

京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム

プログラム

日時 2021年1月25日(月) 13:00~17:55

場所 オンライン (Zoom)

開会式 (Opening)

[開会の辞] 春田 直毅 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 13:00 – 13:05

講演会 (Lecture Session)

● 岸 亮平 (大阪大学大学院 基礎工学研究科) 13:05 – 13:55

「開殻縮環分子系の光・磁場応答制御の分子設計：モデル構築と量子化学計算」

座長：春田 直毅 (京都大学 福井謙一記念研究センター)

● 中 寛史 (京都大学大学院 薬学研究科) 14:05 – 14:55

「水で有機物質をつくる」

座長：佐藤 徹 (京都大学 福井謙一記念研究センター)

● 飯田 健二 (北海道大学 触媒科学研究所) 15:05 – 15:55

「ナノ物質系の界面の光や電圧に対する応答の理論計算研究」

座長：西本 佳央 (京都大学大学院 理学研究科)

閉会式 (Closing)

[閉会の辞] 佐藤 啓文 (京都大学 福井謙一記念研究センター長) 15:55 – 16:00

ポスターセッション (Poster Session)

16:05 – 17:55

ポスターリスト (ブレイクアウトルーム 16:05~17:55)

- ✓ 番号が奇数の方は前半 (16:05-17:00)、番号が偶数の方は後半 (17:00-17:55) には、各自の番号のブレイクアウトルーム内で発表するようにしてください。Zoom での発表方法の詳細については、参加の手引きをご覧ください。
- ✓ Authors with odd and even poster numbers should be present at the corresponding breakout rooms during the first half (16:05-17:00) and the second half (17:00-17:55) of the session, respectively. You can find how to make a presentation on Zoom in the participation guide “参加の手引き”.

1. アヌレンの単分子電気伝導特性に関する理論研究

○甘水 君佳[1]、佐藤 宏賢[1]、池永 和輝[1]、北河 康隆[1,2,3]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、阪大 QIQB[3])

2. ピレン色素を持つ発光性液体のレオロジーの解析

○山本裕生、Lu Fengniu、中西尚志、林重彦

3. 3 サイト 2 電子原子価配置間相互作用(VBCI)モデルを用いたホールドーブジラジカロイドにおける開殻性と三次非線形光学物性の相関の解析

○吉田 航[1]、松井 啓史[2]、宮本 孟[1]、岸 亮平[1,3]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、大安研[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 CSRN[4])

4. 非制限密度汎関数法を用いたラジカル間交換相互作用の減衰定数の評価によるアームチェア型グラフェンナノリボン (AGNRs) の電子輸送特性評価

○篠塚 智仁、西澤 尚平、清水 大貴、松田 建児 (京大院工)

5. 対称ヘテロ直鎖状ペンタセン集合系の一重項分裂ダイナミクスの理論研究

○中野雅由[1,3,4]、宮本孟[1]、徳山和明[2] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])

6. DFTB 法を用いた電極電解液界面の定電圧シミュレーション法の開発

○押木 淳[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])

7. 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 LUMO のエネルギーと置換基種との関連性についての理論研究

○佐藤 宏賢[1]、甘水 君佳[1]、池永 和輝[1]、北河 康隆[1,2,3]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、阪大 QIQB[3])

8. **非直交スピン軌道の第二量子化演算子による共鳴構造の解析**
○中谷 佳萌[1]、東 雅大[1,2]、福田 良一[2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])
9. **ドナーおよびアクセプター分子からなる金属有機構造体 (MOF) の吸蔵分子による磁性変化に関する理論研究**
○北河 康隆[1,2,3]、Jun Zhang[4]、高坂 亘[4]、宮坂 等[4]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CNRS[2]、阪大 QIQB[3]、東北大金研[4])
10. **Hubbard 模型と量子化学計算に基づいた TMTTF 系の超伝導-金属量子相転移の解析**
○北村直大、倉重佑輝 (京大院理)
11. **Dicyclopenta-fused acene の 2 電子酸化還元状態およびホウ素・窒素置換系における開殻性の鎖長依存性についての理論研究**
○清水 陽介[1]、岸 亮平[1,4]、吉田 航[1]、池内 雅登[2]、正田 迅己[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])
12. **Origin of aggregation-induced enhanced emission: role of pseudo-degenerate electronic states of excimers formed in aggregation phases**
Wataru Ota[1,2], Ken Takahashi[3], Kenji Higashiguchi[2], Kenji Matsuda[2], and Tohru Sato[1,2,4] (FIFC[1], Graduate School of Eng. Kyoto Univ.[2], Undergraduate School of Industrial Chemistry, Kyoto Univ. [3], ESICB, Kyoto Univ.[4])
13. **非平衡グリーン関数法を用いた電流によるカイラル誘起スピン選択性の起源の研究**
○島田 隆史、瀬波 大土 (京大院工)
14. **A theoretical investigation into the role of catalyst support and regioselectivity of molecular adsorption on a metal oxide surface: NO reduction on Cu/c-alumina**
Tohru Sato[1,2,3], Wataru Ota[1,2], Yasuro Kojima[2], Saburo Hosokawa[2,3], Kentaro Teramura[2,3], Tsunehiro Tanaka[2,3] (FIFC[1], Grad. School. of Eng. Kyoto Univ.[2], ESICB, Kyoto Univ.[3])
15. **ペンタセン一次元集合系モデルにおけるシングレットフィッシュンダイナミクス : slip-stack 型配置と herringbone 型配置の比較**
○徳山 和明[1]、宮本 孟[2]、永海 貴識[2]、中野 雅由[2,3,4] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 CSRN[4])

16. **バクテリオクロロフィル a の励起状態緩和ダイナミクスに配位子が与える効果の解析**
○高林 侑示[1]、佐藤 啓文[1,2,3]、東 雅大[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井センター[3])
17. **3つのアセチルアセトナト配位子を持つジスプロシウム(III)錯体の磁気異方性に関する理論研究**
○長 奎吾[1]、池永 和輝[2]、北河 康隆[2,3,4]、中野 雅由[2,3,4] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])
18. **電極電解液界面酸化還元反応に対する定電位平均場 QM/MM 法の開発**
○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])
19. **テトラシクロペンタテトラフェニレン二量体の芳香族性、開殻性、光・磁気物性の相関に関する理論研究**
○杉浦 亮介[1]、岸 亮平[1,5]、清水 陽介[1]、池内 雅登[1]、吉田 航[1]、正田 迅己[1]、永海 貴識[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]、阪大 CSRN[4]、阪大 QIQB[5])
20. **相互作用点モデルによる分子液体の古典密度汎関数理論**
○矢木 智章[1]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])
21. **湾曲 π 共役分子系のシングレットフィッション：ペリレン/ペロピレン骨格の屈曲効果**
○岡田 健治[1]、坂井 亮太[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])
22. **diagonal CASPT2 の解析的勾配**
○西本 佳央[1] (京大院理)
23. **分子の電気伝導現象における電子テンション密度のスピン依存成分に関する理論的研究**
○吉田如寛[1]、瀬波大士[1] (京大院工[1])
24. **量子化学計算に基づく溶媒和ヒドリドイオンの化学シフト推定**
○今村 洸輔[1]、東 雅大[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井センター[3])
25. **高効率一重項分裂材料設計に向けた分子内電荷分極を有する縮環共役分子系のエネルギー整合条件についての理論研究**
○坂井 亮太[1]、岡田 健治[2]、永海 貴識[2]、中野 雅由[2,3,4] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])

26. 3D-RISM 理論を用いた表面吸着分子系の溶媒和構造に関する研究

○高松 晃彦[1]、福田 良一[1,2]、東 雅大[1,2]、佐藤 啓文[1,2] (京大院工[1]、京大 ESICB[2])

27. バタフライ型アセンの一重項分裂誘起非線形光学特性に関する理論研究

○當波 孝凱[1]、杉森 亮太[1]、坂井 亮太[1]、中野 雅由[1,2,3] (阪大院基礎工[1]、阪大 CSRN[2]、阪大 QIQB[3])

28. 振電相互作用解析を用いたアザボリン骨格深青色蛍光分子の開発

大田 航[1]、平 翔太[1]、○上島 基之[1]、藤原 絵美子[1]、佐藤 忠久[2]、坂上 恵[1]、佐藤 徹[1] (京大福井セ[1]、(株)NIL[2])

29. ペンタセン環状分子集合系の一重項分裂ダイナミクスにおける分子配向及び集合系サイズ依存性

○宮本 孟[1]、徳山 和明[2]、中野 雅由[1,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4])