

第 13 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム プログラム

日時 平成 28(2016)年 2 月 5 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 10:00~15:00)

- 開会の辞 赤木 和夫 (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
- 田中 一義 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 司会 : 永瀬 茂 (福井センター)
「発光性分子材料の理論化学的設計」 . . . 10:15-11:15

— 休憩 —

- 西森 秀稔 (東京工業大学 大学院理工学研究科) 司会 : 佐々 真一 (京大院理)
「量子アニーリング理論と D-Wave マシン」 . . . 11:30-12:30

— 昼休み —

- 永谷 清信* (京都大学 大学院理学研究科) 司会 : 池田 昌司 (福井センター)
「X 線自由電子レーザーとの付き合い方」 . . . 14:00-15:00
*八尾誠先生のご都合により、永谷清信先生に同内容でご代講いただく事になりました。

— 休憩 —

ポスターセッション (3 階大会議室 15:30~17:20)

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. 密度行列繰込み群による鉄-硫黄クラスターの構造および電子状態に関する理論的研究
○中谷 直輝、長谷川 淳也 (北大触媒研)
2. **Computational Investigation of the Structural Dependence of Switching Efficiency of Exchange Interaction and Hyperpolarizability on Diarylethenes**
○西澤 尚平[1]、Arnaud Fihey[2]、Denis Jacquemin[2]、長谷川 淳也[3]、松田 建児[1] (京大院工[1]、ナント大 CEISAM[2]、北大触セ[3])
3. 有限温度における分子運動エネルギーの同位体効果
○河津 励[1,2]、立川 仁典[2] (分子研[1]、横市大院生命ナノ[2])
4. 金属-炭素結合の開殻性と三次非線形光学特性についての研究
○高椋章太、永海貴識、岸亮平、北河康隆、中野雅由 (阪大院基礎工)
5. インデノフルオレン系の開殻性、芳香族性、非線形光学物性に関する理論研究
○福田 幸太郎、藤吉 純也、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)
6. 一次元シリコン鎖の第二超分極率における開殻性と σ/π 共役の効果
○松井 啓史、福田 幸太郎、伊藤 聡一、藤吉 純也、永海 貴識、泉 志旺、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)
7. 開殻性を持つフェナレニルラジカル二量体の二光子吸収特性に関する理論研究
○松下 尚之、福田 幸太郎、伊藤 聡一、松井 啓史、藤吉 純也、永海 貴識、泉 志旺、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)

8. 高効率シングレットフィッシュョンを示すペロピレン分子配置の量子化学計算に基づく探索
○永海貴識[1]、伊藤聡一[1]、久保孝史[2]、中野雅由[1] (阪大院基礎工[1]、阪大院理[2])
9. 無置換 boron-dipyrromethene(BODIPY)と亜鉛ジピリン錯体の光物性に関する理論的研究
○浅岡瑞稀、西久保玲奈、宮城公磁、竹林拓、北河康隆、中野雅由 (阪大院基礎工)
10. ニコチンアミドの酸化還元における理論研究
○西久保玲奈、浅岡瑞稀、北河康隆、中野雅由 (阪大院基礎工)
11. TbPc2 錯体の安定および準安定構造に関する理論研究
○北河康隆、浅岡瑞稀、宮城公磁、西久保玲奈、中野雅由 (阪大院基礎工)
12. カテコール-キノン会合体の開殻性と第二超分極率の相関についての理論研究
○泉 志旺、永海 貴識、藤吉 純也、伊藤 聡一、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)
13. 直線状縮合多環炭化水素系の開殻性と誘導電流密度異方性の相関に関する理論研究
○藤吉純也、福田幸太郎、永海貴識、岸亮平、北河康隆、中野雅由 (阪大院基礎工)
14. 実在コラヌレン骨格を含む開殻一重項 π 共役系の非線形光学効果に関する理論的研究
○南田有加、福田幸太郎、松井啓史、永海貴識、藤吉 純也、岸亮平、中野雅由 (阪大院基礎工)
15. ニトロベンゼンのアニリンへの還元の経路の追跡
○山邊 信一、山崎 祥子 (奈良先端大、奈良教育大)
16. Theoretical study of the Zn-catalyzed aqueous Aldol reaction
○Miho Hatanaka[1] (Faculty of Sci. and Eng. Kindai Univ. [1])
17. β -ジケトン型配位子を持つ Eu 錯体の発光強度の温度依存性に関する理論的研究
○辻 佑樹[1]、畑中 美穂[1] (近大理工[1])
18. Eu 錯体の補助配位子と発光量子収率の関係
○田中 孝幸[1]、畑中 美穂[1] (近大理工[1])

19. 熱流に誘起された力をめぐって

○伊丹将人、佐々真一（京都大学）

20. Driven Anomalous Diffusion in Polymer Stretching

○Takuya Saito[1] and Takahiro Sakaue[2]（FIFC[1], Kyushu Univ.[2]）

21. アモルファス固体における弾性不均一性と熱伝導率

○水野 英如（京大福井セ）

22. 時間依存密度汎関数強束縛（TD-DFTB）法に関する理論開発

○西本 佳央（京大福井セ）

23. Construction of basis sets of 3d transition metals (Sc-Zn) for F12 explicitly correlated method

○伊勢川 美穂[1]、Robert Izsak、Dimitrios A. Pantazis、Frank Neese（京大福井セ[1]、マックスプランク研究所・化エ変換[2]）

24. Theoretical Studies of Alkali Metal-Graphite Intercalation Compounds

○Wataru Ota, Maxim Shishkin and Hirofumi Sato（京大院工）

25. 分子シミュレーションによる ADP/ATP 輸送体の交互アクセス機構の原子論的解明

○田村 康一、林 重彦（京大院理）

26. 水溶性レチナール結合タンパク質の色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）

27. XFEL を用いたヨウ化ウラシルの多価イオン化と電荷ダイナミクスの実験的観測

○永谷 清信[1,2]、本村 幸治[3]、和田 真一[2,4]、福澤 宏宣[2,3]、大村 訓史[5]、立花 徹也[3]、伊藤 雄太[3]、Mondal Subhendu[3]、古賀 亮介[4]、松波 健司[1]、酒井 司[1]、Kukk Edwin[6]、高橋 優祐[7]、菅野 学[7]、Rudenko Artem[8]、Nicolas Christophe[9]、Liu XiaoJing[9]、Miron Catalin[9]、Zhang Yizhu[10]、Jiang Yuhai[10]、Chen Jianhui[11]、Mailam Anand[12]、Kim Don Eon[12]、登野 健介[13]、矢橋 牧名[2]、河野 裕彦[7]、八尾 誠[1]、上田 潔[2,3]（京大院理[1]、理研放射光センター[2]、東北大多元研[3]、広島大院理[4]、広島工大[5]、University of Turku[6]、東北大院理[7]、Kansas State University[8]、Synchrotron Soleil[9]、SARI CAS[10]、SINAP CAS[11]、POSTECH[12]、JASRI[13]）

28. SACLA のシングルショット X 線回折による単一クラスターの形状解析

○西山 俊幸 [1]、Bostedt Christoph[2]、Ferguson Kenneth R.[2]、Hutchison Christopher[1]、永谷 清信[1,3]、福澤 宏宣[3,4]、本村 幸治[4]、和田 真一[3,5]、酒井 司 [1]、松波 健司[1]、立花 徹也[4]、伊藤 雄太[4]、Xu Weiqing[4]、Mondal Subhendu[4]、梅本 嵩之[5]、Nicolas Christophe[6]、Miron Catalin[6,7]、亀島 敬[8]、城地 保昌[8]、登野 健介[8]、初井 宇記[3]、矢橋 牧名[3]、上田 潔[3,4]、八尾 誠[1] (京大院理[1]、SLAC National Accelerator Laboratory[2]、理研 RSC[3]、東北大多元研[4]、広大院理[5]、Synchrotron SOLEIL[6]、ELI-NP[7]、JASRI[8])

29. ルドルスデン-ポッパー相 AgRTiO_4 における酸素八面体回転による反転対称性の破れ

○吉田 傑[1]、藤田 晃司[1]、久家 俊洋[1]、赤松 寛文[2]、Arnab Sen Gupta[2]、Venkatraman Gopalan[2]、田中 勝久[1] (京大院工[1]、ペンシルバニア州立大学[2])

30. QM/MM 法による Ru(II)-SO₂ 錯体の結晶内異性化反応の理論的研究

○青野 信治、榊 茂好 (京大福井セ)

31. Embedded cluster model を用いた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])

32. Gas Adsorption into Porous Coordination Polymers Consisting of Cu Paddle-Wheel Units: Theoretical Investigation of the Interaction between Gas Molecule and Organic Ligand

○Jia-Jia Zheng[1,2]、Ryotaro Matsuda[2]、Susumu Kitagawa[2] and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1]、WPI-iCeMS[2])

33. Sigma-Bond Activation by New Nickel(0) Complex with Z-type Aluminum Ligand: Theoretical Study

○Nishamol Kuriakose[1]、Shigeyoshi Sakaki[1]、Teruhiko Saito[2]、Yoshiaki Nakao [2] (FIFC [1]、Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2])

34. Reaction mechanism of silylene coordinated Mo and W complexes :Product selectivity for metals and solvents

○Masayuki Nakagaki[1]、Takako Muraoka[2]、Keiji Ueno[2] and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1]、School of Science and Technology, Gunma Univ.[2])

35. Characteristic Features of Transmetallation of Pd(II)-Ph Complex with Cu(I)-alkyl Complex: Theoretical Study

○Hong Zheng[1], Kazuhiko Semba[2], Yoshiaki Nakao[2] and Shigeyoshi Sakaki[1]
(FIFC[1], Department of Material chemistry. Kyoto Univ.[2])

36. $\text{Cu}_{38-n}\text{M}_n$ 金属微粒子の構造、電子状態、及び吸着特性に関する理論研究(M = Ru, Rh, Pd, Ag, Os, Ir, Pt, Au; n = 0, 1, 2, 6)

○高木 望[1]、石村和也[2]、松井正冬[1]、福田良一[1,2]、江原正博[1,2]、榊 茂好[1,3]
(京大 ESICB[1]、分子研[2]、京大福井セ[3])

37. Reactivity of Biomimetic Model Complexes for [NiFe] Hydrogenase: Density Functional Theory and Artificial Force-Induced Reaction Study

○W. M. C. Sameera[1], Yasuhiro Ohki[2], Zilong Li, Kazuyuki Tatsumi[2], and Keiji Morokuma[1] (FIFC[1], Grad. School. of Sci. and Research Center for Materials Science, Nagoya Univ.[2])

38. Computational Insights on the Mechanism and the Origin of Enantioselectivity in Fe-Catalyzed Cross-Coupling Reaction

○A. K. Sharma [1], W. M. C. Sameera [1], M. Nakamura [2] and K. Morokuma [1] (FIFC [1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ. [2])

39. Computational study on the photochemistry of (Z)-4,4-difluorobut-2-enal: Norrish type II reaction vs cis-trans isomerization

○Pedro J. Castro and Keiji Morokuma (FIFC)

40. A density functional study of the Addition Reactions Between $\text{L}_4\text{M}(\text{M}=\text{Rh}, \text{Ir}), \text{L}_2\text{M}(\text{M}=\text{Pd}, \text{Pt})$ fragments and Endohedral Fullerene ($\text{Li}^+@\text{C}_{60}$)

○Ming-Chung Yang[1], W.M.C Sameera[2], Keiji Morokuma[2] and Ming-Der Su[1,3]
(Department of Applied Chemistry, National Chiayi University[1]、FIFC[2]、Department of Medicinal and Applied Chemistry, Kaohsiung Medical University[3])

41. Theoretical Insight into Aggregation Induced Emission in bis(alkylamino)anthracene

○鈴木聡、諸熊奎治 (京大福井センター)

42. Theoretical study on ring opening and closing mechanism of diarylethene derivatives

○ Kimichi Suzuki[1], Satoshi Suzuki[2], Satoshi Maeda[1], and Keiji Morokuma[2]
(Hokkaido University[1], FIFC[2])

**43. 共役ポリマーとキラルネマチック液晶を組み合わせた選択反射による白色円偏光
Chiral resolution affording white circularly polarized light with tuned handedness through selective reflection**

○大田冬木、閻家林、赤木和夫（京大院工）

44. キラル液晶場での光架橋重合によるヘリカルネットワークポリマーの合成とキラルテンプレートへの応用

Synthesis of Helical Network Polymers by Photo-crosslink Polymerization in Chiral Liquid Crystal Field and Their Application to Chiral Templates

○稲垣拓也、朴珍旻、赤木和夫（京大院工）

45. キラルおよびラセミ芳香族共役系ポリマー間でのヘリカル積層 π - π 相互作用に基づくキラリティ転写 (Chirality Transfer through Interchain Helically π -Stacking Interactions between Chiral and Racemic Aromatic Conjugated Polymers)

○野津 賢祐、渡辺 和誉、赤木 和夫（京大院工）