

第20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 2025年2月6日(木) 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) : _____

● 吉澤 一成 (京都大学 福井謙一記念研究センター) 13:05 – 14:05

「複雑化学系の応用量子化学研究」

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)

● 恩田 健 (九州大学大学院 理学院) 14:15 – 15:15

「時間分解分光と量子化学計算による光機能性材料の励起状態過程の解明」

座長: 佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)

福井謙一奨励賞 受賞講演 (Award Lecture) _____

● 受賞者: 清水 大貴 (京都大学大学院工学研究科) 15:25 – 15:55

「交換相互作用制御に基づく有機開殻電子系の機能開拓」

ポスターセッション (Poster Session) : 3階大会議室 16:05 – 17:25

懇親会 (Banquet) : 1階多目的ルーム 17:35 – 19:00

ポスターリスト (3 階大会議室 16:05~17:25)

- ✓ 番号が奇数の方は前半 (16:05–16:45)、番号が偶数の方は後半 (16:45–17:25) 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 (16:05–16:45) and the second half (16:45–17:25) of the session, respectively.

1. CASPT2/PCM による計算

○西本 佳央 (京大院理)

2. $[\text{Ni}(\text{phen})_3]^{2+}$ のモデルハミルトニアンの開発と吸収スペクトルの解析

○杉村 怜音[1]、井内 哲[2]、佐藤 啓文[1,3] (京大院工[1]、名古屋大院情報[2]、京大福井セ[3])

3. Scaled Schrödinger equation・静電力理論・SAC-CI 理論の複合理論

○中辻 博 (量子化学研究協会)

4. キュバン異性化反応における Jahn-Teller 効果

○杉村 潤輝[1,2]、春田 直毅[1,2]、竹邊 日和[2]、松原 誠二郎[2]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2])

5. 液体の積分方程式理論を用いた溶液中高分子の慣性半径に関する理論的研究

○金丸 恒大[1,2]、山口 毅[3]、吉田 紀生[2] (京大福井セ[1]、名大院情報[2]、名大院工[3])

6. フェナレニル型配位子を有するガリレンの構造と電子状態に関する量子化学計算

○川崎 愛矢[1]、岸 亮平[1,2,3]、向井 虹渡[4]、兒玉 拓也[3,4]、鳶巢 守[3,4]、多田 幸平[1]、北河 康隆[1,2,3,5] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 ICS-OTRI[3]、阪大院工[4]、阪大 OTRI-Spin[5])

7. 同符号帯電物質の運動曲率振動による質量固定

○杉山 順一 (産総研)

8. PdCx ナノキューブの構造・電子状態に関する理論研究

○松山 快[1]、多田 幸平[1]、岸 亮平[1,2,3]、北河 康隆[1,2,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 ICS-OTRI[3]、阪大 OTRI-Spin[4])

9. 表面吸着ダブルデッカー型イットリウム(III)―フタロシアニナト錯体に関する理論研究

○廣田 陸哉[1]、多田 幸平[2]、岸 亮平[2]、北河 康隆[2] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2])

10. キラルアルコールとテルビウム(III)イオンからなる錯体の円二色性スペクトルに関する理論研究

○柴田 果歩[1]、太田 光城[1]、多田 幸平[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 OTRI-Spin[6])

11. ニトロキシドラジカルを配位子に含む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[1]、多田 幸平[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 OTRI-Spin[5])

12. ミオグロビン活性中心における環状 π 共役系の変化が酸素親和性に及ぼす影響に関する理論研究

○原田 茉依[1]、多田 幸平[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 OTRI-Spin[6])

13. Theoretical study on photophysical processes of triphenylamine-benzothiadiazole compounds

○Zhengnan Hu[1,2]、Naoki Haruta[1,2]、Tohru Sato[1,2] (Grad. Sch. of Eng., Kyoto Univ.[1]、FIFC, Kyoto Univ.[2])

14. ヘプタジン誘導体の発光機構と一重項-三重項ギャップ反転機構の理論的考察

○石戸 景[1]、浦谷 浩輝[2]、佐藤 啓文[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3])

15. 第一原理 DFT+U+V 法により補正した酸化パラジウムの電子構造

○石川 晃久[1,2]、大田 航[1,2]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2])

16. 多熱浴系におけるスピン-ボソンモデルの動力学計算ソフトウェアの開発とその量子カルノーサイクルへの応用

○小柳 翔輝、谷村 吉隆 (京大理)

17. Diels-Alder 反応のメカノケミカル反応性に関する理論的研究

○堺 稚菜[1,2]、ゴネ ロリ[3,4]、春田 直毅[1,2]、佐藤 徹[1,2]、バロン ミシェル[3] (京大福井セ[1]、京大院工[2]、アルビ国立高等鉱業学校[3]、バーミンガム大[4])

18. ビスペリアズレン誘導体の構造および電子状態に関する理論研究

○松本 優太[1]、島田 魁智[2]、岸 亮平[2,3,4]、多田 幸平[2]、北河 康隆[2,3,4,5] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 OTRI-Spin[5])

19. 熱活性型遅延蛍光を示すトリアジンコアカルバゾールデンドリマーの振電構造

○若林 未己[1,2]、大田 航[1,3]、安楽 滉允[4]、アルブレヒト 建[5]、佐藤 徹[1,3] (京大福井セ[1]、京大工[2]、京大院工[3]、九大院総理工[4]、九大先導研[5])

20. 粗断熱描像における共鳴 Raman 散乱強度の定式化

○八木 拓巳[1,2]、大田 航[1,3]、春田 直毅[1,3]、佐藤 徹[1,3] (京大福井セ[1]、京大工[2]、京大院工[3])

21. 第一原理バンド計算を用いた Li-inserted trioxotriangulene 結晶の理論研究

○北野 幸親[1]、多田 幸平[2]、岸 亮平[2,3,4]、北河 康隆[2,3,4,5] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 OTRI-Spin[5])

22. Kekulé 構造を持ちながら高スピン基底状態を示す新奇 Blatter ラジカル二量体の理論的考察

○篠塚 智仁[1]、山田 孟[1]、清水 大貴[1]、松田 建児[1,2] (京大院工[1]、京大福井セ[2])

23. NBO 解析を用いた α フッ素化ジペプチドの立体配座に関する研究

○大志茂 輝[1]、杉山 佳奈美[2]、古謝 源太[3]、吾郷 友宏[4]、新垣 尚熙[5]、源河 理子[5]、有光 暁[6]、佐藤 啓文[2,7]、東 雅大[8] (京大工[1]、京大院工[2]、琉大研究基盤統括セ[3]、兵庫県立大院理[4]、琉大院理工[5]、琉大理[6]、京大福井セ[7]、名大院情報[8])

24. 異種分子からなる対称 3 量体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

○宮本 孟[1]、岡田 健治[1]、多田 幸平[1,2]、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 OTRI-Spin[5])

25. 縮環 π 共役低分子の溶液状態における輻射および無輻射遷移速度のエネルギーギャップ則

○佐藤 友揮[1]、三木江 翼[2]、尾坂 格[2]、大北 英生[1] ([1] Grad. Sch. of Eng., Kyoto Univ., [2] Grad. Sch. of Adv. Sci. and Eng., Hiroshima Univ.)

26. 微視的溶質-溶媒相互作用を考慮した Passerini 反応中の水の特異な溶媒効果の解明

○野竹 将司[1]、市川 雄大[2]、鈴木 さら[2]、杉山 佳奈美[2]、佐藤 啓文[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3])

27. 反芳香族分子の π 積層系の構造と電子状態に関する荷電状態依存性についての理論研究

○西野 康生[1]、岸 亮平[2,3,4]、杉森 亮太[2]、川上 翔平[1]、多田 幸平[2]、北河 康隆[2,3,4,5] (阪大基礎[1]、阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 OTRI-Spin[5])

28. 環状 π 共役分子の磁場誘導環電流と磁気遮蔽定数の計算と解析

○川上 翔平[1]、岸 亮平[2,3,4]、杉森 亮太[2]、多田 幸平[2]、北河 康隆[2,3,4,5] (阪大基礎工[1]、

阪大院基礎工[2]、阪大 QIQB[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、阪大 OTRI-Spin[5])

29. AFIR 法を用いた GaN(0001) 面上の NH₃ 分解過程の理論解析

○角田 和貴[1]、杉山 佳奈美[2]、佐藤 啓文[2,3] (京大工[1]、京大院工[2]、京大福井セ[3])

30. 高速な輻射冷却を示す炭素クラスター負イオン C₆⁻の吸収スペクトルにおける振電構造の再帰属

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

31. 逆水性ガスシフト反応に活性を示す SrTi_{1-x}Mn_xO₃ への Pd 合金添加効果

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

32. Study of configuration space of water coordination structure using generalized-RMSD

○山本 裕生 (京大院理)

33. 大環状分子を有するカーボンナノチューブ生成反応の理論追跡

○永田 周慈[1]、高畠 一真[1]、湯村 尚史[1] (京工繊大院工芸[1])

34. 弱開殻性を有する縮環 π 共役分子系が示す非線形光学特性の周波数依存性に関する理論研究

○原田 知輝[1]、岸 亮平[1,2,3]、杉森 亮太[1]、多田 幸平[1]、北河 康隆[1,2,3,4] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 ICS-OTRI[3]、阪大 OTRI-Spin[4])

35. Mixed-reference spin flip 方を用いた励起状態の解析

○中田 浩弥[1]、Choi Ho Cheol[2] (京大福井セ[1]、Kyungpook National University[2])

36. 遺伝子制御の熱力学：クロマチンドメインの核形成理論

○藤城 新 (京大福井セ)