

第 19 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 2024 年 2 月 6 日 (火) 13:00~19:00

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 徹 (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)

● 笹井 理生 (京都大学福井謙一記念研究センター) 13:05 – 14:05

「遺伝情報を担う高分子、そしてソフトマターの物理」

座長：佐藤 啓文 (京都大学大学院工学研究科)

● 山子 茂 (京都大学化学研究所) 14:15 – 15:15

「特徴的トポロジを持つ中・高分子の精密合成法の開発とその物性・機能の解明」

座長：春田 直毅 (京都大学福井謙一記念研究センター)

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 多目的室 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)、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. 酸素空孔を触媒的に活用した逆水性ガスシフト反応

○浪花 晋平[1]、小林 みのり[1]、井口 翔之[1]、田中 庸裕[1,2,3]、寺村 謙太郎[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])

2. ジスプロシウム(III)メタロセン錯体の磁気異方性に対して密度汎関数理論法の Hartree-Fock 交換エネルギーが与える影響に関する理論研究

○井上 廉[1]、高 海斗[1]、益田 晃希[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[5]、阪大 SRN[6])

3. サファイア基板上 α -Ga₂O₃ 薄膜における貫通転位の構造

○高根 倫史[1]、小西 伸弥[1]、早坂 祐一郎[2]、大多 亮[3]、若松 岳[1]、磯部 優貴[1]、金子 健太郎[4]、田中 勝久[1] (京大[1]、東北大[2]、北大[3]、立命館大[4])

4. アヌレン分子並列回路モデルの電子状態と電気伝導性に関する理論研究

○甘水 君佳[1]、西田 光博[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])

5. 分子認識に伴うチアベンダゾールの pKa シフトに関する理論的研究

○金丸 恒大[1,2]、城下 景亮[3]、中野 晴之[3]、吉田 紀生[2] (京大福井セ[1]、名大院情報[2]、九大院理[3])

6. ニトロゲナーゼの反応活性中心の電子状態に関する理論研究

○本城 一樹[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])

7. 環状第 4 級アンモニウム TCNQ 錯体の結晶構造と物性

○KIM YONGJIN[1]、○梁瀬 歩輝[1]、○山田 覚巳[1]、石川 学[1]、大塚 晃弘[1, 2]、中野 義明[1, 2] (京大院理[1]、京大環安保[2])

8. フェナレニル型配位子を有するゲルミレンにおける反応に関する理論研究

○島岡 諒[1]、中筋 千尋[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、兒玉 拓也[4,6]、鳶巢 守[4,6]、北河 康隆[2,3,4,5,7] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大院工[6]、阪大 CSRN[7])

9. 金属ドーブ SrTiO₃ を用いた CO₂ 光還元における正孔捕捉剤の添加効果

○小坂井 明[1]、中本 嵩市[1]、井口 翔之[1]、浪花 晋平[1]、田中 庸裕[1,2,3]、寺村 謙太郎[1,2,3] (京大院工[1]、京大 ESICB[2]、京大福井セ[3])

10. ヘテロ原子置換がアントラセンの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[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])

11. N-アルキル化（イソ）キノリニウムと TCNQ 系アクセプター分子から成る電荷移動錯体の構造と物性

○澤田 卓寛[1]、○小濱 智宏[2]、増田 怜旺[2]、石川 学[2]、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]）

12. フェナレニル型配位子を有するガリレンの励起状態計算

○川崎 愛矢[1]、中筋 千尋[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、向井 虹渡[6]、兒玉 拓也[4,6]、鳶巣 守[4,6]、北河 康隆[2,3,4,5,7]（阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 RCSEC[5]、阪大院工[6]、阪大 CSRN[7]）

13. CO₂還元 Ru 触媒における反応機構と水の添加効果の理論的解析

○田仲 雄一[1]、佐藤 啓文[1,2]、東 雅大[3]（京大院工[1]、京大福井セ[2]、名大院情[3]）

14. 実在反芳香族分子からなる近接 π 積層した二量体の安定化機構に関する理論研究

○杉森 亮太[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]）

15. Approximate functionals for multistate density functional theory

Alexander Humeniuk

16. ジスプロシウム(III)メタロセ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]、井上 廉[2]、高 海斗[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[5]、阪大 SRN[6]）

17. 中鎖アルキル化 DABCO と TCNQ から成るラジカルアニオン塩の結晶構造と物性

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

18. 局所的に分子間相互作用が変化した一次元分子集合系モデルにおける一重項分裂過程に関する理論研究

○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]）

19. 量子化学計算によるテトラシアノキノジメタン（TCNQ）のソルバトクロミズムの解析

○戸部 すみれ[1]、比嘉 未香子[2]、佐藤 啓文[3,4]、東 雅大[5]（京都大学工学部[1]、琉球大学大学院理工学研究科[2]、京都大学大学院工学研究科[3]、京都大学福井謙一記念研究センター[4]、名古屋大学大学院情報学研究科[5]）

20. ビスーペリアズレンの連結二量体における電子状態に関する理論研究

○島田 魁智[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 ICS-OTRI[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 SRN-OTRI[5])

21. 発光性 Sn ドープ亜鉛リン酸塩ガラスに関する理論的研究

○河野 由帆[1,2]、春田 直毅[1,2]、正井 博和[3]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、産総研[3])

22. 配位子にニトロキシドラジカルを有するランタノイド錯体の磁気特性に関する理論研究

○高 海斗[1]、井上 廉[1]、益田 晃希[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、北河 康隆[2,3,4,5,7] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 RCSEC[4]、阪大 ICS[5]、阪大 SRN[7])

23. フォノン放出・吸収過程としての無輻射遷移

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

24. タンパク質－基質結合過程に対する熱力学・動力学解析

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

25. 炭素クラスター負イオン C_6^- と C_6H^- の振電構造に関する理論的研究

○高見 哲理[1,2]、春田 直毅[1,2]、加藤 立久[2]、佐藤 徹[1,2] (京大院工[1]、京大福井セ[2])

26. Universal direction in thermoosmosis of a near-critical binary mixture

Shunsuke Yabunaka and Youhei Fujitani

27. Ge ドープ α -Ga₂O₃ 薄膜の電気伝導特性とショットキーバリアダイオードへの応用

○若松 岳[1]、磯部 優貴[1]、高根 倫史[1]、金子 健太郎[1,2]、田中 勝久[1] (京大院工[1]、立命館大総研[2])

28. Cu₂O₂ 骨格を中心とする NO 還元反応機構の理論的考察

○森本 流星[1]、杉山 佳奈美[2]、東 雅大[3]、佐藤 啓文[2,4] (京大工[1]、京大院工[2]、名大院情報[3]、京大福井セ[4])

29. 含ヘテロ π 共役系熱活性型遅延蛍光材料の光物理素過程に関する理論的研究

○坂下 諒[1,2]、春田 直毅[1,2]、大田 航[3]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、株式会社 MOLFEX[3])

30. 反応経路ネットワークの経路列挙：水性ガスシフト反応への適用

○江村 紅音[1]、杉山 佳奈美[2]、東 雅大[3]、佐藤 啓文[2,4]（京大工[1]、京大院工[2]、名大院情報[3]、京大福井センター[4]）

31. 有機薄膜太陽電池材料における擬ヤーン・テラー効果による電荷分離

○在間 嵩朗[1,2]、大田 航[1,2]、春田 直毅[1,2]、上島 基之[3]、大北 英生[2]、佐藤 徹[1,2]（京大福井セ[1]、京大院工[2]、Molfex[3]）

32. 分枝限定法を用いた一般化 RMSD の大域的最適化

○山本 裕生（京大院理）