

# 第18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 2023年2月10日(金) 13:00~17:55

場所 京都大学福井謙一記念研究センター 3階 大会議室

### 開会式 (Opening)

---

[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) 13:00 – 13:05

### 講演会 (Lecture Session)

---

- 田中 庸裕 (京都大学大学院工学研究科) 13:05 – 14:05  
「自動車排ガス浄化三元触媒の貴金属使用節減と貴金属フリー化」  
座長：佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)
- 加藤 昌子 (関西学院大学生命環境学部) 14:15 – 15:15  
「蒸気応答性を示す金属錯体ソフトクリスタル」  
座長：榊 茂好 (京都大学高等研究院物質-細胞統合システム拠点)

### 受賞講演 (Award Lecture)

---

福井謙一奨励賞 (第7回) 受賞講演 15:25 – 15:55  
受賞者：砂賀 彩光 (京都大学大学院理学研究科)  
「化学における量子電磁力学効果と分子を用いた CP 対称性破れの探索」

### ポスターセッション (Poster Session)

---

#### ポスターリスト (3階大会議室 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)、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 (16:05-17:00) and the second half (17:00-17:55) of the session, respectively.

1. **CHFCIBr 分子におけるパリティを破る鏡像異性体間エネルギー差の電子励起による増大**  
○黒田 直也[1]、砂賀 彩光[2]、瀬波 大土[1] (京大院工[1]、京大複合研[2])
2. **アニオン交換膜内におけるイオン動態の分子動力学解析**  
○笠原 健人[1]、奈良 悠里[2]、松林 伸幸[1]、八木 清[3]、田中 学[2] (阪大院基礎工[1]、東京都立大都市環境[2]、理研開拓研究本部[3])
3. **電子非断熱動力学とスピнкаレント**  
○花崎 浩太[1]、高塚 和夫[1] (京大福井セ[1])
4. **ホストゲスト材料の安定構造探索: 密度汎関数計算と粒子群最適化の比較**  
○福浦 秀太[1]、湯村 尚史[1]、西舘 陽平[2] (京工織大院[1]、会津大学[2])
5. **Structure Search for inorganic molecules based on DIRECT (Dividing RECTangle) algorithm**  
○Kansei Kanayama, Kazuaki Toyoura (Grad. Sch. of Eng., Kyoto Univ.)
6. **[18]アヌレンを用いた分子並列回路モデルの電子状態と電気伝導特性の関係に関する理論研究**  
○甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[1]、西田 光博[2]、津田 雅大[1]、林 優太[1]、本城 一樹[2]、益田 晃希[2]、岸 亮平[1,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])
7. **Higher-order Slater's Transition State Approximation**  
○平尾公彦[1,2]、中嶋隆人[2]、Bun Chan[3] (京大福井セ[1]、理研[2]、長崎大[3])
8. **ヒドリドが反応に関わる Ir-M (M = Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)ヘテロ金属二核錯体触媒の分子軌道エネルギー制御に関する理論研究**  
○林 優太[1]、甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[1]、津田 雅大[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])
9. **密度汎関数理論を用いたコレスタンの熱力学安定性の評価**  
○温 祐貴[1]、佐藤 啓文[2,3]、齊藤 諒介[4,5]、東 雅大[2] (京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3]、山口大理[4]、JST さきがけ[5])
10. **量子化学計算を用いた SrFeOx 薄膜における長距離水素スピルオーバー現象の解明**  
○植田 泰成[1]、鎌田 太郎[2]、福浦 秀太[1]、湯村 尚史[1]、細川 三郎[1]、田中 庸裕[3]、菅 大介[2]、島川 祐一[2] (京工織大院[1]、京大化研[2]、京大院工[3])

**11. CASPT2-IPEA の解析的微分**

○西本 佳央 (京大院理)

**12. ニトロゲナーゼの P クラスタ一周囲の水素結合がフロンティア軌道に与える影響に関する理論研究**

○本城 一樹[1]、甘水 君佳[2]、林 優太[2]、佐々木 啓介[2]、津田 雅大[2]、西田 光博[1]、益田 晃希[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 IQQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])

**13. QM/MM RWFE-SCF 法を用いたアニオンチャネルロドプシン GtACR1 の変異体モデリングおよび光励起エネルギー計算**

○鹿倉 啓史、成 鍼、林 重彦 (京大院理)

**14. N-アルキル化 DABCO を対成分とする F2TCNQ 陰イオンラジカル塩の結晶構造と電気特性**

○増田 怜旺[1]、石川 学[1,2]、大塚 晃弘[1,2]、中野 義明[1,2] (京大院理[1]、京大環安保[2])

**15. N-アルキル化 DABCO と TCNQ から成る電荷移動錯体の構造と物性**

○立木 実[1]、中井 暁量[2]、石川 学[2,3]、中野 義明[2,3]、大塚 晃弘[2,3] (京大理[1]、京大院理[2]、京大環安保[3])

**16. エネルギー表示の新規拡散方程式**

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

**17. N-アルキル化 DABCO と F4TCNQ から成る分子性導体の結晶構造および物性**

○矢野 亜実[1]、○石川 優李[2]、石川 学[1,3]、大塚 晃弘[1,3]、中野 義明[1,3] (京大院理[1]、京大理[2]、京大環安保[3])

**18. 密度汎関数理論法を用いたダブルデッカー型テルビウム(III)フタロシアニン錯体の構造と磁気異方性に関する理論研究**

○益田 晃希[1]、津田 雅大[2]、甘水 君佳[2]、林 優太[2]、佐々木 啓介[2]、西田 光博[1]、本城 一樹[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[2,3,4,5,6] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 IQQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])

**19. Internal Conversion Processes from the S<sub>2</sub> and S<sub>1</sub> states in Azulene**

○在間 嵩朗[1,2]、大田 航[3]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、MOLFEX[3])

20. **ビス-ペリアズレン連結二量体モデルの軌道相互作用・開殻性についての理論研究**  
島田 魁智[1]、坂井 亮太[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])
21. **テンソルネットワークに基づく波束ダイナミクスに最適化されたグリッドポテンシャルエネルギー曲面の開発**  
○樋野 健太郎[1]、倉重 佑輝[1] (京大院理[1])
22. **一次元不均一分子集合系における一重項分裂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]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])
23. **光化学反応解析に向けた半古典ダイナミクスの実装開発**  
○津村 将弥[1]、倉重 佑輝[1] (京大理院[1])
24. **近接積層した反芳香族分子集合系の分子間相互作用エネルギーと開殻性の関係に関する理論研究**  
○杉森 亮太[1]、池内 雅登[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 RCSEC[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])
25. **Low-rank 型波動関数理論による  $\pi$  共役分子集合体における励起子の解析**  
○西尾 宗一郎、倉重 佑輝 (京大院理)
26. **八員環を含有する開殻縮環共役分子の構造と電子状態に関する理論研究**  
○土田 聖也[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])
27. **Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒の触媒活性**  
○高倉 陸[1,2]、春田 直毅[1,2,3]、大西 駿也[1,2]、大田 航[1,2]、細川 三郎[1,3,4]、田邊 豊和[5]、寺村 謙太郎[1,2,3]、田中 庸裕[1,3]、佐藤 徹[1,2,3] (京大院工[1]、京大福井セ[2]、京大 ESICB[3]、京都工繊大材料化学[4]、防衛大機能材料[5])
28. **Co 置換型ペロブスカイト酸化物の酸素貯蔵能**  
○杉本 良介[1]、細川 三郎[1] (京都工芸繊維大学[1])
29. **アニオンポンプロドプシン NpHR のイオン輸送過程に関する理論的研究**  
○江尻 智森[1]、小山 糧[1]、林 重彦[1] (京大院理[1])

30. **バソクプロインコバルト(II)単イオン磁石における電子状態と磁気異方性の相関に関する理論研究**  
○津田 雅大[1]、益田 晃希[2]、甘水 君佳[1]、佐々木 啓介[1]、林 優太[1]、西田 光博[2]、本城 一樹[2]、岸 亮平[1,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])
31. **電極電解液界面の動的誘電率計算とデバイ緩和解析**  
○田仲 雄一[1]、佐藤 啓文[1,2]、中農 浩史[3] (京大院工[1]、京大福井セ[2]、産総研 CD-FMat[3])
32. **ポリアセンにおけるヘテロ原子置換が単分子電気伝導性に与える影響に関する理論研究**  
○西田 光博[1]、甘水 君佳[2]、佐々木 啓介[2]、津田 雅大[2]、林 優太[2]、本城 一樹[1]、益田 晃希[1]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])
33. **水溶媒による Z-(allyloxycarbonyl)methyl ラジカル環化反応の促進機構**  
○鈴木 さら[1]、Soni Aman Govind[2]、今村 洗輔[1]、東 雅大[1]、佐藤 啓文[1, 3] (京大院工[1]、インド工科大[2]、京大福井セ[3])
34. **原子価結合理論に基づく有限  $\pi$  共役分子集積体における電荷分布の積層構造依存性に関する理論研究**  
○吉田 航[1]、重田 育照[2]、松井 啓史[3]、岸 亮平[1,4,5,6]、北河 康隆[1,4,5,6,7] (阪大院基礎工[1]、筑波大 CCS[2]、大安研[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 QIQB[5]、阪大 ICS-OTRI[6]、阪大 SRN-OTRI[7])
35. **Sr-Ti 系複合酸化物担持 Pd 触媒における超周期構造の発現機構**  
○大西 駿也[1,2]、細川 三郎[3]、田邊 豊和[4]、大田 航[1,2]、寺村 謙太郎[1]、田中 庸裕[1]、佐藤 徹[1,2] (京大院工[1]、京大福井セ[2]、京都工繊大材料化学[3]、防衛大機能材料[4])
36. **ジフェノキノン骨格を含有する縮合環化合物のシングレットフィッシュン過程に関与する低励起状態に関する理論研究**  
○岡田 健治[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTR[4]I、阪大 SRN-OTRI[5])
37. **マルコフ状態モデルによる V 字型多環芳香族両親媒性分子の自己組織化構造の研究**  
○山本 裕生[1]、田口 雅彦[2]、林 重彦[1] (京大院理[1]、量子科学技術研究開発機構[2])

**38. 架橋配位子に導入した $\pi$ 電子系の軌道対称性と軌道エネルギーによるルテニウム二核錯体の電子状態制御に関する理論研究**

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

**39. イクオリンの生物発光過程についての理論的研究**

○安東 智大[1]、林 重彦[1] (京大院理[1])

**40. ヘリセン骨格を有する開殻一重項分子の一重項-分裂過程に関する電子励起状態についての理論研究**

○中山 直哉[1]、岡田 健治[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[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 ICS-OTRI[5]、阪大 SRN-OTRI[6])

**41. Role of Vibronic Couplings and Energy Gap in the Internal Conversion Process of a Molecule**

大田 航[1,2]、上島 基之[3]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、MOLFEX[3])

**42.  $\beta$ -diketiminato 配位子を持つ低原子価 14 属元素錯体の構造と電子状態に関する理論研究**

中筋 千尋[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、北河 康隆[1,2,3,4,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 SRN-OTRI[5])