

第17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 2020年1月31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] 佐藤 啓文 (京都大学 福井謙一記念研究センター長) 10:00 – 10:05

[ご挨拶] 大嶋 正裕 (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

● 榊 茂好 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 10:15 – 11:15

「d電子複合系の理論化学：孤立分子から分子性結晶へ」

座長：永瀬 茂 (福井センター)

● 渡邊 一也 (京都大学大学院 理学研究科) 11:30 – 12:30

「界面・微小共振器中における励起状態ダイナミクス」

座長：春田 直毅 (福井センター)

— 昼食 —

● 西原 寛 (東京大学大学院 理学系研究科) 13:50 – 14:50

「有機・無機二次元物質「配位ナノシート」」

座長：佐藤 徹 (福井センター)

「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：西本 佳央 (京都大学 福井謙一記念研究センター)

「高精度計算と大規模計算の発展 – 解析的エネルギー微分の視点から」

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 (16:25-17:20) of the session, respectively.

1. 第一原理計算による Eu を導入したペロブスカイト化合物の電子構造評価

○鈴木 厚志、奥 健夫 (滋賀県大工)

2. 三元触媒 Pd/SrTiO₃ のスラブおよびクラスターモデルの構築

○安間 洋太[1,2]、大田 航[2,3]、細川 三郎[3,4]、寺村 謙太郎[3,4]、田中 庸裕[3,4]、佐藤 徹[2,3,4] (京大工[1]、京大福井セ[2]、京大院工[3]、京大 ESICB[4])

3. ジベンゾフェナジンのメカノケミカル合成における特異な反応経路の発現メカニズム

○春田 直毅[1,2,3]、Paulo Filho Marques de Oliveira[4]、Alain Chamayou[4]、佐藤 徹[1,2,3]、田中 一義[1,2]、Michel Baron[4] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、アルビ国立高等鉱業学校[4])

4. フェノキサジン-トリフェニルトリアジン誘導体を用いた OLED における高効率 EL 機構: 高次三重項経由蛍光

○伊藤 俊介[1]、上島 基之[2]、佐藤 徹[1,2,3] (京大院工[1]、京大福井セ[2]、京大 ESICB[3])

5. ジフェニルフルベンとマレイミドのメカノケミカル反応における立体選択性の起源

○伊奈 稚菜[1,2]、ゴネ ロリ[3]、春田 直毅[1,2,4]、佐藤 徹[1,2,4]、バロン ミシエル[3] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、アルビ国立高等鉱業学校[3]、京大 ESICB[4])

6. Effective Sampling on Initiator Model Space Quantum Monte-Carlo Method

○Motoyuki Uejima[1], Seiichiro L. Ten-no[1,2] (Science, Technology, and Innovation[1] and System Informatics[2], Kobe Univ.)

7. 分子における相対論的動力学理論の研究

○花崎 浩太、高塚 和夫 (京大福井セ)

8. [Pt(dien)(dmap)]₂I₃ の結晶中の電子構造及び吸収スペクトルに関する理論的研究

○中垣 雅之[1]、井口 弘章[2]、Unjila Afrin[2]、山下 正廣[2]、榊 茂好[1] (京大福井セ[1]、東北大院理[2])

9. 多参照摂動理論を用いた円錐交差の計算

○西本 佳央 (京大福井セ)

10. Collective motion and cell migration of cells on a substrate

○Simon K. Schnyder (FIFC, Kyoto Univ.)

11. 円錐交差に注目した合理的分子設計による発光性制御

○鈴木 聡 (京大福井セ)

12. Theoretical Study on Catalytic Mono-Alkylation of Pyridine with Alkenes by Rh(PAIP) Complex

○Qiao-Zhi Li[1], Naofumi Hara[2], Yoshiaki Nakao[2] and Shigeyoshi Sakaki[1] (FIFC[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2])

13. Theoretical study on nickel(0)-catalyzed alkenyl exchange of allylamines with alkenes

○Qingxi Meng [1,2] and Shigeyoshi Sakaki [1] (FIFC, Kyoto Univ. [1], College of Chem., Shandong Agri. Univ., China [2])

14. Theoretical insight into the reaction behavior of NO molecule on 3d and 4d metal clusters (M₁₃, M₅₅; M = Co, Ni, Rh, Pd)

○Nozomi Takagi[1], Ryoichi Fukuda[1], Masahiro Ehara[1,2], Shigeyoshi Sakaki[1,3] (ESICB, Kyoto Univ.[1], IMS[2], FIFC, Kyoto Univ.[3])

15. Mechanistic Insights into Propene Oxidation on MCr₂O₄(111) Surface (M = Mg and Zn) with and without Cu Doping

○Peng Zhao, Masahiro Ehara, and Shigeyoshi Sakaki

16. Propene Oxidation on M₅₅ Particle (M = Pd or Rh): Theoretical Study of Reaction Mechanism and Differences in Catalytic Activity between Pd₅₅ and Rh₅₅

○Bo Zhu (FIFC, Kyoto Univ.)

17. TCNQの光物性の溶媒依存性の分子論的機構解析

○比嘉 未香子[1]、東 雅大[2]、佐藤 啓文[2] (琉球大院理工[1]、京大院工[2])

18. Mechanism elucidation of the metal cation effects on α -acid isomerization with quantum chemical calculations

○Minami Kimura[1], Masahiro Higashi[2], Hirofumi Sato[2] (Fac. of Eng. Kyoto Univ.[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2])

19. **有機合成反応における水の添加効果の理論的解析**
○倉奥 大樹[1]、東 雅大[2]、佐藤 啓文[2] (琉大院理工[1]、京大院工[2])
20. **HBT の励起状態分子内プロトン移動における溶媒依存性に関する理論的研究**
○仲 啓志[1]、東 雅大[2]、佐藤 啓文[2] (京大工[1]、京大院工[2])
21. **DFTB と補正ポテンシャルを用いた白金錯体が触媒する反応のポテンシャルエネルギー曲面の構築**
○押木 淳[1]、小杉 健斗[1]、中農 浩史[1,2]、東 雅大[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])
22. **電極電解液間電子移動における電子分極と界面の影響に関する理論的研究**
○高橋 健[1]、中農 浩史[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])
23. **SrFeO₃, Sr₃Fe₂O₇(001)面における NO 酸化反応の第一原理計算**
○高松 晃彦、福田 良一、田中 庸裕、細川 三郎 (京大院工)
24. **Ag ナノシリンドラーアレイの作製と高速熱処理による光学特性の制御**
○東野 真、村井 俊介、田中 勝久 (京大院工)
25. **層状構造を持つ複酸化物群 ARTiO₄における空間反転対称性の破れと異常熱膨張**
○吉田 傑[1]、赤松 寛文[2]、Alexandra S. Gibbs[3]、藤田 晃司[1]、田中 勝久[1] (京大院工[1]、九大院工[2]、ラザフォード・アップルトン研[3])
26. **Ab initio evaluation of redox potential of metalloprotein**
○成 せい、林 重彦 (京大院理)
27. **量子化学計算による TMTTF 系の電荷局在-電荷秩序量子相転移の構造解析**
○北村 直大、倉重 佑輝 (京大院理)
28. **Theoretical study on molecular mechanism of a light-driven ion transport of Halorhodopsin**
○小山 糧、長谷川 太祐、林 重彦 (京大理)
29. **天然アニオンチャンネルロドプシン GtACR1 の分子機構に関する理論的研究**
○鹿倉 啓史、成 せい、林 重彦 (京大院理)

30. Photoactivation Intermediate of AsLOV2 Photoreceptor Protein Investigated by a Hybrid Molecular Simulation

○Masahiko Taguchi, Cheng Cheng, Chika Higashimura, Yoshihiro Uchida, Shigehiko Hayashi (Grad. School. of Sci. Kyoto Univ.)

31. 液体ピレンの分子動力学シミュレーションと理論的解析

○山本 裕生[1]、Lu Fengniu[2]、中西 尚志[2]、林 重彦[1] (京大理[1]、物質・材料研究機構[2])

32. ポリエンの電気伝導性の鎖長依存性に関する理論研究

○甘水 君佳[1]、多田 隼人[2]、池永 和輝[2]、江良 伊織[2]、藤井 琢也[2]、北河 康隆[2]、中野 雅由[2,3] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、分子研[3])

33. ダブルデッカー型ランタノイド(III)-フタロシアニン錯体の磁気的な分子間相互作用に関する理論研究

○池永 和輝[1]、北河 康隆[1,2]、加藤 恵一[3]、山下 正廣[3]、中野 雅由[1,2,4] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、東北大院理[3]、分子研[4])

34. 五員環含有ナノベルト系の開殻性、芳香族性および光・磁気応答物性についての理論研究

○岸 亮平[1]、山根 将暉[1]、杉浦 亮介[1]、清水 陽介[1]、中野 雅由[1,2,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大 IQQB[2]、阪大 CSRN[3]、分子研[4])

35. 金属二核錯体の軌道相補性に関する理論研究

○北河 康隆[1,2]、藤井 琢也[1]、池永 和輝[1]、多田 隼人[1]、江良 伊織[1]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、分子研[3])

36. ペンタセン環状集合系のシングレットフィッシュンダイナミクスに関する理論研究

○宮本 孟[1]、岡田 健治[1]、吉田 航[1]、當波 孝凱[1]、永海 貴識[1]、久保 孝史[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大基礎工[1]、阪大院理[2]、阪大 CSRN[3]、分子研[4])

37. 高効率シングレットフィッシュンに向けた振電相互作用設計に関する理論研究

○永海 貴識[1]、當波 孝凱[1]、岡田 健治[1]、吉田 航[1]、宮本 孟[1]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、分子研[3])

38. スマネン縮合アセンニ量体におけるシングレットフィッシュンダイナミクスに関する理論研究

○岡田 健治[1]、吉田 航[1]、宮本 孟[1]、中澤 廣宣[2]、植竹 裕太[2]、櫻井 英博[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大院工[2]、阪大 CSRN[3]、分子研[4])

39. 多変量解析法を用いたトリス(2,2'-ビピリジン)ルテニウム(II)錯体の HOMO および LUMO のエネルギーの置換基種依存性についての理論研究

○佐藤 宏賢[1]、池永 和輝[2]、多田 隼人[2]、江良 伊織[2]、藤井 琢也[2]、北河 康隆[2]、中野 雅由[2] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2])

40. アゾメチンイリド部位を有する開殻多環芳香族分子の電子構造と光・磁気応答物性についての理論研究

○清水 陽介[1]、岸 亮平[1]、伊藤 慎庫[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、南洋理工大数理科学学院[2]、阪大 CSRN[3]、分子研[4])

41. テトラシクロペンタテトラフェニレン π 二量体における芳香族性、開殻性、非線形光学特性の面間距離・角度依存性に関する理論研究

○杉浦 亮介[1]、岸 亮平[1]、永海 貴識[1]、北野 奨実[1]、清水 陽介[1]、戸部 義人[2,3]、中野 雅由[1,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大産研[2]、台湾国立交通大[3]、分子研[4]、阪大 CSRN[5])

42. バタフライ型アセンの電子状態と励起エネルギーに関する理論研究

○當波 孝凱[1]、永海 貴識[1]、岡田 健治[1]、吉田 航[1]、宮本 孟[1]、中野 雅由[1,2,3,4] (阪大基礎工[1]、分子研[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])

43. 2 次の時間非畳み込み型量子マスター方程式を用いたペンタセン二量体モデルの一重項開裂における非マルコフ効果に関する理論的研究

○吉田 航[1]、岡田 健治[1]、永海 貴識[1]、當波 孝凱[1]、宮本 孟[1]、中野 雅由[1,2] (阪大院基礎工[1]、分子研[2])