

令和元年6月11日現在

機関番号：14301

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2013～2017

課題番号：25102002

研究課題名(和文)分子集積と秩序形成の分子理論

研究課題名(英文)Molecular theories for self-assembly and order formation

研究代表者

佐藤 啓文(SATO, Hirofumi)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：70290905

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 55,400,000円

研究成果の概要(和文)：自己集合とは複数の分子が集合して秩序高い構造体を自発的に形成する過程である。本課題では物理化学の基礎原理に基づき、そのメカニズムとダイナミクスを明らかにすることを目的とした。この結果、(1)自己集合過程の解析を念頭とした基盤的な分子理論化学の手法を開発し、(2)歯車状の両親媒性分子6つが自己集合する系ナノキューブについて、全原子および粗視化モデルを用いて調べ、(3)Pd(II)イオンと8つのパネル状分子からなる八面体型カプセル分子の形成過程の経時解析と原子レベルの詳細について明らかにした。またこれらに基づきながら(4)様々な自己集合過程のダイナミクスや分子論的な特徴を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

自己集合過程のメカニズムとダイナミクスの理解は、多くの自然現象にも通底する普遍性の高い課題である。しかし実験的にも未解明であり、既存の理論化学の方法でも十分答えることができなかった。本課題では溶液中での自己集合過程の分子シミュレーションを世界で初めて成功させて、原子レベルで溶媒分子の役割を明らかにした。また対象を粗視化することで幅広い時間・空間スケールにおける分子や分子集団の挙動を特徴付け、実際の観測結果と結びつけながら現象を俯瞰するためのフレームワークを構築した。

研究成果の概要(英文)：Self-assembly is a process in which a certain number of molecules assemble to spontaneously form an ordered structure. In this project, we aimed to clarify the mechanism and dynamics of the process. As a result, (1) we have developed fundamental methods to understand self-assembly process in mind. (2) Nanocube is a self-assembling system, in which six gear-like amphiphilic molecules form an ordered cubic structure. We have studied the system using all-atom model and coarse-grained model to understand the assembling mechanism. (3) The time evolution was analyzed for the formation process of octahedron-shaped coordination capsule consisting of Pd(II) ions and eight panel-shaped ligands, by utilizing master equation. Detail of the formation process including the rate-determining step was investigated using quantum chemical effective Hamiltonian. Moreover, based on these, (4) The dynamics and molecular characteristics of various self-assembly processes were clarified.

研究分野：理論化学

キーワード：自己集合 化学 マスター方程式 液体の積分方程式理論 粗視化モデル エネルギーランドスケープ 量子

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

複数の分子が集合して秩序高い構造体を自発的に形成する自己集合において、個々の分子はなぜ、どの様に組み上がっていくのだろうか。これはシンプルだが、生体分子や身近な化学現象にも通底する普遍性の高い問いである。しかしこれに答えることは実は容易でない。極めて複雑な超多次元のエネルギー面上での長時間に渡る動態を追跡し理論的に特徴付けることは、既存の物理化学・理論化学的手法では殆ど不可能と言ってもよい。永く議論されてきたタンパク質のフォールディングやフラレンの生成過程の問題などと本質的に同等の難しさがあると言ってもよいだろう。

2. 研究の目的

本課題では、物理化学の基礎原理に基づきながら、これまでアクセスが難しかった自己集合化過程のメカニズムとダイナミクスの本質を明らかにすることを目的とした。このための新しい分子理論を開発するとともに、既存法を含む様々な方法を総合的に駆使しながら、幅広い空間・時間スケールにおける動的な秩序形成過程を対象とした。特に実在の系へと展開しながら、実験研究者と協力することで、観測・測定結果に対して相補的な知見を提供し、過程の複眼的な理解を目指した。一義的な会合体形成に至る過渡的ダイナミクスと、これを支配する物理化学的要因を理解することは、生体系類似の自己組織化系を人工的に設計する上でも極めて重要である。すなわち、本研究領域で掲げる大きな目標の実現に資すると期待できる。

3. 研究の方法

自己集合過程において、構成素子が自律的な構造形成を行う駆動力を明らかにし、過程のエネルギー収支を定量的に理解することは基礎的に重要な意味を持つ。これと同時に、現象を種々のレベルで粗視化し、全体を俯瞰できるフレームワークの構築もまた重要である。

分子やその会合体を第一原理的に理解するためには、電子状態理論(量子化学)や分子シミュレーション計算(分子動力学法)に基づくアプローチが一般的である。これらに基づくことで、自由エネルギーをはじめとする基本的な物理量を定量的に評価することが原理的には可能である。しかし、例えば典型的な超分子集合体は1000原子程度(あるいはそれ以上)から構成される上、金属・有機分子の配位結合や分散力などの相互作用を精度良く見積もることが必須であり、汎用の電子状態理論で取り扱うことは容易でない。これを分子動力学法と組み合わせることで、溶液内における超分子の自由エネルギーを求めることはさらに困難になる。特に自己集合過程は遅い時間スケールの事象であり、準安定な会合構造にトラップされた後に真の安定状態へ遷移する(エラー訂正)ことがしばしば起こる。すなわち、時には数週間にもおよぶ長い時間スケールの構造変化の理解が求められる。そこで分子間の相互作用や反応過程の本質のみを抽出した粗視化モデルを開発し、実際の現象へアプローチすることも行った。

4. 研究成果

秩序形成過程の本質に迫るべく、これまでに我々が開発してきた分子系の統計力学理論や量子化学理論を基盤とし、またこれらを発展させながら研究を進めてきた。成果のうち、(2)および(3)については、本新学術領域A02班の平岡教授の開発した系を研究対象として選び、必要となる新しい理論手法を開発しつつ、さまざまな角度から現象にアプローチした。またA01班立川教授を含む3研究室で学生も含めたミーティングを開くなど緊密な連携を取りながら研究を進めた。

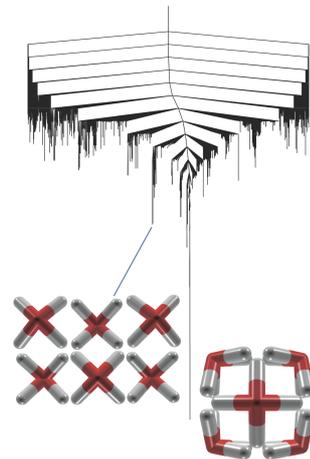
(1) 自己集合過程の解析を念頭に、既存法の有用性や限界を精査するとともに、基盤的な分子理論化学の手法を開発した。具体的な事例は以下の通りである。

- ① 溶液中の自己集合化分子の挙動を理解するには溶媒と自由エネルギーの計算が不可欠であり、このための効率的な理論的手法として液体の積分方程式理論が考えられる。そこで、これらの方法の精度をナノサイズの様々な系に対して系統的に調べ、系のサイズに付随する誤差項の起源について詳細に調べた。また、現状の適用限界と提案されている改善法について定量的な解析を行った。
- ② 溶媒分子をあらわに用いる自己集合系の分子動力学計算では、溶質が局所的な自由エネルギー地形の井戸に落ち込んでしまい、長時間動けなくなる問題が以前から知られている。これを回避するためレプリカ交換法が提案・利用されているが、溶媒をあらわに含めた計算では必要なレプリカの数が増大することが知られている。そこで、溶質のサンプリングのみを加速する方法を検討し、分子カプセル系やポリマー系での有用性の検証を行った。得られた方法を、後に述べるナノキューブ系や典型的な超分子ポリマーであるBTA系へと展開した。
- ③ 分子性液体の三次元溶媒和構造に関する拡散方程式理論の開発に成功した。この方法では、三次元空間における相関関数を直接得られるため、動径方向のみで溶媒構造変化を表現する従来のSSSV方程式とは質的にも異なり、溶液内の事象の時間発展を追跡することが可能となった。計算で得られた結果も極めて妥当であり、比較的長い時間スケールにおける分子動態を追跡する上で強力な手法と期待できる。

- (2) ナノキューブは、平岡教授らによって開発された自己集合系である。歯車状の両親媒性分子 (Gear-Shaped Amphiphile; GSA) が6つ自己集合することで一辺が約2nmの立方体構造を一義的に形成する。構造形成の駆動力は疎水効果と van der Waals 相互作用と考えられており、指向性が弱いにもかかわらず高い秩序を有する構造体が定量的に形成される。実際の実験からは、ナノキューブ形成は純メタノール中では起こらず、25%含水メタノール中で自発的に進行する事が知られており、溶媒条件に敏感に依存する。すなわち、溶媒が構造形成の鍵を握っていることは明らかだが、その詳細は分かっていなかった。そこで、本課題では①精緻な分子理論に基づいてアプローチするとともに、②粗視化モデルに基づく考察も行った。

① 全原子モデルに基づく自由エネルギー計算と電子状態計算を行い、超分子集合体の自己組織化を自由エネルギー変化に基づいて定量的に調べた。ナノキューブは648原子からなり、1800の価電子を持つため、一般的な量子化学計算の対象としては相当大きな系である。ここで問題になったのは、ナノキューブの会合状態が多数のファンデアワールス (vdW) 相互作用の結果として生じるものであり、それらを予想以上に精度良く扱う必要があったことである。(個々の vdW 相互作用は 1-2 kcal/mol 程度と小さいが、それらが数百のペアとして寄与し、全体としては数百 kcal/mol の束縛エネルギーを与える。)当初は分子系の量子化学で一般的に用いられる手法を採用していたが、BSSE と呼ばれるエラーの効果が想像以上に大きく、得られる結果の不定性が非常に大きいため、この方法で数百原子以上の系について信頼出来る結果を得ることは事実上困難であるという結論に至った。この難点を回避するため、固体物性分野で使われる電子状態理論および有機半導体用の最新の汎関数を使う方針に切り替え、計算コストの見積りと精度の検証を行った。その結果、ナノキューブ系でも現実的な計算時間で非常に信頼性の高い結果が得られることが分かった。溶媒効果の見積りに関しては、積分方程式理論、エネルギー表示理論、自由エネルギー摂動法について、超分子サイズの系に対する様々なテスト計算を行い、溶媒和自由エネルギーについても十分正確な値を得られるようにした。さらに自己集合過程の全原子分子動力学シミュレーションを行い、そのメカニズムを原子レベルで明らかにすることに成功した。シミュレーションの結果から、溶媒のアルコール分子が、GSA が互いに直角に組み合わさるよう調整してナノキューブの部分構造を作り出し、GSA がスタックして集積することを防いでいることが分かった。さらに REST(replica exchange with solute tempering)法を用いることで、バラバラの状態にある6つのGSAからのナノキューブ形成を計算することにも成功している。

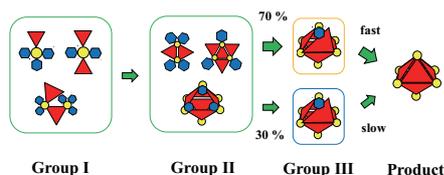
② ナノキューブの系の幾何的・構造的な性質を抽出する目的で、モノマーの持つ幾何的特徴を反映したピラミッド型の粗視化モデルを開発した。Basin-Hopping法を用いてこの粗視化モデル分子の系の広域的な探索を行い、エネルギーランドスケープを明らかにした。大変興味深いことに、この系ではナノキューブの他にも分子が平面状に集合したシート状構造も形成される。これら二つの構造の相対的安定性は微妙な相互作用の違いで入れ替わることも発見した。なお、この研究は、本領域で主催した国際シンポジウムに招聘した英国ケンブリッジ大学のWales教授との討論をきっかけに共同研究へと発展し、成果は同教授の研究グループとの共著論文として発表した。掲載誌のEditor's choiceに選ばれるとともに、表紙を飾り、研究に取り組んだ大学院生が内外の学会等でポスター賞を複数受賞するなど大きな注目を集めた。さらに互いの大学院生を交換するなどの国際的な交流も生まれた。



- (3) 平岡教授は QASAP と呼ばれる NMR を用いた新しい解析法を開発し、様々な系の自己集合過程の実験的追跡に成功している。そこで Pd²⁺イオンと8つのパネル状分子からなる八面体型カプセル分子を対象として、その形成過程の経時変化と原子レベルの詳細について調べた。

① QASAP では、n、k-解析と呼ばれる自己集合過程の過渡種を特徴づけるパラメータが実験的に得られる。しかし、これは複数の中間体に対する平均的な情報であり、中間体を個別に区別して追跡することはできない。また、自己集合は数時間から時には数週間にもおよぶ長い過程であり、分子動力学法などの汎用理論に基づいて過程を追跡することは不可能である。そこで、分子の持つ幾何的特徴を可能な限り排して化学量論的に中間体を記述し、これらの集合体として定義した状態間の時間発展をマスター方程式によって追跡する反応ネットワークのモデルを提案した。極めて少数のパラメータを設定することで長時間に渡る物質生成過程を計

算によって追跡することに成功した。また計算と実験結果の詳細な比較を行い、 n 、 k 値や始原系の消費量などについて極めてよい一致を見出した。解析の結果、実験で示唆されているように最終段階が全過程に大きな影響を与えていることが確認され、特に自己集合の最終段階では二つの異なる種が寄与していることを見いだした。また、中間体の分子内過程に比較すると、中間種同士が結合する分子間過程が遅いため、構造的に緩和した中間体が過程上で数多く生成していることが明らかになった。



- ② 典型的な自己集合系は比較的大きな遷移金属錯体であり、八面体型カプセル錯体も約 800 原子からなる系である。錯体形成の鍵は金属-配位子結合であることから、通常の古典力場では適切な記述が一般には難しい。さらに注意すべきは、自己集合の過程で無数の中間体、異性体が存在することである。ごく少数の特定の構造のみを対象とするならば、大規模分子系に対しても汎用 DFT 計算を行うことは可能である。しかし過程を正しく理解するためにはポテンシャルエネルギー面上の広域的な探索を行い、多数の構造を調べることが不可欠であり、既存の量子化学手法で自己集合過程を原子レベルで追跡することは事実上不可能である。そこで井内らが開発した量子化学的有効モデルハミルトニアンの方法に基づいて高精度計算を行い、自己集合過程における広域的な構造探索を実現した。この方法では、遷移金属と配位子間の相互作用を量子化学的に記述し、高精度計算との比較を通じて必要なパラメータを決定している。計算結果から、配位子には 2 つの光学異性体があり、最終生成物はこれらが交互に組みあわさった構造をしていることが確かめられた。さらに自己集合過程の律速である最終段階では、これらに由来する二つの異なる前駆体が存在することを見出した。一連の結果は前項マスター方程式に基づく解析の結果とも矛盾しない。

これらの結果は、いずれも平岡教授との共著論文として発表し、掲載誌において 1 つは HOT article に、2 つはバックカバーアートに選出されるなど高い評価を受けている。

- (4) さまざまな自己集合系を対象に、その形成過程のダイナミクスや分子論的な特徴を明らかにした。
- ① 八面体型カプセル分子の自己集合過程の経時解析に用いた方法をさらに発展させた。Gillespie アルゴリズムを用いて Pt 二核錯体の配位子交換反応について時間変化を解析し、結果を微分方程式に基づく従来型の速度論に基づく解析と比較した。Gillespie アルゴリズムでは有限数個の分子を扱うが、十分な数の分子を考慮した場合は、従来型の微分方程式と全く同じ結果を与えることがわかった。その後、さらに過程が複雑になる Pd2L4 や Pd6L4 の自己集合系など、解析対象を広げつつある。
- ② 班友の前田グループ（立命館大）が実験的に調べているピロール π 共役系の結晶多形と電荷輸送を対象に、共同研究を行った。ab initio 全電子フラグメント分子軌道法を用いて 3 種の結晶多形に対する電子カップリングを計算し、Marcus 理論とマスター方程式を用いて分子結晶における電子・ホールのキャリア移動度を計算した。その結果、結晶多形に依存して電荷移動ネットワークの次元性が 0 次元的な振る舞い（電荷の局在化）から 3 次元的な振る舞い（等方的な電荷輸送）まで幅広く異なる挙動を示すことなど、分子結晶における電荷移動の性質を分子レベルで明らかにした。
- ③ GPU を用いた高速な分子動力学計算を行うことで、超分子ポリマー (SOPV) の自己集合過程を詳細に調べた。特に、溶媒効果とモノマー間相互作用の拮抗によって初期の核形成が特徴的な binding mode を持つ事、これらが従来使われていた implicit solvent model では再現出来ないことなどを明らかにした。また自己集合系の分子動力学計算を高速化・スケールアップするため、粗視化モデルを開発した。特に、最もシンプルで汎用性のある 1-bead model について、全原子計算の結果と比較することで有効性の検証を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計 13 件)

1. Tatsuya Iioka, Satoshi Takahashi, Yuichiro Yoshida, Yoshihiro Matsumura, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, “A kinetics study of ligand substitution reaction on dinuclear platinum complexes: Stochastic versus deterministic approach”, *J. Comp. Chem.*, **40**, 279-285 (2019), 査読有, DOI: 10.1002/jcc.25588
2. Satoshi Takahashi, Yuya Sasaki, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, “A stochastic model study on the self-assembly process of a Pd”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **21**, 6341-6347 (2019) 査読有, DOI: 10.1039/c8cp06102e
3. Yoshihiro Matsumura, Satoru Iuchi, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, “Chiral effects on the final step of an octahedron-shaped coordination capsule self-assembly”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 7383-7386 (2018), 査読有, DOI: 10.1039/c7cp08237a
4. Hisashi Okumura, Masahiro Higashi, Yuichiro Yoshida, Hirofumi Sato, and Ryo Akiyama, “Theoretical approaches for dynamical ordering of biomolecular systems”, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects*, **1862**, 212-228 (2018), 査読有, DOI: 10.1016/j.bbagen.2017.10.001
5. Takeshi Yamamoto, Hadi Arefi, Sudhanshu Shanker, Hirofumi Sato, and Shuichi Hiraoka, “Self-Assembly of Nanocubic Molecular Capsules via Solvent-Guided Formation of Rectangular Blocks”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **9**, 6082-6088 (2018), 査読有, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b02624
6. Yoshihiro Matsumura, Shuichi Hiraoka, and Hirofumi Sato, “A reaction model on the self-assembly process of octahedron-shaped coordination capsules”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 20338-20342 (2017), 査読有, DOI: 10.1039/c7cp03493h
7. Hadi Arefi and Takeshi Yamamoto, “Self-assembly of a model supramolecular polymer studied by replica exchange with solute tempering”, *J. Chem. Phys.* **147**, 211102 (2017), 査読有, DOI: 10.1063/1.5008275
8. Takatoshi Fujita, Yohei Haketa, Hiromitsu Maeda, and Takeshi Yamamoto, “Relating stacking structures and charge transport in crystal polymorphs of the pyrrole-based π -conjugated molecule”, *Organic Electronics*, **49**, 53-63 (2017), 査読有, 10.1016/j.orgel.2017.06.028
9. Takatoshi Fujita, Takeshi Yamamoto, “Assessing the accuracy of integral equation theories for nano-sized hydrophobic solutes in water”, *J. Chem. Phys.* **147**, 014110, (2017), 査読有, DOI: 10.1063/1.4990502
10. Yuichiro Yoshida, Hirofumi Sato, John W.R. Morgan, and David J. Wales, “Potential energy landscapes of tetragonal pyramid molecules”, *Chem. Phys. Lett.*, **664**, 5-9, (2016), 査読有, DOI:10.1016/j.cplett.2016.09.058
11. Kentaro Kido, Kento Kasahara, Hirofumi Sato, and Shigeyoshi Sakaki, “A molecular level study of selective cation capture by a host-guest mechanism for 25, 26, 27, 28-tetramethoxycalix[4]arene in MClO_4 solution ($\text{M}=\text{Na}, \text{K}$)”, *Mol. Sim.*, **41**, 881-891 (2014), 査読有, DOI: 10.1080/08927022.2014.895002
12. Taichi Inagaki, Takeshi Yamamoto, “Critical Role of Deep Hydrogen Tunneling to Accelerate the Antioxidant Reaction of Ubiquinol and Vitamin E”, *J. Phys. Chem. B*, **118**, 937-950 (2014), 査読有, DOI: 10.1021/jp410263f
13. Kento Kasahara and Hirofumi Sato, “Development of three-dimensional site-site Smoluchowski-Vlasov equation and application to electrolyte solutions”, *J. Chem. Phys.*, **140**, 244110- (2014), 査読有, DOI:10.1063/1.4884386

〔学会発表〕 (総計 70 件)

1. Hirofumi Sato, “Self-assembly process at molecular level” (招待講演) 7th Japan-Czech-Slovak Symposium, the Czech Academy of Sciences, 2018 年 5 月
2. 佐藤啓文「分子レベルで見る自己集合過程の実時間追跡」(招待講演) 日本化学会第 98 春季年会, 2018 年 3 月
3. Sudhanshu Shanker, Takeshi Yamamoto, Hirofumi Sato, “Molecular dynamics and enhanced sampling simulation of nanocapsule formation and spontaneous shape conversion via guest molecules”, The 6th International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, 浜松アクトタワー, 2018 年 1 月
4. Hadi Arefi, Takeshi Yamamoto, Hirofumi Sato, “Supramolecular polymer elongation studied by replica-exchange with solute tempering molecular dynamics simulation”, The 6th International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, 浜松アクトタワー, 2018 年 1 月
5. T. Iioka, Y. Matsumura, A. Baba, S. Hiraoka, H. Sato, “A kinetic study of substitution reaction on dinuclear platinum complex”, 第 33 回化学反応討論会, 2017 年 6 月
6. Hirofumi Sato, “Understanding of Self-Assembly Process at Molecular Level” (招待講演), Frontier Bioorganization Forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Academia Sinica, Taipei, 2017 年 4 月
7. Y. Yoshida, H. Sato, J. W. R. Morgan, D. J. Wales, “Potential energy landscapes of tetragonal

- pyramid molecules”, 4th International Conference on Molecular Simulation, Shanghai, 2016年10月
8. Hirofumi Sato, “Chemical processes in condensed phase: Quantum chemistry and statistical mechanics” (招待講演), JFS-Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex System, FIFC, Kyoto University, 2016年10月
 9. 吉田悠一郎, 佐藤啓文, John W. R. Morgan, David J. Wales 「ポテンシャルエネルギー曲面から見た分子集合体と構成分子の関係性」第10回分子科学討論会, 2016年9月
 10. 松村祥宏, 井内哲, 佐藤啓文 「金属・配位子系における自己集合反応の理論研究」第10回分子科学討論会, 2016年9月
 11. Yoshihiro Matsumura, “Phenomenological and Molecular approach to Self-Assembly process of metal-ligand system”, Future of Chemical Physics, St. Edmund Hall (SEH), Oxford, 2016年8月
 12. Yoshihiro Matsumura, “Phenomenological and Molecular approach to Self-Assembly process of metal-ligand system”, Energy Landscapes: Theory and Applications, Porquerolles, 2016年6月
 13. 松村祥宏, 井内哲, 佐藤啓文 「金属-配位子系における自己集合反応のためのモデルハミルトニアン」第19回理論化学討論会, 2016年5月
 14. 吉田悠一郎, 佐藤啓文 「ピラミッド型分子の自己集合のエネルギー地形」第19回理論化学討論会, 2016年5月
 15. 飯岡達也, 松村祥宏, 馬場絢子, 平岡秀一, 佐藤啓文 「六角形型 Pt(II) 環状錯体の自己集合過程: (2) 理論的アプローチ」日本化学会第96春季年会, 2016年3月
 16. 佐藤啓文 「自己組織化過程の理論化学」(招待講演)日本化学会第96春季年会, 2016年3月
 17. Hirofumi Sato, “Multi-scale couplings for chemical processes at molecular level: quantum chemistry and statistical mechanics” (招待講演), Pacificchem, Honolulu (USA), 2015年12月
 18. Takeshi Yamamoto, Hirofumi Sato, “Self assembly of gear-shaped amphiphiles into a molecular capsule (nanocube): computational study”, The 4th International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, 九州大学, 2015年11月
 19. 山本武志 「溶液中ナノキューブ自己組織化過程の自由エネルギー解析」第9回分子科学討論会, 2015年9月
 20. 松村祥宏, 佐藤啓文 「マスター方程式に基づく八面体型金属カプセル錯体の自己集合過程」第18回理論化学討論会, 2015年5月
 21. 吉田悠一郎, 佐藤啓文 「粗視化モデルと分子シミュレーションを用いた分子の自己集合過程に関する研究」日本化学会第95春季年会, 2015年3月
 22. 佐藤啓文 「動的秩序形成の分子理論」(招待講演)日本化学会第95春季年会, 2015年3月
 23. 松村祥宏, 佐藤啓文 「分子性液体の密度汎関数理論とマスター方程式による分子の自己集合過程の研究」第37回溶液化学シンポジウム, 2014年11月
 24. 松村祥宏, 佐藤啓文 「ウイルスのカプシド形成の粗視化モデル系の理論研究: 分子性液体の密度汎関数理論に基づく形成過程」第8回分子科学討論会, 2014年9月
 25. 吉田悠一郎, 佐藤啓文 「自己組織化ナノキューブの粗視化モデル」第8回分子科学討論会, 2014年9月
 26. Yoshihiro Matsumura, Hirofumi Sato, “A study of virus capsid formation based on RISM theory”, Energy Landscapes: From Single Molecules to Soft Matter, UK, 2014年8月
 27. 松村祥宏, 佐藤啓文 「凝縮系における自己集合過程の分子統計力学理論」第17回理論化学討論会, 2014年5月
 28. Kento Kasahara, Hirofumi Sato, “Development of three-dimensional SSSV equation”, The 2nd International Symposium “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions”, Campus Plaza Kyoto, 2014年1月
 29. Ryohei Kirihara, Taichi Inagaki, Hirofumi Sato, Takeshi Yamamoto, “Theoretical study of gear-shaped amphiphiles”, The 2nd International Symposium “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions”, Campus Plaza Kyoto, 2014年1月
- [その他] J. Comp. Chem. Jpn.(Online ISSN: 1347-3824)にて、特集: 「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現のコンピュータ化学」(同誌17巻第1号)の企画・編集を行った。

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名: 山本 武志

ローマ字氏名: YAMAMOTO Takeshi

所属研究機関名: 京都大学

部局名: 理学研究科

職名: 助教

研究者番号(8桁): 30397583

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。