. 異核遷移金属鎖におけるジラジカル因子と三次非線形光学物性の相関：金属種配列効果

○高椋 章太、北河 康隆、中野 雅由 (阪大院基礎工)

- 28. イミノニトロキシド置換メタンイミノニトロキシド-Eu(III)錯体の構造と光学物性に関する理論研究**
○中村 亮太[1]、重田 育照[2]、北河 康隆[1]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]、筑波大院理工[2])
- 29. チアジラジカル多量体における開殻一重項性と第二超分極率に関する理論研究**
○松井 啓史、福田 幸太郎、伊藤 聡一、南田 有加、中野 雅由 (阪大院基礎工)
- 30. ピラゾール架橋 2 核銅(II)錯体の電子状態と磁氣的相互作用に関する理論的研究**
○宮城 公磁、浅岡 瑞稀、竹林 拓、北河 康隆、中野 雅由 (阪大院基礎工)
- 31. 1,4-ジラジカル化合物の電子構造と光応答特性についての理論研究**
○森田 啓介、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)
- 32. 1,3-ジラジカル化合物の電子励起および光応答特性についての理論研究**
○齋藤 真和、岸 亮平、森田 啓介、中野 雅由 (阪大院基礎工)
- 33. C₆₀ 部分骨格としての曲面縮環 π 共役系：開殻非線形光学物性の視点から**
○福田 幸太郎、南田 有加、中野 雅由 (阪大院基礎工)
- 34. 単分子の伝導性に対するスピン分極の効果についての理論的研究**
○竹林 拓[1]、北河 康隆[1]、重田 育照[2]、奥村 光隆[3]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]、筑大院数理[2]、阪大院理[3])
- 35. コラスレン骨格を含む非局在開殻一重項曲面型 π 共役系の開殻性と非線形光学効果**
○南田 有加[1]、福田 幸太郎[2]、中野 雅由[2] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2])
- 36. Multistep Reconstructions of Half-saturated Carbon Nanotubes**
○Wei-Wei Wang and Shigeru Nagase (FIFC, Kyoto Univ.)
- 37. Theoretical Study on Reaction of 1,2-Diarylgermyne with Acetylene**
○Jing-Dong Guo and Shigeru Nagase (FIFC, Kyoto Univ.)
- 38. キノイド構造と芳香族構造をそれぞれ有する分子ユニットからなる分子ワイヤにおける電子トンネリング効率に関する計算化学的研究**
○西澤 尚平[1]、長谷川 淳也[2]、松田 建児[1] (京大院工[1]、北大触セ[2])

39. Theoretical Design of Fluorescent Triphenylamine Derivative Based on Reduced Vibronic Coupling

○ Yuichiro Kameoka[1], Masashi Uebe[1], Akihiro Ito[1], Tohru Sato[1,2], and Kazuyoshi Tanaka[1] (Grad. School of Eng. Kyoto Univ.[1], ESICB, Kyoto Univ.[2])

40. Molecular Structures of Polyene-Iodine Complexes

○ Dai Nagashima[1], Tohru Sato[1,2], Naoya Iwahara[1], Kazuyoshi Tanaka[1], Yoriko Wada[3] and Tomonari Wakabayashi[3] (Grad. School. of Eng. Kyoto Univ [1], ESICB, Kyoto Univ. [2], Grad. School. of Sci. & Eng. Kinki Univ [3])

41. Hellmann-Feynman Theorem and Vibronic Coupling Density in Degenerate System

○ Naoki Haruta[1], Tohru Sato[1,2] and Kazuyoshi Tanaka[1] (Kyoto Univ.[1], ESICB, Kyoto Univ.[2])

42. ポリイン分子の禁制遷移およびビスマス三量体の電子遷移に関する研究

○ 若林 知成[1]、和田 資子[2]、森澤 勇介[1]、佐藤 徹[3] (近大理工[1]、関学大理工[2]、京大院工[3])

43. ヨウ素導入ドナー分子 EDO-TTF-I の陽イオンラジカル塩作製とその物性

○ 中野 義明[1]、高橋 佑輔[1,2]、石川 学[1]、矢持 秀起[1]、売市 幹大[3] (京大低物セ[1]、京大院理[2]、分子研[3])

44. 縮退軌道を有する分子系におけるヤーン・テラー歪み、および電子状態に関する理論的研究

○ 大江 佳毅[1,2]、中野 義明[1]、高橋 佑輔[1,2]、大塚 晃弘[1]、矢持 秀起[1]、吉田 幸大[3]、齋藤 軍治[3]、Dmitri V. Konarev[4]、Rimma N. Lyubovskaya[4] (京大低物セ[1]、京大院理[2]、名城大農[3]、ロシア科学アカデミー[4])

45. (EDO-TTF-Cl)₂PF₆ における gapped spin-liquid 状態発現の可能性

○ 石川 学[1,5]、平松 孝章[1,5]、中野 義明[1]、前里 光彦[2]、大塚 晃弘[1]、売市 幹大[3]、薬師 久彌[4]、矢持 秀起[1]、齋藤 軍治[5] (京大低物セ[1]、京大院理[2]、分子研[3]、豊田理研[4]、名城大農[5])

46. ルドルスデン - ポッパー型層状酸化物 NaRTiO_4 における酸素八面体回転による反転対称性の破れ

○松原 司[1]、藤田 晃司[1]、久家 俊洋[1]、田中 功[1]、田中 勝久[1]、東後 篤史[2]、赤松 寛文[3]、Arnab S. Gupta[3]、Venkatraman Gopalan[3] (京大院工[1]、京大学際融合研究推進セ[2]、ペンシルベニア大[3])

47. 結晶中における $\text{Ru(II)}\text{-SO}_2$ 錯体の異性化反応：配位子および結晶分子効果

○青野 信治、榊 茂好 (京大福井セ)

48. スピントスオーバーを示す Co(II) 錯体の電子状態と結晶内分子間相互作用

○中垣 雅之、青野 信治、榊 茂好 (京大福井セ)

49. 分子軌道理論とバンド理論のハイブリッド計算手法による金属担持触媒の金属…表面間相互作用の研究

○松井 正冬[1]、榊 茂好[1,2] (京大 ESICB[1]、京大福井セ[2])

50. 計算化学による L-アスコルビン酸の酸化の素過程の追跡

○山邊 信一[1]、土田 敦子[2]、山崎 祥子[3]、榊 茂好[1] (京大福井セ[1]、埼玉医科大医[2]、奈良教育大教育[3])

51. プロトン還元活性を示す Ni(II) 錯体による触媒反応機構に関する理論的研究

○山田 健太、榊 茂好 (京大福井セ)

52. C-H Alkylation of Alkenes with Alcohols Catalyzed by a Cationic Ru(II) Hydride Complex: A Theoretical Study

○Guixiang Zeng[1], Satoshi Maeda[1], Tetsuya Taketsugu[1], and Shigeyoshi Sakaki [2] (Depart. of Chem. Hokkaido Univ.[1], FIFC[2])

53. Reaction Mechanism of $[\text{Ni}(\text{NHC})]$ -Catalyzed Olefin Hydroarylation through C-H Activation: A Computational Study

○Shuwei Tang and Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)

54. Theoretical Study on the H_2 and X-H bond Activation by Mo-Mo quintuple bond

○Yue Chen and Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)

55. Theoretical Study on Crowded Organometallic Fullerene $C_{60} \{(h^5-C_5H_5)Ru(CO)_2\}_2$

○Hong Zheng and Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)