

## 1. 論文 (142件、うち5件は審査中・投稿準備中)

1. J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, H. Matsumura, "Elucidation of the FtsZ structural transition pathway by crystallographic analysis combined with enhanced-sampling MD simulations", *in preparation* (2017).
2. M. Hada, S. Saito, S. Tanaka, R. Sato, M. Yoshimura, K. Mouri, K. Matsuo, M. Hara, Y. Hayashi, Y. Shigeta, S. Yamaguchi, K. Onda, R. J. Dwayne Miller, "Ultrafast Snapshots of a Columnar Liquid Crystal Forming a Helical Structure at Local Photoexcited Sites", *in preparation* (2017).
3. M. Shoji, H. Isobe, Y. Shigeta, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "O<sub>2</sub> release mechanism of the oxygen-evolving complex in photosystem II ", *Physical Chemistry Chemical Physics in preparation* (2017).
4. R. Yamakado, Y. Ashida, R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda, H. Maeda, "Cooperatively Interlocked [2+1]-Type  $\pi$ -System-Anion Complexes", *Chemistry A European Journal*, *submitted* (2016).
5. R. Harada, Y. Shigeta, "Efficient conformational search based on Structural Dissimilarity Sampling: Applications to reproductions of structural transitions on Maltodextrin Binding Protein", *Journal of Chemical Theory and Computation*, *submitted* (2016).
6. R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, " Theoretical analyses on a flipping mechanism of UV-induced DNA damage", *Biophysics and Physicobiology*, **13**, 311-319 (2016). DOI: 10.2142/biophysico.13.0\_311
7. S. Maekawa, M. Krzysztof, Y. Shigeta, "Refractive Indices of Organo-Metallic and -Metalloid Compounds: A Long-Range Corrected DFT Study", *Journal of Computational Chemistry*, **37**, 2759-2769(2016). DOI: 10.1002/jcc.24501
8. R. Yamakado, S. Sato, Y. Shigeta, H. Maeda, "Ion-Pairing Crystal Polymorphs of Interlocked [2+1]-type Receptor–Anion Complexes", *The Journal of Organic Chemistry* **81**, 8530–8536 (2016). DOI: 10.1021/acs.joc.6b01688
9. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, "A Fast Convergent Simulated Annealing Algorithm: Simulated Annealing Outlier FLOODing (SA-OFLOOD) Method", *Bulletin of the Chemical Society of Japan* **89**, 1361-1367 (2016). DOI: 10.1246/bcsj.20160244
10. S. Negoro, Y. Kawashima, N. Shibata, T. Kobayashi, T. Baba, Y.-H. Lee, K. Kamiya, Y. Shigeta, K. Nagai, I. Takehara, D.-I. Kato, M. Takeo, Y. Higuchi, "Mutations affecting the internal equilibrium of the 6-aminohexanoate-dimer hydrolase reaction", *FEBS Letter* **590**, 3133-3143(2016). DOI: 10.1002/1873-3468.12354.

11. W. Naito, N. Yasuda, T. Morimoto, Y. Shigeta, H. Takaya, I. Hisaki, H. Maeda, "Doubly N-Methylated Porphyrinoids", *Organic Letters* **18**, 3006-3009 (2016).  
**DOI:** 10.1021/acs.orglett.6b01377
12. W. Tanaka, M. Shoji, F. Tomoike, Y. Ujiie, K. Hanaoka, R. Harada, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, R. Masui, S. Kuramitsu, Y. Shigeta, "Molecular Mechanisms of Substrate Specificities of Uridine-Cytidine Kinase", *Biophysics and Physicobiology* **13**, 77-82 (2016).  
**DOI:** 10.2142/biophysico.13.0\_77.
13. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, "TaBoo SeArch (TBSA) algorithm with a modified inverse histogram for reproducing biologically relevant rare-events of proteins", *Journal of Chemical Theory and Computation* **12**(5), 2436-2445(2016). **DOI:** 10.1021/acs.jctc.6b00082
14. M. Kayanuma, M. Shoji, M. Yoda, M. Odaka, Y. Shigeta, "Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase Subsequent to Cyclic Intermediate Formation: A QM/MM Study", *Journal of Physical Chemistry B* **120** (13), pp 3259–3266 (2016). **DOI:** 10.1021/acs.jpcc.5b11363
15. S. Maekawa, R. Sato, K. Hirao, Y. Shigeta, "Solvent effects on excited-state electron-transfer rate of pyrene-labeled deoxyuridine: a theoretical study", *Chemical Physics Letters* **644**, 25-30 (2016). **DOI:**10.1016/j.cplett.2015.11.037
16. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, "Sparsity-weighted Outlier FLOODing (OFLOOD) method: Efficient rare event sampling method using sparsity of distribution", *Journal of Computational Chemistry* **37**, 724–738(2016) **DOI:** 10.1002/jcc.24255
17. R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, "Automatic detection of hidden dimension in Outlier FLOODing (OFLOOD) method", *Chemical Physics Letters* **639**, 269-274 (2015).  
**DOI:**10.1016/j.cplett.2015.09.031
18. M. Shoji, M. Kayanuma, H. Umeda, Y. Shigeta, "Performance of the divide-and-conquer approach used as an initial guess", *Chemical Physics Letters* **634**, 181–187(2015). **DOI:** 10.1016/j.cplett.2015.06.011
19. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, "Efficient conformational sampling of proteins based on a multi-dimensional inverse histogram: An application to folding of chignolin in explicit solvent", *Chemical Physics Letters* **630**, 68-75(2015). **DOI:** 10.1002/jcc.23854
20. S. Maekawa, T. Matsui, K. Hirao, Y. Shigeta, "A Theoretical Study on Reaction Mechanisms of Nitrite Reduction in Copper Nitrite Complexes as Models for the Copper Nitrite Reductase", *Journal of Physical Chemistry B* **119**, 5392-5403 (2015). **DOI:** 10.1021/acs.jpcc.5b01356
21. K. Okuno, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, "Theoretical design of solvatochromism switching by photochromic reactions using donor-acceptor disubstituted diarylethene derivatives with oxidized thiophene rings", *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**, 6484-6494 (2015). **DOI:** 10.1039/c4cp05946h.

22. M. Kayanuma, K. Hanaoka, M. Shoji, Y. Shigeta, "A QM/MM Study of Initial Steps of Catalytic Mechanism of Nitrile Hydratase", *Chemical Physics Letters* **623**, 8-13 (2015). DOI: 10.1016/j.cplett.2015.01.039
23. R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, "Simple, Yet Powerful Methodologies for Conformational Sampling of Proteins", *Physical Chemistry Chemical Physics* (**invited feature article**) **17**, 6155-6173 (2015). DOI: 10.1039/c4cp05262e.
24. H. Ando, Y. Shigeta, T. Baba, C. Watanabe, Y. Okiyama, Y. Mochizuki, M. Nakano, "Hydration Effects on Enzyme-Substrate Complex of Nylon Oligomer Hydrolase: Inter-Fragment Interaction Energy Study by the Fragment Molecular Orbital Method", *Molecular Physics* **113**, 319-326 (2015). DOI: 10.1080/00268976.2014.941311
25. R. Nakamura, Y. Shigeta, K. Okuno, M. Fukushima, M. Hasegawa, S. Suzuki, M. Kozaki, K. Okada, M. Nakano, "Substitution Effects on Optical Properties of Iminonitroxide- substituted Iminonitroxide Diradical", *Molecular Physics* **113**, 267-273 (2015). DOI: 10.1080/00268976.2014.937777
26. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, "Enhanced Conformational Sampling Method for Proteins Based on the TaBoo SeArch (TBSA) Algorithm: Application to the Folding of a Mini-protein, Chignolin", *Journal of Computational Chemistry* **36**, 763-772 (2015). DOI: 10.1002/jcc.23854
27. T. Baba, M. Boero, K. Kamiya, H. Ando, S. Negoro, M. Nakano, Y. Shigeta, "Unraveling the degradation of artificial amide bonds in nylon oligomer hydrolase: from induced-fit to acylation processes", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **17**, 4492-4504(2015). DOI: 10.1039/C4CP04419C
28. T. Matsui, Y. Kitagawa, M. Okumura, Y. Shigeta, "Accurate Standard Hydrogen Electrode Potential and Applications to the Redox Potentials of Vitamin C and NAD/NADH", *Journal of Physical Chemistry A*, **119**, 369-376 (2015). DOI: 10.1021/jp508308y
29. Y. Shigeta, R. Harada, M. Kayanuma, M. Shoji, "Quantal cumulant dynamics for real-time simulations of quantum many-body systems", *International Journal of Quantum Chemistry* (**invited review**), **115**, 300-308 (2015). DOI: 10.1002/qua.24820
30. R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta, "Protein folding pathways extracted by Outlier FLOODing method (OFLOOD)", *Journal of Computational Chemistry*, **36**, 97-102 (2015). DOI: 10.1002/jcc.23773
31. T. Baba, T. Matsui, K. Kamiya, M. Nakano, Y. Shigeta, "A density functional study on  $pK_a$  of small polyprotic molecules", *International Journal of Quantum Chemistry*, **114**, 1128-1134 (2014).
32. H. Fukui, S. Takamuku, T. Yamada, K. Fukuda, T. Takebayashi, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, "Open-Shell Character and Second Hyperpolarizabilities of One-Dimensional

- Chromium(II) Chains: Size Dependence and Bond-Length Alternation Effect“, *Inorganic Chemistry*, **53**, 8700-8707 (2014).
33. T. Baba, R. Harada, M. Nakano, Y. Shigeta, "On the induced-fit mechanism of substrate-enzyme binding structures of Nylon-oligomer hydrolase“, *Journal of Computational Chemistry* **35**, 1240-1247 (2014).
  34. K. Kamiya, T. Baba, M. Boero, T. Matsui, S. Negoro, Y. Shigeta, “A Nylon-oligomer Hydrolase Promoting Cleavage Reactions in Unnatural Amide Compounds“, *Journal of Physical Chemistry Letters* **5**, 1210-1216 (2014).
  35. R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, “Fluctuation Flooding Method (FFM) for accelerating conformational transitions of proteins“, *Journal of Chemical Physics* **140**, 125103 (2014).
  36. S. Muhammad, H. Xu, Z. Su, K. Fukuda, R. Kishi, Y. Shigeta, M. Nakano, “A new type of organic-inorganic hybrid NLO-phore with large off-diagonal first hyperpolarizability tensors: A two-dimensional approach“, *Dalton Transaction*, **42**, 15053-15062 (2013).
  37. Y. Kitagawa, T. Matsui, Y. Nakanishi, Y. Shigeta, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, “Theoretical studies of electronic structures, magnetic properties and electron conductivities of one-dimensional Ni<sub>n</sub> ( $n = 3, 5, 7$ ) complexes“, *Dalton Transaction*, **42**, 16200-16208 (2013).
  38. K. Koyanagi, Y. Kita, Y. Shigeta, M. Tachikawa, “Binding of a positron to nucleic-acid base molecules and their pairs“, *ChemPhysChem*. **14**, 3458-3462 (2013).
  39. T. Inui, Y. Shigeta, K. Okuno, T. Baba, R. Kishi, M. Nakano, “Finite-Field Method with Unbiased Polarizable Continuum Model for Evaluation of the Second Hyperpolarizability of an Open-Shell Singlet Molecule in Solvents“, *Journal of Computational Chemistry*, **34**, 2345-2352 (2013).
  40. K. Okuno, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, “Non-empirical tuning of CAM-B3LYP functional in time-dependent density functional theory for excitation energies of diarylethene derivatives“, *Chemical Physics Letters*, **585**, 201-206 (2013).
  41. K. Okuno, Y. Shigeta, R. Kishi, M. Nakano, “Photochromic Switching of Diradical Character: Design of Efficient Nonlinear Optical Switches“, *Journal of Physical Chemistry Letters*, **4**, 2418-2422 (2013).
  42. T. Matsui, Y. Kitagawa, Y. Shigeta, M. Okumura, ”A Density Functional Theory Based Protocol to Compute the Redox Potential of Transition Metal Complex with the Correction of Pseudo-Counterion: General Theory and Applications“, *Journal of Chemical Theory and Computation*, **9**, 2974–2980 (2013).
  43. K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, A. Oshiyama, “Atom-Scale Reaction Pathways and Free-Energy Landscapes in Oxygen Plasma Etching of Graphene“, *Journal of Physical Chemistry Letters*, **4**, 1592–1596 (2013).
  44. M. Nakano, R. Kishi, H. Fukui, T. Minami, K. Yoneda, S. Minamide, Y. Inoue, T. Yamada, S.

- Ito, S. Muhammad, Y. Shigeta, T. Kubo, B. Champagne, "Diradicalology in Third-Order Nonlinear Optical Systems: Second Hyperpolarizabilities of Acetylene-Linked Phenalenyl Based Superpolyenes", *International Journal of Quantum Chemistry*, **113**, 585-591 (2013).
45. S. Muhammad, T. Minami, H. Fukui, K. Yoneda, S. Minamide, R. Kishi, Y. Shigeta, M. Nakano, "Comparative Study of Diradical Characters and Third-Order Nonlinear Optical Properties of Linear/Cyclic Acenes versus Phenylenes", *International Journal of Quantum Chemistry*, **113**, 592-598 (2013).
46. K. Yoneda, S. Minamide, T. Yamada, S. Ito, T. Minami, R. Kishi, Y. Shigeta, M. Nakano, "Antidot Effects on the Open-Shell Characters and Second Hyperpolarizabilities of Rectangular Graphene Nanoflakes", *International Journal of Quantum Chemistry*, **113**, 605-611 (2013).
47. Y. Shigeta, T. Inui, T. Baba, K. Okuno, H. Kuwabara, R. Kishi, M. Nakano, "Qantal Cumulant Mechanics and Dynamics for Multi-Dimensional Quantum Many-Body Clusters", *International Journal of Quantum Chemistry*, **113**, 348-355 (2013).
48. A. Konishi, Y. Hirao, K. Matsumoto, H. Kurata, R. Kishi, Y. Shigeta, M. Nakano, K. Tokunaga, K. Kamada, T. Kubo, "Synthesis and Characterization of Quarteranthene: Elucidating the Characteristics of the Edge State of Graphene Nanoribbons at the Molecular Level", *Journal of the American Chemistry Society*, **135**, 1430-1437 (2013).
49. T. Matsui, Y. Kitagawa, M. Okumura, Y. Shigeta, S. Sakaki, "Consistent Scheme for Computing Standard Hydrogen Electrode and Redox Potentials", *Journal of Computational Chemistry*, **34**, 21-26 (2013).
50. S. Muhammad, K. Fukuda, T. Minami, R. Kishi, Y. Shigeta, M. Nakano, "Interplay between the Diradical Character and Third-Order Nonlinear Optical Properties in Fullerene Systems", *Chemistry-A European Journal*, **19**, 1677-1685 (2013).
51. Y. Takano, O. Okuyama, Y. Shigeta, H. Nakamura, "Density Functional Studies of the Structural Variety of the  $\text{Cu}_2\text{S}_2$  Core of the  $\text{Cu}_A$  Site", *International Journal of Quantum Chemistry*, **112**, 3756-3762 (2012).
52. M. Kubo, O. Okuyama, T. Kitagawa, Y. Shigeta, "DFT Analysis of Low-Frequency Heme Vibrations in Soluble Guanylate Cyclase: Raman Mode Enhancement by Propionate-Protein Interactions", *Chemistry Letters*, **41**, 860-862 (2012).
53. K. Yoneda, M. Nakano, Y. Inoue, T. Inui, K. Fukuda, Y. Shigeta, "Impact of Antidot Structure on the Multiradical Characters, Aromaticities, and Third-Order Nonlinear Optical Properties of Hexagonal Graphene Nanoflakes", *Journal of Physical Chemistry C*, **116**, 17787-17795 (2012).
54. H. Fukui, Y. Inoue, T. Yamada, S. Ito, Y. Shigeta, R. Kishi, B. Champagne, M. Nakano, "Enhancement of the Third-Order Nonlinear Optical Properties in Open-Shell Singlet

- Transition-Metal Dinuclear Systems: Effects of the Group, of the Period, and of the Charge of the Metal Atom”, *Journal of Physical Chemistry A*, **116**, 5501-5509 (2012).
55. K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, A. Oshiyama, “Microscopic Mechanisms of Initial Oxidation of Si (100): Reaction Pathways and Free-Energy Barriers”, *Physica Review B*, **85**, 205314 (4 pages) (2012).
  56. R. Kishi, H. Fujii, S. Kishimoto, Y. Murata, S. Ito, K. Okuno, Y. Shigeta, M. Nakano, “Development of Calculation and Analysis Methods for the Dynamic First Hyperpolarizability Based on the *ab initio* Molecular Orbital - Quantum Master Equation Method”, *Journal of Physical Chemistry A*, **116**, 4371-80 (2012).
  57. K. Okuno, Y. Shigeta, R. Kishi, H. Miyasaka, M. Nakano, “Tuned CAM-B3LYP Functional in the Time-Dependent Density Functional Theory Scheme for Excitation Energies and Properties of Diarylethene Derivatives”, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **235**, 29-34 (2012).
  58. K. Koizumi, Y. Shigeta, O. Okuyama, H. Nakamura, Y. Takano, “Coordination Effects on the Electronic Structure of the Cu<sub>A</sub> Site of Cytochrome *c* Oxidase”, *Chemical Physics Letters*, **531**, 197-201 (2012).
  59. S. Muhammad, T. Minami, H. Fukui, K. Yoneda, R. Kishi, Y. Shigeta, M. Nakano, “Halide Ion Complexes of Decaborane (B<sub>10</sub>H<sub>14</sub>) and Their Derivatives: Noncovalent Charge Transfer Effect on Second-Order Nonlinear Optical Properties”, *Journal of Physical Chemistry A*, **116**, 1417-1424 (2012).
  60. K. Kamiya, T. Matsui, T. Sugimura, Y. Shigeta, “Theoretical Insight into Stereoselective Reaction Mechanisms of 2,4-Pentandiol-Tethered Ketene-Olefin [2+2] Cycloaddition”, *Journal of Physical Chemistry A*, **116**, 1168-1175 (2012).
  61. H. Fukui, Y. Inoue, R. Kishi, Y. Shigeta, B. Champagne, M. Nakano, “Tuned Long-Range Corrected Density Functional Theory Method for Evaluating the Second Hyperpolarizabilities of Open-Shell Singlet Metal-metal Bonded Systems”, *Chemical Physics Letters*, **523**, 60-64 (2012).
  62. M. Nakano, T. Minami, H. Fukui, R. Kishi, Y. Shigeta, B. Champagne, “Full Configuration Interaction Calculations of the Second Hyperpolarizabilities of the H<sub>4</sub> Model Compound: Summation-over-states Analysis and Interplay with Diradical Characters”, *Journal of Chemical Physics*, **136**, 024315 (2012).
  63. Y. Takano, Y. Shigeta, K. Koizumi, H. Nakamura, “Electronic Structures of the Cu<sub>2</sub>S<sub>2</sub> Core of the Cu<sub>A</sub> Site in Cytochrome *c* Oxidase and Nitronous Oxide Reductase”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **112**, 208-218 (2012).
  64. T. Saito, S. Yamanaka, K. Kanda, H. Isobe, Y. Takano, Y. Shigeta, Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Shen, N. Kamiya, M. Okumura, M. Shoji, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “Possible

Mechanisms of Water Splitting Reaction Based on Proton and Electron Release Pathways Revealed for  $\text{CaMn}_4\text{O}_5$  Cluster of PSII Refined to 1.9 Å X-Ray Resolution”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **112**, 253-276 (2012).

65. T. Matsui, T. Baba, K. Kamiya, Y. Shigeta, “An Accurate Density Functional Theory Based Estimation of  $pK_a$  Values of Polar Residues Combined with Experimental Data: From Amino Acids to Minimal Proteins”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **14**, 4181-4187 (2012).
66. T. Sugimura, E. Mitani, T. Tei, T. Okuyama, K. Kamiya, T. Matsui, Y. Shigeta, “Temperature-Independent Stereoselectivity in Intramolecular Cycloaddition of Ketene Generated from Diazoester in Solution and in Vapor Phase: How Entropy Term Governs the Selectivity”, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **85**, 504–510 (2012).
67. M. Nakano, H. Fukui, T. Minami, K. Yoneda, Y. Shigeta, R. Kishi, B. Champagne, E. Botek, T. Kubo, K. Ohta, K. Kamada, “(Hyper)polarizability Density Analysis for Open-Shell Molecular Systems Based on Natural Orbitals and Occupation Numbers”, *Theoretical Chemistry Accounts*, **130**, 711-724 (2011). [Erratum **130**, 725-726 (2011).]
68. K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, A. Oshiyama, “Self-diffusion in Crystalline Silicon: A Car-Parrinello Molecular Dynamics Study”, *Physica Review B*, **84**, 20, 205203 (2011).
69. K. Kamiya, Y. Shigeta, “First-principles Molecular Dynamics Studies on the Atomistic Behavior of His503 in Bovine Cytochrome *c* Oxidase”, *Biochim Biophys Acta*, **1807**, 1328-1335 (2011).
70. H. Fukui, M. Nakano, Y. Shigeta, B. Champagne, “Origin of the Enhancement of the Second Hyperpolarizabilities in Open-Shell Singlet Transition-Metal Systems with Metal–Metal Multiple Bonds”, *Journal of Physical Chemistry Letters*, **2**, 2063–2066 (2011).
71. T. Matsui, H. Miyachi, T. Baba, Y. Shigeta, “A Theoretical Study on Reaction Scheme of Silver (I) Containing 5-Substituted Uracils Bridge Formation”, *Journal of Physical Chemistry A*, **115**, 8504-10 (2011).
72. K. Yoneda, M. Nakano, H. Fukui, T. Minami, Y. Shigeta T. Kubo, E. Botek, B. Champagne, “Open-Shell Characters and Second Hyperpolarizabilities of One-Dimensional Graphene Nanoflakes Composed of Trigonal Graphene Units”, *ChemPhysChem*, **12**, 1697-1707 (2011)
73. M. Nakano, T. Minami, K. Yoneda, S. Muhammad, R. Kishi, Y. Shigeta, T. Kubo, L. Rougier, B. Champagne, K. Kamada, K. Ohta, “Giant Enhancement of the Second Hyperpolarizabilities of Open-Shell Singlet Polyaromatic Diphenalenyl Diradicaloids by an External Electric Field and Donor-Acceptor Substitution”, *Journal of Physical Chemistry Letters*, **2**, 1094-1098 (2011).
74. K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kamiya, Y. Shigeta, K. Shiraishi, “Atomistic Design of Guiding Principles for High Quality Metal-Oxide-Nitride-Oxide-Semiconductor Memories: First Principles Study of H and O Incorporation Effects for N Vacancies in SiN Charge Trap

- Layers”, *Japanese Journal of Applied Physics*, **50**, 04DD05 (2011).
75. K. Kamiya, K. Yamaguchi, A. Otake, Y. Shigeta, K. Shiraishi, "Efficient Guiding Principle of Highly Scalable MONOS-Type Memories", *ECS Transactions*, **41**, 71-79 (2011).
76. M. Muraguchi, Y. Sakurai, Y. Takada, Y. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, S. Nomura, K. Shiraishi, T. Endoh, "Collective Tunneling Model in Charge-Trap-Type Nonvolatile Memory Cell", *Japanese Journal of Applied Physics*, **50**, 04DD04 (2011).
77. Y. Nakanishi, T. Matsui, Y. Kitagawa, Y. Shigeta, T. Saito, Y. Kataoka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, "Electron Conductivity in Modified Models of Artificial Meta-DNA Using Green's Function-Based Elastic Scattering Theory", *Bulletin of the Chemical Society of Japan* (Selected Article), **84**, 366-375 (2011).
78. T. Baba, K. Kamiya, T. Matsui, N. Shibata, Y. Higuchi, T. Kobayashi, S. Negoro, Y. Shigeta, "Molecular Dynamics Studies on the Mutational Structures of a Nylon-6 Byproduct-Degrading Enzyme", *Chemical Physics Letters*, **507**, 157-161 (2011).
79. M. Muraguchi, Y. Sakurai, Y. Takada, Y. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, S. Nomura, K. Shiraishi, T. Endoh, "Collective Electron Tunneling Model in Si-Nano Dot Floating Gate MOS Structure", *Key Engineering Materials*, **470**, 48-53 (2011).
80. H. Fukui, Y. Shigeta, M. Nakano, T. Kubo, K. Kamada, K. Ohta, B. Champagne, E. Botek, "Enhancement of Second Hyperpolarizabilities in Open-Shell Singlet Slipped-Stack Dimers Composed of Square Planar Nickel Complexes Involving *o*-Semiquinonato Type Ligands", *Journal of Physical Chemistry A*, **115**, 1117-24 (2011).
81. T. Matsui, A. Oshiyama, Y. Shigeta, "A Simple Scheme for Estimating the pKa Values of 5-Substituted Uracils", *Chemical Physics Letters*, **502**, 4-6, 248-252 (2011).
82. M. Nakano, T. Minami, H. Fukui, K. Yoneda, Y. Shigeta, R. Kishi, B. Champagne, E. Botek, "Approximate Spin-Projected Spin-Unrestricted Density Functional Theory Method: Application to the Diradical Character Dependences of the (Hyper) Polarizabilities in *p*-Quinodimethane Models", *Chemical Physics Letters*, **501**, 140-145 (2010).
83. Y. Nakanishi, T. Matsui, Y. Shigeta, Y. Kitagawa, T. Saito, Y. Kataoka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, "Sequence-Dependent Proton-Transfer Reaction in Stacked GC Pair III: The Influence of Proton Transfer to Conductivity", *International Journal of Quantum Chemistry*, **110**, 2221-2230 (2010).
84. K. Kamiya, M. Boero, K. Shiraishi, A. Oshiyama, Y. Shigeta, "Energy Compensation Mechanism for Charge-Separated Protonation States in Aspartate-Histidine Amino Acid Residue Pairs", *Journal of Physical Chemistry B*, **114**, 6567-6578 (2010).
85. M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Takada, Y. Sakurai, S. Nomura, K. Shiraishi, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, Y. Shigeta, "Importance of Electronic State of Two-dimensional Electron Gas for Electron Injection Process in Nano-electronic Devices", *Physica E*, **42**,



2602-2605 (2010).

86. Y. Sakurai, S. Nomura, Y. Takada, J. Iwata, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, "Anomalous Temperature Dependence of Electron Tunneling Between a Two-Dimensional Electron Gas and Si Dots", *Physica E*, **42**, 918-921 (2010).
87. Y. Sakurai, J. Iwata, M. Muraguchi, Y. Shigeta, Y. Takada, S. Nomura, T. Endoh, S. Saito, K. Shiraishi, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, "Temperature Dependence of Electron Tunneling Between Two-Dimensional Electron Gas and Si Quantum Dots", *Japanese Journal of Applied Physics*, **49**, 014001 (4 pages), (2010).
88. H. Miyachi, T. Matsui, Y. Shigeta, K. Hirao, "Effects of Mercury (II) on Structural Properties, Electronic Structure and UV Absorption Spectra of Thymine-Mercury (II)-Thymine Nucleobase Pair Containing Duplex", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **12**, 909-917, (2010).
89. Y. Sakurai, S. Nomura, Y. Takada, J. Iwata, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, "Physics of Nano-Contact between Si Quantum Dots and Inversion Layer", *ECS Transactions*, **25**, 463-469, (2009).
90. Y. Shigeta, "Molecular Theory Including Quantum Effects and Thermal Fluctuations", *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **82** (Award Accounts), 1323-1340, (2009).
91. T. Matsui, T. Sato, Y. Shigeta, K. Hirao, "Sequence-Dependent Proton-Transfer Reaction in Stacked GC Pair II: The Origin of Stabilities of Proton-Transfer Products", *Chemical Physics Letters*, **478**, 238-242, (2009).
92. T. Matsui, H. Miyachi, Y. Nakanishi, Y. Shigeta, Y. Kitagawa, M. Okumura, K. Hirao "Theoretical Studies on Sulfur and Metal Cation (Cu(II), Ni(II), Pd(II), and Pt(II))-Containing Artificial DNA", *Journal of Physical Chemistry B*, **113**, 12790-12795 (2009).
93. T. Matsui, T. Sato, Y. Shigeta, "Sequence Dependent Proton-Transfer Reaction in Stacked GC Pair I: The Possibility of Proton-Transfer Reactions", *International Journal of Quantum Chemistry*, **109**, 2168-2177, (2009).
94. Y. Nakanishi, Y. Kitagawa, Y. Shigeta, T. Saito, T. Matsui, H. Miyachi, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, "Theoretical Studies on Magnetic Interactions between Cu(II) Ions in Salen Nucleobases", *Polyhedron*, **28**, 1945-1949, (2009).
95. Y. Nakanishi, Y. Kitagawa, Y. Shigeta, T. Saito, T. Matsui, H. Miyachi, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, "Theoretical Studies on Magnetic Interactions Between Cu(II) Ions in Hydroxypyridone Nucleobases", *Polyhedron*, **28**, 1714-1717, (2009).
96. T. Matsui, H. Miyachi, T. Sato, Y. Shigeta, K. Hirao, "Structural Origin of Copper Ion Containing Artificial DNA: A Density Functional Study", *Journal of Physical Chemistry B*, **112**, 16960-16965, (2008).

97. Y. Shigeta, "Distribution Function in Quantal Cumulant Dynamics", *Journal of Chemical Physics*, **128** (Communication), 161103 (4 pages), (2008).
98. Y. Shigeta, H. Miyachi, K. Hirao, "Quantal Cumulant Dynamics II: An Efficient Time-Reversible Integrator", *Chemical Physics Letters*, **443**, 414-419, (2007).
99. T. Matsui, Y. Shigeta, K. Hirao, "Multiple Proton-Transfer Reaction in DNA Base Pairs by Coordination of Pt Complex", *Journal of Physical Chemistry B*, **111**, 1176-1181, (2007).
100. Y. Shigeta, H. Miyachi, K. Hirao, "Quantal Cumulant Dynamics: General Theory", *Journal of Chemical Physics*, **125**, 244102 (9 pages), (2006).
101. H. Miyachi, Y. Shigeta, K. Hirao, "Real Time Mixed Quantum-Classical Dynamics with ab initio Quartic Force Field: Application to Molecular Vibrational Frequency Analysis", *Chemical Physics Letters*, **432**, 585-590, (2006).
102. I. Barth, J. Manz, Y. Shigeta, K. Yagi, "Unidirectional Electronic Ring Current Driven by a Few Cycle Circularly Polarized Laser Pulse: Quantum Model Simulations for Mg-Porphyrin", *Journal of the American Chemical Society*, **128**, 7043-7049, (2006).
103. T. Matsui, Y. Shigeta, K. Hirao, "Influence of Pt Complex Binding on the Guanine-Cytosine Pair: A Theoretical Study", *Chemical Physics Letters*, **423**, 331-334, (2006).
104. Y. Shigeta, K. Hirao, S. Hirata, "Exact-Exchange Time-Dependent Density-Functional Theory with the Frequency-Dependent Kernel", *Physical Review A*, **73** (Rapid Communication), 010502 (4 pages), (2006).
105. A. Oda, H. Nagao, Y. Kitagawa, Y. Shigeta, M. Shoji, H. Nitta, M. Okumura, K. Yamaguchi, "Search for the Ground States of Ising Spin Clusters by Using the Genetic Algorithms", *International Journal of Quantum Chemistry*, **105**, 645-654, (2005).
106. Y. Shigeta, K. Takatsuka, "Dynamic Charge Fluctuation of Endohedral Fullerene with Coencapsulated Be Atom and H<sub>2</sub>", *Journal of Chemical Physics*, **123** (Communication), 131101, (2005).
107. H. Miyachi, Y. Shigeta, K. Hirao, "Theoretical Study of the Mechanism of Hydrogenation of Side-on Coordinated Dinitrogen Activated by Zr Binuclear Complexes ( $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4\text{H})_2\text{Zr}]_2(\eta^2, \mu^2, \mu^2\text{-N}_2)$ )", *Journal of Physical Chemistry A*, **109**, 8800-8808, (2005).
108. Y. Shigeta, "Optimized Effective Potential Method at Finite Temperature: An Application to Superconductivity", *International Journal of Quantum Chemistry*, **101**, 774-782, (2005).
109. Y. Shigeta, "Hybrid QM/MM Studies on Energetics of Malonaldehyde in Condensed Phase", *International Journal of Quantum Chemistry*, **96**, 32-41, (2004).
110. K. Yamaguchi, M. Nakano, H. Nagao, M. Okumura, S. Yamanaka, T. Kawakami, D. Yamaki, M. Nishino, Y. Shigeta, Y. Kitagawa, Y. Takano, M. Takahata, R. Takeda, "Spin and Pseudo Spins in Theoretical Chemistry. A Unified View for Superposed and Entangled Quantum Systems", *Bulletin of The Korean Chemical Society*, **24**, 864-880, (2003).

111. Y. Shigeta, H. Saito, "A QM/MM Molecular Dynamics Study of a Dynamical Change in Effective Charge on Be Atom in  $(\text{Be}+n\text{H}_2)@\text{C}_{60}$ ", *Synthetic Metals*, **135**, 765-766, (2003).
112. Y. Shigeta, H. Ushiyama, K. Takatsuka, "Models for Double Proton and Electron Transfer Reactions: Analyses by Means of Quantum Dynamics", *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, **615**, 267-273, (2002).
113. Y. Shigeta, A.M. Ferreira, V.G. Zakrzewski, J.V. Ortiz, "Electron Propagator Calculations with Kohn-Sham Reference States", *International Journal of Quantum Chemistry*, **85**, 411-420, (2001).
114. S. Yamanaka, D. Yamaki, Y. Shigeta, H. Nagao, K. Yamaguchi, "Noncollinear Spin Density Functional Theory for Spin-Frustrated and Spin-Degenerate Systems", *International Journal of Quantum Chemistry*, **84**, 670-676, (2001).
115. D. Yamaki, Y. Shigeta, S. Yamanaka, H. Nagao, K. Yamaguchi, "Generalized Spin Orbital Calculations of Spin-Frustrated Molecules", *International Journal of Quantum Chemistry*, **84**, 546-551, (2001).
116. Y. Kitagawa, T. Soda, Y. Shigeta, S. Yamanaka, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, "Improvement of the Hybrid Density Functional Method from the Viewpoint of Effective Exchange Integrals", *International Journal of Quantum Chemistry*, **84**, 592-600, (2001).
117. Y. Shigeta, H. Nagao, K. Yamaguchi, "Electronic Structure Calculation by Monte Carlo Diagonalization Method", *International Journal of Quantum Chemistry*, **84**, 601-606, (2001).
118. Y. Shigeta, H. Nagao, Y. Yoshioka, J. Toyoda, Y. Morita, K. Nakasuji, K. Yamaguchi, "A Theoretical Study on Conductivity of Model Polymer Including DNA Base Pairs", *Synthetic Metals*, **119**, 259-260, (2001).
119. Y. Ohta, J. Maki, T. Yoshimoto, Y. Shigeta, H. Nagao, K. Nishikawa, "Calculation of Quasiparticle Energy of Molecular Systems by the GW Method", *International Journal of Quantum Chemistry*, **84**, 348-353, (2001).
120. T. Yoshimoto, Y. Ohta, J. Maki, Y. Shigeta, H. Nagao, K. Nishikawa, "Non-Born-Oppenheimer Density Functional Theory for Excited States by Using Green's Function Techniques", *International Journal of Quantum Chemistry*, **84**, 354-362, (2001).
121. S. Yamanaka, Y. Shigeta, Y. Ohta, D. Yamaki, H. Nagao, K. Yamaguchi, "Generalized Spin Orbital GW Theory for Spin-Frustrated and Spin-Degenerate Systems", *International Journal of Quantum Chemistry*, **84**, 369-374, (2001).
122. H. Nagao, K. Kinugawa, Y. Shigeta, K. Ohta, K. Yamaguchi, "Quantum Spin Dynamics in Solution Applicable to Quantum Computing", *Journal of Molecular Liquids*, **90**, 63-68, (2001).
123. Y. Shigeta, Y. Kitagawa, H. Nagao, Y. Yoshioka, J. Toyoda, K. Nakasuji, K. Yamaguchi, "Theoretical Studies on the Proton and Electron Transfer (PET) in a Pseudo One-Dimensional

- Hydrogen Bonded Network System”, *Journal of Molecular Liquids*, **90**, 69-74, (2001).
124. H. Nagao, M. Nishino, Y. Shigeta, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “Theoretical Studies on Anomalous Phases of Photodoped Systems in Two-Band Model”, *Journal of Chemical Physics*, **113**, 11237-11244, (2000).
125. A. Oda, H. Nagao, Y. Kitagawa, Y. Shigeta, K. Yamaguchi, “Theoretical Studies on Magnetic Behavior in Clusters by the Genetic Algorithms”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **80**, 646-656, (2000).
126. S. Yamanaka, D. Yamaki, Y. Shigeta, H. Nagao, Y. Yoshioka, N. Suzuki, K. Yamaguchi, “Generalized Spin Density Functional Theory for Non-Collinear Molecular Magnetism”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **80**, 664-671, (2000).
127. D. Yamaki, Y. Shigeta, S. Yamanaka, H. Nagao, K. Yamaguchi, “MP2, Tamm-Dancoff, and RPA Methods Based on the Generalized HF Solution”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **80**, 701-707, (2000).
128. H. Nagao, M. Nishino, Y. Shigeta, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “Theoretical Studies on Superconducting and Other Phases: Triplet Superconductivity, Ferromagnetism, and Ferromagnetic Metal”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **80**, 721-732, (2000).
129. Y. Shigeta, H. Nagao, J. Toyoda, Y. Morita, K. Nakasuji, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “Theoretical Study on Dependency of Conductivity on Structure of the Proton- and Electron-Coupled System”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **80**, 882-891, (2000).
130. H. Nagao, M. Nishino, Y. Shigeta, T. Soda, Y. Kitagawa, T. Onishi, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “Theoretical Studies on Effective Spin Interactions, Spin Alignments and Macroscopic Spin Tunneling in Polynuclear Manganese and Related Complexes and Their Mesoscopic Clusters”, *Coordination Chemistry Reviews*, **198**, 265-295, (2000).
131. T. Soda, Y. Kitagawa, T. Onishi, Y. Takano, Y. Shigeta, H. Nagao, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “*ab initio* Computations of Effective Exchange Integrals for H-H, H-He-H and  $Mn_2O_2$  Complex: Comparison of Broken-Symmetry Approaches”, *Chemical Physics Letters*, **319**, 223-230, (2000).
132. Y. Shigeta, T. Kawakami, H. Nagao, K. Yamaguchi, “A Theoretical Study of Spin Level Crossing Induced by an External Magnetic Field of Ring Molecule Magnet Models”, *Chemical Physics Letters*, **315**, 441-445, (1999).
133. H. Nagao, M. Mitani, M. Nishino, Y. Shigeta, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, “Theoretical Studies on Anomalous Phases in Molecular Systems with External Field: Possibility of Photo-induced Superconductivity”, *International Journal of Quantum Chemistry*, **75**, 549-561, (1999).
134. Y. Shigeta, H. Nagao, K. Nishikawa, K. Yamaguchi, “Density Functional Theory without the Born-Oppenheimer Approximation. II. Green Function Techniques”, *International Journal of*

*Quantum Chemistry*, **75**, 875-883, (1999).

135. H. Nagao, M. Nakano, Y. Shigeta, K. Yamaguchi, "Quantum Phase Dynamics of Interaction Between Photon Field and Magnetic System: Effects of Magnetic Quantum Tunneling", *Optical Review*, **6**, 227-231, (1999).
136. Y. Shigeta, H. Nagao, K. Nishikawa, K. Yamaguchi, "A Formulation and Numerical Approach to Molecular Systems by the Green Function Method without the Born-Oppenheimer Approximation", *Journal of Chemical Physics*, **111**, 6171-6179, (1999).
137. Y. Shigeta, H. Takahashi, S. Yamanaka, M. Mitani, H. Nagao, K. Yamaguchi, "Density Functional Theory without the Born-Oppenheimer Approximation and Its Application", *International Journal of Quantum Chemistry*, **70**, 659-669, (1998).
138. H. Nagao, M. Mitani, M. Nishino, Y. Shigeta, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, "Possibility of Charge-Mediated Superconductors in the Intermediate Region of Metal-Insulator Transitions", *International Journal of Quantum Chemistry*, **70**, 1075-1084, (1998)
139. Y. Shigeta, Y. Ozaki, K. Kodama, H. Nagao, H. Kawabe, K. Nishikawa, "Nonadiabatic Molecular Theory and Its Application. II. Water Molecule", *International Journal of Quantum Chemistry*, **69**, 629-637, (1998).
140. H. Nagao, Y. Shigeta, H. Kawabe, T. Kawakami, K. Nishikawa, K. Yamaguchi, "Path Integral Method by Means of Generalized Coherent States and Its Numerical Approach to Molecular Systems .1. Ensemble Average of Total Energy", *Journal of Chemical Physics*, **107**, 6283-6289, (1997).
141. H. Nagao, K. Kodama, Y. Shigeta, K. Nishikawa, H. Kawabe, M. Nakano, K. Yamaguchi, "Nonadiabatic Treatment of Molecular Systems by the Wave Packets Method", *International Journal of Quantum Chemistry*, **60**, 49-58, (1996).
142. H. Nagao, M. Nakano, S. Yamanaka, S. Yamada, D. Yamaki, I. Shigemoto, S. Kiribayashi S, K. Yamaguchi, Y. Shigeta, "Many-Electron-Wavepackets Method", *International Journal of Quantum Chemistry*, **60**, 79-89, (1996).

## 2. Proceedings (査読付き、12件)

- P1. Y. Imai, T. Yamamoto, Y. Okano, R. Sato, Y. Shigeta, "Molecular Dynamics Simulation of Atomic-scale Solutal Marangoni Convection", *Proceeding of Regional Symposium on Chemical Engineering* (2016).
- P2. K. Kamiya, Y. Shigeta, A. Oshiyama, "Effects of Hydrogen-Bonding Environments on Protonation States around the Entrance of Proton Transfer Pathways in Cytochrome *c* Oxidase", *AIP Conference issue*, **1102**, 257-261 (2009).
- P3. Y. Shigeta, "Quantal Cumulant Dynamics for Dissipative Tunneling", *AIP Conference Issue*, **963**, 1371-1374 (2007). Selected as "selected papers from ICNAAM 2007 and ICCMSE2007",

*AIP Conference Issue*, **1046**, 48-51 (2008).

- P4. Y. Shigeta, "Internal Motion of Confined Molecules in Fullerene", *AIP Conference Issue*, **708**, 464-465 (2004).
- P5. H. Nagao, Y. Shigeta, K. Yamaguchi, K. Nishikawa, "Theoretical Study on Triplet Superconducting Phase and Other Phases in Hole-Doped Ferromagnetic Systems", *Synthetic Metals*, **121**, 1792-1793 (2001).
- P6. Y. Shigeta, K. Kinugawa, H. Nagao, K. Ohta, K. Yamaguchi, "Quantum Spin Dynamics by Path Integral Centroid Molecular Dynamics Method", *Progress of Theoretical Physics Supplement*, **138**, 533-534 (2000).
- P7. S. Yamanaka, D. Yamaki, Y. Shigeta, H. Nagao, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, N. Suzuki, "Generalized Spin-Density Functional Calculation for the Spin Frustrated Systems" *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, **343**, 457-462 (2000).
- P8. H. Nagao, M. Nakano, K. Ohta, Y. Shigeta, S. Kobayashi, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, "Exciton Condensate in Model Dendrimers", *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, **342**, 273-278 (2000).
- P9. Y. Shigeta, H. Nagao, Y. Yoshioka, K. Yamaguchi, "Theoretical Studies on Quantum Tunneling of Spins in Cluster of Clusters", *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, **342**, 279-284 (2000).
- P10. Y. Shigeta, S. Yamada, H. Nagao, M. Nakano, K. Ohta, K. Yamaguchi, "Theoretical Study on Polarizability of Ethylene by Path Integral Method", *Synthetic Metals*, **101**, 513-513 (1999).
- P11. Y. Shigeta, T. Kawakami, H. Nagao, K. Yamaguchi, "Theoretical Studies of Magnetization by *ab initio* Path Integral Method", *Synthetic Metals*, **103**, 1989-1990 (1999).
- P12. H. Nagao, H. Kawabe, Y. Shigeta, M. Nishino, M. Mitani, K. Yamaguchi, "Theoretical Studies on Anomalous Phases in Model Plane Systems of  $\text{LiBeH}_3$ ", *Synthetic Metals*, **103**, 2651-2652 (1999).

### 3. 解説 (9 件)

- E1. 松井亨、喜屋武茜、庄司光男、重田育照、"プロトンの水和自由エネルギー：酸解離定数および標準水素電極電位の高精度計算"、量子水素の科学 (特集号)、日本コンピュータ化学会誌 (**invited review**)、**in revision** (2016).
- E2. 梅田宏明、埴敏博、庄司光男、朴泰祐、重田育照、"OpenFMOにおける4中心クーロン相互作用項計算のGPGPU化の試み"、*Journal of Computer Chemistry Japan* (**invited letter**) **14**(3), 69-70(2015).
- E3. 神谷克政、重田育照、"酵素による人工物質の分解反応シミュレーション"、『シミュレーション』 小特集 **34**, 6 (2015).

- E4. 梅田宏明, 埜敏博, 庄司光男, 朴泰祐, 重田育照, "GPGPUクラスタ上でのFMO計算の性能評価", *Journal of Computer Chemistry Japan (invited letter)* **13**, 323–324 (2014) .
- E5. 馬場剛史、安東寛之、重田育照、“第一原理Meta-Dynamics法, Blue Moon Ensemble法を用いた反応経路解析 (特集 反応経路探索)”、アンサンブル：分子シミュレーション研究会会誌 16, Vol. 1, 36-41 (2014).
- E6. 中野雅由、重田育照、岸良平  
“量子化学工学における光機能性物質設計”  
特集「化学工学に展開する量子化学計算」 化学工学会誌, **77**, 406-409, (2013).
- E7. 重田育照  
“第一原理計算による生体内酵素反応の理論解析”  
豊田研究報告, **66**, 103-104 (2013).
- E8. 山口慶太、大竹朗、神谷克政、重田育照、白石賢二、  
"酸素の化学ポテンシャルデザインに基づく MONOS 型メモリーの原子レベルの設計指針"  
電子情報通信学会技術研究報告, **110**, 21-24 (2011).
- E9. 小田彰史、北河康隆、重田育照、長尾秀実、山口 兆  
“分子磁性の理論 (その 7) 遺伝的アルゴリズムのモンテカルロ法への導入”  
固体物理, **40**, 163 (2005)

#### 4. 著作・総説 (9 件)

- R1. T. Baba, K. Kamiya, Y. Shigeta, "Integrated Computational Studies on Mutational Effects of A Nylon-degrading Enzyme", *Conceptual and Computational Advances in Quantum Chemistry*, Chap. X, Y-Z, Springer (2016).
- R2. R. Harada, Y. Inagaki, Y. Shigeta, "Protein Folding and Evolution", *Materials Science and Engineering*, Article ID: Protein Folding and Evolution/00999 Elsevier.
- R3. 金属錯体の量子・計算化学：山口兆、増田秀樹、榊茂好 編、錯体化学選書 10、三共出版、「第 4-1 章担当」(2014) .
- R4. 重田育照, "Cumulant mechanics : An explicit treatment for fluctuation on dynamics", 分子科学会アーカイブス (Review) , *Mol. Sci.* **7**, Vol. 1, A0057 (2013).
- R5. Y. Shigeta, "Quantal Cumulant Mechanics as Extended Ehrenfest Theorem", *Quantum Mechanics*, Chap. **13**, 293-316, InTech open (ISBN 980-953-307-945-0), (2013).
- R6. T. Matsui, H. Miyachi, Y. Shigeta, "Theoretical Studies on Metal-Containing Artificial DNA Bases", *Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems, Conceptual and Computational Advances in Quantum Chemistry*, Chap. **25**, 433-460, Springer, (2012).
- R7. Y. Shigeta, H. Miyachi, T. Matsui, N. Yokoyama, K. Hirao, "Quantum Theory in Terms of Cumulant Variables", *Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems, Conceptual*

*and Computational Advances in Quantum Chemistry*, Ed. P. Piecuch, J. Maruani, G. Delgado-Barrio, S. Wilson, Chap. **21**, 3-34, Springer, (2009).

R8. S. Hirata, P.-D. Fan, T. Shiozaki, Y. Shigeta, “Single-Reference Methods for Excited States in Molecules and Polymers”, Book chapter of “*Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics*” Ed. J. Leszczynski, Chap. **2**, 15-64, Springer Netherland, (2008).

R9. 物性量子化学入門：山口兆他編、講談社「13、14 章担当」(2004).

## 5. 報道 (1 件)

PR-1. 「神奈川工科大と阪大、筑波大、兵庫県立大、仏 Strasbourg 大など、人工物質ナイロンオリゴマー分解酵素の反応の仕組みをスパコンで解明」日経バイオテク Online <https://bio.nikkeibp.co.jp/article/news/20140419/175556/>



## 国内外の招待講演・依頼講演リスト (重田育照)

1. 国際学会招待講演 (34件 2016年度の予定を含む)
- I1. "Cumulant Mechanics for Quantum and Statistical Physics", *The 4<sup>th</sup> International Conference on Molecular Simulation (ICMS)*, Oct. 23<sup>rd</sup>-26<sup>th</sup> 2016, Shanghai, China.
- I2. "Integrated approach toward rational design of enzyme", *2016 2<sup>nd</sup> Japan-Thai workshop on theoretical and computational chemistry*, Sep. 21<sup>st</sup>-22<sup>nd</sup> 2016, Yokohama City University, Japan.
- I3. "Simple conformational search methods for understanding biological functions", *Shanghai Workshop on Frontiers in Molecular Biophysics*, Jul. 23<sup>th</sup>-26<sup>th</sup> 2016, Shanghai, China.
- I4. "Efficient Conformational Search Methods for Protein Folding Problems", *The ninth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP 2016)*, Jul. 17<sup>th</sup>-22<sup>nd</sup> 2016, Grand Forks, North Dakota, USA.
- I5. "A consistent scheme for accurately estimating acid dissociation constant ( $pK_a$ ) and redox potential", *4<sup>th</sup> Changsha Workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2016*, Jun. 10<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> 2016, Changsha, Hunan, China.
- I6. "Theoretical design of photochemical properties of diarylethenes", *International Mini-Symposium on Fundamentals and Applications of Photosynergetic Excitations*, AIST Osaka center Mar. 15<sup>th</sup> 2016, Osaka, Japan.
- I7. "Inverse Histogram-based Sampling Algorithm for Protein-folding Problems", *The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7)*, Jan. 25<sup>th</sup>-28<sup>th</sup> 2016, Kaohsiung, Taiwan.
- I8. "Theoretical studies on triplet-triplet annihilation processes of diphenylanthracene derivatives in solution", *Symposium #44 'Modeling and Analyzing Exciton and Charge Dynamics in Molecules and Clusters' Pacificchem 2015*, Dec. 15<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> 2015, Hawaii, USA.
- I9. "Molecular Design for Optical Properties of Diarylethenes", *Energy, Materials, Nanotechnology (EMN) Bangkok meeting*, Nov. 10<sup>th</sup>-13<sup>th</sup> 2015, Bangkok, Thailand.
- I10. "Simple Conformational Search Algorithms For Protein Folding", *6<sup>th</sup> Czech-Slovakia-Japan Theoretical Chemistry meeting*, Oct. 11<sup>th</sup>-14<sup>th</sup> 2015, Bratislava, Slovakia.
- I11. "A Molecular Design of Nonlinear Optical Properties and Conductivity Switches on the Basis of Open-shell Nature", *2014 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS)*, Nov. 30<sup>th</sup>-Dec. 5<sup>th</sup> 2014, Hawaii, USA.
- I12. "Protein Folding Processes Detected by Enhanced Sampling Techniques", *19<sup>th</sup> International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics*, Nov. 11<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> 2014, Tamsui, Taiwan.

- I13. "Towards Theoretical Design of Catalytic Activities of Enzymes", *The Asia Hub for e-Drug Discovery Symposium 2014*, Nov. 11<sup>th</sup>-12<sup>th</sup>, in Sichuan University (SCU), Chengdu, China.
- I14. "First-principles analysis on enzymatic degradation of nylon", *2<sup>nd</sup> World Congress on Petrochemistry and Chemical Engineering*, Oct. 27<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> 2014, Las Vegas, USA.
- I15. "Computational Studies on Redox Potential of Metal Complexes and Model Cofactors", *International Conference on Synthetic Metals*, June 30<sup>th</sup>-July 5<sup>th</sup>, Turku, Finland.
- I16. "Theoretical Studies on Reaction Mechanism of An Enzyme Cleaving Unnatural Amide Compound", *Symposium on Molecular Science and Synthesis of Functional Molecules for Next Generation*, Mar.10<sup>th</sup>-11<sup>th</sup> 2014, Hiroshima, Japan.
- I17. "Quantum chemical studies for estimation of  $pK_a$  and redox potential", *World Congress on Petrochemistry and Chemical Engineering*, Nov. 17<sup>th</sup>-19<sup>th</sup> 2013, San Antonio USA.
- I18. "Free Energy Analyses on Cluster Deformations by Cumulant Mechanics", *8th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics*, Aug. 25<sup>th</sup>-31<sup>st</sup> 2013, Budapest, Hungary.
- I19. "Theoretical Studies on Current-Voltage (*I-V*) Characteristics of Metal Containing Artificial DNA and Ni Complex Based Molecular Devices", *2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS)*, Dec. 2<sup>nd</sup>-7<sup>th</sup> 2012, Hapuna Beach Hotel, Hawaii, USA.
- I20. "Design of Nylon Oligomer Hydrolase on the Basis of Simulations", *BIT's 3<sup>rd</sup> Symposium on Enzymes & Biocatalysis 2012*, Apr. 25<sup>th</sup>-28<sup>th</sup> 2012, Xian, China.
- I21. "First-principles Analysis on Proton Transport Pathways of Cytochrome *c* Oxidase", *Asian International Symposium on Theoretical Chemistry 2012*, Mar. 26<sup>th</sup> 2012, Tokyo, Japan.
- I22. "First-principle Analyses on Reaction Mechanisms of Enzymes and Related Topics", *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2011*, Oct. 2<sup>nd</sup>-7<sup>th</sup> 2011, Halkidiki, Greece.
- I23. "Classical and Quantal Cumulant Dynamics", *16<sup>th</sup> International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics*, Sep 11<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> 2011, Ishikawa, Japan.
- I24. "Classical Cumulant Dynamics", *7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics*, Sep 2<sup>nd</sup>-7<sup>th</sup> 2011, Tokyo, Japan.
- I25. "Theoretical Study on Artificial and Mismatch DNA Bases", *Symposium #5 Pacificchem 2010*, Dec. 14<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> 2010, Hawaii, USA.
- I26. "Energetics at an Entrance Part of Proton Transfer Pathway", *3rd. International Conference of Computational Science*, Oct 27<sup>th</sup>-28<sup>th</sup> 2009, Bali, Indonesia.
- I27. "Electron Conduction of Metal Containing Artificial DNA", *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009*, Sep 29<sup>th</sup>-Oct. 4<sup>th</sup> 2009, Rhodes, Greece.
- I28. "Energy Compensation Mechanism for Protonation States of a Asp-His Pair at Entrance of D

pathway in Cytochrome *c* Oxidase”, *International Meeting of Metalloprotein Functions*, July 31<sup>st</sup> -Aug 1<sup>st</sup> 2009, Hyogo, Japan.

- I29. “Quantum Dynamics in Terms of Cumulant”, *Theory and Application in Computational Chemistry 2008*, Sep. 22<sup>nd</sup>-27<sup>th</sup> 2008, Shanghai, China.
- I30. “Quantum Mechanics in Terms of Cumulant”, *13<sup>th</sup> Quantum Systems in Chemistry and Physics*, July 6<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> 2008, Lansing, USA.
- I31. “Importance of Fluctuation on Molecular Properties by Molecular Dynamics Method”, *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2007*, Symposium 1, Sep. 25<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> 2007, Corfu, Greece.
- I32. “Quantal Cumulant Dynamics for Dissipative Systems”, *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2007*, Sep. 25<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> 2007, Corfu, Greece.
- I33. “Bio-electronic Molecular Device: Switch by Proton Transfer”, *Material Oriented Quantum Chemistry*, May 27<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> 2006, Osaka, Japan.
- I34. “Electron Propagator Theory Based on Density Functional Theory”, *47<sup>th</sup> Sanibel Symposium (Keynote Lecture)*, Feb. 21<sup>st</sup>-27<sup>th</sup> 2006, Florida, USA.

## 2. 国内学会・ワークショップ・シンポジウムにおける招待・依頼講演 (39 件)

- D1. "理論計算に基づく生体内分子の構造・機能相関解析"、"愛媛大学プロテオサイエンスセンターPROS セミナー"・“医学研究科大学院講義”、November 21<sup>st</sup> 2016、愛媛大学、愛媛
- D2. "第一原理計算に基づく物質の起源と生命痕跡の探求"、宇宙科学談話会（宇宙科学セミナー）、August 10<sup>th</sup> 2016、JAXA 相模原キャンパス、神奈川。
- D3. "タンパク質の機能解析と制御に向けた量子化学理論"、九州大学理学部化学科学研究懇談会、June 30<sup>th</sup> 2016、九州大学、福岡。
- D4. "理論計算によるタンパク質の機能解析と制御：最近の進展"、分子研理論・計算領域セミナー、May 19<sup>th</sup> 2016、分子科学研究所、岡崎、愛知。
- D5. "ナノバイオ系のシミュレーションとダイナミクス：その後の展開"、「量子化学の最近の進展- 大規模・複雑系の量子化学シミュレーション -」、March 23<sup>rd</sup> 2016、AICS、兵庫。
- D6. "分子動力学法と情報科学の融合によるタンパク質の構造探索"、「分子技術と理論計算・データ科学」大阪大学未来研究分子技術イニシアティブセミナー、March 14<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> 2016、大阪大学豊中キャンパス、大阪
- D7. “第一原理計算に基づく物質の起源と生命痕跡の探求”、シンポジウム「宇宙惑星居住の実現に向けて - 生命維持, 食糧生産, エネルギー・資源開発 等 -」、化学工学会第 81 年会、March 13<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> 2016、関西大学千里山キャンパス、大阪。
- D8. “化学における動力学と統計について”、研究交流会「理論分子科学・分子非線形科学のこれまでとこれから」、東京大学駒場リサーチキャンパス、March 5<sup>th</sup>-6<sup>th</sup> 2016、東京。

- D9. “レアイベントとしてのタンパク質の構造変化と機能”、タンパク研セミナー「構造を基盤とする蛋白質科学における未解決問題」、東京大学 先端科学技術研究センター ENEOS ホール、March 1<sup>st</sup>-2<sup>nd</sup> 2016、東京.
- D10. “理論研究によるチトクロム *c* 酸化酵素の酸化還元と共役したプロトン輸送機構：入り口と出口”、生物物理学会シンポジウム「膜を介したプロトン透過機構」、September 13<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> 2015、金沢、石川.
- D11. “理論計算に基づくタンパク質の反応性と物性の解析”「2015 年度第 1 回水和ナノ構造研究会」、September 1<sup>st</sup>-2<sup>nd</sup> 2015、那須、栃木.
- D12. “第一原理計算に基づく酵素機能解析：チトクロム *c* 酸化酵素のプロトンポンプを例として”、東京大学物性研究所 「機能物性融合科学シリーズ(3)「反応と輸送」」、June 24<sup>th</sup>-26<sup>th</sup>、柏、千葉.
- D13. “チトクロム *c* 酸化酵素におけるプロトン輸送の構造的仕掛け”、分子研研究会「膜タンパク質内部のプロトン透過を考える」、April 20<sup>th</sup>-21<sup>st</sup> 2015、分子研、愛知.
- D14. “第一原理計算によるタンパク質の  $pK_a$  と構造機能相関”、日本物理学会シンポジウム「プロトネーション イントゥ ダークネス：生体分子機能理解の為の水素位置情報」、March 21<sup>st</sup>-24<sup>th</sup> 2015、早稲田大学、東京.
- D15. 「高分散分子動力学法によるタンパク質でのレアイベントの検出」、レアイベントの理論科学ワークショップ、February 16<sup>th</sup> 2015、日本原子力研究開発機構システム計算科学センター、千葉.
- D16. “理論と実験の協奏的アプローチによる複合スピン励起子変換制御”、新学術領域研究「高次複合光応答」第 2 回公開シンポジウム、January 23<sup>rd</sup>-24<sup>th</sup> 2015、千里ライフサイエンスセンター、大阪.
- D17. “酵素活性制御に向けた多階層量子計算手法の応用”、理研シンポジウム「生体分子系量子化学計算の最前線」、January 22<sup>nd</sup>-23<sup>rd</sup> 2015、理化学研究所、和光.
- D18. 「宇宙生命連携研究による物質進化過程の探索」27 回理論懇シンポジウム、December 24<sup>th</sup>-26<sup>th</sup> 2014、国立天文台、東京.
- D19. 「第一原理計算に基づくタンパク質機能デザイン」、第 8 回 FMO 研究会 (CBI 学会 2014 年大会)、October 28<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> 2014、タワーホール船堀、東京.
- D20. “CMD の思想に基づく生命物理学の研究”、第 25 回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD) ワークショップ、September 1<sup>st</sup>-5<sup>th</sup> 2014 国際高等研究所、京都.
- D21. “計算化学による  $pK_a$  の高精度算出法”、第 1 回水和ナノ構造研究会、August 28<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> 2014、奥平温泉、岩手.
- D22. “実空間 Car-Parrinello Molecular Dynamics 法のマルチコア超並列アーキテクチャでのチューニング”、領域研究「コンピューティクス」勉強会、March 12<sup>th</sup> 2014、東京大学.

- D23. “分子動力学法によるタンパク質の効率的構造探索に関して”、 領域研究「コンピュ  
ーティクス」成果報告会、March 10<sup>th</sup>-11<sup>th</sup> 2014、東京大学.
- D24. “構造ゆらぎと化学反応に関する理論的研究”、分子科学会奨励賞受賞講演、Sep.  
24<sup>th</sup>-27<sup>th</sup> 2013、京都.
- D25. “ナノマテリアルの非線形光学特性の分子設計に向けて”、領域研究「コンピューティ  
クス」成果報告会、July 8<sup>th</sup>-9<sup>th</sup> 2013、東京大学.
- D26. “第一原理計算に基づく反応解析”、「宇宙生命計算科学連携拠点」ワークショップ、  
June 28<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> 2013、筑波大学.
- D27. “量子化学計算によるタンパク質の物性および機能評価”、第 13 回蛋白質科学会、ワ  
ークショップ “蛋白質機能を化学的に理解するために”、Jun 12<sup>th</sup>-14<sup>th</sup> 2013、とりぎん  
文化会館（鳥取）.
- D28. “第一原理計算に基づく反応解析”、第 4 回神戸大学協定講座シンポジウム「計算生物  
学と材料科学の融合」、Dec 19<sup>th</sup> 2012、神戸大学.
- D29. “生体内化学反応解析の基礎: 化学反応理解の為の古典・統計・量子力学”、分子研量  
子化学冬の学校、Dec 16<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> 2012、分子科学研究所.
- D30. “HPC システムの過去・現在・未来”（パネルディスカッション）、第 20 回計算科学  
研究センターシンポジウム、Sep 9<sup>th</sup> 2012、筑波大学.
- D31. “実空間基底による Car-Parrinello 分子動力学法ならびに時間依存密度汎関数法の実  
装”、領域研究「コンピューティクス」勉強会、Mar. 9<sup>th</sup> 2011、東京大学.
- D32. “Analyses of Bio-Molecular Reactions Based on First-Principles Calculations”、*Frontier in  
reaction path theory*、Sep. 12<sup>th</sup> 2010、福井謙一記念研究センター・京都大学.
- D33. “金属蛋白質の触媒反応の理論解析”、第 47 回生物物理学会年会、Oct 31<sup>th</sup>, 2009、徳島  
文理大学・アスティとくしま.
- D34. “Side-on 型配位遷移金属錯体の反応解析”、第 104 回触媒討論会（特別講演）、Sep 29<sup>th</sup>,  
2009、シーガイア・宮崎大学.
- D35. “電子ダイナミクスによる電子集団運動の解析”、特定領域研究「実在系の分子理論」  
成果報告会札幌シンポジウム、Dec 16<sup>th</sup> 2008、北海道大学.
- D36. “キュミュラント変数による量子力学”、特定領域研究「実在系の分子理論」若手勉強  
会、Dec 28<sup>th</sup> 2008、伊豆長岡.
- D37. “大規模量子動力学計算のための基礎理論の開発：準量子キュミュラント分子動力学  
法”、スーパーコンピューターワークショップ「大規模計算と分子のダイナミクス」、  
Feb 18<sup>th</sup>-19<sup>th</sup> 2008、分子科学研究所.
- D38. “準量子キュミュラント分子動力学法”、若手研究会「理論分子科学のフロンティアを  
探る」（主催）、Jan 15<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> 2008、分子科学研究所.
- D39. “熱揺らぎと量子揺らぎの分子動力学”、分子科学コロキウム、Mar. 3<sup>rd</sup> 2007、東北大学.
- D40. “大学の知を支援するセンターマシン”（パネルディスカッション）、Sep. 6<sup>th</sup> 2006、東

京大学.

D41. “密度汎関数理論に基づく Green 関数計算と Sham-Schlüter 法の現状“、「Beyond LDA としての新しい電子状態計算手法」 科研費特定領域「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」ミニワークショップ、Feb. 22<sup>nd</sup> 2006、東京大学.

### 3. 他大学・研究機関におけるセミナー講演・授業 (20 件)

S1. “反応・物性量子化学”、大学院講義「応用科学特論第 6」、October 3<sup>rd</sup>-4<sup>th</sup> 2016、東京大学大学院工学系研究科.

S2. 「物性・反応量子化学」 “大学院講義”、 2016、九州大学大学院理学研究科.

S3. 「量子化学に基づく化学反応理論」 “大学院講義反応量子化学”、140<sup>th</sup>-15<sup>th</sup> Jan. 2016、名古屋大学大学院理学研究科.

S4. “大学院講義”、June 22<sup>nd</sup> 2015、徳島大学大学院薬学研究科.

S5. “第一原理計算による物性・反応解析と設計：酵素反応を中心として”、Seminar Feb. 17<sup>th</sup> 2015、立命館大学.

S6. “Multiscale Modeling Toward Design of Enzymatic Activity”, Seminar, Nov. 18<sup>th</sup> 2014, 台湾交通大, 台湾.

S7. “Computational Design of Enzymatic Activities: Reaction Mechanisms of Nylon-oligomer Hydrolase”, Seminar, Oct. 22<sup>th</sup> 2014, Auburn University, USA.

S8. “計算科学とバイオ科学”、July 16<sup>th</sup> 2014、金沢大学理学部計算科学科.

S9. “Car-Parrinello Molecular Dynamics Simulation on Reaction Mechanisms of Surface Oxidation and Nylon-degrading Enzyme”、1/2 journée Séminaires Chimie Théorique, Institut des Sciences Moléculaires, May 30<sup>th</sup>, 2013, Université Bordeaux, France.

S10. “量子化学計算に基づく  $pK_a$  等の高精度計算”、Feb 28<sup>th</sup>、横浜市立大学「理論化学セミナー」.

S11. “量子化学計算に基づく  $pK_a$  等の高精度計算”、Jan 30<sup>th</sup>、九州大学「理論化学セミナー」.

S12. “時間依存密度汎関数理論に基づく分子動力学法”、「理研セミナー」、Dec 18<sup>th</sup> 2009、理化学研究所.

S13. “A Theoretical Study on Metal-Containing Artificial DNAs”, Nov 5<sup>th</sup> 2009, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, France.

S14. “生体内分子におけるプロトン/電子移動反応第一原理計算によるアプローチ”、Oct. 20<sup>th</sup> 2008, 大阪大学蛋白研プロテオミクス研究センター「セミナー」

S15. “Thermal and Quantum Fluctuation in Dynamics”, Oct. 7<sup>th</sup> 2008, Univ. Washington 「セミナー」

S16. “キュミュラント変数による量子動力学”、Apr. 4<sup>th</sup> 2008, 早稲田大学. 「QMS セミナー」

S17. “DNA 塩基内の水素移動反応：van der Waals DFT の紹介と準量子 cumulant dynamics 法に関して”、Feb. 16<sup>th</sup> 2007, 筑波大学「計算科学コロキウム」.

S18. “準量子キュミュラント動力学によるトンネル現象の解析と分子振動計算”、Jan. 28<sup>th</sup>

2007, 早稲田大学. 「第 1 2 回量子化学セミナー」

S19. “準量子キュムラント動力学によるトンネル現象の解析と分子振動計算”、Jan. 23rd 2007, 日本大学. 「セミナー」

S20. “Generalized Sham-Schlüter Equation”、Aug. 25th 2005, Cornell Univ. 「セミナー」

S21. “Generalized Sham-Schlüter Equation”、Aug. 17th 2005, Florida Univ. 「QTP セミナー」

S22. “分子内包系における温度揺らぎの効果：量子化学計算を用いたアプローチ”

Feb. 15th 2005, 豊橋科学技術大学. 「セミナー」

## 受賞歴とその概要 (重田育照)

- A1. 第2回大阪大学総長奨励賞・研究部門 (2013), 大阪大学 (Japan).

**概要**「理論化学の研究において顕著な業績をおさめており、大阪大学総長奨励賞に値するものと認められた。」

- A2. 第5回分子科学会奨励賞 (2012), 受賞タイトル「ゆらぎの動的分子理論」、分子科学会 (Japan).

**概要**「応募者は1990年代後半より現在物質科学で最も重要な概念の一つとなっている「動的分子理論(ダイナミクス)による分子描像」に着眼した理論的研究を進め、様々な階層における分子のダイナミクスから動的な構造・機能・反応相関を見出してきた。よって応募者の業績は、分子科学会奨励賞に値するものと認められた。」

- A3. 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2010), 受賞タイトル「量子揺らぎと熱揺らぎの動的分子理論の研究」、文部科学省 (Japan).

**概要**「応募者は1990年代より物質科学で最も重要な概念の一つとなっている「分子の第一原理ダイナミクス」に着眼し、原子核ばかりでなく電子に対する「量子揺らぎ」と「熱揺らぎ」に対する理論を構築し、物理・化学・生物学における新たな研究領域を開拓した。よって応募者の業績は、文部科学大臣表彰若手科学者賞に値するものと認められた。」

- A4. 第58回日本化学会進歩賞 (2009), 受賞タイトル「量子ゆらぎと熱ゆらぎの動的分子理論」、日本化学会 (Japan).

**概要**「応募者は量子ゆらぎと熱ゆらぎによって紡ぎ出される様々な化学現象の特徴を捉えるため、分子の動力的側面を様々な角度から捉える理論を開発し、数値計算によって実証する事で、物理化学における新たなパラダイムをもたらした。これらの研究成果は国内外で高い評価を受け、注目を浴びている。よって応募者の業績は、日本化学会進歩賞に値するものと認められた。」

- A5. 第1回 PCCP Prize for the Outstanding Achievement of Young Scientists in Physical Chemistry and Chemical Physics (2007), 受賞タイトル「Quantum Cumulant Dynamics: A Novel Quantum Theory」Royal Society of Chemistry (United Kingdom).

**概要**「分子は絶対零度においても静止しておらず、零点振動をしている。しかし、動的な現象を解析するために現在広く行われている分子動力学計算では、核の運動は古典力学を用いて記述しているため、核の量子効果については範疇外であり、分子内振動を適切に取り扱う事は出来ない。そこで、応募は時間依存 Schrödinger 方程式とは異なる新たな近似量子論である準量子キュムラント動力学(QCD)法を提唱し、分子振動や量子トンネル問題に適用した。この理論の新規性などが評価され、第1回 PCCP award を授与された」



A6. 第 86 回日本化学会年会優秀講演賞 (2006), 受賞タイトル「時間依存有効ポテンシャル理論: 「非」断熱近似」日本化学会 (Japan).

**概要** 「最適化有効ポテンシャル理論を励起状態に適用し、時間依存密度汎関数法で用いられている断熱近似が共鳴周波数付近で破綻し周波数異存分極率に異常が見られる事、また van der Waals  $C_6$  係数の計算において誤差が生ずる事を数値的に示した。さらに断熱近似を越える事でそれらの異常性を取り除く事が出来る事を世界に先駆けて示した。この研究発表により優秀講演賞を授与された。」

## 研究費導入実績

### 学外

#### 代表 (9件、計 104,420 千円)

1. 文部科学省・科学研究費・新学術領域研究「複合光化学」  
「実験と理論の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」  
期間 (H26-30) 計画班経費 63,600 千円 (5年間) + 総括班経費 1,200 千円 (5年間)  
期間 (H27-30) 国際活動支援班経費 3,000 千円 (4年間)
2. 文部科学省・科学研究費・新学術領域研究「動的秩序と機能」  
「キュムラント粗視化動力学によるタンパク質動的秩序形成過程の理論研究」  
期間 (H26-27) 金額 3,380 千円 (1年間)  
(新学術領域研究「複合光化学」計画班研究採択により期間中に辞退)
3. 文部科学省・科学研究費・新学術領域研究「コンピューティクス」  
「Si ナノドットの非線形光学特性変化に対する動力的解析」  
期間 (H25-26) 金額 4,200 千円 (2年間)  
(新学術領域研究「複合光化学」計画班研究採択により期間中に辞退)
4. 豊田理化学研究所・フェロー  
「第一原理計算による生体内酵素反応の理論解析」  
期間 (H24) 金額 700 千円 (1年間)
5. 学術振興会・科学研究費・若手研究 A  
「タンパク内で起こる協同的プロトン・電子移動反応の量子論的解析」  
期間 (H22-25) 金額 21,660 千円 (4年間)
6. 学術振興会・科学研究費・若手研究 B  
「プロトン結合電子移動反応の実時間解析：量子キュムラント動力学法」  
期間 (H20-21) 金額 2,880 千円 (2年間)
7. 学術振興会・科学研究費・特定領域研究「実在系の分子理論」  
「電子ダイナミクスによる電子集団運動の解析」  
期間 (H20-21) 金額 2,600 千円 (2年間)
8. 学術振興会・科学研究費・特別研究員研究奨励費  
期間 (H14-16) 金額 3,600 千円 (3年間)
9. 学術振興会・科学研究費・特別研究員研究奨励費  
期間 (H12-13) 金額 1,800 千円 (2年間)

#### 分担 (2件、計 17,680 千円)

1. ポスト「京」重点課題 (7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題 A 「高機能半導体デバイス」  
代表 押山淳 東京大学大学院工学系研究科・教授

期間 (H27-30) 金額 6,480 千円 (H28 年度分) (5 年間)

2. 学術振興会・科学研究費・挑戦的萌芽

「メゾスケール空間内移動速度論創成のための挑戦的研究」

代表 岡野泰則 大阪大学教授

期間 (H27-28) 金額 600 千円 (/3,000)千円 (2 年間)

3. JST CREST 「マルチスケールマルチフィジックス統合シミュレーション」

「ナノバイオ系のシミュレーションとダイナミクス」

代表 平尾公彦 理化学研究所特別顧問、東京大学理事 (元東京大学教授)

期間 (H18-22) H18~H19 まで参加、金額 2,000 (/300,000)千円 (5 年間)

4. JST CREST 「マルチスケールマルチフィジックス統合シミュレーション」

「計算科学によるナノアーキテクチャ構築」

代表 押山敦 東京大学大学院工学系研究科・教授

期間 (H18-22) H20 より参加、金額 8,600 (/300,000)千円 (5 年間)

学内

代表 (3 件、計 8,000 千円)

1. 筑波大学 TIA 「かけはし」

「実験と理論の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」

期間 (H28-28) 計画班経費 1,000 千円 (1 年間)

2. 兵庫県立大学 県科学研究費「先導的プロジェクト研究」5,600 千円 (1 年間)

3. 兵庫県立大学 県科学研究費「奨励研究」1,400 千円 (1 年間)

その他

代表 (1 件、計 3,000 千円)

1. 分子科学研究所「岡崎コンファレンス」3/6-8 開催予定

期間 (H28) 経費 3,000 千円 (1 年間)

## 学内外での活動・教育実績

### 講義・演習・実験

1. 「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義反応量子化学”、
2. 名古屋大学大学院理学研究科. 大学院前期課程 (2015 後期) 7 コマ
3. “大学院講義”、徳島大学大学院薬学研究科 大学院前期課程 (2015 前期) 1 コマ
4. 現代物理学への招待 筑波大学 物理学系 1 回生 (2015 春 ABC) 3 コマ
5. 物性物理学 I 筑波大学大学院数理物質科学研究科  
大学院前期課程 (2015 春 ABC) 15 コマ
6. 計算物理学 2 筑波大学 物理学類 3 回生 (2014-2015 春 ABC) 15 コマ
7. 計算物理学 3 筑波大学 物理学類 3 回生 (2014-2015 秋 ABC) 15 コマ
8. 計算科学科集中講義 金沢大学理学部 4 回生 (2014 前期) 1 コマ
9. 基礎物理学セミナー 筑波大学 物理学系 1 回生 (2014 春 C) 1 コマ
10. 物性反応量子化学 大阪大学大学院基礎工学研究科  
大学院前期課程 (2011-2014 前期) 5 コマ
11. 化学反応論 大阪大学基礎工学部 3 回生 (2011-2014 前期) 15 コマ
12. コンピュータープログラミング B 大阪大学基礎工学部 2 回生 (2010-2013 後期) 15 コマ
13. 化学工学実験 II (物理化学) 大阪大学基礎工学部 3 回生 (2011-2013 前期) 15 コマ
14. 大学院集中講義 三重大学工学研究科 大学院前期課程 (2013 前期) 3 コマ
15. 大学院集中講義 兵庫県立大学生命理学研究科 (2010 前期) 15 コマ
16. 特別セミナー 兵庫県立大学生命理学研究科 (2009 後期) 8 コマ
17. 集中講義 東北大学国際高等研究教育機構 (2009 後期) 1 コマ
18. 統計力学演習 I 筑波大学 物理学系 3 回生 (2008 1 学期) 15 コマ
19. コンピューター化学演習 東京大学工学部化学生命系 3 回生 (2004-2006 前期) 7 コマ
20. 応用化学詳論 I 東京大学工学部化学生命系 4 回生 (2004-2005 前期) 1 コマ
21. 無機・物理化学演習 東京大学工学部化学生命系 3 回生 (2005-2006 後期) 1 コマ

### 指導・指導補助

1. 2014～ 筑波大学 (主宰する生命物理研究室) において、のべ4回生4名、博士前期課程3名、博士後期課程1名の研究指導を行う
2. 2011～2014 大阪大学 (中野研究室) にて 4回生のべ4名、博士前期課程のべ5名、博士後期課程2名の直接の研究指導を行う  
(博士後期課程2名は日本学術振興会特別研究員 (DC1) および (DC2) 採用)
3. 2009～2011 兵庫県立大学 (小倉、本間研究室) にて 4回生のべ4名、大学院生1

名の研究指導補助を行う

4. 2007～2008 筑波大学（押山・白石・舘野・Boero・岡田研究室）にて 4 回生 2 名、博士前期課程 2 名、博士後期課程 2 名の研究指導補助を行う
5. 2004～2007 東京大学（平尾研究室）にて 4 回生のべ 7 名、博士前期課程のべ 5 名、博士後期課程 2 名の直接の研究指導を行う  
(博士後期課程 2 名は日本学術振興会特別研究員 (DC1) および (DC2) 採用)

### 博士後期課程学生の進路

1. 松井亨（2009年学位取得 博士（工学）東京大学）  
（東京大学博士後期課程→大阪大学 PD→兵庫県立大特任助教→日本学術振興会特別研究員→理研 AICS 研究員→筑波大学アドミッションセンター准教授）
2. 宮地秀明（2011年学位取得 博士（工学）東京大学（論文博士））  
（東京大学博士後期課程→千葉大学医学部（この間、東京大学にて論文博士取得）→医師国家資格取得）
3. 馬場剛史（2014年学位取得）  
（日本学術振興会特別研究員→株式会社東レ）
4. 奥野克樹（2014年学位取得）  
（昭和電工）
5. 佐藤（2016年学位取得予定）  
（未定）

### セミナー・研究会の企画運営

1. 研究交流会「理論分子科学・分子非線形科学のこれまでとこれから」、  
牛山浩、重田育照、高橋聡、藤井幹也、山下雄史、東京大学駒場リサーチキャンパス.
2. 蛋白研セミナー「構造を基盤とする蛋白質科学における未解決問題」  
石北央、鷹野優、米澤、重田育照、March. 2016 1<sup>st</sup>-2<sup>nd</sup>, 東京大学エネオスホール.
3. 蛋白研セミナー「蛋白質の機能デザインに向けた実験と理論のインタープレー」  
鷹野優、石北央、重田育照、Jan. 2014, 大阪大学蛋白研プロテオミクス研究センター.
4. 蛋白研セミナー「タンパク質科学の未来を語る：実験・理論研究者の対話」  
鷹野優、久保稔、重田育照、Nov. 11<sup>th</sup> -12<sup>th</sup> 2011, 大阪大学会館.
5. 蛋白研セミナー「分子科学を基盤とした生命活動への理論的アプローチ」  
鷹野優、湊上壮太郎、安池智一、重田育照、Dec. 3<sup>rd</sup> - 4<sup>th</sup> 2009, 大阪大学蛋白研プロテオミクス研究センター.
6. 若手研究会「理論分子科学のフロンティアを探る」  
安池智一、湊上壮太郎、重田育照、Jan. 15<sup>th</sup> -17<sup>th</sup> 2008, 分子科学研究所.

## 学会活動・社会貢献

1. 2016～ 分子科学研究所招聘教授
2. 2016～ 分子科学会第6期運営委員会委員
3. 2015～2016 分子科学会速報配信担当
4. 2015 ポストK 課題7 コデザイン WG 副査
5. 2014 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2014」世話人
6. 2014 JST 研究開発戦略センター（物質・材料分野）俯瞰活動への執筆協力
7. 2013 日本化学 CSJ 化学フェスタ実行委員
8. 2013 JST 研究開発戦略センター（物質・材料分野）俯瞰活動への執筆協力
9. 2013 日本化学工学会春期年会実行委員
10. 2013 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2013」世話人
11. 2012～2013 文部科学省学術調査官（科研費担当）
12. 2011～2012 日本化学会近畿支部代表幹事
13. 2011 第4回分子科学会実行委員

## 特許

1. 名称：情報処理、シミュレーションプログラムおよびシミュレーション方法  
発明者：中村朋健、重田育照、原田隆平  
出願人：富士通、筑波大学  
出願番号：2015-032321  
出願年月日：2015/02/20
2. 名称：情報処理装置、シミュレーション方法、およびシミュレーションプログラム  
発明者：中村朋健、重田育照、原田隆平  
出願人：富士通、筑波大学  
出願番号：2015-156702  
出願年月日：2015/08/07
3. 名称：情報処理装置、指標次元抽出方法、および指標次元抽出プログラム  
発明者：中村朋健、重田育照、原田隆平  
出願人：富士通、筑波大学  
出願番号：2015-156703  
出願年月日：2015/08/07