

# 第15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 2018年2月2日(金) 10:00~19:00

場所 京都大学 福井謙一記念研究センター

### 開会式 (Opening) : 3階大会議室

---

[開会の辞] 田中 勝久 (京都大学 福井謙一記念研究センター長) 10:00 – 10:05

[ご挨拶] 北村 隆行 (京都大学 工学研究科長) 10:05 – 10:15

### 講演会 (Lecture Session) : 3階大会議室

---

● 佐々 真一 (京都大学 大学院理学研究科) 10:15 – 11:15

「気液転移と熱伝導が会合するとき：19世紀科学から21世紀科学への展開」

座長：古賀 毅 (京大院工)

● 北浦 和夫 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 11:30 – 12:30

「The Group Molecular Orbital Method For Large Molecular Systems」

座長：永瀬 茂 (福井センター)

— 昼食 —

● 幾原 雄一 (東京大学 大学院工学系研究科) 13:50 – 14:50

「原子直視 STEM 法の新展開と材料科学への応用」

座長：田中 功 (京大院工)

### 「福井謙一奨励賞」表彰式 (Ceremony of Kenichi Fukui Encouragement Award) :

3階大会議室

15:00 – 15:30

受賞者：越智 正之 (大阪大学 大学院理学研究科)

「第一原理波動関数理論の固体への展開：量子化学と固体電子論の融合」

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

15:30 – 17:20

### 懇親会 (Banquet) : 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. 遷移金属錯体の内殻イオン化・内殻励起スペクトルに関する理論的研究

○中谷 直輝 (首都大院理工)

### 2. Random matrix theory in proteogenesis

○山中 雅則 (日大理工)

### 3. Stereoselective isomerization of eugenol to trans-isoeugenol catalyzed by Ni(0) phosphines: experimental and theoretical studies

(Chemistry Department, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung[1], ITbM[2]) Yessi Permana[1], ○Arifin[2], Leo Saputra[1], Nunik Gustini[1], Stephan Irle[2], Aep Patah[1], and Muhamad A. Martoprawiro[1]

### 4. 高次三重項状態からの逆系間交差を利用した新規有機 EL 素子の設計指針

○佐藤 徹[1,2]、林 里香[3]、春田 直毅[1]、夫 勇進[4,5] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大工[3]、山形大院理工[4]、JST さきがけ[5])

### 5. 福井謙一生涯百年記念事業のご紹介とフロンティア軌道に関連した展示物の準備

○西本 佳央 (京大福井セ)

### 6. Deformable swimmers in Poiseuille flow

○Mitsusuke Tarama (FIFC)

### 7. The difference between the heat-induced forces of the Soret effect and the adiabatic piston problem

○Masato Itami[1] and Shin-ichi Sasa[2] (FIFC[1], Dept. of Phys. Kyoto Univ.[2])

### 8. Cell Colony Growth

○Simon K. Schnyder[1], John J. Molina[2], and Ryoichi Yamamoto[2] (FIFC[1], Grad. School of Eng., Kyoto Univ.[2])

**9. 理論的観点から見た凝集誘起発光**

○鈴木 聡、諸熊 奎治 (京大福井セ)

**10. 結晶・溶媒中における五配位四角錐型コバルトサレン錯体の混合原子価電子状態と吸収スペクトル**

○青野 信治、中垣 雅之、榊 茂好 (京大福井セ)

**11. Theoretical Study on the Mechanism of Phosphorane-Trihydroborate Reaction with Methyl Iodide**

○Akhilesh Kumar Sharma[1], Miho Isegawa[1,2], Keiji Morokuma[1], N. J. O'Brien[3], and Naokazu Kano[3] (FIFC[1], Kyushu Univ.[2], Univ. of Tokyo[3])

**12. The potential energy surfaces of emission decay of a type of platinum(II) cyclometalated complexes**

○Xuefeng Ren and Keiji Morokuma (FIFC)

**13. ルイス塩基安定化シリレン分子を用いた Si-H 結合の可逆的酸化的付加/還元的脱離反応の機構解明と制御**

○中垣 雅之[1]、Antoine Baceiredo[2]、加藤 剛[2]、榊 茂好[1] (京大福井セ[1]、トゥールーズ大へテロ化研[2])

**14. Theoretical Understanding of Segregation Behavior and Electronic Structure of 55 and 147-atom PtTc and PtRe Nanoclusters**

○Jing Lu[1], Kazuya Ishimura[2], and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], IMS[2])

**15. How to control Ar-NO<sub>2</sub> bond activation and Ar-NO<sub>2</sub> bond formation**

○Rong-Lin Zhong[1], Masahiro Nagaoka[2], Myuto Kashihara[2], Yoshiaki Nakao[2], and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2])

**16. Theoretical Study on C<sub>4</sub>-Hydrocarbon Adsorption and Separation by a Soft Porous Coordination Polymer**

○Jia-Jia Zheng[1,2], Shinpei Kusaka[2], Ryotaro Matsuda[2], Susumu Kitagawa[2], and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], KUIAS-iCeMS, Kyoto Univ.[2])

**17. Photocatalytic cycle of water splitting with small manganese oxides and water clusters as source of oxygen molecules**

○Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka (FIFC)

**18. Flux analysis on nonadiabatic chemical dynamics**

○Rei Matsuzaki and Kazuo Takatsuka (FIFC)

**19. CaO-SiO<sub>2</sub> 融液におけるソレー効果解明への分子動力学計算によるアプローチ**

○清水 雅弘、下間 靖彦、三浦 清貴 (京大院工)

**20. メチル化ポリロタキサン水溶液の熱誘起ゲル化に関する理論的研究**

○小島 広之、古賀 毅 (京大院工)

**21. 円盤状粒子/高分子混合ネットワークの構造と力学物性に関する分子シミュレーション**

○古谷 勉、古賀 毅 (京大院工)

**22. 会合性高分子のゲル化の分子シミュレーション：分子内会合と分子間会合の競合**

○柴田 基樹、古谷 勉、古賀 毅 (京大院工)

**23. D-B-A 型分子の電子カップリングに対する架橋部分の影響の評価**

○由本 美香[1]、中農 浩史[2,3]、佐藤 啓文[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3])

**24. 電極-電解液界面における酸化還元反応を扱うための新規方法論開発**

○松三 勇介[1]、中農 浩史[1,2]、佐藤 啓文[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2])

**25. 分子センシングに向けた酸化インジウムスズと金粒子アレイにおける表面増強赤外吸収**

○鎌倉 涼介[1]、村井 俊介[1,2]、藤田 晃司[1]、田中 勝久[1] (京大院工[1]、JST さきがけ[2])

**26. 層状ペロブスカイト酸化物における間接型強誘電性**

○吉田 傑[1]、藤田 晃司[1]、赤松 寛文[2]、Olivier Hernandez[3]、Arnab Sen Gupta[4]、Alexandra S. Gibbs[5]、辻 涼介[1]、Venkatraman Gopalan[4]、田中 勝久[1] (京大院工[1]、九大院工[2]、レンヌ第一[3]、ペンシルバニア州立大[4]、ラザフォード・アップルトン研[5])

**27. Theoretical Study on Substrate and Inhibitor of HIV-1 protease**

○Masahiko Taguchi, Masahiro Kaneko, and Shigehiko Hayashi (Grad. Sch. of Sci. Kyoto Univ.)

**28. 光誘起チャネルロドプシンに関する理論研究**

○成 せい[1]、神谷 基司[1]、吉田 紀生[2]、林 重彦[1] (京大院理[1]、九大院理[2])

**29. アルキルπピレン液体発光特性の理論的研究**

○山本 裕生[1]、中西 尚志[2]、林 重彦[1] (京大院理[1]、NIMS[2])

**30. コアシェル型混合金属微粒子  $\text{Cu}_{32}\text{Ru}_6$  による NO-CO 反応の理論研究～ $\text{Cu}_{38}$  との比較**

○高木 望[1]、石村 和也[2]、福田 良一[1]、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])

**31. 遷移金属担体の埋め込みクラスターモデルの構築**

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

**32. 溶媒和自由エネルギーの新しい表式とタンパク質の構造安定性への適用**

○丸山 豊[1]、光武 亜代理[2] (理研 AICS[1]、慶應大理工[2])

**33. Optimizing conical intersections by particle-particle random phase and Tamm-Dancoff approximations**

○嶺澤 範行 (理研 AICS)

**34. シクロオクタテトラエンを導入した一次元共役縮環系の構造と電子状態の理論研究**

○西垣 佑亮、高椋 章太、山根 将暉、當波 孝凱、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)

**35. ペンタセン二量体における三次非線形光学特性のスピ状態及び分子配向依存性についての理論研究**

○當波 孝凱、永海 貴識、山根 正暉、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)

**36. Push-pull-biphenyl (PPB) の開殻性及び電荷移動性のねじれ角依存性に関する理論研究**

○北野 奨実[1]、山根 正暉[1]、當波 孝凱[1]、岸 亮平[1]、平尾 泰一[2]、久保 孝史[2]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]、阪大院理[2])

**37. スマネン縮合アセンのシングレットフィッシュンについての理論研究**

○渡邊 健一郎[1]、永海 貴識[1]、當波 孝凱[1]、伊藤 聡一[2]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])

**38. 螺旋骨格を有する開殻分子の非線形光学物性および分子アクチュエーター機能**

○高椋 章太、中野 雅由 (阪大院基礎工)

**39. Pyridinium *N*-phenoxide betaine とその誘導体の開殻性と非線形光学特性の理論研究**

○渡部 晃希[1]、北野 奨実[1]、山根 正暉[1]、當波 孝凱[1]、清水 章弘[1]、吉田 潤一[2]、岸 亮平[1]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]、京大院工[2])

**40. テリレンのシングレットフィッションにおける分子間相互作用に関する理論研究**

○永海 貴識[1]、伊藤 聡一[2]、久保 孝史[3]、中野 雅由[1,4] (阪大院基礎工[1]、分子研[2]、阪大院理[3]、阪大 CSRN[4])

**41. Mn(III)ダイマー錯体の分子内磁氣的相互作用に関する理論研究**

○北河 康隆[1]、加知 千裕[2]、宮坂 等[3]、中野 雅由[1] (阪大院基礎工[1]、東邦大理[2]、東北大金研[3])

**42. ナノベルト系の一重項開殻性と第二超分極率の理論研究**

○山根 正暉、岸 亮平、中野 雅由 (阪大院基礎工)

**43. Ab initio free-energy calculations on reactions of carbon dioxide with aqueous amine compounds**

○Yoshiyuki Kubota[1] and Tomáš Bučko[2,3] (Kansai Electric Power Co.[1], Comenius Univ. Bratislava[2], Slovak Acad. Sci.[3])

**44. 不斉希土類  $N,N'$ -ジオキソド誘導体を触媒とするマイケル付加反応の立体選択性発現機構の解明**

○宮崎 文[1]、畑中 美穂[1,2,3] (奈良先端大物質創成[1]、奈良先端大研究推進・データセンター[2]、JST さきがけ[3])

**45. 不斉トリアゾリウム塩を触媒とする開環アルキル化における立体選択性発現機構の解明**

○鎌田 安奈[1]、畑中 美穂[1,2,3] (奈良先端大物質創成[1]、奈良先端大研究推進・データセンター[2]、JST さきがけ[3])

**46. Theoretical study on palladium(0)-catalyzed intramolecular cyclization: formation of  $\delta$ -lactam**

○Takayoshi Yoshimura[1], Yohei Ogiwara[2], Norio Sakai[2], and Miho Hatanaka[1,3] (NAIST[1], Tokyo Univ. of Science[2], JST Presto[3])

**47. 2Fe-2S ferredoxin 活性中心の電子状態と水素結合に関する理論研究**

○江良 伊織、名取 圭紀、寺本 玲奈、青木 笙悟、多田 隼人、北河 康隆、中野 雅由 (阪大基礎工)

**48. クロムおよびモリブデン二核錯体の単分子電気伝導性に関する理論研究**

○多田 隼人、名取 圭紀、寺本 玲奈、青木 笙悟、江良 伊織、北河 康隆、中野 雅由 (阪大基礎工)

**49. ビス(ジピリナト)錯体における中心金属イオン種がフロンティア軌道に与える影響についての理論研究**

○青木 笙悟、名取 圭紀、北河 康隆、中野 雅由 (阪大基礎工)