

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 2022年1月26日(水) 13:00~18:30

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)

- 水上 渉 (大阪大学量子情報・量子生命研究センター) 13:05 – 13:55
「確率的手法を用いた量子化学計算：ニューラルネットワークと量子コンピュータの利用」
座長：西本 佳央 (京都大学大学院理学研究科)
- 石井 史之 (金沢大学ナノマテリアル研究所) 14:05 – 14:55
「固体中のスピン軌道相互作用とエネルギー変換」
座長：春田 直毅 (京都大学福井謙一記念研究センター)
- 森 俊文 (九州大学先導物質化学研究所) 15:05 – 15:55
「生体分子の動的構造と機能発現機構の理論的解明」
座長：中農 浩史 (京都大学大学院工学研究科)

受賞講演 (Award Lecture)

福井謙一奨励賞 (第5回) 受賞講演 16:05 – 16:30

受賞者：植松 祐輝 (九州大学大学院理学研究院)

「水の界面物性計算理論の構築と疎水性界面における帯電メカニズムの解明」

座長：佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)

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) 16:30 – 16:35

ポスターセッション (Poster Session)

16:40 – 18:30

ポスターリスト (ブレイクアウトルーム 16:40~18:30)

- ✓ 番号が奇数の方は前半 (16:40-17:35)、番号が偶数の方は後半 (17:35-18:30) 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 (16:40-17:35) and the second half (17:35-18:30) 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. タンパク質-リガンド結合キネティクスの理論的解析

○笠原 健人[1]、昌山 廉[1]、沖田 和也[1]、松林 伸幸[1] (阪大院基礎工[1])

2. Higher-order Transition State Approximation

K. Hirao[1], T. Nakajima[2], B. Chan[3] (FIFC[1], RIKEN[2], Nagasaki Univ[3])

3. ~~変分量子固有値法のエネルギー期待値観測における誤差推定~~

○大場 優生[1]、倉重 佑輝[1] (京大院理[1]) ~~発表中止~~

4. 非調和振動ポテンシャルにおける MPS-MCTDH 手法の開発

○樋野 健太郎[1]、倉重 佑輝[1] (京大院理[1])

5. 分子回路設計指針構築に向けたアヌレンの電気伝導特性に関する理論研究

○甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[2]、長 奎吾[1]、上村 泰吾[1]、林 優太[2]、津田 雅大[2]、岸 亮平 [1,3,4]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 CSRN[5]、阪大 ICS[6])

6. 冷却による TMTTF 系の電荷秩序転移の理論解析

○北村 直大、倉重 佑輝 (京大院理)

7. HiPIP の[4Fe-4S]活性中心周囲の水素結合がイオン化ポテンシャルに与える影響に関する理論研究

○上村 泰五[1]、甘水 君佳[1]、長 奎吾[1]、林 優太[2]、津田 雅大[2]、佐々木 啓介[2]、岸 亮平 [1,4,5]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

8. New Simple Theoretical Chemical Bond Theory and Its Applications. / 新しい単純な科学結合理論とその応用

Chang, Bok Ryun / 張 福鍊 (Chang Medical Services)

9. スピン分極および電荷分極を併せ持つアズレン縮環共役分子の構造物性相関についての理論研究

○坂井 亮太[1]、杉森 亮太[1]、岡田 健治[1]、土田 聖也[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

10. 密度汎関数理論(DFT)法を用いたジスプロシウム錯体の電子状態に関する理論研究

○長 奎吾[1]、津田 雅大[2]、甘水 君佳[1]、上村 泰五[1]、林 優太[2]、佐々木 啓介[2]、岸 亮平[1,4,5]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

11. p-スチレンスルホン酸が配位した3,5-ビス(2-ピリジル)ピラゾール架橋イリジウム-銅二核錯体における分散力補正の有無による構造変化に関する理論研究

○林 優太[1]、甘水 君佳[2]、上村 泰吾[2]、長 奎吾[2]、金崎 良紀[1]、佐々木 啓介[1]、津田 雅大[1]、岸 亮平[2,4,5]、北河 康隆[2,3,4,5]、中野 雅由[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

12. 八員環を含む開殻縮環共役分子の構造、電子状態に関する理論研究

○土田 聖也[1]、岸 亮平[2,3,4]、坂井 亮太[2]、池内 雅登[2]、北河 康隆[2,3,4,5]、中野 雅由[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 CSRN[5]、阪大 ICS-OTRI[6])

13. バックブロンコバルト(II)錯体の電子状態に関する理論研究

○津田 雅大[1]、長 奎吾[2]、甘水 君佳[2]、上村 泰五[2]、林 優太[1]、佐々木 啓介[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[2,3,4,5]、中野 雅由[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 CSRN[3]、阪大 QIQB[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大 ICS[6])

14. 分子集合体の励起状態計算における動的電子相関の重要性

○西尾 宗一郎、倉重 佑輝 (京大院理)

15. ペンタセン一次元多量体モデルにおける一重項分裂ダイナミクスの分子配置依存性に関する理論研究

○徳山 和明[1]、宮本 孟[1]、岡田 健治[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

16. Dicyclopenta-fused acene の開殻電子構造と三次非線形光学物性に対する電荷状態依存性についての理論研究

○清水 陽介[1]、岸 亮平[1,2,3]、吉田 航[1]、池内 雅登[1]、正田 迅己[1]、白井 尚樹[1]、北河 康隆[1,2,3,5]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS[4]、阪大 CSRN[5])

17. 開殻分子 π 積層一次元集合系の電子構造と光応答物性の分子配置依存性に関する理論研究

○正田 迅己[1]、岸 亮平[1,2,3]、横山 麻紗子[1]、吉田 航[1]、池内 雅登[1]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

18. 化学反応における領域同位体効果

○矢田 達寛[1,2]、春田 直毅[1,2,3]、佐藤 徹[1,2,3] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3])

19. 外部静電場が一重項分裂ダイナミクスに与える影響に関する理論研究

○當波 孝凱[1]、岡田 健治[1]、宮本 孟[1]、岸 亮平[1,2,3,4,5]、北河康隆[1,2,3,4,5]、中野雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 RCSEC[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS[5])

20. 量子もつれ光子対を用いた Fenna-Matthews-Olson タンパク質の時間分解分光スペクトルの理論的解析

○藤橋裕太[1,2]、東雅大[1,2,3]、石崎章仁[4,5] (京大院工[1]、JST さきがけ[2]、京大 ESICB[3]、分子研[4]、総研大[5])

21. パドルホイール型ルテニウム二核錯体におけるアセテート配位子に導入された多環芳香族炭化水素によるフロンティア軌道の変化に関する研究

○佐々木 啓介[1]、甘水 君佳[2]、片岡 祐介[3]、陳 秀慧[4]、許 益瑞[4]、岸 亮平[2,6,7]、北河 康隆[2,5,6,7]、中野 雅由[2,6,7,8] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、島根大理工[3]、台北科技大[4]、阪大 CSRN [5]、阪大 QIQB [6]、阪大 RCSEC[7]、阪大 ICS[8])

22. β,β -ジフェニルセリンを用いた立体選択的フッ素化反応に関する理論的研究

○矢島 武知[1]、佐藤 啓文[2,3,4]、有光 暁[5]、東 雅大[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、京大福井セ[4]、琉大理[5])

23. 化学反応における局在スピンの相関の解析

○中谷 佳萌[1]、東 雅大[1,2]、佐藤 啓文[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大 FIFC[3])

24. **非フラレン型電子受容体 TACIC 薄膜の長寿命励起状態に関する理論的研究**
○浦上 拓臣[1]、佐藤 啓文[2,3,4]、東 雅大[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、京大福井セ[4])
25. **反芳香族分子の π 積層多量体における芳香族性の分子数および分子間距離依存性に関する理論研究**
○池内 雅登[1]、岸 亮平[1,3,4]、杉森 亮太[1]、正田 迅己[1]、土田 聖也[2]、北河 康隆[1,3,4,5]、中野 雅由[1,3,4,5,6] (阪大院基礎工[1]、阪大基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 CSRN[5]、阪大 ICS-OTRI[6])
26. **分子動力学シミュレーションによる光捕集複合体 LH2 の吸収スペクトルの解析**
○藪 俊佑[1]、佐藤 啓文[1,2,3]、東 雅大[1,2,4] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井センター[3]、JST さきがけ[4])
27. **階層型積分方程式によるグランドポテンシャル汎関数の自己無撞着な構成と相平衡および溶媒和への応用**
○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])
28. **ジアジボラ置換オリゴアセン類縁体の開殻性及び非線形光学特性に関する理論研究**
○杉森 亮太[1]、當波 孝凱[1]、坂井 亮太[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])
29. **π 共役ホスホール塩の溶液内蛍光特性の理論解析**
○鈴木 さら[1]、今村 洗輔[2]、東 雅大[2, 3]、佐藤 啓文[2, 3, 4] (京大工[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3]、京大福井セ[4])
30. **ポウル型分子からなる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に関する理論研究**
○岡田 健治[1]、徳山 和明[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])
31. **有機薄膜太陽電池材料 ITIC の自発的対称性の破れによる電荷分離状態の生成**
○在間 嵩朗[1,2]、大田 航[1,2]、大北 英生[3]、佐藤 徹[1,2,4] (京大福井セ[1]、京大院工分子工学[2]、京大院工高分子化学[3]、京大 ESICB[4])
32. **MD シミュレーションによる光捕集複合体クロロソームに含まれる色素集合体の解析**
○仲 啓志[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[3])

33. ドナー-アクセプター連結分子の電荷分離状態を含む光励起緩和過程

○木村 南[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])

34. 多参照摂動理論を用いた円錐交差探索

○西本 佳央 (京大院理)

35. π -アルキル発光性分子液体の励起エネルギー移動モデリング

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

36. RISM-SCF-cSED 法による溶液内化学シフトの計算理論

○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])

37. カルバゾールオリゴマーの構造、電荷状態、開殻性の相関に関する理論研究

○白井 尚樹[1]、吉田 航[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

38. 環状分子集合系におけるシングレットフィッシュンダイナミクスの構造-特性相関に関する理論研究

○宮本 孟[1]、岡田 健治[1]、徳山 和明[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4]、中野 雅由[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 CSRN[4]、阪大 ICS-OTRI[5])

39. Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の超周期構造と NO 吸着の領域選択性

大西 駿也[1,2]、大田 航[1,2]、高倉 陸[1,2]、春田 直毅[1,2,3]、細川 三郎[2,3]、寺村 謙太郎[2,3]、田中 庸裕[2,3]、佐藤 徹[1,2,3] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、京大 ESICB[3])