

第21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 2026年2月10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) :

● 松田 建児 (京都大学大学院 工学研究科) 13:05 – 14:05

「分子軌道の精密設計に基づく多機能光機能分子の創製」

座長: 佐藤 徹 (京都大学福井謙一記念研究センター)

● 田中 勝久 (京都大学大学院 工学研究科) 14:15 – 15:15

「ランダムスピン系酸化物固体の基礎物性と応用」

座長: 佐藤 啓文 (京都大学大学院 工学研究科)

福井謙一奨励賞 受賞講演 (Award Lecture)

● 受賞者: 堤 拓朗 (北海道大学大学院理学研究院) 15:25 – 15:55

「次元縮約法に基づく反応解析理論の開発と励起状態動力学への展開」

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. Theoretical Study on the Adhesion of Phenolic Polymers on Hydrophilic γ -Alumina Surface

○Amit Shrestha (Kyushu University), Yoshihito Shiota, Ken Kojio, Kotaro Satoh, Satoru Yamamoto, Keiji Tanaka, Kazunari Yoshizawa

2. FMO を用いた励起状態や溶媒効果の解析

○中田 浩弥 (京大福井セ)

3. モリブデン錯体を用いた触媒的窒素固定反応の機構解明に向けた理論検討

○中村 泰司[1]、荒芝 和也[2]、許斐 明日香[1,3]、田中 宏昌[4]、西林 仁昭[2]、吉澤 一成[1] (京大福井セ[1]、東大院工[2]、九大先導研[3]、大同大教養[4])

4. 置換基導入がビスペリアズレンの最低一重項-三重項状態間エネルギー差に及ぼす影響に関する理論研究

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

5. ペンタセンへの置換基導入およびリンカー架橋における分子内一重項分裂に関する理論研究

○藏田 蓮弥[1]、岡田 健治[2]、岸 亮平[2,3,4]、多田 幸平[2,4]、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])

6. NEVPT2 法の OpenMolcas への実装

○西本 佳央 (京大院理)

7. 3D-RISM を用いた 4 残基ペプチドデータベースの構築と応用

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

8. 金属ポルフィリン錯体触媒の二量化に関する理論研究

○衣川 翔真[1]、多田 幸平[1]、廣田 陸哉[1]、岸 亮平[1]、北河 康隆[1] (阪大[1])

9. 非晶質分子凝集体環境と DACT-II の発光特性の関係に関する計算化学的研究

○卷淵 友希[1]、浦谷 浩輝[2]、梶 弘典[3]、佐藤 啓文[2,4] (京都大学工学部[1]、京都大学大学院工学研究科[2]、京都大学化学研究所[3]、京都大学福井謙一記念研究センター[4])

10. 窒素ドーピンググラフェンからの N₂昇温脱離過程における窒素原子移動の役割

○今村 心[1]、浦谷 浩輝[2]、清水 俊介[3]、吉井 丈晴[3]、佐藤 啓文[2,4] (京大工[1]、京大院工[2]、東北大多元研[3]、京大福井セ[4])

11. ダブルデッカー型フタロシアニン Dy(III) 錯体の f- π 相互作用に関する理論的研究

○小磯 太楊[1]、井上 廉[2]、高 海斗[2]、多田 幸平[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、加藤 恵一[7]、北河 康隆[2,3,4,5,6] (大阪大学基礎工学部[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]、城西大理[7])

12. Theoretical Study on the Enhancement of Luminescence Efficiency in β -Estradiol Matrix

○Junki Sugimura[1,2], Emiko Fujiwara[1], Naoki Haruta[1,2], Yuki Oba[3], Tohru Sato[1,2] (FIFC, Kyoto Univ.[1], Grad. Sch. of Eng., Kyoto Univ.[2], ENEOS Holdings, Inc.[3])

13. 置換基導入による BODIPY のフロンティア軌道制御に関する理論研究

○柴田 果歩[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])

14. 2準位系における Langevin 動力学と surface hopping 法を用いた凝縮系非断熱電子移動ダイナミクスの解析

○二瓶 諒[1]、浦谷 浩輝[2]、佐藤 啓文[2,3] (京都大学工学部[1]、京都大学大学院工学研究科[2]、京都大学福井謙一記念研究センター[3])

15. ウラシルの電子緩和過程に及ぼす C6 メチル置換効果

○安藝 美乃、小原 祐樹、Ghosh Srijon、鈴木 俊法 (京大理)

16. トリオキソトリアンギュレン-酸素分子-グラフェン担体複合体におけるスピン混入誤差に関する考察

○植田 聖一[1]、多田 幸平[1,2]、廣田 陸哉[2]、北野 幸親[2]、岸 亮平[1,2]、北河 康隆[1,2] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2])

17. 時間分解赤外分光を用いたウラシルの twisted intermediate 形成過程の研究

○石丸 泰葉、Ghosh Srijon、小原 祐樹、鈴木 俊法 (京大院理)

18. パドルホイール型二核錯体を構成単位とする MOF における電子移動および水素結合角度の理論的解析

○那須 亮太 [1]、井上 廉[2]、高 海斗[2]、Ji Ke[6]、多田 幸平[2]、岸 亮平[2,3,4,5]、高坂 亘[6]、宮坂 等[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 RCSEC[4]、阪大 ICS-OTRI[5]、東北大院理[6]、阪大 OTRI-Spin[7])

19. 量子化学計算を用いたホスホール・トリアゾール類縁体の発光特性の解析

○戸部 すみれ[1]、酒巻 うた[2]、北角 梨桜[2]、杉山 佳奈美[1,3]、浦谷 浩輝[1,4]、俣野 善博[5]、木村 佳文[6]、佐藤 啓文[1,7] (京大院工[1]、同志社大院理工[2]、国立情報研[3]、JST さきがけ[4]、新潟大理[5]、同志社大理工[6]、京大福井セ[7])

20. フォトン・フォノン放出過程としての Herzberg-Teller 効果

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

21. 混合スピン粗断熱描像に基づくベンゾフェノンの輻射・無輻射遷移

○疋田 泰章[1,2]、大田 航[1,2]、加藤 立久[1]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2])

22. 長距離補正密度汎関数強束縛計算に基づくメチレン架橋シクロパラフェニレンの発光挙動の研究

○浅居 竜一[1]、浦谷 浩輝[2]、河野 英也[3]、八木 亜樹子[4]、伊丹 健一郎[3]、佐藤 啓文[2,5] (京都大学工学部[1]、京都大学大学院工学研究科[2]、理化学研究所開拓研究所[3]、名古屋大学大学院理学研究科[4]、京都大学福井謙一記念研究センター[5])

23. エネルギー地形を対象とした局所原子環境記述子の開発

○高橋 朋之[1]、杉山 佳奈美[2,3]、佐藤 啓文[2,4] (京大工[1]、京大院工[2]、国立情報研[3]、京大福井セ[4])

24. 反芳香族分子からなる π 積層系の電荷を有する状態における分子間相互作用に関する理論研究

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

25. 積分方程式形式の状態間遷移ダイナミクス理論

○笠原 健人[1]、森 俊文[2]、松林 伸幸[1] (阪大院基礎工[1]、九大先導研[2])

26. 開殻一重項分子ジフルオレノチオフェンの単分子電気伝導性に関する理論的研究

○伊藤 嘉宏[1]、多田 幸平[1]、岸 亮平[1,2,3,4]、加藤 真一郎[5]、北河 康隆[1,2,3,4,6] (阪大院基礎工[1]、阪大 QIQB[2]、阪大 RCSEC[3]、阪大 ICS-OTRI[4]、大阪公大院工[5]、阪大 OTRI-Spin[6])

27. 第一原理計算を用いた Yb 導入 Cs₂NaGdCl₆ ダブルペロブスカイト結晶の電子構造、光学特性および熱電特性予測

○鈴木 厚志[1]、奥 健夫[1] (滋賀県大工[1])

28. 混合スピン粗断熱描像に基づくリン光理論

○小西 健登[1, 2]、在間 嵩朗[1, 3]、大田 航[1, 3]、加藤 立久[1]、佐藤 徹[1, 3] (京大福井セ[1]、京大工[2]、京大院工[3])

29. Cu エッジによるヒスチジン吸着に関する密度汎関数理論と機械学習ポテンシャルを用いた理論研究

○草川 卓斗[1]、多田 幸平[1,2]、北野 幸親[2]、岸 亮平[1,2]、北河 康隆[1,2] (阪大基礎工[1]、阪大院基礎工[2])

30. Franck-Condon 過程における非全対称モードの関与する振電遷移と二次振電相互作用密度解析

○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. Mn ドープ SrTiO₃による逆水性ガスシフト反応に対する不純物準位の効果

○石川 晃久[1,2]、大田 航[1,2]、浪花 晋平[2]、井口 翔之[2]、加藤 立久[1]、佐藤 徹[1,2] (京大福井セ[1]、京大院工[2])

32. クネアンの異性化反応の反応経路ネットワーク分析

○江村 紅音[1]、杉山 佳奈美[1]、佐藤 啓文[1,2] (京大院工[1]、京大福井セ[2])

33. 再構成法によるミオグロビン活性中心の電子状態変化に関する理論研究

○原田 茉依[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])

34. 不均一系触媒 Pd₀/Sr₃Ti₂O₇におけるフェルミ面のネスティング

○尾矢 和輝[1,2]、石川 晃久[2,3]、大田 航[2,3]、佐藤 徹[2,3] (京大工[1]、京大福井セ[2]、京大院工[3])

35. Exact (SAC-CI, ESF) 理論による分子の基底・励起・イオン化状態の研究

○中辻 博 (量子化学研究協会)

36. [7]helicene の発光に関する理論的研究

○大石琳敦[1, 2]、在間 嵩朗[1, 3]、大田 航[1, 3]、加藤 立久[1]、佐藤 徹[1, 3] (京大福井セ[1]、京大工[2]、京大院工[3])