

ワークショップ
「複雑物質系の分子理論の発展」
名古屋大学東山キャンパス ES総合館・ESホール
令和6年3月14日

“複雑物質系の分子反応理論を目指して” “Toward the Theory of Molecular Reactions in Complex Material Systems”



長岡正隆
Masataka Nagaoka



名古屋大学 情報学部/大学院情報学研究科
自然情報学科 複雑システム系/複雑系科学専攻
(名大情報文化学部/大学院人間情報学研究科)
平成10年7月採用

今日の内容



第一章 はじめに

第二章 “福井研”を目指して！ 物理から化学へ！

第三章 続け、ノーベル賞！

第四章 長岡研究室、始動！ 旅立ち！？

それまでしてきたことが

“新しく”始めることに繋がる！

第五章 展開 複雑性に向かって

第六章 おわりに ~“フクイ研精神”を継承できているか？~

第七章 謝辞

JOURNEY
『DEPARTURE』
CDアルバム

※著作権の関係上
画像を非表示と
しております

今日の内容



第一章 はじめに

第二章 “福井研”を目指して！ 物理から化学へ！

第三章 続け、ノーベル賞！

第四章 長岡研究室、始動！ 旅立ち！？

それまでしてきたことが
“新しく”始めることに繋がる！

第五章 展開 複雑性に向かって

第六章 おわりに ~“フクイ研精神”を継承できているか？~

第七章 謝辞

JOURNEY
『DEPARTURE』
CDアルバム

※著作権の関係上
画像を非表示と
しております



第一章 はじめに

:01



**NHK にんげんドキュメント
「天突く龍を作れ
～長野 須坂高校文化祭～」
(2006.9.8 放映)**

※著作権の関係上
画像を非表示としております

“設計図”は残さず“心”つなぐ 高校生が半年かけて作った巨大竜を燃やす夜

清水大輔2023年7月1日 8時00分



“生徒が半年以上かけて**巨大な竜のオブジェ**を制作し、文化祭に向けてグラウンドに建立する。後夜祭でそれを**解体**し、**燃やす**。長野県立**須坂高校**（須坂市）で半世紀近く、…受け継がれる伝統行事だ。…

近くに**臥竜山**という山があり、校章がリンゴウ（竜胆）の一つ「ミヤマリンゴウ」であることなどから、同校では**竜**をシンボルとした「**りんどう祭**」（文化祭）で生徒がオブジェを作る。この伝統は1967年に竜の首から上を作ったのが始まりである。

半世紀前、物理教師は言った

分厚い木材を骨格とし、年によって高さ10メートルを超える。しかし、設計図の引き継ぎはないという。50年前、最初に中心となって骨格を設計した、建築士の資格を持つ**物理教師**の言葉が今も語り継がれているという。

「**設計図は（残さず）燃やせ**」。

今年の竜制作でリーダーは言う。「そこが面白いところであり、いいところ。つなげていくのは（設計図という）紙ではなく、気持ちなんです」。



紀元前BC

- 77(S52)03 22 須坂高等学校卒業
- 82(S57)03 16 京大工石化学卒業
- 84(S59)03 14 同院修士 修了 *JSPS: 福井先生 博士
- 87(S62)03 11 同院博士 修了 日本学術振興会
- 88(S63)04 10 JSPS*研究員(基礎化研)
- 91(H03)04 07 基礎化研 副主任研究員
- 93(H05)06 05 米白サマーツアー
- 97(H09)09 01 同上 主任研究員
- 98(H10)01 00 同上 退所(福井先生 逝去)
- 98(H10)07 名古屋大学 大学院 名大異動
- 10 JST*計算科学技術活用型
- 特定研究開発推進事業: ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」
- Lab Ncube誕生!
- 02(H14)03 國際会議 CRN³(化学反応現象に特徴的非平衡非定常性の解明)(基盤C)
- 02(H14)09 教授(人間情報学)
- 03(H15)04 教授(情報科学)
- 04(H16)04 21世紀COE「計算科学フロンティア」

略歴

世界史年表・地図 亀井高孝 編、三上次男 編、林健太郎 編、稻米廣三 編 吉川弘文館 (2024)

世界史年表



- 06(H18)10 JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」 小惑
- 07(H19)04 「すぐできる分子シミュレーションビギナーズ マニュアル」出版 講談社 サイエンス・ティーム (2008)
- 08(H20)12 MSCRS2012 (JST国際)
- 12(H24)05 JST戦略的創造研究推進事業: CREST 「マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築」 StudyCamp2014
- 13(H25)10 PACIFICHEM2015 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大) 教授(情報学部・情報学研究科) 還暦
- 14(H26)04 PACIFICHEM2015 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大) 教授(情報学部・情報学研究科) 還暦
- 15(H27)12 StudyCamp2014
- 16(H28)04 PACIFICHEM2015 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大) 教授(情報学部・情報学研究科) 還暦
- 17(H29)04 PACIFICHEM2015 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大) 教授(情報学部・情報学研究科) 還暦
- 18(H30)09 PACIFICHEM2020
- 20(R02)12 StudyCamp2022
- 23(R05)03



第二章 “福井研”を目指して！ 物理から化学へ！

京都大学入学 (1978)



「新装版 四次元の世界」都筑卓司 講談社(2002)



湯川秀樹 日本人初のノーベル物理学賞を受賞(1949)。



Kyoto University Clock Tower Centennial Hall

<https://www.kyoto-u.ac.jp/ja/about/facilities/campus/clocktower>



「旅人—湯川秀樹伝」(角川文庫) (1960)



エピソード4/新たなる希望

CLOSE ENCOUNTERS OF THE THIRD KIND

『未知との遭遇』
映画ポスター

テレビアニメ
『銀河鉄道666』

※著作権の関係上、一部画像を非表示しております

京大入学 (1978, BC21)

B1

Evening News 1978.7.27



試験管ベビー誕生 (7月、英)



<https://www.kyoto-u.ac.jp/ja/about/facilities/campus/clocktower>



エピソード4/新たなる希望

テレビアニメ
『銀河鉄道666』

キャンディーズ
解散コンサート

NHK 連続テレビ小説
『ブギウギ』

キャンディーズ解散 (4月、後楽園)
(普通の女の子に戻った！)

NHK2023朝ドラ「ブギウギ」10月2日スタート、ヒロインは「キャンディーズ」の伊藤蘭さんの娘さん、趣里さん。

※著作権の関係上、一部画像を非表示しております

京大入学 (1978, BC21)

B1

Evening News 1978.7.27



試験管ベビー誕生 (7月、英)



<https://c5557.ala.jp/kyotosideh-1978-3.htm>

キャンディーズ
解散コンサート



エピソード4/新たなる希望

TVアニメ『銀河鉄道666』



「京大交響楽団」部室前(東山近衛交差点北)
(部室は1996年10月31日に火事で焼失)

京都市電が9月限りで全線廃止！

※著作権の関係上、
一部画像を非表示しております

福井謙一先生、

日本人初！
ノーベル化学賞受賞（1981, BC17）

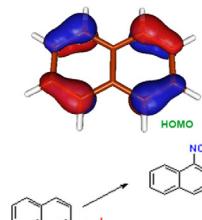


<https://www.kyoto-u.ac.jp/contentarea/ja/issue/kurenai/documents/25.pdf>



https://people.chem.ucsb.edu/kahn/kalju/chem109C/FMO_Theory.html

シリーズ映画第5作(1967)



※著作権の関係上、
画像を非表示としております

YOU ONLY LIVE TWICE
映画ポスター

“1981年、10月19日午後9時50分、電話のベルが鳴る。私と娘が、佳境に入ったショーン・コネリーの「007」に釘づけになっているのを横目に見ながら、夫が何気なく立って廊下にある電話器を取り上げる。…ふと夫の方を覗くと、少し赤みを帯びた表情で、眼が怒ったように見え、珍しく首筋に血管が浮いている。

「そんなことはっきり言えませんよ」「知らんのですよ」などと押し問答の気配で少し変だなと思いつつ、また視線をテレビに戻す。

電話はまだ押し問答が続き、少し夫の声が高くなる。何事かと思いながらも「007」のアクションに気をとられていると、突然テレビの画面に、ニュース速報となつて次の文字が現れた。

「京大教授福井謙一氏ノーベル賞受賞」
(福井先生奥様文)

その年の 福井研究室の忘年会 ('81, BC17) B4

福井先生63歳



ノーベル賞を受賞された先生方が愛した味

日本人初！

B4



教授室でバンザイ！(811020)

B4



<https://flyteam.jp/photo/854929>



ANN NEWS

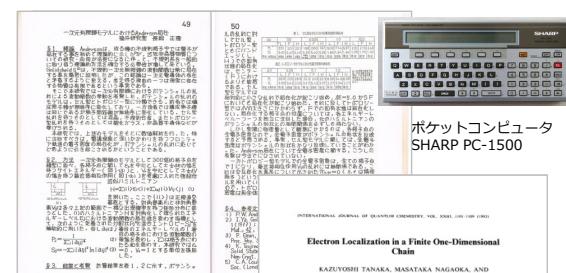
テロップ：「昭和のノーベル賞 日本人初の化学賞 福井謙一氏。」

※著作権の関係上、一部画像を不鮮明または非表示としております



福井先生最後の卒論指導生('82春, BC16) B4

卒業論文：『一次元有限鎖モデルにおけるAnderson局在』



ポケットコンピュータ
SHARP PC-1500

卒論発表会後 石油化学教室入口前
(昭和57年3月11日撮影)



『合成金属』(化学同人)



CC BY-NC-ND 4.0 International



福井先生最後の卒論指導生('82春, BC16) ^{B4}

卒業論文：『一次元有限鎖モデルにおけるAnderson局在』

■非対角乱れでは全電子密度は変わらない！

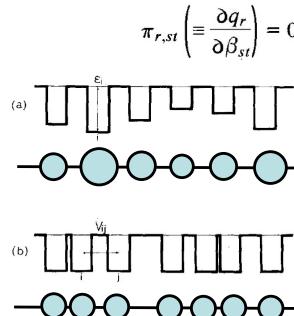
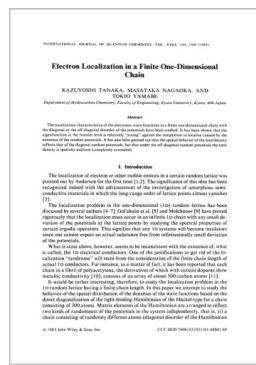


Fig. 1. ポテンシャルと一次元鎖の概念図 (a)対角乱れと(c)非対角乱れ

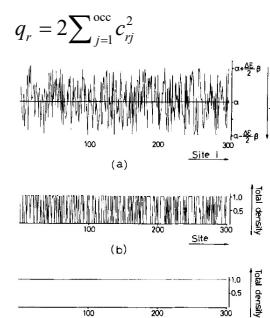


Fig. 2. (a)ポテンシャルと全電子密度((b)対角乱れ(c)非対角乱れ)



C.A. Coulson
(1910-1974)
Oxford大('45-'47)
King's College London
(47-???)



H.C. Longuet-Higgins
(1923-2004)
Cambridge大('54-'67)
Edinburgh大('67-'74)

<https://m.athens.ry.st.andrews.ac.uk/BioGraphies/Coulson/>

$$\pi_{r,st} = \frac{\partial q_r}{\partial \beta_{st}}, \quad \pi_{st,r} = \frac{\partial p_{st}}{\partial \alpha_r},$$

• C.A. Coulson, H.C. Longuet-Higgins, Proc. R. Soc. Londn, A192, 16 (1947)

福井研最後の追コン! ('82春, BC16) ^{B4}

現在の「東山荘」は、2008年に新築されたようだ。
乞う、情報！！



福井研最後の追コン! (820320) ^{B4}

福井研究室としての最後の一枚



紀元前BC

77(S52)0322 須坂高等学校卒業



82(S57)0316 京大工石化卒業

84(S59)0314 同院修士 修了

87(S62)0311 同院博士 修了 ICSM'86

88(S63)0410 JSPS*研究員(基礎化研)

91(H03)0407 基礎化研 副主任研究員

93(H05)0605 米白サマーツアー

97(H09)0901 同上 主任研究員

98(H10)0100 同上 退所 (福井先生 逝去)

98(H10)07 名古屋大学 大学院 名大異動

人間情報学研究科 助教授

JST*計算科学技術活用型

特定研究開発推進事業:

ACT-JST 「凝集反応系の非平

衡非定常ダイナミクスの研究」

“非線形非平衡非定常”誕生!!

国際会議 CRN³(化学反応現象

に特徴的非平衡非定常性

の解説)(基盤C)

教授(人間情報学)

教授(情報科学)

21世紀COE「計算科学フロンティア」

略歴, Brief History



06(H18)10

JST*戦略的創造研究推進事業:
CREST 「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」

小患

07(H19)04

08(H20)12

12(H24)05

13(H25)10

JST戦略的創造研究推進
事業:**CREST** 「マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築」

StudyCamp2014

PACIFICHEM2015

MSCRS2016

(JSPS日伯+名大)

教授(情報学部・情報学
研究科)

還暦

PACIFICHEM2020

StudyCamp2022



ICSM'86 (860601-06, BC12) D3

～“1986合成金属の科学と技術に関する国際会議”～



レセプション:
ホリディイン京都

パンケット:
京都ホテル



ICSM'86 (860601-06)

D3

ウルトラセブン：
第14話
“ウルトラ警備隊
西へ(前編)”
(1968)

ウルトラセブン
Blu-ray



超伝導 BCS理論



ICSM'86 (860601-06)

D3

ウルトラセブン：
第14話
“ウルトラ警備隊
西へ(前編)”
(1968)

『ウルトラセブン』
Blu-ray



六甲防衛センター（地球防衛軍）改め
国立京都国際会館



テレビドラマ『ウルトラセブン』
第14話 “ウルトラ警備隊 西へ(前編)”

六甲防衛センターでのウルトラセブンと
キングジョーの戦闘シーン

※著作権の都合上、一部画像を非表示しております



山邊研海水浴(伊根)(860828-30)



誰のバッグ？



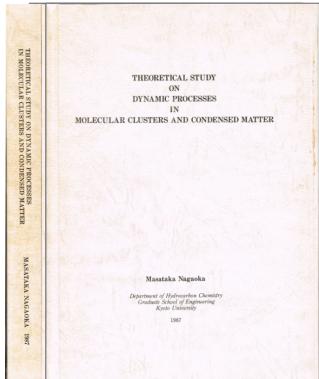
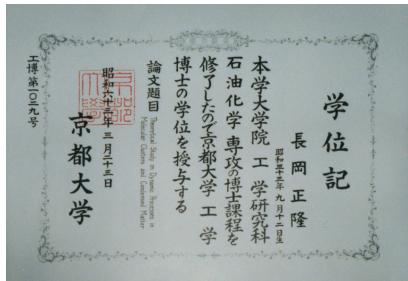
しばた荘
客間風景



学位(工学博士)授与 ('88, BC10)



第21代京都大学総長 西島安則先生から学位記を手渡される。



研究題目： Theoretical Study on Dynamic Processes in Molecular Clusters and Condensed Matter

1988年3月、京都
大学大学院工学研究科
博士課程を修了、工学
博士を授与される。



G.G.Hall教授
(副査のお一人)



紀元前BC

- 77(S52)03 22 須坂高等学校卒業
- 82(S57)03 16 京大工石卒業 福井先生N賞
- 84(S59)03 14 同院修士 修了
- 87(S62)03 11 同院博士 修了 IFC
- 88(S63)04 10 JSPS*研究員(基礎化研)
- 91(H03)04 07 基礎化研 副主任研究員
- 93(H05)06 05 米白サマーツアー
- 97(H09)09 01 同上 主任研究員
- 98(H10)01 00 同上 退所(福井先生 逝去)

略歴

世界史年表・地図



今日の内容



第一章 はじめに

第二章 “福井研”を目指して！ 物理から化学へ！

第三章 続け、ノーベル賞！

第四章 長岡研究室、始動！ 旅立ち！？

それまでしてきたことが
“新しく”始めることに繋がる！

第五章 展開 複雑性に向かって

第六章 おわりに ~“フクイ研精神”を継承できているか？~

第七章 謝辞



JOURNEY
『DEPARTURE』
CD ALBUM

※著作権の関係上
画像を非表示と
しております



:01

第三章 続け、“ノーベル賞”！

基礎化学研究所(現福井謙一記念研究センター)('88, BC10)



ノーベル賞授賞を記念して、京都高野に設立された基礎化学研究所

https://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/outline_ja

1988年4月1日、福井謙一先生の基礎化学研究所所長就任（6/1）に備えて、研究員として着任。



茶室（書：篠田桃紅さん）



初顔合わせ(三階食堂)(880601We, BC10)

基礎化学研究所開所式前後の業務予定表	
新住所：〒606 京都市左京区基町南御門34-4 TEL: 075-711-17708 (代表)	
月 日	曜
5.10～	火
5.13	金
5.17～	水
5.19～27	金
6.1	水
6.3	金
6.4	土
6.14～	水
6.15	木
6.16～	金
6.17	土
6.22	木
6.23～	木
7.1～	金
行事その他の予定	
5.10～ 酒井先生さとみ(74歳)登用 (日、火、木)	
5.13 東京事務所開張 長瀬常務理事、朝倉事務担当	
5.17～ 長瀬常務理事、朝倉事務担当	
5.19～27 建物点渡し 福井先生の荷物搬入(京都工芸繊維大学より)	
6.1 横浜開港台、緑の認明等 浜井利子さん(54歳)登用	
6.3 10:00 写真撮影(日本経済新聞社) 10:30 福井謙一先生(74歳)登用 12:00 レセプション(会場料、料理費共負) 3:00 運行会議(会場料、会員登録料、宿泊料)(6月1日に確定)	
6.4 11:00 福井先生、山邊先生、京都市訪問 (挨拶)	
6.14～ Prof. and Mrs. J. K. Thomas来訪 (Director and Resident professor, The Royal Institution of Great Britain) (6月14日～15日、6月17日～18日) 2:00 基礎化学研究会開催 4:00 Prof. Thomas 京大にてセミナー(分子工学、基礎化研共催)	
6.17 12:00 理事会(会場料、会員登録料)	
6.22 Dr. Anita Entle 6月1日(京大招へり外国人学者) (報告: 京都基研学生の家 TEL: 771-3840)	
6.23～ 7月 山邊先生米国出張(12日～18日, Santa Fe, New Mexico, U.S.A. 参加)	
鉛筆一本の文房具さえない真新しい建物に「よーい、スタート！」といった感じで入館して、福井先生のお荷物の搬入などを手伝いました。	



開所初日の記念撮影 ('88, BC10, 30) (敬称省略)



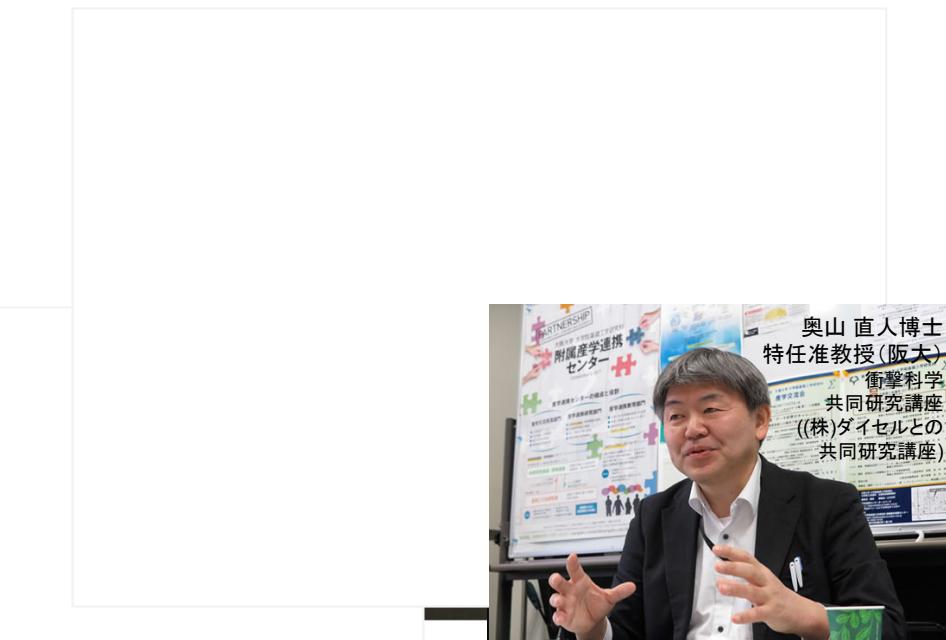
1988年6月1日、三階パントリー(食堂)での会食の後、説明会、記念撮影を経て、福井先生をお迎えした初日の大きな行事を済ませました。

研究所とは… 研究所では…

「緑と文化の京都」(KBS京都)より
福井謙一先生 インタビュー

※こちらの画像は著作権の都合上、非表示としております

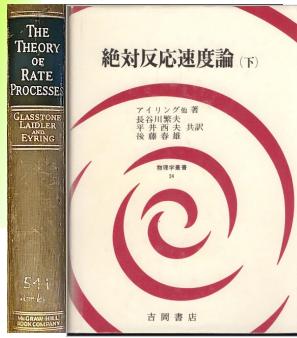
研究室102にて（1991）



*For copyright reasons, the images are not displayed.

研究動機 #1 絶対反応速度論 (反応論の標準理論)

The theory of rate process (International chemical series)
by Samuel Glasstone and others.
New York: McGraw-Hill, 1941.



「第八章 溶液反応」の中の言葉・・・

「...溶液中の化学反応の絶対反応速度論による取り扱いは、原理的には**気体反応**の場合と同じである。...しかし液相中の分子の分配函数に関しては多少の不確かさがあり、したがって、**溶液反応**は**気体反応**におけるよりもっと**基本的でない立場**から取り扱う方が一層便利である。」

（長谷川・平井・後藤 共訳）

気体反応:

$$k = \frac{k_B T}{h} \cdot K^* = \frac{k_B T}{h} \cdot \frac{F_\infty}{F_A F_B} e^{-E_0/RT}$$

分配函数の比

$$k = \frac{k_B T}{h} \cdot K^* = \frac{k_B T}{h} \cdot \frac{c_M^\neq}{c_A c_B \dots} = \frac{k_B T}{h} \cdot K_0^\neq \cdot \frac{\alpha_A \alpha_B \dots}{\alpha_M^\neq}$$

真の平衡定数

<問題意識>

溶液反応も**基本的な立場**で扱うべきである！

→液相における分配函数を用いた絶対反応速度論！

表面反応
酵素反応
も含む！

所長室にて（1991）

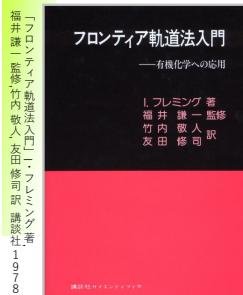


34

研究動機 #2 温度Tと時間t

福井理論

- 1. フロンティア軌道理論
- 2. 極限的反応座標理論



「...フロンティア軌道理論は溶液反応にも多くの場合有効であるが、時として反応分子や溶媒分子群のダイナミックな動きのために補正されなければならない。フロンティア軌道理論において、軌道は**静止した核配置**に対して**電子状態理論**により定義されるからである。また、**極限的反応座標理論**も反応系が**無限に緩やかな速度**で変化してゆく筋道（“反応の一つの中心”（福井の言））に関する理論である。（月刊「化学」福井謙一先生追悼号より）」

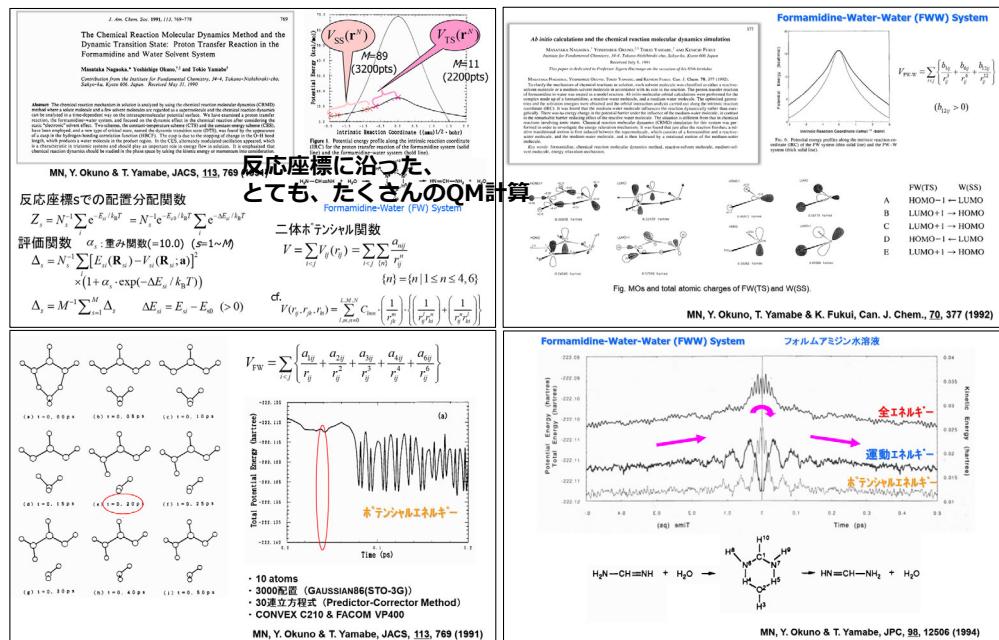
「...溶媒効果（普通、活性化エントロピー項にきいてくると考えられている）は、軟（ソフト）および硬（ハード）酸あるいは塩基の理論の説明の一部としてもよく知られている。...これからわかるように、フロンティア軌道の相互作用に基づいた議論は有用であるが、ここに述べた極めて重大な限界があることを忘れずに応用してほしい。（「フロンティア軌道法入門」より）」

<私の問題意識>

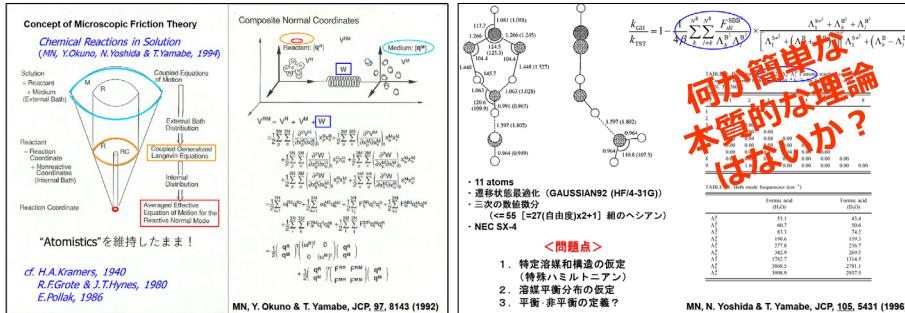
両理論には、ともに**二つのティー**（温度Tと時間t）の概念が直接入っていない。

→ Tとtを入れた理論を作りたい！

溶液反応における反応エネルギー移動機構： 化学反応のための発見的ポテンシャル関数



分子摩擦理論： 化学反応とブラウン運動



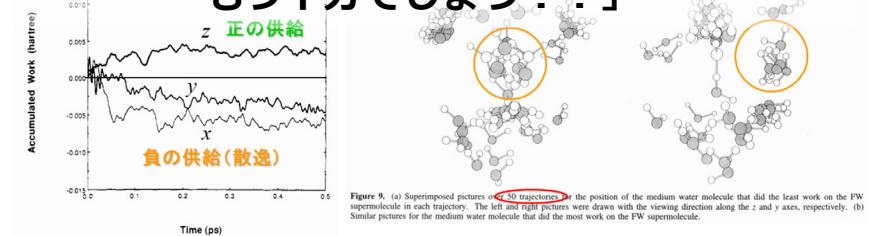
溶液反応における反応エネルギー移動機構： 化学反応のための発見的ポテンシャル関数

溶液反応における反応エネルギー移動機構（成分仕事分析）

累積仕事

$$\begin{aligned}\Delta W(t) &= \sum_j \Delta W_j(t) && \text{vth atom in FW} \\ &= \sum_j \int_0^t d\tau \mathbf{f}_j(\tau) \cdot \mathbf{v}(\tau) && \text{jth atom in water} \\ &= \sum_i \int_0^t d\tau \left(\sum_v \mathbf{f}_{vj}(\tau) \cdot \mathbf{v}_v(\tau) \right)\end{aligned}$$

「同じ計算で、論文5報を書いたら もう十分でしょう！？」



MN. Y. Okuno & T. Yamabe. JPC. 98, 12506 (1994)

分子摩擦理論と自由エネルギー面

Free-Energy Surface and Potential of Mean Force

Potential of Mean Force and

$$g(q^S) = V^S Z_{SS}^{-1} \int dq^B \exp[-\beta(U_0 + U^S + U^{SS} + U^{BS})]$$

Configuration Integral :

$$\Delta(\text{gas}) = \theta^{-1} \ln Q(\text{gas})$$

$$Q(qS) = (2\pi)^{N^{3/2}} Z_S^S = (2\pi)^{N^{3/2}} Z_{SS} q(qS)$$

$$(\beta h^c) - V^c = (\beta h^c) - V^c$$

$$\therefore w(q^S) = A(q^S) + C$$

$$C = \beta^{-1} \ln \left[\left(\frac{2\pi}{\beta h^2} \right)^{N^{3/2}} \frac{Z_{SS}}{V^S} \right]$$

MN, N Yoshida & T Yamabe, IJOC, 60, 287 (1998)

Reduced System Hamiltonian and Free-Energy Surface

$$\begin{aligned}
g(\mathbf{q}^S) &= V^S Z_{S,S}^{-1} \exp\{-\beta [U_0 + U^S(\mathbf{q}^S) + U^{S\bar{S}}(\mathbf{q}^S)]\} \\
&\quad \times \int d\mathbf{q}^B \exp\{-\beta [U^B(\mathbf{q}^B) + U^{S\bar{S}}(\mathbf{q}^S, \mathbf{q}^B)]\} \\
&= V^S Z_{S,S}^{-1} \exp\{-\beta [U_0 + U^S(\mathbf{q}^S) + U^{S\bar{S}}(\mathbf{q}^S)]\} \\
&\quad \times \prod_k^{N^B} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{B}\Lambda_k^B} \cdot \exp\left[\frac{1}{2} \sum_k^{N^B} \left(\frac{F_{k,k}^{B,S}}{\sqrt{B}\Lambda_k^B} q_k^S \right)^2\right] \\
&= V^S Z_{S,S}^{-1} \prod_k^{N^B} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{B}\Lambda_k^B} \\
&\quad \times \exp\left[-\beta \left[(U_0 + U^S(\mathbf{q}^S) + U^{S\bar{S}}(\mathbf{q}^S)) - \frac{1}{2} \sum_k^{N^B} \left(\frac{F_{k,k}^{B,S}}{\sqrt{B}\Lambda_k^B} q_k^S \right)^2 \right]\right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} w(\mathbf{q}^S) &= -\beta^{-1} \ln g(\mathbf{q}^S) \\ &= U_0 + 2 \sum_{i=1}^{N^S} \left(\left| A_i^S \right|^2 - \sum_k \frac{\left| F_{ik}^S \right|^2}{A_k^S} \right) / \left| \mathbf{q}^S \right|^2 \\ &\quad + 2 \sum_{i,j,k \in \{d\}} \left\{ \left| F_{ik}^S \right|^2 - \sum_k \frac{\left| F_{ik}^S \right|^2 \left| F_{jk}^S \right|^2}{\left| A_k^S \right|^2} \right\} \left| \mathbf{q}^S \right|^2 + D \end{aligned}$$

$$D = -\beta^{-1} \ln \left(\frac{V^S Z_{SS} \prod_k \frac{Y_k \pi_k}{\sqrt{\beta \Delta_k}}}{B} \right)$$

$$f_s^S = -\frac{\partial w(q^S)}{\partial \alpha} = -\frac{\partial A(q^S)}{\partial \alpha} = -\frac{\partial H^S}{\partial \alpha}$$

自由エネルギー勾配法



米白サマーツアー : ACTC08 & ゴードンコンファレンス ('93夏, BC5)



55年体制崩壊、細川政権誕生へ(総選挙930718)



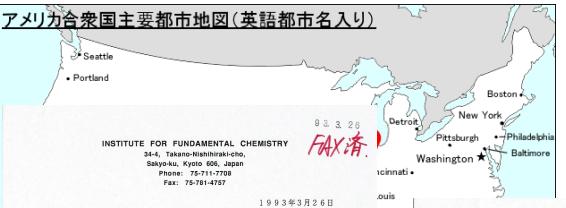
米白サマーツアー : ACTC08 & ゴードンコンファレンス ('93夏, BC5)



TACC2023(N.Makri教授)230905



米白サマーツアー : ACTC08 & ゴードンコンファレンス ('93夏, BC5)



Dr. Susumu Okazaki
Mail box 41
Noyes Laboratory
Department of Chemistry, University of Illinois
505 South Matthews Ave., Urbana, Illinois 61801
U.S.A.

岡崎さん、お見光ですか？

アリエの活動もすこし減れ、パリエと研究に没頭でおられますこと思います。

さて、大阪にも下記の学会に出発する事が決まっていますので、その前の6月中旬に岡崎さんのお見合に訪問したいと考えています。ご都合を教えてください。

1. 1993 Gordon Conference on Molecular Energy Transfer (New Hampton School, June 20-25, 1993)
2. Eighth American Conference on Theoretical Chemistry (University of Rochester, June 28-July 2, 1993).

宜しくお願い致します。では、さようなら。

敬具

基礎化学研究所
長岡正隆
InterNet: C5213@salakr.kudpc.kyoto-u.ac.jp
BBS: C54213@SPKNUPC.BITNET

上記 ひょっとしたらj-sci.eeアドレスを変えたのですか？ 何回かトラブルしたのですが失敗しました。



From okazaki@frej.scs.uiuc.edu Tue Mar 30 00:14 JST 1993
Received: from frej.scs.uiuc.edu by sakura.kudpc.kyoto-u.ac.jp (4.1.6/4.J.6)
Received: from frej.scs.uiuc.edu by ANONMOUS [128.223.129.125]
(920330.SGI/IDa-1.4.4); Mon, 29 Mar 93 09:13:51 -0600
From: Susumu Okazaki <okazaki@frej.scs.uiuc.edu>
Message-ID: <>9303291513.AAA4454@frej.scs.uiuc.edu>
Subject: Re: [j-sci] お見合
To: c54213@salakr.kudpc.kyoto-u.ac.jp
Date: Mon, 29 Mar 93 09:13:50 CST
X-Mailer: ELM [version 2.3 PL11]
Content-Type: text
Content-Length: 1006

Mar. 29, 1993

Dear Dr. Nagaka

I received your facsimile on Friday in the last week. I'm sorry for my slow response. This is because I waited for the recovery from the computer trouble.

In any case, it is a good news that you can visit here. Please let me know your visiting schedule when it is fixed. I can arrange your discussion with Prof. G. Wolynes. A few other researchers who are interested in molecular energy transfer and you need to stay near your hotel near University of Urbana-Champaign about eighty miles south of Chicago. There is a small airport (Champaign airport) in this town and several flights from Chicago, New York, and other important cities are available.

I am looking forward to see you. Good bye.

Sincerely,
Susumu Okazaki



米白サマーツアー : ACTC08 & ゴードンコンファレンス ('93夏, BC5)



Molecular Energy Transfer

GORDON RESEARCH CONFERENCE ON
MOLECULAR ENERGY TRANSFER

June 20-25, 1993
New Hampton School
New Hampton, New York, USA

David S. King and John C. Stephenson, Co-Chairs

SCHEDULE OF SESSIONS

MORNING A.M.

1. Plasma State: Session Leader: Stephen R. Leone (NIST/JILA)

8:45 - 9:00 Ammosions

9:00 - 9:15 Overview

9:15 - 9:30 C. Bradley Moore, U. C. Berkeley, "Vibrations at Unimolecular Transition States"

9:45 - 10:00 Coffee Break

10:45 - 11:15

11:15 - 11:30

12:00 - 12:30

MONDAY P.M.

1. 12:45 - 1:15

1:15 - 1:45

2:00 - 2:30

MONDAY P.M.

2. 2:45 - 3:15

3:15 - 3:45

4:00 - 4:30

4:30 - 4:50

4:50 - 5:10

5:15 - 5:30

5:30 - 5:50

5:50 - 6:10

6:15 - 6:30

6:30 - 6:50

6:50 - 7:10

7:30 - 7:50

8:00 - 8:20

8:20 - 8:40

8:40 - 8:50

8:50 - 9:10

9:00 - 11:00

11:00 - 11:30

11:30 - 11:45

11:45 - 12:00

12:00 - 12:15

12:15 - 12:30

12:30 - 12:45

12:45 - 12:55

12:55 - 13:00

13:00 - 13:15

13:15 - 13:30

13:30 - 13:45

13:45 - 13:55

13:55 - 14:00

14:00 - 14:15

14:15 - 14:30

14:30 - 14:45

14:45 - 14:55

14:55 - 15:00

15:00 - 15:15

15:15 - 15:30

15:30 - 15:45

15:45 - 15:55

15:55 - 16:00

16:00 - 16:15

16:15 - 16:30

16:30 - 16:45

16:45 - 16:55

16:55 - 17:00

17:00 - 17:15

17:15 - 17:30

17:30 - 17:45

17:45 - 17:55

17:55 - 18:00

18:00 - 18:15

18:15 - 18:30

18:30 - 18:45

18:45 - 18:55

18:55 - 19:00

19:00 - 19:15

19:15 - 19:30

19:30 - 19:45

19:45 - 19:55

19:55 - 20:00

20:00 - 20:15

20:15 - 20:30

20:30 - 20:45

20:45 - 20:55

20:55 - 21:00

21:00 - 21:15

21:15 - 21:30

21:30 - 21:45

21:45 - 21:55

21:55 - 22:00

22:00 - 22:15

22:15 - 22:30

22:30 - 22:45

22:45 - 22:55

22:55 - 23:00

23:00 - 23:15

23:15 - 23:30

23:30 - 23:45

23:45 - 23:55

23:55 - 24:00

24:00 - 24:15

24:15 - 24:30

24:30 - 24:45

24:45 - 24:55

24:55 - 25:00

25:00 - 25:15

25:15 - 25:30

25:30 - 25:45

25:45 - 25:55

25:55 - 26:00

26:00 - 26:15

26:15 - 26:30

26:30 - 26:45

26:45 - 26:55

26:55 - 27:00

27:00 - 27:15

27:15 - 27:30

27:30 - 27:45

27:45 - 27:55

27:55 - 28:00

28:00 - 28:15

28:15 - 28:30

28:30 - 28:45

28:45 - 28:55

28:55 - 29:00

29:00 - 29:15

29:15 - 29:30

29:30 - 29:45

29:45 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

29:55 - 29:55

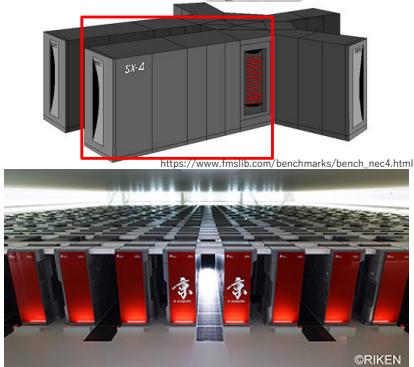
NEC会長に会見、SX-4導入へ (950831, BC3, 37)



開所当時のマシン
CONVEX C1-XP



関本忠弘
NEC会長(当時)
(IFC理事)



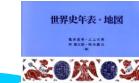
元(独)理化学研究所 次世代スーパーコンピュータ
開発実施本部 プロジェクトリーダー兼副本部長



紀元前BC

77(S52)03 22 須坂高等学校卒業
82(S57)03 16 京大工石卒業 福井先生卒業
84(S59)03 14 同院修士 修了
87(S62)03 11 同院博士 修了 IFC
88(S63)04 10 JSPS*研究員(基礎化研)
91(H03)04 07 基礎化研 副主任研究員
93(H05)06 05 米白サマーツアー
97(H09)09 01 同上 主任研究員
98(H10)01 00 同上 退所(福井先生 逝去)

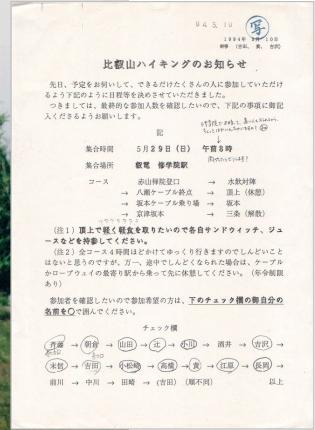
略歴



「比叡山ハイキング」 -ロープウェイ駅にて- 伝説! (940529, BC4, in 36)



福井先生は、比叡山の阿闍梨に頂いた
という“杖”をいつも携帯していました。



名古屋大学へ('980701, BC0) 秋



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

パノラマビュー



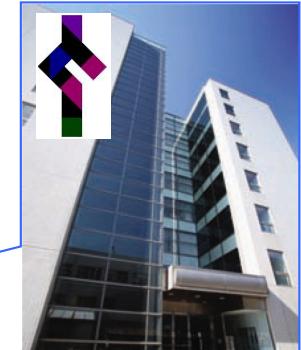
東山キャンパス

地下鉄「名古屋大学」駅

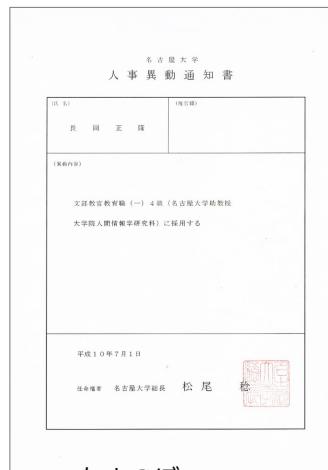


500 m

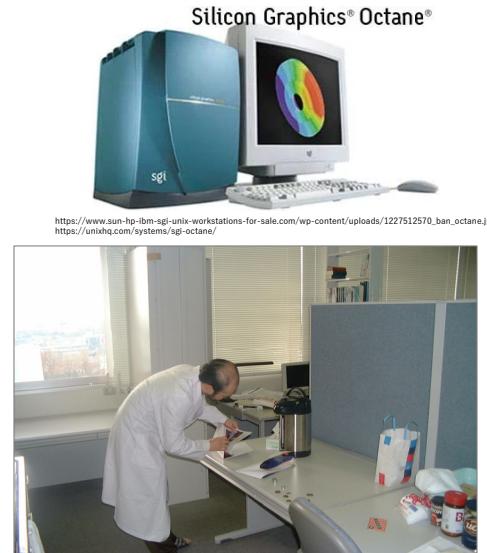
当時
情報文化学部・大学院 “人間情報学研究科”
“物質・生命情報学”専攻



名古屋大学 大学院 人間情報学研究科 着任！ ('980701, AD0)



あまのぼ
“天上り”！？



今日の内容

第一章 はじめに

第二章 “福井研”を目指して！ 理論物理から理論化学へ！

第三章 続け、ノーベル賞！

第四章 長岡研究室、始動！ 旅立ち！？

それまでしてきたことが
“新しく”始めることに繋がる！

第五章 展開 複雑性に向かって

第六章 おわりに ~“フクイ研精神”を継承できているか？~

第七章 謝辞



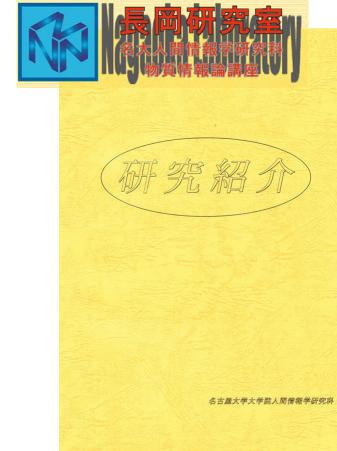
JOURNEY
『DEPARTURE』
CDアーティスト

※著作権の関係上
画像を非表示と
しております

第四章 長岡研究室、始動！ 旅立ち!?

:01

名古屋大学 大学院 人間情報学研究科 着任！ ('980701, AD0)

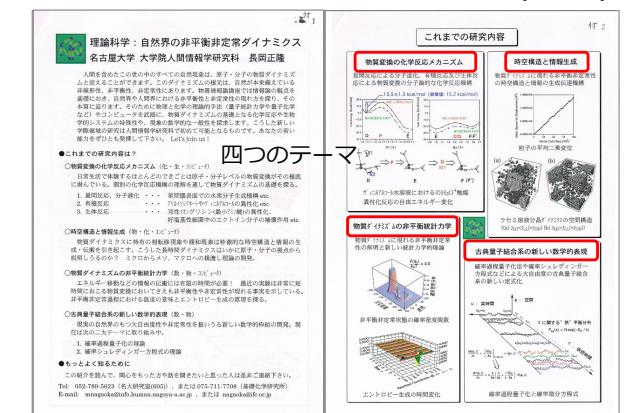


(1998)

- ・物質変換の化学反応メカニズム
- ・時空構造と情報生成
- ・物質ダイナミズムの非平衡統計力学
- ・古典量子結合系の新しい数学的表現

(2024)

- ・運動から非平衡系へ
- ・孤立反応から凝集系化学反応へ
- ・素反応から複合化学反応へ
- ・分子から生命現象へ
- ・並行コンピューティングからマルチスケール情報処理へ
- ・実験と理論計算のインターパレイによる産業応用





自由エネルギー勾配法 (1998)

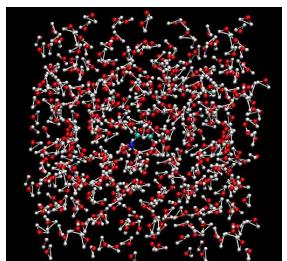
～溶液中における分子の形や反応を調べる方法～



■溶液中の分子がどんな形をしているかを調べる方法

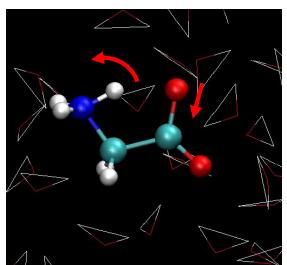
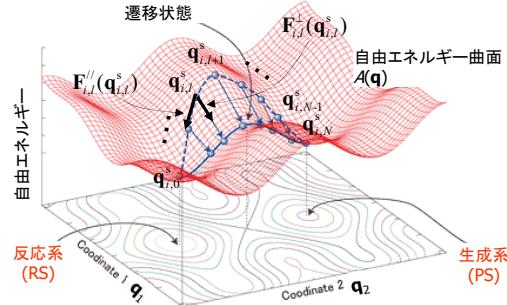
溶液中の
平均的な力

$$F_{i,l}^{FE}(q_{i,l}^s) = -\frac{\partial A(q_{i,l}^s)}{\partial (q_{i,l}^s)} = -\left\langle \frac{\partial V_{SB}(q_{i,l}^s)}{\partial (q_{i,l}^s)} \right\rangle_i \approx 0,$$



奥山
博士

■自由エネルギー $A(q_{i,l}^s) = -k_B T \ln Z(q_{i,l}^s)$ $i=0, \dots, N$



例 水溶液中のグリシンの異性化

Q IR 10\rvkld/P Q) #N\lqwd#M#xdqwp #khp 1/
435/#535#4<<,#
Wdnhdnd#N ldp xud#Nr|dqr#Dvdg d# #Q,#
Wkhru#khp #fwd#63/#48#5344,#

『化学』特集号 – 福井謙一先生が遺したもの – (‘98, BC0, in 39)

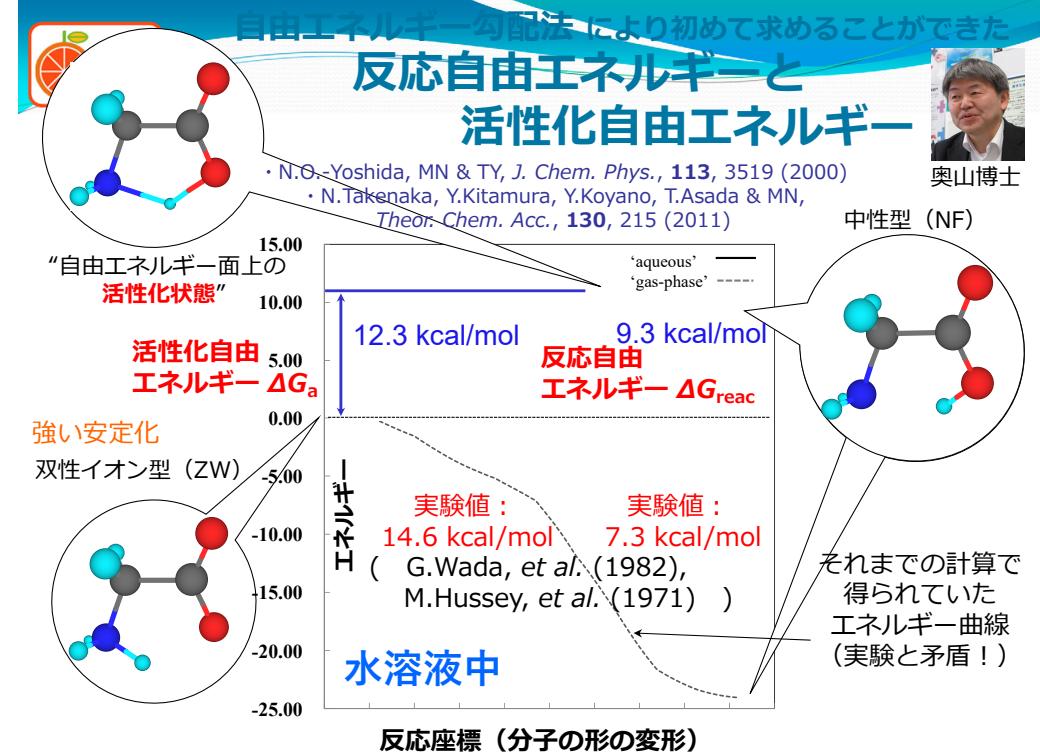
「化学」Vol.53 化学同人 1998



若手化学者
師を語る



座談会(980130)が開かれた
“聖護院御殿莊”



奥山博士

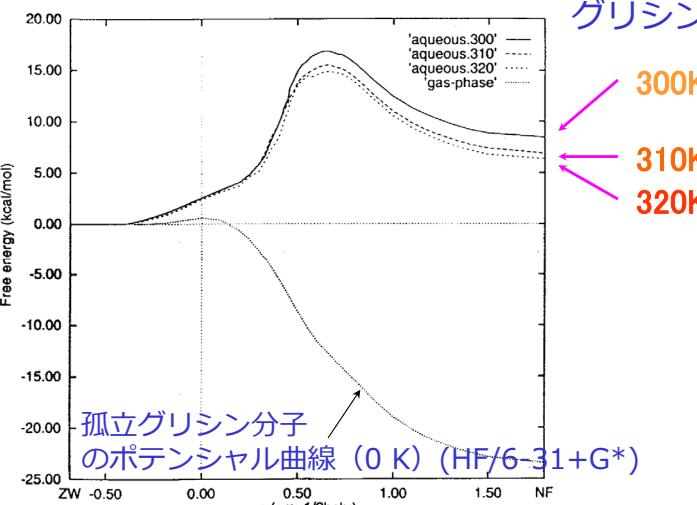
中性型 (NF)

それまでの計算で
得られていた
エネルギー曲線
(実験と矛盾!)



活性化エネルギーの温度依存性
自由エネルギー計算から温度依存性を知ることができる！
(QM計算からでは求まらない情報！)

グリシン水溶液



孤立グリシン分子
のポテンシャル曲線 (0 K) (HF/6-31+G*)

MN, N.Yoshida, T.Yamabe, JPC A, 102, 8202 (1998).

YangのグループもFEG法を開発しました！

— FEG法 via

QM/MM 最小自由エネルギー経路 (QM/MM-MFEP) 法 —



J. Chem. Theory Comput. 2007, 3, 390–406

JCTC
Journal of Chemical Theory and Computation

QM/MM Minimum Free-Energy Path: Methodology and Application to Triosephosphate Isomerase

Hao Hu, Zhenyu Lu, and Weitao Yang*

Department of Chemistry, Duke University, Durham, North Carolina 27708

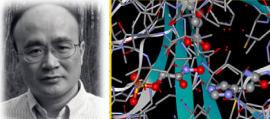
Received July 21, 2006

Abstract: Structural and energetic changes are two important characteristic properties of a chemical reaction process. In the past, determining reaction pathways was a very challenging because of the high computational cost associated with the quantum mechanical calculations and phase space sampling. Although the combined quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) approach significantly reduces the amount of the quantum mechanical calculations and facilitates the simulation of solution-phase and enzyme-catalyzed reactions, the search for the minimum energy path (MEP) and the corresponding reaction coordinate, which can be achieved routinely only with semiempirical quantum mechanical methods. QM/MM simulations are often restricted to narrow regions of the potential energy surface (PES). Therefore, it has been performed with the QM/MM-free energy path (QMM-FEP) method. The free-energy gradient with respect to the reaction coordinate is calculated by using free-energy perturbation calculations at the molecular dynamics level. The resulting reaction path is obtained by a local search on path, which is based on local conformations difficult to obtain in practice. To overcome the problem of further energy sampling along the reaction coordinate, we have developed the QM/MM reaction processes in solution and in terms of the free energy of the system as a function of the reaction coordinate. The reaction coordinate optimization is performed by using the free-energy difference between two QM conformations and the reaction coordinate gradient method. The free-energy gradient with respect to the reaction coordinate is calculated by using free-energy gradient method: Application to aqueous-phase Menschutkin reaction between ammonia and methyl chloride. *Chem. Phys. Lett.* 2001, 348, 350–356.

The 2nd International Symposium on Large-scale Computational Science and Engineering



$$\frac{\partial f_0(r_{QM})}{\partial r_{QM,j}} = \frac{\partial}{\partial r_{QM,j}} \ln(Z_0(r_{QM})) \\ = \frac{\int \frac{\partial E(r_{QM}, r_{MM})}{\partial r_{QM,j}} \exp(-\beta E(r_{QM}, r_{MM})) dr_{MM}^M}{Z_0(r_{QM})} \\ = \left(\frac{\partial E(r_{QM}, r_{MM})}{\partial r_{QM,j}} \right)_{r_{MM}}$$



https://www.lagms.org/members/yang.php



FEG
Method

私達の論文

- (51) Hino, H.; Nagae, Y.; Nagaoaka, M. Transition-state optimization by the free energy gradient method: Application to aqueous-phase Menschutkin reaction between ammonia and methyl chloride. *Chem. Phys. Lett.* 2001, 348, 350–356.
 (52) Okuyama-Yoshida, N.; Kataoka, K.; Nagaoaka, M.; Yamabe, T. Potential energy function for intramolecular proton transfer reaction of glycine in aqueous solution. *J. Phys. Chem. A* 1998, 102, 285–292.
 (53) Okuyama-Yoshida, N.; Kataoka, K.; Nagaoaka, M.; Yamabe, T. Structure optimization via free energy gradient method: Application to the reaction in aqueous solution. *J. Chem. Phys.* 2000, 113, 3519–3524.
 (54) Nagaoaka, M.; Okuyama-Yoshida, N.; Yamabe, T. Origin of the transition state on the free energy surface: Intramolecular proton transfer reaction of glycine in aqueous solution. *J. Phys. Chem. A* 1998, 102, 280–285.
 (55) Okuyama-Yoshida, N.; Nagaoaka, M.; Yamabe, T. Transition-state optimization on free energy surface: Toward solution chemical reaction ergodology. *Int. J. Quantum Chem.* 1998, 70, 95–103.

H. Hu, Z. Lu and W. Yang, *J. Chem. Theory and Comput.* 3, 390 (2007)

略歴

- AD
 06(H18)1008JST*戦略的創造研究推進事業:
CREST「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」
- 07(H19)0409小志
 08(H20)1210「すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル」出版
- 12(H24)0515MSCRS2012
 (JST国際)
- 13(H25)1016JST戦略的創造研究推進事業:
CREST「マクロ化学現象シミュレーションにおける計算分子技術の構築」
- 14(H26)0417StudyCamp2014
 15(H27)1218PACIFICHEM2015
 16(H28)0419MSCRS2016
 (JSPS日伯+名大)
 17(H29)0420教授(情報学部・情報学研究科)
 18(H30)0921還暦
 20(R02)1223PACIFICHEM2020
 23(R05)0325StudyCamp2022
- 紀元AD
 98(H10)0700名古屋大学 大学院 名大異動
 人間情報学研究科 助教授
- *JST: 10 JST*計算科学技術活用型
 科学技術振興機構
ACT-JST「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」
 “非線形非平衡非定常”誕生!!
- 02(H14)0304国際会議 CRN³(化学反応現象に特徴的非平衡非定常性の解明)(基盤C)
 02(H14)09教授(人間情報学)
 03(H15)0405教授(情報科学)
 04(H16)040621世紀COE「計算科学フロンティア」

FEG法は“メタダイナミクス法”の開発に影響を与えたに違いない！？

Escaping free-energy minima

Alessandro Laio and Michele Parrinello*

Centro Svizzero di Calcolo Scientifico, Via Cantonale, CH-6928 Manno, Switzerland; and Department of Chemistry, Eidgenössische Hönggerberg HCI, CH-8093 Zurich, Switzerland

Communicated by David Chandler, University of California, Berkeley, CA, July 18, 2002 (received for review May 8, 2002)



https://people.ssa.it/laio/



symmetrial method (5, 6, 9, 18), allow an accurate FES in many dimensions. The drawback of these t they are efficient only if a good approximation known *a priori*, whereas this is not required in our

nature of the method is its ability to provide information on the free energy of a system in a few dimensions. The scaled forces $\phi_i = F_i/\Delta x_i$, where Δx_i is the estimated size of the FES with respect to dimension i , is a modulus of the i -th dimension. The number of degrees of freedom N is determined by very few coarse-grained dynamics steps by using large Gaussians. Subsequently, our qualitative knowledge of the FES can be improved by using smaller Gaussians, eventually reducing the dimensionality of the problem by exploiting the topological information obtained with the large Gaussians.

M.P. thanks Yannis Kevrekidis for a very ill-coarse-grained method and David Chandler his understanding of the statistical mechanism. Thanks to José VandeVondele for many prec-

8. Gong, X. G. & Wilkins, J. W. (1999) *Phys. Rev. B* **59**, 54–57.

9. VandeVondele, J. & Rothlisberger, U. (2000) *J. Chem. Phys.* **113**, 4863–4868.

10. Okuyama-Yoshida, N.; Kataoka, K.; Nagaoaka, M.; Yamabe, T. (2000) *J. Phys. Chem. B* **104**, 5234–5238.

11. Wang, F. & Landau, D. P. (2001) *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050–2053.

12. VandeVondele, J. & Rothlisberger, U. (2002) *J. Phys. Chem. B* **106**, 205–210.

13. Rahman, J. A. & Tully, J. C. (2002) *J. Chem. Phys.* **116**, 8750–8760.

PNAS | October 1, 2002 | vol. 99 | no. 20 | 12565

FEG法は十分に普及した！！

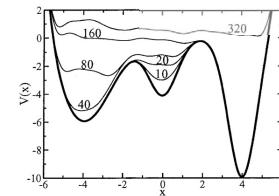
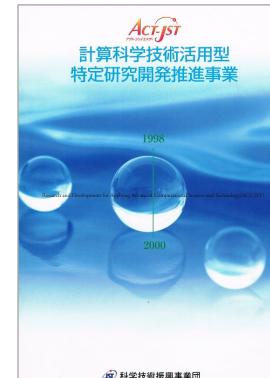


Fig. 1. Evolution of the sum of a one-dimensional model potential $V(x)$ and the accumulating Gaussian tails of Eq. 2. The dynamic evolution (thin line) is labeled by the number of dynamical iterations (Eq. 1). The starting potential (thick line) has three minima and the dynamics is initiated in the second minimum.

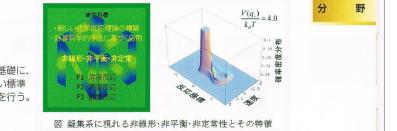
Laio and Parrinello

A. Laio and M. Parrinello, *PNAS*, **99**, 12562 (2002)

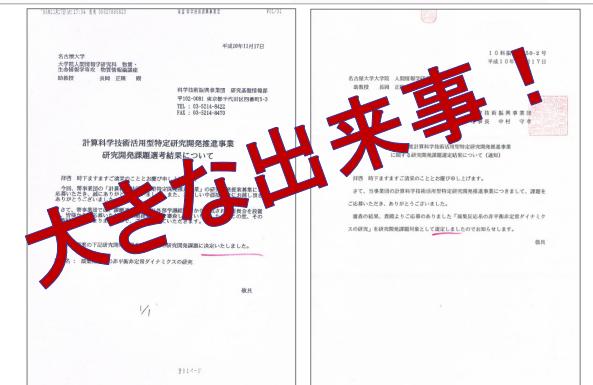
ACT-JST「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」採択 ('981117, AD0)



凝集反応系の非平衡非定常
ダイナミクスの研究
(名古屋大学 大学院人間情報学研究科 助教授)



応募を勧めてくれた
笹井理生先生
(当時 名大院人間情報学研究科教授)



ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」採択 ('981117, AD0)

このプロジェクトが、もし採択されていなければ歴史が変わって・・・



映画『Back to the future』DVD

『バック・トゥー・ザ・フューチャー』
(R.Zemeckis, 1985)

※著作権の関係上、一部画像を非表示
または不鮮明としております

ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」採択 ('981117, AD0)



科学技術振興“事業団”



ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」採択 ('981117, AD0)

Acjst

**計算科学技術活用型
特定研究開発推進事業**

1998

2000

科学技術振興事業団

**凝聚反応系の非平衡非定常
ダイナミクスの研究**

長岡 正隆
(名古屋大学 大学院人間情報学研究科 助教授)

量子化学や分子力学法などの計算科学的や局所分散技術を基に、
非規則性、非平衡性、非定常性を加味した凝聚系化学反応の新しい標準理論を確立する。更に環境問題などに現れる現象で実践的応用を行う。

図 組合系に現れる複数形・非平衡・非定常性とその特徴

図 組合系に現れる複数形・非平衡・非定常性とその特徴

化 学 工 業 の 脈

1998年(平成10年)11月20日(金曜日)

安価な供給など
通産・産構審に部会

工業アルコー
ド

研究期間： 3年間

研究費：～150,000千円

[進]

〔総〕

〔進〕

〔総〕

ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」採択 ('981117, AD0)



PCクラスター（DEC（COMPAQ）

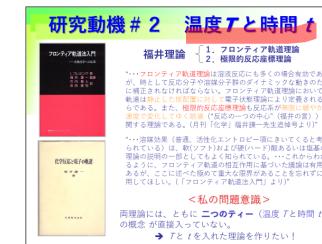


Origin200 (SiliconGraphics)

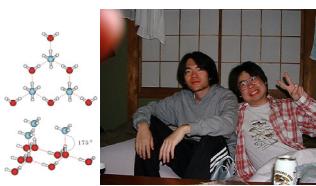
「1999年 忘年会」栄にて ('99, AD1)



ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」採択 ('981117, AD0)



Tとtの研究を理論的・情報学的観点から取り組んでくれた岡本君 (当時M2、現HPCシステムズ)

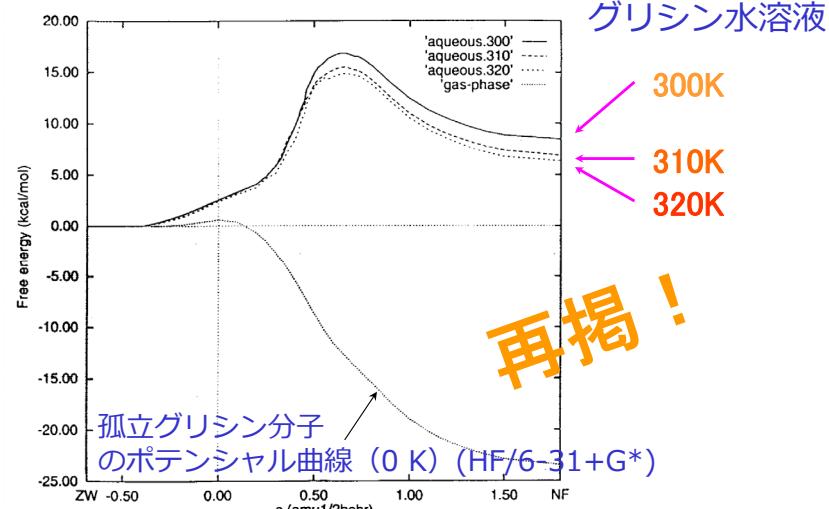


Tとtの研究を実践してくれた岡崎君 (当時PD、現弘前大講師) と原君 (当時M2、現産総研主任研究員)



活性化エネルギーの温度依存性

自由エネルギー計算から温度依存性を知ることができる！
(QM計算からでは求まらない情報！)



MN, N.Yoshida, T.Yamabe, JPC A, 102, 8202 (1998).

略歴

- 77(S52)03 須坂高等学校卒業
- 82(S57)03 京大工石化卒業
- 84(S59)03 同院修士 修了
- 87(S62)03 同院博士 修了
- 88(S63)04 JSPS*研究員(基礎化研)
- 91(H03)04 基礎化研 副主任研究員
- 93(H05)06 米白サマーツアー
- 97(H09)09 同上 主任研究員
- 98(H10)01 退所 (福井先生 逝去)
- 98(H10)07 同上 退所 (福井先生 逝去)
- *JST: 10 科学技術振興機構
- ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」
Lab Ncube誕生！
- 02(H14)03 04 国際会議 CRN³(化学反応現象に特徴的非平衡非定常性の解明)(基盤C)
- 02(H14)09 教授(人間情報学)
- 03(H15)04 教授(情報科学)
- 04(H16)04 21世紀COE「計算科学フロンティア」

- 06(H18)1008 JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」
- 07(H19)04 09 小患
- 08(H20)12 10 「すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル」出版
- 12(H24)05 15 MSCRS2012 (JST国際)
- 13(H25)10 16 JST戦略的創造研究推進事業: CREST 「マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築」
- 14(H26)04 17 StudyCamp2014
- 15(H27)12 PACIFICHEM2015
- 16(H28)04 19 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
- 17(H29)04 20 教授(情報学部・情報学研究科)
- 18(H30)09 21 還暦
- 20(R02)12 23 PACIFICHEM2020
- 23(R05)03 25 StudyCamp2022



略歴



77(S52)03	須坂高等学校卒業
82(S57)03	京大工石卒業 福井先生N賞
84(S59)03	同院修士 修了
87(S62)03	同院博士 修了
88(S63)04	JSPS*研究員(基礎化研)
91(H03)04	基礎化研 副主任研究員
93(H05)06	米白サマーツアー
97(H09)09	同上 主任研究員
98(H10)01	同上 退所 (福井先生 逝去)
98(H10)07	名古屋大学 大学院 名大異動 人間情報学研究科 助教授
*JST: 10 科学技術振興機構 Lab Ncube誕生 !	JST*計算科学技術活用型 特定研究開発推進事業: ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」 “非線形非平衡非定常”誕生 !!
02(H14)03	国際会議 CRN ³ (化学反応現象に特徴的非平衡非定常性の解明)(基盤C)
02(H14)09	教授(人間情報学)
03(H15)04	教授(情報科学)
04(H16)04	21世紀COE「計算科学フロンティア」



略歴



77(S52)03	須坂高等学校卒業
82(S57)03	京大工石卒業 福井先生N賞
84(S59)03	同院修士 修了
87(S62)03	同院博士 修了
88(S63)04	JSPS*研究員(基礎化研)
91(H03)04	基礎化研 副主任研究員
93(H05)06	米白サマーツアー
97(H09)09	同上 主任研究員
98(H10)01	同上 退所 (福井先生 逝去)
98(H10)07	名古屋大学 大学院 名大異動 人間情報学研究科 助教授
*JST: 10 科学技術振興機構 Lab Ncube誕生 !	JST*計算科学技術活用型 特定研究開発推進事業: ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」 “非線形非平衡非定常”誕生 !!
02(H14)03	国際会議 CRN ³ (化学反応現象に特徴的非平衡非定常性の解明)(基盤C)
02(H14)09	教授(人間情報学)
03(H15)04	教授(情報科学)
04(H16)04	21世紀COE「計算科学フロンティア」



略歴

77(S52)03	須坂高等学校卒業
82(S57)03	京大工石卒業 福井先生N賞
84(S59)03	同院修士 修了
87(S62)03	同院博士 修了
88(S63)04	JSPS*研究員(基礎化研)
91(H03)04	基礎化研 副主任研究員
93(H05)06	米白サマーツアー
97(H09)09	同上 主任研究員
98(H10)01	同上 退所 (福井先生 逝去)
98(H10)07	名古屋大学 大学院 名大異動 人間情報学研究科 助教授
*JST: 10 科学技術振興機構 Lab Ncube誕生 !	JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」 小患 「すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル」出版 MSCRS2012 (JST国際)
06(H18)10	JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」
07(H19)04	「すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル」出版
08(H20)12	MSCRS2012 (JST国際)
12(H24)05	JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築」
13(H25)10	StudyCamp2014 PACIFICHEM2015 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
14(H26)04	StudyCamp2014
15(H27)12	PACIFICHEM2015
16(H28)04	MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
17(H29)04	教授(情報学部・情報学研究科) 還暦
18(H30)09	PACIFICHEM2020
20(R02)12	StudyCamp2022
23(R05)03	
02(H14)03	国際会議 CRN ³ (化学反応現象に特徴的非平衡非定常性の解明)(基盤C)
02(H14)09	教授(人間情報学)
03(H15)04	教授(情報科学)
04(H16)04	21世紀COE「計算科学フロンティア」
06(H18)10	小谷野哲之博士
07(H19)04	優乙石博士
08(H20)12	
12(H24)05	JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築」
13(H25)10	StudyCamp2014 PACIFICHEM2015 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
14(H26)04	StudyCamp2014
15(H27)12	PACIFICHEM2015
16(H28)04	MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
17(H29)04	教授(情報学部・情報学研究科) 還暦
18(H30)09	PACIFICHEM2020
20(R02)12	StudyCamp2022
23(R05)03	



略歴



77(S52)03	須坂高等学校卒業
82(S57)03	京大工石卒業 福井先生N賞
84(S59)03	同院修士 修了
87(S62)03	同院博士 修了
88(S63)04	JSPS*研究員(基礎化研)
91(H03)04	基礎化研 副主任研究員
93(H05)06	米白サマーツアー
97(H09)09	同上 主任研究員
98(H10)01	同上 退所 (福井先生 逝去)
98(H10)07	名古屋大学 大学院 名大異動 人間情報学研究科 助教授
*JST: 10 科学技術振興機構 Lab Ncube誕生 !	JST*計算科学技術活用型 特定研究開発推進事業: ACT-JST 「凝集反応系の非平衡非定常ダイナミクスの研究」 “非線形非平衡非定常”誕生 !!
02(H14)03	国際会議 CRN ³ (化学反応現象に特徴的非平衡非定常性の解明)(基盤C)
02(H14)09	教授(人間情報学)
03(H15)04	教授(情報科学)
04(H16)04	21世紀COE「計算科学フロンティア」
06(H18)08	JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」
07(H19)09	小患
08(H20)10	「すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル」出版
12(H24)05	MSCRS2012 (JST国際)
13(H25)10	StudyCamp2014 PACIFICHEM2015 MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
14(H26)04	StudyCamp2014
15(H27)12	PACIFICHEM2015
16(H28)04	MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
17(H29)04	教授(情報学部・情報学研究科) 還暦
18(H30)09	PACIFICHEM2020
20(R02)12	StudyCamp2022
23(R05)03	

CREST「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」('06, AD08)

–大規模原子情報の疎視化・再構成技法・疎視化理論の開発–

科学技術振興機構 戰略的創造研究推進事業
Core Research for Evolutional Science and Technology

研究総括



矢川元基教授
(東大名譽教授
元東洋大学教授)

領域アドバイザ

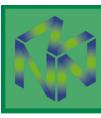


渡辺 貞先生
(当時理研次世代スーパーコンピュータ開発実施本部プロジェクトリーダー)
他9名

<https://www.jst.go.jp/kisoken/archives/multigrid/geometrical.html>

<https://www.jst.go.jp/kisoken/archives/multigrid/atomistic.html>

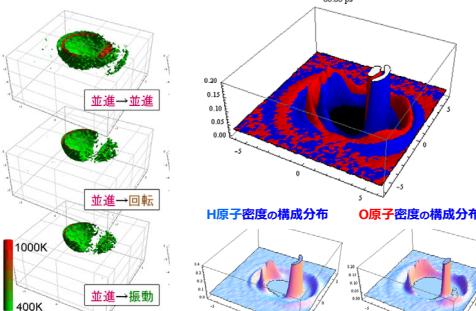
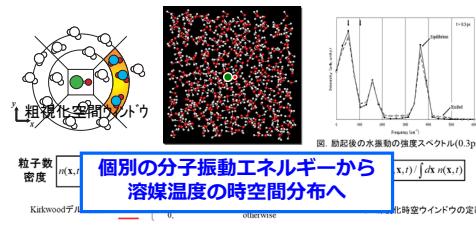
[https://www.jst.go.jp/kisoken/archives/mult](https://www.jst.go.jp/kisoken/archives/multigrid/atomistic.html)



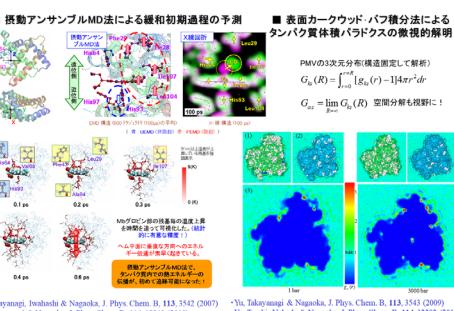
“凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発 - 大規模原子情報の疎視化・再構成技法・疎視化理論の開発 -”



■水溶液中におけるHF分子の振動緩和過程の観測 —溶質分子周辺水分子群に現れる実空間非平衡非定常分布—



2011初詣出 熱田神宮 (110114)



講談社サイエンティフィク (2008)



執筆工程表

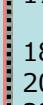
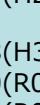
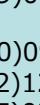
福井研究室で諸能先生らがまとめた「量子化学入門」



略歴

紀元AD

- | | | | |
|--|--|---|------|
| 77(S52)03 | 須坂高等学校卒業 |  | 紀元AD |
| 82(S57)03 | 京大工石化卒業 | 福井先生写真 | |
| 84(S59)03 | 同院修士 修了 | | |
| 87(S62)03 | 同院博士 修了 | | |
| 88(S63)04 | JSPS*研究員(基礎化研) | | |
| 91(H03)04 | 基礎化研 副主任研究員 | | |
| 93(H05)06 | 米白サマーツアー | | |
| 97(H09)09 | 同上 主任研究員 | | |
| 98(H10)01 | 同上 退所 (福井先生 逝去) | | |
| 98(H10)0700 | 名古屋大学 大学院 名大異動
人間情報学研究科 助教授 | | |
| *JST:
科学技術振興機構

品高研究所
Lab Ncube誕生 ! | 10
JST*計算科学技術活用型
特定研究開発推進事業:
ACT-JST「凝集反応系の非平衡
非定常ダイナミクスの研究」
“非線形非平衡非定常”誕生 !! |  | |
| 02(H14)0304 | 国際会議 CRN ³ (化学反応現象
に特徴の非平衡非定常性
の解明)(基盤C)
 | | |
| 02(H14)09 | 教授(人間情報学) |  | |
| 03(H15)0405 | 教授(情報科学) |  | |
| 04(H16)0406 | 21世紀COE「計算科学フロンティア」 |  | |
| 06(H18)1008 | JST*戦略的創造研究推進事業:
CREST「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」 | | |
| 07(H19)0409 | 小患 | | |
| 08(H20)1210 | 「すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル」出版 |  | |
| 12(H24)0514 | MSCRS2012
(JST国際) |  | |
| 13(H25)1015 | JST戦略的創造研究推進
事業: CREST「マクロ物理学
現象シミュレーションに向
けた計算分子技術の構築」 | | |
| 14(H26)0416 | StudyCamp2014 |  | |
| 15(H27)1217 | PACIFICHEM2015 |  | |
| 16(H28)0418 | MSCRS2016
(JSPS日伯+名大) |  | |
| 17(H29)0419 | 教授(情報学部・情報学
研究科) |  | |
| 18(H30)0920 | 還暦 | | |
| 20(R02)1222 | PACIFICHEM2020 |  | |
| 23(R05)0325 | StudyCamp2022 | | |



略歴

紀元AD

- | | | | |
|--|---|--------------|---|
| 77(S52)03 | 須坂高等学校卒業 | | 紀元AD |
| 82(S57)03 | 京大工石化卒業 | | 06(H18)1008 JST*戦略的創造研究推進事業:
CREST 「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」 |
| 84(S59)03 | 同院修士 修了 | | 07(H19)0409 小患 |
| 87(S62)03 | 同院博士 修了 | | 08(H20)1210 「すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル」出版 |
| 88(S63)04 | JSPS*研究員(基礎化研) | | 12(H24)0515 MSCRS2012
(JST国際)
 |
| 91(H03)04 | 基礎化研 副主任研究員 | | 13(H25)1016 JST戦略的創造研究推進事業:
CREST 「マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築」
 |
| 93(H05)06 | 米白サマーツアー | | 14(H26)0417 StudyCamp2014 |
| 97(H09)09 | 同上 主任研究員 | | 15(H27)12 PACIFICHEM2015 |
| 98(H10)0100 | 同上 退所 (福井先生 逝去) | | 16(H28)0419 MSCRS2016
(JSPS日伯+名大)
 |
| 98(H10)07 | 名古屋大学 大学院 名大異動 | | 17(H29)0420 教授(情報学部・情報学研究科)
 |
| *JST:
科学技術振興機構

品川高専
Lab Ncube誕生! | 10
人間情報学研究科
助教授
JST*計算科学技術活用型
特定研究開発推進事業:
ACT-JST 「凝集反応系の非平衡定常ダイナミクスの研究」
“非線形非平衡非定常”誕生!!
 | | 18(H30)0921 還暦
20(R02)1222 PACIFICHEM2020
23(R05)0325 StudyCamp2022
 |
| 02(H14)0304 | 国際会議 CRN ³ (化学反応現象に特徴的の非平衡非定常性の解明)(基盤C)
教授(人間情報学)
教授(情報科学)
21世紀COE「計算科学フロンティア」 |

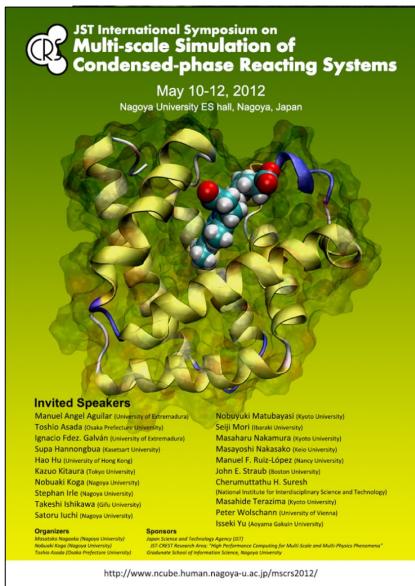
 |

 |
| 02(H14)09 | | | |
| 03(H15)04 | | | |
| 04(H16)04 | | | |



JST国際シンポジウム MSCRS2012 「凝縮相反応系のマルチスケールシミュレーション」

('12, AD17)



今日の内容

第一章 はじめに

第二章 “福井研”を目指して！ 理論物理から理論化学へ！

第三章 続け、ノーベル賞！

第四章 長岡研究室、始動！ 旅立ち！？

それまでしてきたことが

“新しく”始めることに繋がる！

第五章 展開 複雑性に向かって

第六章 おわりに ~“フクイ研精神”を継承できているか？~

第七章 謝辞

JOURNEY
『DEPARTURE』
CDアルバム

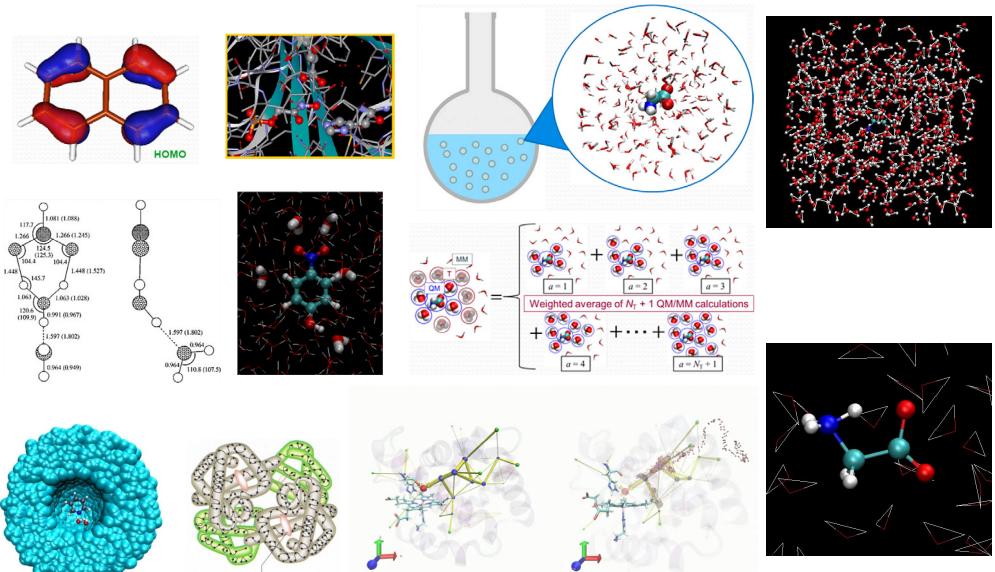
※著作権の関係上
画像を非表示と
しております

82

:01

第五章 展開！ 複雑系に向かって

これまで主に研究されてきたのは、
单一分子、素反応です！

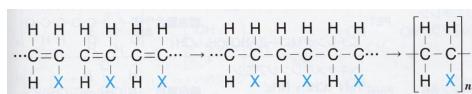


世界は複雑な“モノ”にあふれている！

-私たちの生活は、複雑な組成の化合物に囲まれている-

■合成樹脂(プラスチック)(熱可塑性樹脂、熱硬化性樹脂など)

整然とした、反応式だが、実は、高分子化合物は複雑な構造をしている！



ポリエチレン

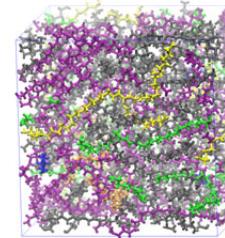
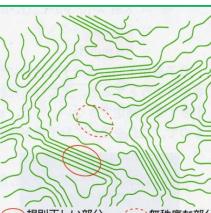
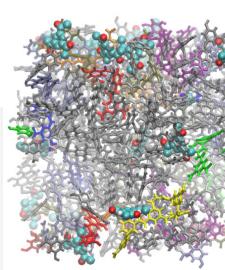
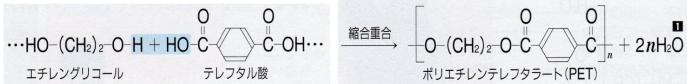


図 固体の高分子化合物の構造
(「化学II新訂版」、p. 143)

■合成繊維(縮合重合、付加重合などによる) 例、ナイロン66



ポリエチレンテレフタレート(PET)etc.

ユニクロ ヒートテックのCM

※著作権の関係上、一部画像を非表示しております

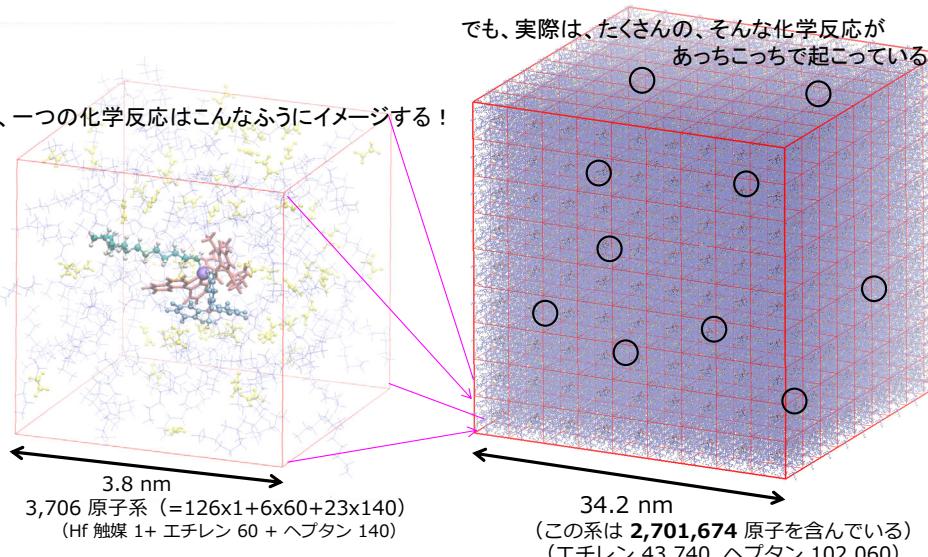
UNIQLO



「化学基礎新訂版」と「化学新訂版」<https://www.whole-earth.net/news/2789>
(実教出版) (2018年)

“化学反応”のイメージ！？ 複合反応系は確率変数の体系である！

普通、一つの化学反応はこんなふうにイメージする！

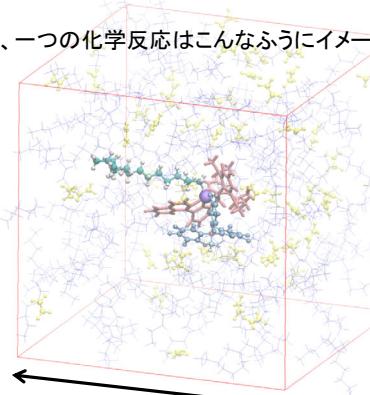


“化学反応”のイメージ！？

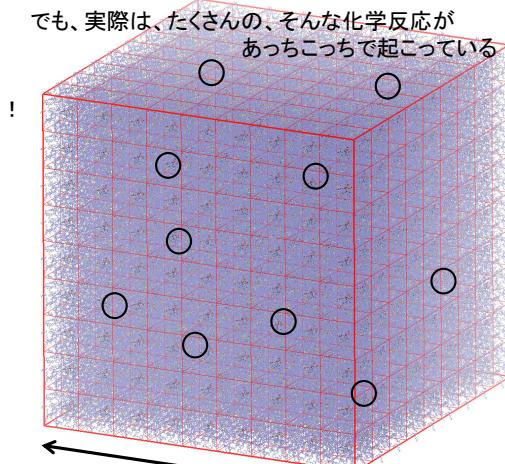
複合反応系は確率変数の体系である！

でも、実際は、たくさんの、そんな化学反応が
あっちこっちで起こっている！

普通、一つの化学反応はこんなふうにイメージする！



3.8 nm
3,706 原子系 (=126x1+6x60+23x140)
(Hf触媒 1+ エチレン 60 + ヘプタン 140)



34.2 nm
(この系は 2,701,674 原子を含んでいる)
(イチレン 43,740, ヘプタン 102,060)

Red Moon 法 -混合MC/MD反応法- ～複雑な成分の化合物を調べる分子シミュレーション～



希少事象促進機構を備えた 混合モンテカルロ(MC)/分子動力学(MD)反応法：

“A hybrid MC/MD reaction method with Rare event-driving Methodology of necessity”

MN, Y.Suzuki, T.Okamoto, N.Takenaka, Chem. Phys. Lett., 583, 80 (2013)

Red Moon 法

…新しいシミュレーション法

- ・混合MC/MD反応法
- ・遷移率 ((Metropolis)法) :

$$w_{mn} = \min \left\{ 1, \exp \left[-\beta \Delta U_{mn} \right] \right\}$$

- ・反応エネルギー差 :

$$\Delta U_{mn} = \Delta U_{mn}^{MM} + \Delta U_{mn}^0$$

これまでのシミュレーション法

ニュートンの運動方程式 :

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{r}^{Ns}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}^{Ns}} \\ \frac{d\mathbf{p}^{Ns}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}^{Ns}} \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{r}^{Nm}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}^{Nm}} \\ \frac{d\mathbf{p}^{Nm}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}^{Nm}} \end{cases}$$

化学反応
(超希少事象)
<~10⁻¹⁰

活性分子割合

活性分子 1個
vs.
不活性分子 100億個

なかなか
起ららない！

MD
(分子動力学法)

A ⇌ B ⇌ C

w_{mn} w_{nl}

MD MC MD MC MD

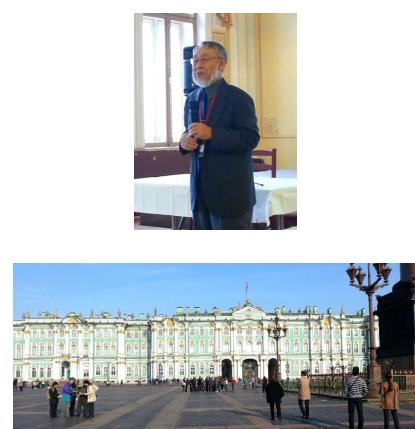
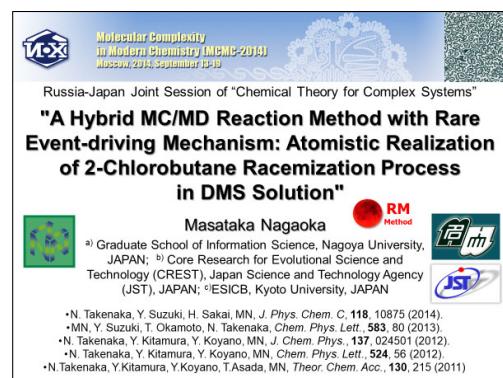
MD (モンテカルロ法)

「情報学の研究者たちの喜怒哀楽」

(企)有田隆也先生等



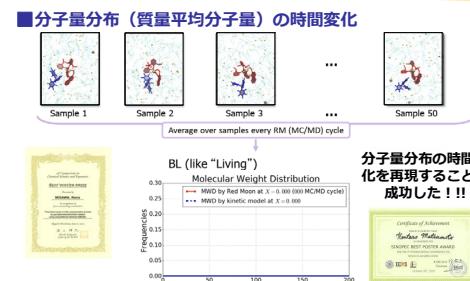
モスクワシンポジウム “Chemical Theory for Complex Systems” ('14, AD17)



モスクワシンポジウム “Chemical Theory for Complex Systems” ('14, AD17)

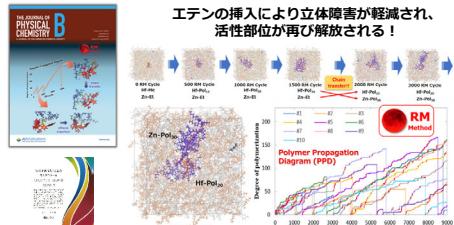


 CREST「分子技術」
“マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築”
触媒重合とラジカル重合 -ポリオレフィン樹脂-

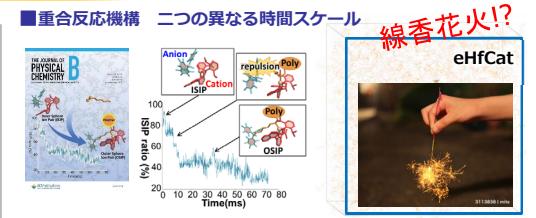



- M. Matsumoto, M. Takayanagi, Y. Suzuki, N. Koga, MN, *J. Comp. Chem.*, **40**, 421 (2019).

■ポリマー伸長ダイアグラム … モノマー成分比が計算可能！



- S.Kanesato, K.Yasoshima, N.Misawa, K.Matsumoto, Y.Suzuki, N.Koga, *MN. J. Phys. Chem. B*, **127**, 7735 (2023).



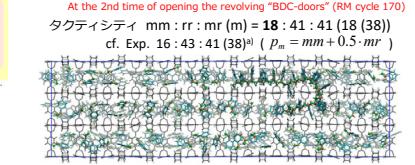
1-オクテン/エテン系に共重合反応と連鎖移動重合をシミュレートする計算化学的手法を確立した。

eHfCat_OCT_ETH_3.mp4
連鎖移動反応が、1124RMサイクル
で起こる（トラジェクトリ#9）

- N. Misawa, K. Matsumoto, Y. Suzuki, S. Saha, N. Koga, MN, *J. Phys. Chem. B*, 127, 1209 (2023).



At the 1st time of opening the revolving “BDC-doors” (RM cycle 101)



RM cycle 170



略歴

紀元AD 77(S52)03	須坂高等学校卒業
82(S57)03	京大工石化卒業 福井先生N賞
84(S59)03	同院修士 修了
87(S62)03	同院博士 修了
88(S63)04	JSPS*研究員(基礎化研)
91(H03)04	基礎化研 副主任研究員
93(H05)06	米白サマーツアー
97(H09)09	同上 主任研究員
98(H10)0100	同上 退所 (福井先生 逝去)
98(H10)07	名古屋大学 大学院 名大異動 人間情報学研究科 助教授
*JST: 10	JST*計算科学技術活用型 特定研究開発推進事業: ACT-JST 「凝集反応系の非 平衡非定常ダイナミクスの研究」 “非線形非平衡非定常”誕生!!
02(H14)0304	国際会議 CRN ³ (化学反応現象 に特徴的非平衡非定常性 の解明)(基盤C) 教授(人間情報学) 教授(情報科学)
02(H14)09	21世紀COE「計算科学フロンティア」
03(H15)04	
04(H16)04	

科学技術振興機構
Ncube誕生!

02(H14)0304	国際会議 CRN ³ (化学反応現象 に特徴的非平衡非定常性 の解明)(基盤C) 教授(人間情報学) 教授(情報科学)
02(H14)09	
03(H15)04	
04(H16)04	

紀元AD 06(H18)1008	JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「凝集反応系マルチスケー ルシミュレーションの研究開発」
07(H19)0409	小患
08(H20)1210	「すぐできる分子シミュ レーションビギナーズ マニュアル」出版
12(H24)0515	MSCRS2012 (JST国際)
13(H25)1016	JST戦略的創造研究推進 事業: CREST 「マクロ化学 現象シミュレーションに向 けた計算分子技術の構築」
14(H26)0417	StudyCamp2014
15(H27)12	PACIFICHEM2015
16(H28)0419	MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
17(H29)0420	教授(情報学部・情報学 研究科)
18(H30)0921	還暦
20(R02)1222	PACIFICHEM2020
23(R05)0325	StudyCamp2022



"StudyCamp" 開始! ('14, AD17)



StudyCamp2014 (Gujo-Kogen Highland)

(郡上高原)(Aug.25-27, 2014)

Wales先生
倭先生 長岡 Straub夫妻



1st StudyCamp



郡上そば打ち体験!





StudyCamps

SC2015 (Gero-Onsen, Gifu)
(下呂温泉)(Aug.24-25)

篠田・畠中先生

SC2016 (Gujo-Hachiman, Gifu)
(郡上八幡)(Sept.4-5) 高橋・村岡先生

SC2017 (Suwa, Nagano)
(諏訪)(Aug.23-25)

Ruiz-López・中田・阿部・村岡先生



StudyCamps

SC2018 (Ohmi Hachiman, Shiga)
(近江八幡)(Aug.22-23) 優・渡辺先生

Himakajima WS (MSCRS2019)
(日間賀島)(Mar.21-22, 2019)

平田・岡本・Straub・田中・太田・小池先生

SC2019 (Hida Takayama, Gifu)
(飛騨高山)(Sep.1-2, 2019)

Straub・Lintuluoto・北尾先生



Ncube Competition
Best Presentation Award



StudyCamps

SC2018 (Ohmi Hachiman, Shiga)
(近江八幡)(Aug.22-23) 優・渡辺先生

Himakajima WS (MSCRS2019)

(日間賀島)(Mar.21-22, 2019)

平田・岡本・Straub・田中・太田・小池先生

SC2019 (Hida Takayama, Gifu)

(飛騨高山)(Sep.1-2, 2019)

Straub・Lintuluoto・北尾先生



StudyCamps

SC2018 (Ohmi Hachiman, Shiga)
(近江八幡)(Aug.22-23) 優・渡辺先生

Himakajima WS (MSCRS2019)
(日間賀島)(Mar.21-22, 2019)

平田・岡本・Straub・田中・太田・小池先生

SC2019 (Hida Takayama, Gifu)
(飛騨高山)(Sep.1-2, 2019)

Straub・Lintuluoto・北尾先生

StudyCamps

SC2020 (COVID-19のため中止)

...

SC2022 (Ohmi Hachiman, Shiga)

(近江八幡)(March 6-7, 2023)

Straub・Bondar・江原・松林・柄沼・大谷・笠原先生



おみはちまん

OHMI HACHIMAN

<https://www.qkamura.or.jp/ohmi/>



Ncube Competition
Best Presentation Award

<https://cd-best.com/vdata/images/hotel/max1024x768/616219797-23171453458d8dcba5c6d20148468d3bd337e6959b4bd6fd539138fa.html>

<https://travel.rakuten.co.jp/HOTEL/76886160210144427.html>



略歴

紀元AD 77(S52)03	須坂高等学校卒業
82(S57)03	京大工石卒業 福井先生N賞
84(S59)03	同院修士 修了
87(S62)03	同院博士 修了
88(S63)04	JSPS*研究員(基礎化研)
91(H03)04	基礎化研 副主任研究員
93(H05)06	米白サマーツアー
97(H09)09	同上 主任研究員
98(H10)0100	同上 退所 (福井先生 逝去)
98(H10)07	名古屋大学 大学院 名大異動 人間情報学研究科 助教授
*JST: 10 科学技術振興機構 高研院 Lab Ncube誕生 !	JST*計算科学技術活用型 特定研究開発推進事業: ACT-JST 「凝集反応系の非平 衡非定常ダイナミクスの研究」 "非線形非平衡非定常" 誕生 !!
02(H14)0304	国際会議 CRN ³ (化学反応現象 に特徴的非平衡非定常性 の解明)(基盤C) 教授(人間情報学) 教授(情報科学)
02(H14)09 03(H15)04 04(H16)04	21世紀COE「計算科学フロンティア」

紀元AD 06(H18)1008	JST*戦略的創造研究推進事業: CREST 「凝集反応系マルチスケー ルシミュレーションの研究開発」
07(H19)0409	小患
08(H20)1210	
12(H24)0515	
13(H25)1016	PACIFICHEM 2015
14(H26)0417	
15(H27)12	PACIFICHEM2015
16(H28)0419	MSCRS2016 (JSPS日伯+名大)
17(H29)04	
18(H30)09	栗崎博士
20(R02)12	小林さん
23(R05)0325	福原さん
	StudyCamp2022

JSPS-FAPESP国際シンポジウム MSCRS2016 「凝縮相反応系のマルチスケールシミュレーション」

(2016年10月10-13日, AD18)



JSPS-FAPESP国際シンポジウム MSCRS2016

「凝縮相反応系のマルチスケールシミュレーション」

(2016年10月10-13日, AD18)

https://web-honbu.jim.u-nagoya.ac.jp/fmd/02construction/tatemono/14_noi-kouryou/01.jpg



野依記念学術交流館



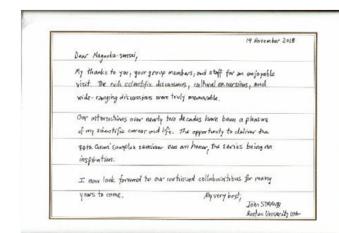
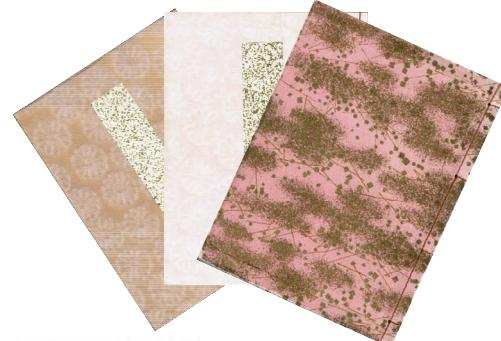
北栄輔 副研究科長の乾杯



尾張コンプレックスセミナー & 芳名録

"コンフレックス" … 複雑系、錯体、様々な人達が集う場所

・異動後すぐ開始した、尾張コンフレックスセミナーは、79回を数える！！



日 時 05/30(木) 13時 14日 (水) 15:30 ~ (約1時間)
DATE Wednesday 14th Nov. 2018 15:30 ~ (About one hour)
場 所 情報学研究科 1階 1号室 棚橋演習
PLACE Lecture Room 1 (GF)
Graduate School of Informatics
講 師 兼 野依 茂路 (名古屋大学大学院情報学研究科)
内閣 5623
CORRESPONDENCE
Masataka Nagao, Graduate School of Informatics,
Nagoya University
Ext. 5623

第15回 複雑系科学セミナー('23, AD25)

専攻のセミナーシリーズ

第15回複雑系科学セミナーのご案内 □ 参加登録 ×

R Ryo Kakei <rykakei@nagoya-u.ac.jp>
To:複雑系科学専攻 students
複雑系科学専攻の先生方・大学院生・研究員の皆様

生命情報論講座の小池です。

第15回複雑系科学セミナーを以下通り開催します。
お忙しいことは存じますが、ぜひご参加いただければと思います。

日時：2023年9月22日（金） 17時半から1時間程度
(終了後に懇親会開催予定)
場所：情報学研究科棟 1F 第1講義室
講師：生命情報論講座 教授 山西芳裕

タイトル：
人工知能とビッグデータで新薬をつくる

アブSTRACT：
近年の生命医科学では、疾患に関するゲノム情報や臨床情報、生体分子に関するオミクス情報、難治性化合物に関する生物学的情報などが増加するようになった。このようなビッグデータ時代において、人工知能・機械学習の重要性が高まってきたおり、データ解析から創薬や医療に転換する効率が求められている。医薬データは、グラフ構造、木構造、文字列、テンソルなど様々なデータ構造を取り、情報科学的にも挑戦的な課題が多い。本セミナーでは、疾患・遺伝子・タンパク質・化合物に関する多様なビッグデータを融合解析し、創薬や医療における様々な課題を解決するための機械学習アルゴリズムの研究を紹介する。創薬的探索、化合物スクリーニング、シナジー創薬学、細胞薬理学、医薬品分子構造設計などの応用例をいくつか紹介する。



Ncube
Nagaoka Laboratory

第六章 おわりに ～“フクイ研精神”を 継承できているか？～

Ncube
Nagaoka Laboratory

今日の内容

第一章 はじめに

第二章 “福井研”を目指して！ 理論物理から理論化学へ！

第三章 続け、ノーベル賞！

第四章 長岡研究室、始動！ 旅立ち！？

それまでしてきたことが
“新しく”始めることに繋がる！

第五章 展開 複雑性に向かって

第六章 おわりに ～“フクイ研精神”を継承できているか？～

第七章 謝辞

JOURNEY
『DEPARTURE』
CDアルバム

※著作権の関係上
画像を非表示と
しております



逆方向の勉強をする態度

基礎を大切にすること、努めて広く学ぶこと

“自分が進もうとしている道には関係なさそうに見える学問、否、もっと極端に、逆の方向の学問を一緒に懸命勉強すること。...”

“学んだことはいつ、どんな形で役に立つか、わかつたものではない。学問を植物に例えれば、個々の学問の地下茎は思わずところでつながり合っているものである。”

“今の学生は、私の時代と比べて、勉強しなければならないことの量が多すぎる。それを思えば、こんな理想論に対して反論が返ってきて来るかもしれない。が、それを承知で私は強調したいのである。創造をめざすには、狭い勉強はためにならない。努めて広く学ぶことである。”

(「学問の創造」(1984))

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS VOLUME 29, NUMBER 1 APRIL 1, 1952

A Molecular Orbital Theory of Reactivity in Aromatic Hydrocarbons
Kosuke Fukui, Tadashi Ueda, and Mano Iwasa
Faculty of Engineering, Kyushu University, Fukuoka, Japan

In the search for a quantitative measure of the reactivity of aromatic hydrocarbons, the electron density of each atomic orbital in the ground state was calculated by the molecular orbital method. In the case of benzene and other aromatic hydrocarbons with closed shell structures, we find that the positive charge density is localized on the carbon atoms, while the negative charge density is delocalized over the entire molecule. In the case of substituted aromatic hydrocarbons, the electron density is delocalized over the entire molecule, except for the substituent which has a strong influence on the electron density.

The electron density of the aromatic hydrocarbons is discussed in relation to the frontier molecular orbital theory.

“frontier”邊境、開拓、最前端

INTRODUCTION
CONSIDERABLE progress has been made in explaining the chemical reactivity of organic compounds, especially, the problems of prediction of reactivity and mechanism of reaction. One of the most important methods is the frontier molecular orbital theory, which was first proposed by Hückel, and later developed by several authors; the one may be called the “frontier density method.” This method is based on the “electron density concept” as a priori of some other theoretical or empirical arguments, and this method is usually confined to halogenated aromatic hydrocarbons.

It is the purpose of this paper to extend the frontier molecular orbital theory to the aromatic hydrocarbons.

CALCULATION OF ELECTRON DENSITY

In our treatment the electron density is calculated in condensed aromatic hydrocarbons which are “alternant.” Namely, they consist of several fused six-membered rings, each of which has a double bond between two adjacent carbon atoms.

In the present paper, the calculation of the electron density is carried out on the basis of some other theoretical or empirical arguments, and this method is usually confined to halogenated aromatic hydrocarbons.

It is the purpose of this paper to extend the frontier molecular orbital theory to the aromatic hydrocarbons.

THE CALCULATION OF ELECTRON DENSITY

In the present paper the electron density is calculated according to the method of the latter method. If we disregard the effect of the substituents on the aromatic hydrocarbons, we can calculate the electron density of each atomic orbital in the ground state of the molecule.

Let us consider the case of benzene, which is the simplest aromatic hydrocarbon.

The density of each electron occupying the sixth atomic orbital in the ground state of benzene is given by $\langle \psi_6^2 \rangle$, where ψ_6 is the function in Eq. (1) corresponding to the six-fold symmetry axis.

$$\psi_6 = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[e^{i\pi/3} \psi_1 + e^{i\pi/3} \psi_2 + e^{i\pi/3} \psi_3 + e^{i\pi/3} \psi_4 + e^{i\pi/3} \psi_5 + e^{i\pi/3} \psi_6 \right] \quad (1)$$

where ψ_i is the i -th atomic orbital of the i th carbon atom.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

The density of each electron occupying the i -th atomic orbital in the ground state of the molecule is given by $\langle \psi_i^2 \rangle$, where ψ_i is the function in Eq. (1) corresponding to the i -th fold symmetry axis.

吉澤先生との共著論文 (1998)

"Lithium Diffusion in Li_xCoO₂ Electrode Materials (Li_xCoO₂電極材料におけるリチウム拡散)"



DIVISION OF MOLECULAR ENGINEERING

GRADUATE SCHOOL OF ENGINEERING

KYOTO UNIVERSITY

JAPAN

5-1 Kanda-Surugadai

Tokyo 101

May 17, 1998

Professor Ryoji Noyori
Chemical Society of Japan
Chairman, Kyoto Chapter
1-5 Kanda-Surugadai
Chiyoda-ku, Tokyo 101

Re: 070034

Dear Professor Noyori:

Thank you very much for the letter of March 27, 1998 from Professor Akira Miyamoto, Kyoto University. I have read the paper "Li_xCoO₂ Electrode Materials" by G. Nagoya, M. Nagata, K. Yoshizawa, and T. Yamabe. Since one of the authors is not Japanese, we asked reviewers to write comments in English when we submitted this manuscript to the Chemical Society of Japan. We are grateful for your kind comments in Japanese. By the same reason, we would like to answer reviewer's comments in English.

We have considered and incorporated reviewer B's comments. I enclose two copies of our revised manuscript. The revised version includes the letter of review. The changes are also indicated with a line-mark in one of the copies attached. I believe that the revised version is acceptable for publication in the Chemical Society of Japan. The revised version includes Fumihito Mohri as a new author because he has greatly contributed to revised text and the revising work. I also enclosed a floppy disk including text (Macintosh 3.5inch). We are very happy that this paper will appear in the Bulletin of the Chemical Society of Japan.

Your kind management is greatly appreciated in advance.

Best regards,

Masaharu Yoshizawa
Kazumi Yamabe
On behalf of Prof. Tokio Yamabe

Department of Molecular Engineering, Kyoto University
Kyoto, Kyoto 606-8501, Japan
Fax: +81-75-751-7279

© 1998 The Chemical Society of Japan

Bull. Chem. Soc. Jpn., 73, 2259–2265 (1998) 2259

Lithium Diffusion in Li_xCoO₂ Electrode Materials

Gerhard Nagel*, Masataka Nagata, Kazumi Yoshizawa,* Fumihito Mohri, and Tokio Yamabe*

Institute for Fundamental Chemistry, 3-4 Takao-Nishihachi-cho, Sakyō-ku, Kyoto 606-8105

(*Department of Engineering, Kyoto University, Sakyō-ku, Kyoto 606-8105)

(Received December 1, 1997)

The activation energy required for the interlayer diffusion of lithium ions is discussed for the layer compound Li_xCoO₂. The calculated force field (DP) is adopted for a solid mass component. Molecular dynamics simulations with additional impulsive method, performed at a microcanonical ensemble, prove that the lithium migration between the Co₂-octahedron layers is made by ion hopping from one octahedron to another. The rate of migration is proportional to the activation energy, which is 25.1 kJ mol⁻¹ (6.0 kV) for an original layer distance of 2.54 Å. A potential energy profile is developed from molecular mechanics calculations. The observed migration rate is in agreement with the calculated rate. The activation energy is considered to contribute to the barrier height in consistence with the fact that the activation energy of lithium diffusion is very sensitive to the layer distance, while the experimentally observed values.

In the last two decades, an understandable number of variable number of valence insertion compounds have been investigated with respect to their properties as anodes for rechargeable batteries.^{1–8} Some of them are batteries, for example. In particular, transition metal oxides^{9–10} and chlorogermanes¹¹ consisting of layer structures of three-dimensional framework are promising candidates for the use of lithium batteries.

Up to now, Li_xCoO₂ has been applied as a cathode material for solid state lithium ion batteries since this compound shows a high lithium ion diffusion coefficient of 10⁻¹⁰ cm² s⁻¹.¹² Li_xCoO₂ in commercial lithium ion batteries¹³ has initiated intensive research on its properties and applications. The first report on the electrochemical lithium ion insertion¹⁴ including a Li_xCoO₂ cathode and an anhydrous carbon anode, namely so-called "rocking chair" cell, was published in 1991. The properties of the insertion compounds are under development. One important example of these properties is the reversible insertion of Li_xCoO₂ (anatase) at the anode and Li_xCoO₂ or Li_{1-x}CoO₂ (cathode).

Li_xCoO₂ is constructed with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

* Present address: Institut für Anorganische Chemie LMU München, Meisingerstr. 1, D-8033 München, Germany.

Fig. 1. Crystal structure of the layer compound Li_xCoO₂ (0.5 < x < 1). All available sites of lithium insertion are shown. For the lithium content, the same sites are occupied statistically.

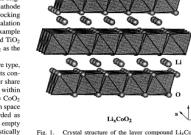


Fig. 1. Crystal structure of the layer compound Li_xCoO₂ (0.5 < x < 1). All available sites of lithium insertion are shown. For the lithium content, the same sites are occupied statistically.

© 1998 The Chemical Society of Japan

Bull. Chem. Soc. Jpn., 73, 2259–2265 (1998) 2259

(*Department of Engineering, Kyoto University, Sakyō-ku, Kyoto 606-8105)

(Received December 1, 1997)

The activation energy required for the interlayer diffusion of lithium ions is discussed for the layer compound Li_xCoO₂. The calculated force field (DP) is adopted for a solid mass component. Molecular dynamics simulations with additional impulsive method, performed at a microcanonical ensemble, prove that the lithium migration between the Co₂-octahedron layers is made by ion hopping from one octahedron to another. The rate of migration is proportional to the activation energy, which is 25.1 kJ mol⁻¹ (6.0 kV) for an original layer distance of 2.54 Å. A potential energy profile is developed from molecular mechanics calculations. The observed migration rate is in agreement with the calculated rate. The activation energy is considered to contribute to the barrier height in consistence with the fact that the activation energy of lithium diffusion is very sensitive to the layer distance, while the experimentally observed values.

In the last two decades, an understandable number of variable number of valence insertion compounds have been investigated with respect to their properties as anodes for rechargeable batteries,^{1–8} Some of them are batteries, for example. In particular, transition metal oxides^{9–10} and chlorogermanes¹¹ consisting of layer structures of three-dimensional framework are promising candidates for the use of lithium batteries.

Up to now, Li_xCoO₂ has been applied as a cathode material for solid state lithium ion batteries since this compound shows a high lithium ion diffusion coefficient of 10⁻¹⁰ cm² s⁻¹.¹² Li_xCoO₂ in commercial lithium ion batteries¹³ has initiated intensive

research on its properties and applications. The first report on the electrochemical lithium ion insertion¹⁴ including a Li_xCoO₂ cathode and an anhydrous carbon anode, namely so-called "rocking chair" cell, was published in 1991. The properties of the insertion compounds are under development. One important example of these properties is the reversible insertion of Li_xCoO₂ (anatase) at the anode and Li_xCoO₂ or Li_{1-x}CoO₂ (cathode).

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO₂, and Li_xAlO₂.¹⁵ The distance between the MD₂ octahedron layers is 2.54 Å, which is the same as the distance between the MD₁ octahedron layers. This fact is regarded as an important reason why a higher Li⁺ mobility is observed in Li_xCoO₂ than in the other octahedron framework materials. The migration of lithium ions in the Li_xCoO₂ was characterized by *in situ* X-ray diffraction in an electrochemical cell by complete lithium deintercalation.¹⁶ Even in the technologically interesting region of lithium

Li_xCoO₂, intercalation with the α -NaF₂ structure type, it is a typical layer compound formed by stacking sheets consisting of octahedron layers of Co₂ and layers of Li₂O₂ with six edges each, resulting in a stoichiometry of Co₂ within one octahedron layer. The stacking sequence of the Co₂ layers is ABCABC... and the Li₂O₂ layers are stacked in the same group R₃c. Therefore, Li_xCoO₂ can also be regarded as a little bit different from the well-known layered perovskite octahedral sites between the Co₂ layers are statistically

likely to be occupied by lithium ions. The crystal structure of Li_xCoO₂ also adopted in Li_xV₂O₅, Li_xCrO_{2</}

基礎を大切に、広く学びながら、
もう少し先へ！



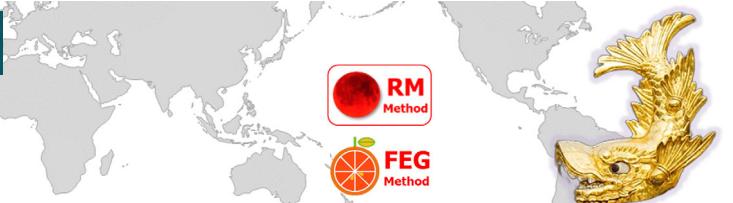
Chemical Physics Letters 503 (2011) 80–86
Contents lists available at ScienceDirect
Chemical Physics Letters journal homepage: www.elsevier.com/locate/cplett

A hybrid MC/MD reaction method with rare event-driving mechanism: Aromatic realization of 2-chlorobutane racemization process in DMF solution
Masataka Nagoka ^{a,b,*}, Yuichi Suzuki ^a, Takuya Okamoto ^a, Norio Takenaka ^{a,b}
^a Graduate School of Advanced Sciences, Tohoku University, Kawauchi, Aoba-ku, Sendai 980-8576, Japan
^b TEC, Kyushu University, Kyushu University, Nishi-ku, Fukuoka 819-0395, Japan
Received 5 July 2010; accepted 20 August 2010
Available online 17 August 2010

ARTICLE INFO
Keywords:
Rare event driving
Monte Carlo simulation
Molecular dynamics
Reaction mechanism
Aromaticity
2-Chlorobutane
Racemization
DMF solution
ABSTRACT
We demonstrate a hybrid molecular simulation method combining Monte Carlo and molecular dynamics simulations to realize aromatic realization of 2-chlorobutane racemization process in dimethylformamide (DMF) solution. The hybrid method is based on the rare event driving mechanism, which is a combination of the Monte Carlo simulation and the molecular dynamics simulation. The hybrid method can simulate the reaction process more efficiently than the pure Monte Carlo simulation. The results show that the hybrid method can simulate the reaction process more efficiently than the pure Monte Carlo simulation. The results also show that the hybrid method can simulate the reaction process more efficiently than the pure Monte Carlo simulation.

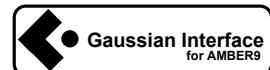


©写真AC



Collaborators and Students:

- N.O.-Yoshida (DR)
- I.Okazaki (DR)
- Y.Hara (DR)
- T.Okamoto (PD)
- M.Takayanagi (PD)
- Y.Koyano (PD)
- Y.Oishi (M2)
- N.Yamamoto (DR)
- K.Yamada (DR)
- I.Kurisaki (DR)
- N.Takenaka (DR)
- Y.Suzuki (DR)
- Y.Kitamura (DR)
- K.Matsumoto (DR)
- (Other OBs & OGs and outer Coworkers)



住友化学

DAICEL

三井化学

AsahiKASEI

ShirEtsu

ENEOS

富士電機



ご清聴有難うございました。

卒業生、修了生、博士研究員、
共同研究者、研究室スタッフ
これまで有難うございました。
これからも宜しくお願ひします！

Ncube ひとまず モードチェンジ！
ご支援 有難うございました！

