

サブ課題A: 新エネルギー源の創出・確保ー太陽光エネルギーー

サブ課題代表者: 天能 精一郎

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)
1	Configuration interaction combined with spin-projection for strongly correlated molecular electronic structures	Takashi Tsuchimochi, Seiichiro Ten-no	J. Chem. Phys. (communications), 144, 011101 (2016)	2016年1月	国外	○
2	Black-Box Description of Electron Correlation with the Spin-Extended Configuration Interaction Model: Implementation and Assessment	Takashi Tsuchimochi, Seiichiro Ten-no	J. Chem. Theor. Comp., 12, 1741-1759 (2016)	2016年3月	国外	○
3	Spin-flip configuration interaction singles with exact spin-projection: Theory and applications to strongly correlated systems	Takashi Tsuchimochi	J. Chem. Phys. 143, 144114 (2015)	2015年8月	国外	○
4	From C60 to Infinity: Large-Scale Quantum Chemistry Calculations of the Heats of Formation of Higher Fullerenes	B. Chan, Y. Kawashima, M. Katouda, T. Nakajima, K. Hirao	J. Am. Chem. Soc. 138, 1420-1429 (2016).	2016年1月	国外	○
5	Theoretical Study on Spin-Forbidden Transitions of Osmium Complexes by Two-component Relativistic Time-dependent Density Functional Theory	Y. Imamura, M. Kamiya, T. Nakajima	Chem. Phys. Lett. 648, 60-65 (2016).	2016年1月	国外	○
6	Gaussian-based range-separation approach on Hartree-Fock exchange interaction and second-order perturbation theory	T. Shimazaki, T. Nakajima	Chem. Phys. Lett. 647, 132-138 (2016).	2016年3月	国外	○
7	Full Geometry Optimizations of the CaMn4O4 Model Cluster for the Oxygen Evolving Complex of Photosystem II	M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, K. Yamaguchi	Chem. Phys. Lett. 640, 23-30 (2015).	2015年11月	国外	○
8	Two-component Relativistic Time-dependent Density Functional Theory Study on Spin-forbidden Transitions for Metal Polypyridyl Complexes	Y. Imamura, M. Kamiya, T. Nakajima	Chem. Phys. Lett. 635, 152-156 (2015).	2015年8月	国外	○
9	Gaussian-based cutoff scheme on Hartree-Fock exchange term of dielectric-dependent potential	T. Shimazaki, T. Nakajima	Chem. Phys. Lett. 634, 83-87 (2015).	2015年8月	国外	○
10	How Can We Understand Au8 Cores and Entangled Ligands of Selenolate- and Thiolate-protected Gold Nanoclusters Au24(ER)20 and Au20(ER)16 (E = Se, S; R = Ph, Me)? A Theoretical Study	N. Takagi, K. Ishimura, M. Matsui, R. Fukuda, T. Matsui, T. Nakajima, M. Ehara, S. Sakaki	J. Am. Chem. Soc. 137, 8593-8602 (2015).	2015年6月	国外	○
11	Theoretical study of exciton dissociation through hot states at donor-acceptor interface in organic photocell	T. Shimazaki, T. Nakajima	Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 12538 (2015).	2015年4月	国外	○
12	マルチGPU超並列クラスタシステムを用いた大規模ナノ炭素分子の電子状態計算	河東田道夫, 成瀬彰, 中嶋隆人	TSUBAME ESJ, 14, 14-18 (2016).	2016年3月	国内	
13	Dipole Analyses for Short-Circuit Current in Organic Photovoltaic Devices of Diketopyrrolopyrrole-Based Donor and PCBM	Shohei Koda, Mikiya Fujii, Shintaro Hatamiya, Koichi Yamashita	Theoret. Chem. Acc., 135, 115 (10 pages) (2016)	2016年3月	国外	○

14	Photon-absorbing charge-bridging states in organic bulk heterojunctions consisting of diketopyrrolopyrrole derivatives and PCBM	Mikiya Fujii, Woong Shin, Takuma Yasuda, Koichi Yamashita	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 9514–9523 (2016)	2016年3月	国外	○
15	Zero-Dimensional Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	J. Phys. Chem. Lett., 7, 888–899 (2016)	2016年2月	国外	○
16	Remarkable Dependence of the Final Charge Separation Efficiency on the Donor-Acceptor Interaction in Photoinduced Electron Transfer	Tomohiro Higashino, Tomoki Yamada, Masanori Yamamoto, Akihiro Furube, Nikolai V. Tkachenko, Taku Miura, Yasuhiro Kobori, Ryota Jono, Koichi Yamashita, Hiroshi Imahori	Angewandte Chemie, 55, 629–633 (2016)	2015年12月	国外	○
17	Energy Alignment of Frontier Orbitals and Suppression of Charge Recombinations in P3HT/SWNT	Katsuhiko Nishimura, Mikiya Fujii, Ryota Jono, Koichi Yamashita	J. Phys. Chem. C, 119, 26258–26265 (2015)	2015年11月	国外	○
18	Zero-dipole molecular organic cations in mixed organic-inorganic halide perovskites: possible chemical solution for the reported anomalous hysteresis in the current-voltage curve measurements	G. Giorgi, K. Yamashita	Nanotechnology, 26, 442001 (16 pages) (2015)	2015年10月	国外	○
19	Explicitly correlated frequency-independent second-order Green's function for accurate ionization potentials	Yu-ya Ohnishi and Seiichiro Ten-no	J. Comput. Chem., 37 2447–2453 (2016)	2016年8月	国外	○
20	General technique for analytical derivatives of post-projected Hartree-Fock	Takashi Tsuchimochi and Seiichiro Ten-no	J. Chem. Phys., 146 074104 (2017)	2017年1月	国外	○
21	Perspective: Explicitly correlated electronic structure theory for complex systems	Andreas Grüneis, So Hirata, Yu-ya Onishi and Seiichiro Ten-no	J. Chem. Phys., 146 080901 (2017)	2017年2月	国外	○
22	Analytic energy gradient of projected Hartree-Fock within projection after variation	Motoyuki Uejima and Seiichiro Ten-no	J. Chem. Phys., 146 104106 (2017)	2017年3月	国外	○
23	Bridging Single- and Multireference Domains for Electron Correlation: Spin-Extended Coupled Electron Pair Approximation	Takashi Tsuchimochi and Seiichiro Ten-no	J. Chem. Theor. Comp., 13 1667–1681 (2017)	2017年2月	国外	○
24	"Analyses on thiophene-based donor-acceptor semiconducting polymers toward designing optical and conductive properties: A theoretical perspective"	T. Matsui, Y. Imamura, I. Osaka, K. Takimiya, T. Nakajima	J. Phys. Chem. C, 120, 8305–8314 (2016).	2016年3月	国外	○
25	"Theoretical study on the cooperative exciton dissociation process based on dimensional and hot charge-transfer state effects in an organic photocell"	T. Shimazaki, T. Nakajima	J. Chem. Phys. 144, 234906 (2016).	2016年6月	国外	○
26	"Large-scale QM/MM calculations of the CaMn4O5 cluster in the oxygen-evolving complex of photosystem II: Comparisons with EXAFS structures"	M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, K. Yamaguchi	Chem. Phys. Lett. 658, 354–363 (2016).	2016年8月	国外	○
27	"Spectroscopic and computational study of acetic acid and its cyclic dimer in the near-infrared region"	K. B. Beć, Y. Futami, M. J. Wójcik, T. Nakajima, Y. Ozaki	J. Phys. Chem. A 120, 6170–6183 (2016).	2016年8月	国外	○

28	“Application of the dielectric-dependent screened exchange potential approach to organic photocell materials”	T. Shimazaki, T. Nakajima	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 27554–27563 (2016). DOI: 10.1039/C6CP04863C	2016年9月	国外	○
29	“Massively parallel algorithm and implementation of RI-MP2 energy calculation for peta-scale many-core supercomputers”	M. Katouda, A. Naruse, Y. Hirano, T. Nakajima	J. Comput. Chem. 37, 2623–2633 (2016). DOI: 10.1002/jcc.24491	2016年9月	国外	○
30	“Quantum chemical calculations of basic molecules: alcohols and carboxylic acids”	K. B. Beć, M. J. Wójcik, T. Nakajima	NIR news, 27(8), 15–21 (2016). DOI: 10.1255/nirn.1650	2016年11月	国外	○
31	”酢酸-リン酸アニオンクラスターの分子間水素結合における核の量子揺らぎの効果に関する理論的研究”	川島雪生, 澤田啓介, 中嶋隆人, 立川仁典	J. Comput. Chem. Japan, 15, 203–209 (2016). http://doi.org/10.2477/jccj.2016-0043	2016年12月	国内	○
32	MPI/OpenMP hybrid parallel algorithm for resolution of identity second-order Møller-Plesset perturbation calculation of analytical energy gradient for massively parallel multicore supercomputers	M. Katouda, T. Nakajima	J. Comput. Chem. 38, 489–507 (2017). DOI: 10.1002/jcc.24701	2017年1月	国外	○
33	Two-component relativistic equation-of-motion coupled-cluster methods for excitation energies and ionization potentials of atoms and molecules	Y. Akinaga, T. Nakajima	J. Phys. Chem. A 121, 827–835 (2017). DOI: 10.1021/acs.jpca.6b10921	2017年1月	国外	○
34	Group molecular orbital approach to solve the Huzinaga subsystem self-consistent-field equations	T. Shimazaki, K. Kitaura, D. Fedorov, T. Nakajima	J. Chem. Phys. 146, 084109 (2017). doi: http://dx.doi.org/10.1063/1.4976646	2017年2月	国外	○
35	A theoretical study on hot charge-transfer states and dimensional effects of organic photocells based on the ideal diode model	T. Shimazaki, T. Nakajima	Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 12517–12526 (2017).	2017年4月	国外	○
36	An extrapolation scheme for solid-state NMR chemical shift calculations	T. Nakajima	Chem. Phys. Lett. 677, 99–106 (2017).	2017年4月	国外	○
37	The Born-Oppenheimer molecular simulations of infrared spectra of crystalline poly-(R)-3-hydroxybutyrate with analysis of weak C-H...O=C hydrogen bonds	M. Z. Brela, M. Boczar, M. J. Wójcik, H. Sato, T. Nakajima, Y. Ozaki	Chem. Phys. Lett. 678, 112–118 (2017).	2017年6月	国外	○
38	Electrical anharmonicity in hydrogen bonded systems. Complete interpretation of the IR spectra of Cl-H stretching band in the gaseous (CH ₃) ₂ O...HCl complex	N. Rejik, J. Suleiman, M. J. Wójcik, H. T. Flakus, T. Nakajima	Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 5917–5931 (2017).	2017年1月	国外	○
39	Large-scale QM/MM calculations of the CaMn ₄ O ₅ cluster in the S ₃ state of the oxygen evolving complex of photosystem II. Comparison between water-inserted and no water-inserted structures	M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, Y. Shigeta, M. Suga, F. Akita, J.-R. Shen, K. Yamaguchi	Faraday Discussions 198, 83–106 (2017).	2016年11月	国外	○
40	Infrared spectroscopy and Born-Oppenheimer molecular dynamics simulation study on deuterium substitution in the crystalline benzoic acid	M. Gług, M. Brela, M. Boczar, A. Turek, Ł. Boda, M. Wójcik, T. Nakajima, Y. Ozaki	J. Phys. Chem. B 121, 479–489 (2017).	2016年12月	国外	○
41	“Dipole Analyses for Short-Circuit Current in Organic Photovoltaic Devices of Diketopyrrolopyrrole-Based Donor and PCBM”	Shohei Koda, Mikiya Fujii, Shintaro Hatamiya, Koichi Yamashita	Theor. Chem. Acc., 135(5), 115 – 124	2016年4月	国外	○
42	“The Effects of the Organic-Inorganic Interactions on the Thermal Transport Properties of CH ₃ NH ₃ PbI ₃ ”	Tomoyuki Hata, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Nano Lett., 2016, 16 (4), pp 2749–2753	2016年4月	国外	○
43	“Atomic-scale analysis of the RuO ₂ /water interface under electrochemical conditions”	E. Watanabe, J. Rossmeisl, M. Bjorketun, H. Ushiyama, K. Yamashita	J. Phys. Chem. C, 120, 8096–8103	2016年4月	国外	○

44	"A new implementation of ab initio Ehrenfest dynamics using electronic configuration basis – exact formulation with molecular orbital connection and effective propagation scheme with locally quasi-diabatic representation–"	Tomotaka Kunisada, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita	Int. J. Quant. Chem., 116, 1205–1213	2016年5月	国外	○
45	"Proton Transfer Dynamics in Protonated Benzene"	Ayaka Kuroki, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita	Bull. Chem. Soc. Japan, 89, 804–809	2016年7月	国外	○
46	"Theoretical studies on ammonia borane dehydrogenation catalyzed by iron pincer complexes"	Ayaka Kuroki, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita	Computational and Theoretical Chemistry, 1090, 214–217	2016年8月	国外	○
47	"Does Organic/Organic Interface Mimic Band Bending by Deforming Structure?"	Ryota Jono, Eriko Watanabe, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita	J. of Photochem. Photobio. A: Chemistry, 330, 181–185	2016年8月	国外	○
48	"Structural and electronic features of small hybrid organic–inorganic halide perovskite clusters: a theoretical analysis"	Giacomo Giorgi, Tomohiro Yoshihara, Koichi Yamashita	Phys. Chem. Chem. Phys., DOI: 10.1039/c6cp03193e	2016年9月	国外	○
49	"Thermal Effect on Morphology and Performance of Organic Photovoltaics"	E. Kawashima, M. Fujii, K. Yamashita	Phys. Chem. Chem. Phys., 18, 26456 – 26465	2016年9月	国外	○
50	"Photon-absorbing charge-bridging states in organic bulk heterojunctions consisting of diketopyrrolopyrrole derivatives and PCBM"	Mikiya Fujii, Woong Shin, Takuma Yasuda, Koichi Yamashita	Phys Chem Chem Phys, 18(14), 9514 –9523	2016年10月	国外	○
51	"Anion Ordering in CaTaO ₂ N: Structural Impact on the Photocatalytic Activity. Insights from First-Principles"	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Chem Mater., 29, 539–545	2016年12月	国外	○
52	"Charge Carrier Trapping at Surface Defects of Perovskite Solar Cell Absorbers: A First-Principles Study"	Hiroki Uratani, Koichi Yamashita	J. Phys. Chem. Lett., 8, 742–746	2017年1月	国外	○
53	"On the development of a classical interatomic potential for MAPbBr"	Tomoyuki Hata, Giacomo Giorgi, Claudia Caddeo, Alessandro Mattoni, Koichi Yamashita	J. Phys. Chem. C, 121, 3724–3733	2017年1月	国外	○
54	"Defects in crystalline PVDF: a Density Functional Theory – Density Functional Tight Binding study"	Saeid Arabnejad, Koichi Yamashita, Sergei Manzhos	Phys. Chem. Chem. Phys., 19, 7560–7567	2017年2月	国外	○
55	"Synthesis of Quinoidal Fused Oligosiloles by Rhodium-Catalyzed Stitching Reaction and Theoretical Investigation of Their Properties"	Ryo Shintani, Nana Misawa, Tomohiro Tsuda, Ryo Iino, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita, Kyoko Nozaki	J. Am. Chem. Soc., 139, 3861–3867	2017年2月	国外	○
56	"First-principles study of the band diagrams and Schottky-type barrier heights of aqueous Ta ₃ N ₅ interfaces"	Eriko Watanabe, Hiroshi Ushiyama, Koichi Yamashita	ACS Appl. Mater. Interfaces, 9, 9559–9566	2017年3月	国外	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

(1)口頭発表

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	Recent advances in explicitly correlated F12 electronic structure theory	Seiichiro Ten-no	CMSI International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems, University of Tokyo	2015年2月	国内	
2	Recent advances in explicitly correlated F12 electronic structure theory	Seiichiro Ten-no	Université Pierre et Marie Curie	2015年2月	国外	
3	サブ課題A「新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー」研究計画概要	天能 精一郎	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
4	サブ課題A 研究事例「太陽光エネルギー変換の理論計算化学」	山下 晃一	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
5	基盤アプリ開発「ポスト京の基盤アプリ開発とコデザイン体制」	中嶋 隆人	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
6	高精度F12電子状態理論の発展	天能 精一郎	新化学技術推進協会 先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会講演会	2015年3月	国内	
7	サブ課題A「新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー」研究計画概要	天能 精一郎	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
8	サブ課題A 研究事例「有機薄膜太陽電池の創電機構に関する理論化学的研究」	藤井 幹也	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
9	基盤アプリ設計・開発	中嶋 隆人	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
10	Black-box, highly accurate approach to dynamic and static electron correlation based on spin projection	Takashi Tsuchimochi, Seiichiro Ten-no	ACS 251st National Meeting, San Diego, California, USA.	2016年3月	国外	
11	NTChem: Quantum Chemistry on K Computer	T. Nakajima	12th ICCMSE 2016, Athens	2016年3月	国外	
12	化学結合の量子化学	中嶋隆人	平成27年度 計算物質科学セミナー, 仙台	2016年3月	国内	
13	NTChem: 分子科学計算ソフトウェア	中嶋隆人	産応協, CMSI, ポスト京重点課題5・6・7合同産学官連携シンポジウム2016, 東京	2016年2月	国内	
14	Recent Progress in NTChem	T. Nakajima	7th Asia-Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry, Taiwan	2016年1月	国外	

15	京コンピュータを用いた理論分子科学研究	中嶋隆人	神戸大学大学院理学研究科化学専攻セミナー, 神戸	2016年1月	国内	
16	NTChem: A high-performance software package for molecular electronic structure calculation	T. Nakajima	PACIFICHEM2015, Honolulu	2015年12月	国外	
17	分子科学計算ソフトウェア「NTChem」	中嶋隆人	第1回マルチスケール計算生物学研究会, 神戸	2015年11月	国内	
18	NTChemと相対論的分子理論	中嶋隆人	分子研究会 理論計算分子科学ワークショップ: 計算法とシミュレーションの新展開, 岡崎	2015年10月	国内	
19	エネルギー変換材料設計の理論計算化学	山下晃一	「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 -	2016年3月	国内	
20	Energy Alignment of Frontier Orbitals and Suppression of Charge Recombinations in P3HT/SWNT	K. Nishimura, M. Fujii, R. Jono, and Koichi Yamashita	12th ICCMSE	2016年3月	国外	
21	Energy Alignment of Frontier Orbitals and Suppression of Charge Recombinations in P3HT/SWNT	K. Nishimura, M. Fujii, R. Jono, and Koichi Yamashita	The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry	2016年1月	国外	
22	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	PACIFICHEM Photocatalysis and Charge Transfer at Interfaces and Nanomaterials	2015年12月	国外	
23	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	ICIQ-FIC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems	2015年11月	国外	
24	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	JCS-2015 Symposium	2015年10月	国外	
25	有機系太陽電池のエネルギー変換過程の理解と予測	山下晃一	次世代有機太陽電池シンポジウム: 「次世代有機太陽電池の動向と展望～実験と理論の連携～」	2015年9月	国内	
26	相界面での光誘起キャリア移動ダイナミクス	山下晃一	第9回分子科学討論会	2015年9月	国内	
27	相界面での光誘起キャリア移動ダイナミクス	山下晃一	シンポジウム「有機無機ペロブスカイト太陽電池の現状と今後の展望」 第76回応用物理学会秋季学術講演会	2015年9月	国内	
28	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	CECAM workshop on Perovskite solar cells: the quest for a theoretical description	2015年8月	国外	
29	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	Gordon Research Conferences “Dynamics at Surfaces”	2015年8月	国外	
30	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	9th Ultrafast Surface Dynamics	2015年5月	国外	

31	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	CECAM workshop "Charge Transfer Modeling in Chemistry: New methods and solutions for a long-standing problem"	2015年4月	国外	
32	サブ課題A「新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー」オーバービュー	天能 精一郎	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
33	サブ課題A 研究事例「高効率光エネルギー変換を目指した強相関電子状態理論の開発」	天能 精一郎	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
34	「スピン反転励起の完全スピン空間への射影による強電子相関の記述」	土持崇嗣、天能精一郎	第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマート	2016/9/13-2016/9/15	国内	
35	「光システム II マンガンクラスターの射影 Hartree-Fock電子状態解析」	上島基之、北浦和夫、天能精一郎	第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマート	2016/9/13-2016/9/15	国内	
36	「射影 Hartree-Fock 法の構造最適化とその応用」	上島基之、北浦和夫、天能精一郎	第19回理論化学討論会, 早稲田大学 西早稲田キャンパス	2016/5/23-2016/5/25	国内	
37	基盤アプリ設計・開発	中嶋 隆人	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
38	「太陽電池設計のための非断熱分子動力学シミュレーションの実装」	嶺澤 範行	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
39	サブ課題A 研究事例「計算科学による太陽光エネルギー変換の機構解析と材料探索」	山下 晃一	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
40	「Zero-Dimensional Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles」	Giacomo Giorgi and Koichi Yamashita	26th IUPAC Symposium on Photochem	2016/4/3-2016/4/8	国外	
41	「Development of classical force fields for thermal transport in methylammonium lead halide」	Tomoyuki Hata	公開セミナー (Università degli Studi di Perugia)	2016年7月	国外	
42	Zero-Dimensional Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles	Giacomo Giorgi and Koichi Yamashita	ANM2016 7th International conference on Advanced Nanomaterials	2016/7/25-2016/7/27	国外	
43	On the nature of the intermolecular interactions in $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{Sn})\text{I}_3$ photovoltaic perovskite solar cells	Varadwaj, A, Varadwaj, PR, Yamashita K.	First European Symposium on Chemical Bonding	2016/8/29-2016/9/2	国外	
44	Tin/Lead halide perovskite nanowires	Varadwaj, A, Varadwaj, PR, Yamashita K.	Electronic structure studies using Gaussian 09 and Aimall. Gaussian 09 Workshop	2016/9/5-2016/9/9	国内	
45	Zero-Dimensional Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles	Giacomo Giorgi and Koichi Yamashita	Spanish-Portuguese Conference on Photochemistry	2016/9/7-2016/9/10	国外	
46	有機薄膜太陽電池 P3HT/PCBM 界面の電子励起状態における電荷分離機構の計算化学的考察	藤井幹也, 幸田 奨平, 川嶋 英佑, 山下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	

47	Can gas phase calculations be effective in generating the novel chemistry of halide perovskite materials?	Varadwaj Pradeep, Varadwaj Arpita, Yamashita Koichi	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
48	「On the environmental stability of the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{Sn})\text{I}_3$ perovskite materials」	Varadwaj Arpita, Varadwaj Pradeep r., Yamashita Koichi	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
49	「有機無機複合構造における熱伝導特性の理解とその制御」	畑 智行	第77回応用物理学会秋季学術講演会	2016/9/13-2016/9/16	国内	
50	First-principles study on photocatalytic properties of $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ alloys: Band-edge character, band bending and visible light response	山下 晃一	CEGAM Workshop	2016/9/27-2016/9/30	国外	
51	計算科学による二次電池の機能解析と材料探索	山下 晃一	触媒・電池元素戦略研究拠点第9回公開シンポジウム	2016年10月	国内	
52	Photoexcitation Mechanism of Metallic $\text{Sr}_{1-x}\text{NbO}_3$ for Watersplitting Photocatalyst	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
53	Origin of low thermal conductivity in organic-inorganic thermoelectric materials	畑 智行, Giorgi Giacomo, 山下 晃一	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
54	Atomistic modeling of the sodium diffusion in black phosphorus anode.	saeid Arabnejad Khanooki, Shunsuke KURAHASHI, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
55	$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ and CsPbI_3 Supramolecular Clusters in 1D: Do They Evolve with the Same Principle of Cooperative Binding?	Arpita Varadwaj, Pradeep R. Varadwaj, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
56	A theoretical study on charge transfer type excitons at donor/acceptor interfaces of organic solar cells.	Azusa Muraoka, Reina Tachibana, Mikiya Fujii, Kenji Mishima, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
57	Morphological Effect on Performance of Organic Photovoltaics—In Terms of Entropy and Helmholtz Energy	Eisuke Kawashima, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
58	金属- La_2O_3 表面におけるCO酸化反応の理論的研究	岩田理比等, 牛山 浩, 山下 晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	国内	
59	有機薄膜太陽電池の電荷移動状態解析に対する密度汎関数パラメータの最適化	寺尾仁志, 藤井幹也, 山下 晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	国内	
60	K イオンのグラファイトへの挿入過程における理論的研究	平井悠登, 山下 晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	国内	
61	非フラウンクセプター有機薄膜太陽電池の軌道準位と電荷移動状態に関する計算化学的研究	田中健斗, 藤井幹也, 山下 晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	国内	
62	光触媒材料 SrTiO_3 における助触媒効果に関する理論的研究	津田昌俊, 山下 晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	国内	
63	CARRIER DYNAMICS OF ORGANIC-INORGANIC METAL HALIDE PEROVSKITES	山下 晃一	ベニス (REMOO/国際エネルギー会議)	2017/5/10-5/12	国外	

64	有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるエントロピーの影響	川嶋 英佑,藤井 幹也,山下 晃	京都大学(第20回理論化学討論会)	2017/5/16-5/18	国内	
----	------------------------------	------------------	-------------------	----------------	----	--

(2)ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	Black-box description of electron correlation for strongly correlated systems: an efficient way	Takashi Tsuchimochi, Seiichiro Ten-no	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
2	分子計算ソフトウェアNTChemの開発と巨大分子への応用	中嶋隆人	第2回元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>/大型研究施設連携シンポジウム, 東京	2016年1月	国内	○
3	サブ課題A 研究事例「Bridging single-reference and multi-reference regimes for electron correlation with spin-extended coupled electron pair approximation」	土持 崇嗣	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
4	サブ課題A 研究事例「Assessment of truncation schemes from the active space coupled cluster expansion through sextuple excitation levels」	XU ENHUA	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
5	サブ課題A 研究事例「射影Hartree-Fock法の二次収束法開発とマンガングラスタへの適用」	上島 基之	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
6	「露わに相関したグリーン関数法による高分子のイオン化ポテンシャルの高精度計算」	大西裕也、天能精一郎	第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマート	2016/9/13-2016/9/15	国内	
7	サブ課題A 研究事例「太陽光エネルギー変換を担う励起電子の非断熱量子動力学を扱う為の理論手法開発」	米原 文博	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
8	サブ課題A 研究事例「反対称ジェミナル積を用いた配置間相互作用法による高精度第一原理計算」	植村 涉	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
9	サブ課題A 研究事例「Coarray Fortranを用いた時間依存密度汎関数法の並列計算」	澤田 啓介	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
10	「領域分割的量子化学アプローチによる光化学系II水分解触媒サイトの構造決定」	中嶋隆人	第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会	2016年10月	国内	
11	サブ課題A 研究事例「非フラーレン型アクセプターに関する量子化学計算」	三嶋 謙二	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
12	「DFT 計算を用いた d1 型水分解光触媒 Sr1-xNbO3 の光吸収およびバンド構造」	金子 正徳, Giacomo Giorgi, 山下 晃一	第19回理論化学討論会 2016	2016/5/23-2016/5/25	国内	
13	有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるモルフォロジーの影響	川嶋英佑, 藤井幹也, 山下晃一	第19回理論化学討論会 2016	2016/5/23-2016/5/25	国内	
14	「Theoretical studies on the structural dependence of the electronic properties of perovskite oxynitride photocatalysts」	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita.	32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics	2016/6/1-3	国外	

15	「周期境界量子化学計算に基づく、高誘電率ドナーの理論設計」	三嶋 謙二、山下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
16	有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるエントロピーの影響	川嶋英佑, 藤井幹也, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
17	「P3HT/PCBMにおける電荷分離機構」	幸田 奨平, 藤井幹也, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
18	「DFT計算を用いたd1型水分解光触媒Sr1-xNbO3の光吸収およびバンド構造」	金子 正徳, Giacomo Giorgi, 山下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
19	「改良Basin-Hopping法を用いた反応中間体の構造探索」	今村友信, 牛山浩, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
20	「Naイオン二次電池負極材料MXeneに関する理論的研究」	倉橋駿介、牛山浩、 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
21	「Ta系ペロブスカイト型酸窒化物光触媒のキャリア拡散に関する理論的研究」	入口 広紀, 渡部 絵里子, 山 下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
22	「Naイオン電池負極材料Snにおける充放電過程の理論的研究」	児玉涼介, Arabnejad Saeid, 牛山浩, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
23	「Ta系ペロブスカイト型酸窒化物光触媒のキャリア拡散に関する理論的研究」	入口 広紀, 渡部 絵里子, 山 下 晃一	第118回触媒討論会	2016/9/21-2016/9/23	国内	
24	Newly Discovered Low Band Gap Lead Iodide Perovskite Materials for Photovoltaic Solar Cells	Varadwaj, PR, Varadwaj, A, Yamashita K.	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condense-Phase Reacting System	2016/10/10-2016/10/12	国外	
25	「Morphological Effect on Performance of Organic Photovoltaics」	Eisuke Kawashima, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
26	「Ab-initio Investigations on MgTaO ₂ N as a Novel Photocatalyst Material: Insights from Anion Ordering, Octahedral-tilting and Crystal Polymorphism」	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita.	JFS-Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
27	「Effect of Sr vacancies and substitutionals on the optical absorption and the band position of SrNbO ₃ : a DFT analysis」	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
28	「On the Physical Understanding of the Outdoor Environmental Stability of the Zero-Dimensional Lead Halide Perovskite Complexes in Water」	Varadwaj Arpita, Varadwaj Pradeep r., Yamashita Koichi	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
29	「Unusually High Cooperativity Revealed in the Chemical Bonding Interactions Exploited: Novel Lead Iodide Perovskite Complex System as a Prototype」	Varadwaj, PR, Varadwaj, A, Yamashita K.	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
30	有機薄膜太陽電池の電荷分離過程の相分離構造依存性	藤井幹也	新化学技術推進協会第3回学産交流ポスターセッション	2016年12月	国内	
31	Charge Carrier Trapping at Surface Defects of Perovskite Solar Cell Absorbers: A First-Principles Study	Hiroki Uratani, Koichi Yamashita	AP-HOPV17	2017/2/2-2017/2/4	国内	

32	Effect of Sr vacancies and substitutionals on the bandstructure of SrNbO ₃ : a DFT analysis.	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
33	Theoretical studies of carrier diffusion in perovskite tantalum oxynitride photocatalyst	Hiroki IRIGUCHI, Eriko WATANABE, Koichi YAMASHITA	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
34	EFFECTS OF CO-CATALYST ON WATER-SPLITTING PHOTOCATALYST: A DFT ANALYSIS	水野花春、山下晃一	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
35	Ab initio investigations on perovskite-type photocatalysts: Impacts of structural features on electronic properties.	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
36	Photoexcitation Mechanism of Metallic Sr _{1-x} NbO ₃ for Watersplitting Photocatalyst	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
37	Effect of Co-catalyst on Water-splitting Photocatalyst: A DFT Analysis	水野花春、山下晃一	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
38	Theoretical studies of carrier diffusion in perovskite tantalum oxynitride photocatalyst	Hiroki IRIGUCHI, Eriko WATANABE, Koichi YAMASHITA	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
39	STRUCTURAL AND ELECTRONIC FEATURES OF PEROVSKITE-TYPE PHOTOCATALYSTS: INSIGHTS FROM FIRST-PRINCIPLES.	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
40	Theoretical Studies of Carrier Diffusion in Perovskite Tantalum Oxynitride Photocatalyst	Hiroki IRIGUCHI, Eriko WATANABE, Koichi YAMASHITA	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
41	The Effect of Co-catalyst on Water-splitting Photocatalyst: A DFT Analysis	水野花春、山下晃一	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
42	Disorder effects on the charge separation pathway by intermixing of donor and acceptor molecules	幸田奨平 藤井幹也 山下晃一	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
43	Are The Chemical Bonding Interactions in Halide Perovskite Solar Cells Cooperative?	Pradeep Varadwaj, Arpita Varadwaj, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
44	First-principles investigation of charge carrier trapping at surface defects of organic-inorganic hybrid perovskites as photovoltaic materials	Hiroki Uratani, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
45	Origin of Unusual Dependencies of LUMO Levels on Conjugation Length in Quinoidal Fused Oligosiloles	Nana Misawa, Mikiya Fujii, Ryo Shintani, Tomohiro Tsuda, Kyoko Nozaki, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
46	第一原理計算に基づくペロブスカイト型太陽電池の動作機構および性能向上指針に関する研究	浦谷浩輝、山下晃一	京都大学(第20回理論化学討論会)	2017/5/16-5/18	国内	
47	キノイド型縮環オリゴシロールの共役長に対する特異な LUMO 準位依存性に関する理論的考察	三澤奈々, 藤井幹也, 新谷亮, 津田知拓, 野崎京子, 山下晃一	京都大学(第20回理論化学討論会)	2017/5/16-5/18	国内	

48	Entropy Decreases Free Energy of Charge Separation in Organic Photovoltaics	Eisuke Kawashima , Mikiya Fujii , Koichi Yamashita	大阪大学 (Interdisciplinary Symposium for Up-and-coming Materials Scientists (ISUMS) 2017)	2017/6/8-6/9	国外	
49	Design Principles for Perovskite Solar Cells: Insights from Density Functional Theory Calculations	Hiroki Uratani, Koichi Yamashita	大阪大学 (Interdisciplinary Symposium for Up-and-coming Materials Scientists (ISUMS) 2017)	2017/6/8-6/9	国外	
50	Origin of Unusual Dependency of LUMO Levels on Conjugation Length in Quinoidal Fused Oligosiloles	Nana Misawa, Mikiya Fujii, Ryo Shintani, Tomohiro Tsuda, Kyoko Nozaki, Koichi Yamashita	大阪大学 (Interdisciplinary Symposium for Up-and-coming Materials Scientists (ISUMS) 2017)	2017/6/8-6/9	国外	
51	LaMg _x Ta _{1-x} O _{1+3x} N _{2-3x} のバンド構造の組成依存性に関する第一原理計算	久保綾子, 山下晃一	近畿大学 (第36回光がかわる触媒化学シンポジウム)	2017/6/30	国内	

(3)招待講演

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	Model space quantum Monte Carlo method for degenerate and quasi-degenerate electronic states	Seiichiro Ten-no	Stochastic Wavefunction Methods in Quantum Chemistry, Electronic Structure Theory and Condensed Matter Physics, Lausanne (CECAM HQ EPFL) Switzerland.	2015年4月	国外	○
2	Model space quantum Monte Carlo method for degenerate and quasi-degenerate electronic states	Seiichiro Ten-no	Recent advances in electronic structure theory (RAEST2015), Nanjing, China.	2015年6月	国外	○
3	The impact of explicitly correlated F12 theory on modern electronic structure calculations	Seiichiro Ten-no	Hylleraas Symposium, the Norwegian Academy of Science and Letters, Oslo, Norway	2015年11月	国外	○
4	Model space quantum Monte Carlo method for degenerate and quasi-degenerate electronic states	Seiichiro Ten-no	Advances in Quantum Monte Carlo, The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem), Honolulu, Hawaii, USA.	2015年12月	国外	○
5	Model space quantum Monte Carlo: Theory and applications	Seiichiro Ten-no	the Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), January 25 - 28 (2016) Kaohsiung, Taiwan.	2016年1月	国外	○
6	Model space quantum Monte Carlo: An effective Hamiltonian approach for electronic structures	Seiichiro Ten-no	Kobe workshop for material design on strongly correlated electrons in molecules and materials, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS).	2016年2月	国外	○
7	Advances in model space quantum Monte Carlo	Seiichiro Ten-no	Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques (LUEST), Telluride, CO, USA.	2016/6/1-2016/6/4	国外	○
8	Model space quantum Monte Carlo in conjunction with F12 theory	Seiichiro Ten-no	Comenius University, Bratislava, Slovakia.	2016年6月	国外	○
9	Massively Parallel Calculation of Accurate Electronic Structures	Seiichiro Ten-no	ISTCP IX, Grand Forks, ND, USA.	2016/7/17-2016/7/22	国外	○

10	Massively Parallel Computation of Accurate Electronic Structures	Seiichiro Ten-no	MESBA 2016, Buenos Aires, Argentina.	2016/9/19-2016/9/23	国外	○
11	Effective Hamiltonians in Stochastic Quantum Chemistry	Seiichiro Ten-no	IRSAMC Université Paul Sabatier et Université de Toulouse, Toulouse, France.	2016年9月	国外	○
12	Static and dynamic electron correlations from restorations of broken symmetries	Seiichiro Ten-no	RAMET2017, Goa, India.	2017/2/9-2017/2/12	国外	○
13	「スピン射影を露わに考慮した配置間相互作用: 非直交Wick定理と応用」	土持崇嗣、天能精一郎	第19回理論化学討論会, 早稲田大学 西早稲田キャンパス	2016/5/23-2016/5/25	国内	○
14	“NTChem: and Relativistic Molecular Theory”	Takahito Nakajima	RMET 2016	2016年9月	国内	○
15	“京コンピュータを用いた理論分子科学研究”	中嶋隆人	神戸大学大学院理学研究科化学専攻セミナー	2016年7月	国内	○
16	“京コンピュータと理論分子科学”	中嶋隆人	第4回CUTEシンポジウム・コンピュータ化学「京コンピュータと理論化学」	2016年6月	国内	○
17	“NTChem: Quantum Chemistry on K Computer”	Takahito Nakajima	12th ICCMSE 2016	2016年3月	国外	○
18	“相対論的電子論に基づく電子機能材料設計”	中嶋隆人	“相対論的電子論に基づく電子機能材料設計”, CREST元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム	2016年12月	国内	○
19	“相対論的時間依存密度汎関数法の開発”	神谷宗明	第4回CUTEシンポジウム・コンピュータ化学「京コンピュータと理論化学」, 津	2016年6月	国内	○
20	NTChem: A High-Performance Software Package for Quantum Chemistry Simulation	T. Nakajima	The PASC17 Conference, Lugano	2017年6月	国外	○
21	計算科学を駆使したリチウムイオン・ナトリウムイオン2次電池の機能解析と材料探索	山下 晃一	光機能材料研究会 第58回講演会	2016年5月	国内	○
22	“Charge separation pathway on electronically excited states of PCBM/P3HT interfaces”	藤井幹也	EMN Prague Meeting, Energy Materials Nanotechnology	2016/6/21-2016/6/24	国外	○
23	「A Theoretical Modelling of High-dielectric-constant Donors and Acceptors Based on Periodic Boundary Condition Calculations」	三嶋 謙二	EMN Prague Meeting, Energy Materials Nanotechnology	2016/6/21-2016/6/24	国外	○
24	「Designing organic-inorganic photovoltaic materials using methylammonium lead halide perovskites for applications in solar cells: Unraveling the importance of ultra-strong hydrogen bonding interactions」	Varadwaj, A, Varadwaj, PR, Yamashita K	EMN Prague Meeting, Energy Materials Nanotechnology	2016/6/21-2016/6/24	国外	○
25	計算科学を駆使したペロブスカイト太陽電池の機能解析と材料探索	山下 晃一	光機能材料研究会 第60回記念講演会	2016年7月	国内	○
26	PHOTON-ABSORBING CHARGE-BRIDGING STATES IN ORGANIC PHOTOVOLTAIC DEVICES OF DIKETOPYRROLOPYRROLE-BASED DONOR AND PCBM	Mikiya FUJII, Shohei KODA, and Koichi YAMASHITA	252nd ACS National Meeting & Exposition	2016/8/21-2016/8/25	国外	○

27	有機薄膜太陽電池 P3HT/PCBM 界面の電子励起状態における電荷分離機構の計算化学的考察	藤井幹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」	2016年9月	国内	○
28	不均一触媒反応に対する理論化学手法による取り組み	牛山 浩	第118回触媒討論会	2016/9/21-9/23	国内	○
29	Theoretical Study on Energy Conversion Processes of Perovskite Solar Cells	山下 晃一	IUPAC 12th International Conference on	2016/10/14-2016/10/19	国外	○
30	「Computational description of charge dissociation in organic photovoltaics」	藤井幹也	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	○
31	International workshop on numerical methods and simulations for materials design and strongly correlated quantum matters	藤井幹也	Charge separation pathway via highly excited electronic states in organic photovoltaics	2017/3/24-2017/3/25	国内	○
32	Structural and Electronic Features of Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Clusters and Surfaces: Insights from First Principles	山下 晃一	ギリシャ(ICCMSE2017)	2017/4/21-4/25	国外	○
33	計算科学を駆使した水分解光触媒の機能解析と材料探索	山下 晃一	富士通労働組合会館(ユニオンビル) 電子セラミック・プロセス研究会 「人工光合成技術に関する最新研究開発動向」	2017年6月	国内	○

サブ課題B: エネルギーの変換・貯蔵—電気エネルギー

サブ課題代表者: 杉野 修

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの場 合○を記入）
1	Assessing the accuracy of the van der Waal density functionals for rare gas and molecular systems	M. Galsen and I. Hamada	Phys. Rev. B 91, 195103	2015年5月	国外	○
2	A single-atom-thick TiO ₂ nanomesh on an insulating oxide	T. Ohsawa, M. Saito, I. Hamada, R. Shimizu, K. Iwaya, S. Shiraki, Z. Wang, Y. Ikuhara, T. Hitosugi	ACS Nano 9, 8766-8772	2015年8月	国外	○
3	Recent progress in predicting structural and electronic properties of organic solids with the van der Waals density functional	S. Yanagisawa, K. Okumura, T. Inaoka, and I. Hamada	J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 204, 159-167	2015年10月	国外	○
4	Tuning the van der Waals Interaction of Graphene with Molecules via Doping	F. Huttmann, A. J. Martínez-Galera, V. Caciuc, N. Atodiresei, S. Schumacher, S. Standop, I. Hamada, T. O. Wehling, S. Blügel, T. Michely	Phys. Rev. Lett. 115, 236101	2015年12月	国外	○
5	Adsorption of reaction of H ₂ S on Cu(110) with scanning tunneling microscope	A. Shiotari, S. Hatta, H. Okuyama, T. Aruga, and I. Hamada	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 4541-4546	2016年1月	国外	○
6	First-Principles Study of Ion Diffusion in Perovskite Solar Cell Sensitizers	J. Haruyama, K. Sodeyama, L. Han, Y. Tateyama	J. Am Chem. Soc., 137, 10048-10051	2015年8月	国外	○
7	Surface Properties of CH ₃ NH ₃ PbI ₃ for Perovskite Solar Cell	J. Haruyama, K. Sodeyama, L. Han, Y. Tateyama	Acc. Chem. Res., 49, 554-556	2016年2月	国外	○
8	Corrosion Prevention Mechanism of Aluminum Metal in Superconcentrated Electrolytes	Yuki Yamada, Ching Hua Chiang, Keitaro Sodeyama, Jianhui Wang, Yoshitaka Tateyama, Atsuo Yamada	ChemElectroChem 2, 1687-1694	2015年7月	国外	○
9	A method to calculate redox potentials relative to the normal hydrogen electrode in nonaqueous solution by using density functional theory-based	Ryota Jono, Yoshitaka Tateyama, Koichi Yamashita	Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 27103	2015年9月	国外	○
10	Near-Shore Aggregation Mechanism of Electrolyte Decomposition Products to Explain Solid Electrolyte Interphase Formation	Keisuke Ushirogata, Keitaro Sodeyama, Zdenek Futera, Yoshitaka Tateyama, Yukihiro Okuno	J. Electrochem. Soc. 162, A2670-A2678	2015年10月	国外	○

11	Investigating crystalline-polarity-dependent electronic structures of GaN by hard x-ray photoemission and ab-initio calculations	Takeo Ohsawa, Shigenori Ueda, Motohiro Suzuki, Yoshitaka Tateyama, Jesse R. Williams, Naoki Ohashi	Appl. Phys. Lett. 107, 171604	2015年10月	国外	○
12	Conservation of the pure adiabatic state in Ehrenfest dynamics of the photoisomerization of molecules	Yoshiyuki Miyamoto, Yoshitaka Tateyama, Norihisa Oyama, Takahisa Ohno	Sci. Rep. 5, 18220	2015年12月	国外	○
13	First-principles study on the cosensitization effects of Ru and squaraine dyes on a TiO ₂ surface	Yusuke Ootani, Keitaro Sodeyama, Liyuan Han, Yoshitaka Tateyama	Surf. Sci. 649, 66-71	2016年2月	国外	○
14	Sodium-Ion Intercalation Mechanism in MXene Nanosheets	Satoshi Kajiyama, Lucie Szabova, Keitaro Sodeyama, Hiroki Iinuma, Ryohei Morita, Kazuma Gotoh, Yoshitaka Tateyama, Masashi Okubo, Atsuo Yamada	ACS Nano 10, 3334-3341	2016年2月	国外	○
15	Life of superoxide in aprotic Li-O ₂ battery electrolytes: simulated solvent and counter-ion effects	Johan Scheers, D. Lidberg, Keitaro Sodeyama, Zdenek Futera, Yoshitaka Tateyama	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 9961-9968	2016年2月	国外	○
16	A Study on Electrolytic Corrosion of Boron-Doped Diamond Electrodes when Decomposing Organic Compounds	Takeshi Kashiwada, Takeshi Watanabe, Yusuke Ootani, Yoshitaka Tateyama, Yasuaki Einaga	ACS Appl. Mater. Interfaces	2016年3月	国外	○
17	Decomposition of the fluoroethylene carbonate additive and the glue effect of lithium fluoride products for the solid electrolyte interphase: an ab initio study	Yukihiro Okuno, Keisuke Ushirogata, Keitaro Sodeyama, Yoshitaka Tateyama	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 8643-8653	2016年3月	国外	○
18	Improving DIIS convergence for metallic systems using Gaussian basis set	David Sulzer, Satoru Iuchi, Koji Yasuda	Chemical Physics Letters 635 (2015) pp. 201-204	2015年7月	国外	○
19	Molecular dynamics study of the structure of anionic SDS, cationic DTAC, zwitterionic DDAO, and nonionic C12E8 spherical micelles in solution	Noriyuki Yoshii, Kazushi Fujimoto, Susumu Okazaki	J. Mol. Liq.	2015年12月	国外	○
20	Molecular dynamics study of the formation mechanisms of ionic SDS and nonionic C12E8 micelles and n-dodecane droplets	Shinji Kawada, Mika Komori, Kazushi Fujimoto, Noriyuki Yoshii, Susumu Okazaki	Chem. Phys. Lett.	2016年1月	国外	○
21	A molecular dynamics study of the breathing and deforming modes of the spherical ionic SDS and nonionic C12E8 micelles	Lin Wang, Kazushi Fujimoto, Noriyuki Yoshii, and Susumu Okazaki	J. Chem. Phys.	2016年1月	国外	○
22	Molecular dynamics study of lipid bilayers modeling the plasma membranes of mouse hepatocytes and hepatomas	Y Andoh, N Aoki, S Okazaki	J. Chem. Phys.	2016年2月	国外	○

23	"Toward full simulation of the electrochemical oxygen reduction reaction on Pt with first-principles and kinetic calculations"	Tamio Ikeshoji and Minoru Otani	PCCP	to be published	国外	○
24	Ab-initio molecular dynamics of solvation effects on reactivity at electrified interfaces	J.A. Herron, Y. Morikawa, and M. Mavrikakis	Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 113, E4937-E4945 (2016)	2016年8月	国外	○
25	Superconcentrated electrolytes for a high-voltage lithium-ion battery	Jianhui Wang, Yuki Yamada, Keitaro Sodeyama, Ching Hua Chian, Yoshitaka Tateyama, Atsuo Yamada	Nat. Commun., 7, 12032 (2016)	2016年6月	国外	○
26	Catalytic Proton Dynamics at the Water/Solid Interface of Ceria Supported Pt Clusters	Matteo Farnesi Camellone, Fabio Negreiros Ribeiro, Lucie Szabova, Yoshitaka Tateyama, Stefano Fabris	J. Am Chem. Soc., 138, 11560-11567 (2016)	2016年7月	国外	○
27	Hydrate-melt electrolytes for high-energy-density aqueous batteries	Yuki Yamada, Kenji Usui, Keitaro Sodeyama, Seongjae Ko, Yoshitaka Tateyama, Atsuo Yamada	Nat. Energy, 13, 16129 (2016)	2016年8月	国外	○
28	The Solvation Structure of Lithium Ions in an Ether Based Electrolyte Solution from First-Principles Molecular Dynamics	Martin Callsen, Keitaro Sodeyama, Zdenek Futera, Yoshitaka Tateyama, Ikutaro Hamada	J. Phys. Chem. B, 121 (2016)	2016年12月	国外	○
29	Cation Mixing Properties toward Co Diffusion at the LiCoO ₂ Cathode/ Sulfide Electrolyte Interface in a Solid-State Battery	Jun Haruyama, Keitaro Sodeyama, Yoshitaka Tateyama	ACS Appl. Mater. Interfaces (2016)	2016年12月	国外	○
30	Enhanced Li-Ion Accessibility in MXene Titanium Carbide by Steric Chloride Termination	Satoshi Kajiyama, Lucie Szabova, Hiroki Iinuma, Akira Sugahara, Kazuma Gotoh, Keitaro Sodeyama, Yoshitaka Tateyama, Masashi Okubo, Atsuo Yamada	Adv. Energy Mater., 1601873(2017)	2017年1月	国外	○
31	An Active Site Opening Mechanism in Ion Pair of (pyridylamide) Hf(IV) Catalyst: An Associative Mechanism	K. Matsumoto, K. S. Sandhya, M. Takayanagi, N. Koga, M. Nagaoka	Organometallics, 35 (24) 4099-4105 (2016) DOI: 10.1021/acs.organomet.6b00804	2016年12月	国外	○
32	Na ⁺ Binding Is Ineffective in Forming a Primary Substrate Pocket of Thrombin	I. Kurisaki, M. Nagaoka	The Journal of Physical Chemistry B, 120 (46) 11873-11879 (2016) DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b07827	2016年5月	国外	○
33	Formation of Reactant Complex Structure for Initiation Reaction of Lactone Ring-Opening Polymerization by Cooperation of Multiple Cyclodextrin	M.Takayanagi, S.Ito, K.Matsumoto, M.Nagaoka	The Journal of Physical Chemistry B, 120 (29) 7174-7181 (2016) DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b04372	2016年7月	国外	○
34	Additive Effect of Fluoroethylene and Difluoroethylene Carbonates for the Solid Electrolyte Interphase Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Quantum Chemical Study	U.Purushotham, N.Takenaka, M.Nagaoka	RSC Advances, 6, 65232-65242 (2016) DOI: 10.1039/C6RA09560G	2016年7月	国外	○
35	Revisiting the Stereochemistry of Propylene Isotactic Polymerization Reaction Mechanism on C2 symmetric [SiH ₂ (Ind) ₂ ZrCH ₃] ⁺ and [SiH ₂ (Ind) ₂ ZrCH ₃] ⁺ [CH ₃ B(C ₆ F ₅) ₃] ⁻	S.K. Sankaran, N.Koga, M.Nagaoka	Bulletin of the Chemical Society of Japan, 89 1093-1105 (2016) DOI:http://dx.doi.org/10.1246/bcsj.20160119	2016年6月	国外	○
36	The Bound Na ⁺ is Negative Effector for Thrombin-Substrate Stereospecific Complex Formation	I.Kurisaki, M.Takayanagi, M.Nagaoka	The Journal of Physical Chemistry B, 120 (20) 4540-4547 (2016) DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b00976	2016年5月	国外	○

37	A Transformation Theory of Stochastic Evolution in Red Moon Methodology to Time Evolution of Chemical Reaction Process in the Full Atomistic System	Y. Suzuki, M. Nagaoka	The Journal of Chemical Physics, 146, 204102	2017年5月	国外	○
38	Evaluation of atomic pressure in the multiple time-step integration algorithm	Y Andoh, A. Yamada, N. Yoshii, S Okazaki	J. Comput. Chem.	2017年1月	国外	○
39	Detailed structural analysis of a self-assembled vesicular amphiphilic NCN-pincer Palladium complex by using wide-angle X-ray scattering and molecular dynamics calculations	G. Hamasaka, T. Muto, Y. Andoh, K. Fujimoto, K. Kato, M. Takata, S. Okazaki, Y. Uozumi	Chemistry-A European Journal	2016年12月	国外	○
40	A molecular dynamics study of local pressures and interfacial tensions of SDS micelles and dodecane droplets in water micelles and dodecane droplets in water	Masahiro Kitabata, Kazushi Fujimoto, Noriyuki Yoshii, and Susumu Okazaki	J. Chem. Phys.	2016年6月	国外	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

(1)口頭発表

No.	発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」全体計画	岡崎 進	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
2	サブ課題B「エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギー」研究計画概要	杉野 修	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
3	サブ課題B 研究事例「「京」を用いたリチウムイオン電池内機構の第一原理シミュレーション」	館山 佳尚	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
4	Computational Molecular Technology towards Macroscopic Chemical Phenomena -Molecular Control of Complex Chemical Reactions, Stereospecificity and Aggregate Structures-	M. Nagaoka	11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2015) (Athens/Greece)	2015年3月	国外	
5	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-複合化学反応・立体特異性・集合体構造の分子制御-	長岡 正隆	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
6	「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」全体計画	岡崎 進	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
7	サブ課題B「エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギー」研究計画概要	杉野 修	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
8	サブ課題B 研究事例「ポスト京コンピュータに向けたソフトウェアMODYLASの開発」	安藤 嘉倫	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
9	First-Principles Investigation on Oxide Cathode/Sulfide Electrolyte Interfaces in All-Solid-State Li-Ion Batteries	春山潤, 袖山慶太郎, 高田和典, 館山佳尚	第10回GREENシンポジウム	2015年6月	国内	

10	First-Principles Investigation of LiCoO ₂ /Sulfide Interfaces for All-Solid-State Li-Ion Batteries	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	The 9th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-9)	2015/10/19-2015/10/21	国内	
11	全固体電池におけるLiCoO ₂ 正極/硫化物電解質界面のCo拡散に関する第一原理計算	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	第41回固体イオニクス討論会	2015/11/25-2015/11/27	国内	
12	ペロブスカイト太陽電池増感材としてのヨウ化鉛メチルアンモニウムの表面安定構造と電子物性	春山潤、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	第35回表面科学学術講演会	2015/12/1-2015/12/3	国内	
13	ペロブスカイト太陽電池光吸収層材料のイオン伝導障壁の第一原理計算	春山潤、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	日本物理学会第71回年次大会	2016/3/19-2016/3/22	国内	
14	DFT study on surface and interface states of tetragonal CH ₃ NH ₃ PbI ₃ for understanding interfacial charge transfer	館山佳尚、春山潤、韓礼元、袖山慶太郎	International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics (HOPV15)	2015/05/10 - 2015/05/15	国外	
15	DFT-MD study on highly concentrated Li-salt electrolyte: A new class of electrolyte for batteries	館山佳尚、袖山慶太郎	Workshop on Materials Science for Energy Storage	2015/05/11-2015/05/15	国外	
16	金属-CeO ₂ 表面系における水吸着・解離に関する第一原理計算研究	館山佳尚, Lucie Szabova, Stefano Fabris	第116回触媒討論会	2015/09/16-2015/09/18	国内	
17	TiO ₂ 表面上におけるRu/squaraine色素とも増感効果の第一原理計算解析	大谷優介、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	第9回分子科学討論会	2015/09/16-2015/09/19	国内	
18	First-principles study of Li-ion diffusion mechanism in highly concentrated Li-salt electrolyte	袖山慶太郎、山田裕貴、山田淳夫、館山佳尚	228th ECS Meeting	2015/10/11-2015/10/15	国外	
19	第一原理分子動力学法を用いた高濃度電解液におけるLiイオン拡散メカニズムの解明	袖山慶太郎、山田裕貴、山田淳夫、館山佳尚	第56回電池討論会	2015/11/11-2015/11/13	国内	
20	二次電池負極表面における固体電解液相間 (SEI) 膜形成機構の理論的研究	竹中 規雄, 鈴木雄一, 酒井裕史, Purushotham Uppula, 長岡 正隆	第18回理論化学討論会	2015年5月	国内	
21	Theoretical Analysis of the Electron Injection Rate in the Dye-Sensitized Solar Cells	Koji Yasuda	The 6th JCS (Japan-Czech-Slovakia) Symposium on Theoretical Chemistry	2015年10月	国外	
22	Naイオン電池の固体電解液相間 (SEI) 膜形成に対するFEC添加効果に関する理論的研究	竹中 規雄, Purushotham Uppula, 鈴木 雄一, 長岡 正隆	第56回電池討論会	2015年11月	国内	
23	Additive Effect of Difluoroethylene Carbonate for the Solid Electrolyte Ineterphase Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Computational Chemical Study	Purushotham Uppula, 竹中 規雄, 長岡 正隆	第56回電池討論会	2015年11月	国内	
24	Computational Molecular Technology towards Macroscopic Chemical Phenomena: Molecular Control of Complex Chemical Reactions, Stereospecificity and Aggregate Structures	Masataka Nagaoka	Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	
25	高速多重極展開法における圧力テンソル	吉井範行・安藤嘉倫・岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会	2015年11月	国内	

26	高分子の衝撃破壊II: ポリエチレン破断の全原子シミュレーション	藤本和士, 服部智成, 中垣雅之, 榊茂好, 篠田涉, 岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会	2015年12月	国内	
27	サブ課題B「エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギー」オーバービュー	杉野 修	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
28	サブ課題B 研究事例「酸化物系電極触媒ZrO ₂ における酸素還元反応」	山本 良幸	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
29	「計算科学は電極反応を正確に記述できるか?: 計算屋からの視点」	杉野 修	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ: 触媒元素戦略研究との連携を求めて	2016/11/29-2016/11/30	国内	
30	「第一原理シミュレーションによる固体触媒表面上でのNO, CO, CO ₂ 分子の吸着と反応過程の研究」	森川 良忠	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ: 触媒元素戦略研究との連携を求めて	2016/11/29-2016/11/30	国内	
31	「正方晶ZrO ₂ (101)表面における水分子吸着構造の被覆率依存性」	山本 良幸	日本物理学会2016年秋季大会	2016/9/13-2016/9/16	国内	
32	“First-principles study of oxygen reduction reaction on the tetragonal ZrO ₂ (101) surface”	山本 良幸	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
33	第一原理計算を基盤とした酸化物触媒の活性メカニズム解析	笠松秀輔	触媒学会界面分子変換研究会・日本表面科学会触媒表面科学研究部会合同ワークショップ 「放談会: 触媒研究の最前線と未来」	2017年3月	国外	
34	サブ課題B 研究事例「stat-CPMDを用いたリチウムイオン電池界面被膜に関する第一原理計算研究」	館山 佳尚	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
35	ボロンドープダイヤモンド(Boron-Doped Diamond:BDD)電極によるOHラジカル発生機構	館山佳尚、Zdenek Futera、渡辺剛志、栄長泰明	第118回触媒討論会	2016/09/21 - 2016/09/23	国内	
36	第一原理計算による層状化合物MXene負極へのカチオン挿入機構の解析	Lucie Szabova、袖山慶太郎、梶山智司、大久保将史、山田淳夫、館山佳尚	第57回電池討論会	2016/11/29-2016/12/1	国内	
37	第一原理計算による全固体Liイオン電池のLiCoO ₂ 正極/硫化物電解質界面のCo拡散の研究	春山潤、袖山慶太郎、館山佳尚	日本物理学会2016年秋季大会	2016/09/13 - 2016/09/16	国内	
38	First-Principles Study on LiCoO ₂ /Sulfide Interfaces in All-Solid-State Li-Ion Battery: Space-Charge Layer and Interfacial Co Mixing	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	PRiME 2016/230th ECS Meeting	2016/10/02 - 2016/10/07	国外	
39	第一原理計算を用いたLiCoO ₂ 正極/Li3PS4電解質界面のCo拡散機構の研究	春山潤、袖山慶太郎、館山佳尚	第57回電池討論会	2016/11/29 - 2016/12/01	国内	
40	第一原理計算を用いたヨウ化鉛メチルアンモニウム/酸化チタン界面の研究	春山潤、袖山慶太郎、館山佳尚	日本物理学会第72回年次大会	2017年3月	国内	

41	First-principles study on effects of buffer layer, Li depletion, and ion mixing at interfaces between LiCoO ₂ and sulfide electrolyte in all-solid-state battery	Yoshitaka Tateyama, Jun Haruyama, Keitaro Sodeyama	21st International Conference on Solid State Ionics (SSI-21)	2017/6/18-2017/6/23	国外	
42	密度汎関数法計算に基づくラジカル重合反応シミュレーションによるポリメタクリル酸メチル立体規則性の解析	高柳 昌芳・松本 健太郎・長岡 正隆	日本化学会第97回春季年会(横浜市)	2017年3月16日～19日(16日)	国内	
43	An active site opening mechanism in ion pair of (pyridylamide)Hf(IV) catalyst: An associative mechanism	K.Matsumoto,S.K.SANKARAN,M.Takayanagi, N.Koga, NAGAOKA, M.Nagaoka	日本化学会第97回春季年会(横浜市)	2017年3月16日～19日(17日)	国内	
44	サブ課題B 研究事例「電極反応の複合効果を考慮した被膜形成シミュレーション手法の開発」	長岡 正隆	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
45	The Electronic Transitions of Paranitrophenol and Paranitrophenolate in Gas and Water: A Study Combining Ab Initio Multiconfigurational Calculations and the Free Energy Gradient Method	ビスタファカルロス、北村 勇吉、長岡正隆、カストシルヴィオ C.Bistafa, Y.Kitamura, M.Nagaoka, S.Canuto	複雑・複合系の理論計算科学に関する 日・仏・スペイン合同シンポジウム(京都大学福井謙一記念研究センター)	2016年10月26日～28日(26日)	国内	
46	Theoretical Study on Solid Electrolyte Interphase (SEI) Film Formation in Secondary Batteries	N.Takenaka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (11日)	国内	
47	Dual Approach to Vibrational Spectra in Solution: Microscopic Influence of Hydrogen Bonding to the State of Motion of Glycine in Water	Y.Kitamura, N.Takenaka, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2017)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (11日)	国内	
48	Theoretical Study on Behaviors of Host PCP and Guest Methyl Methacrylate toward Understanding Tacticity Control Mechanism	M.Takayanagi	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2018)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
49	Combining Sequential-QM/MM and Free Energy Gradient Methods to Obtain Excited State Geometries in Solvent at Reasonable Computational Cost	C.Bistafa	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2019)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
50	ピンサー型Hf錯体を用いたオレフィン重合反応における対アニオンの活性点占有挙動	松本健太郎, S.K.Sankaran, 高柳昌芳, 古賀伸明, 長岡正隆	第5回分子科学討論会(神戸ファッションマート)	2016年9月13日～15日(15日)	国内	
51	トロンビンのNa ⁺ 結合空洞が基質結合ポケットの脱水和に果たす役割	栗崎以久男, C.Barberot, 高柳昌芳, 長岡正隆	第19回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日～25日(23日)	国内	
52	分子動力学計算における高速多重極展開法の拡張	吉井範行、安藤嘉倫、岡崎進	第19回理論化学討論会	2016年5月23～5月25日	国内	
53	分子動力学計算ソフトウェアMODYLASのメニーコアアーキテクチャ対応並列化に関する研究(オーガナイズドセッション)	安藤嘉倫, 大島聡史, 鈴木惣一郎	HPCS2016	2016年6月6日～6月7日	国内	
54	異方性のある系に対する高速多重極展開法	吉井範行・安藤嘉倫・岡崎進	第10回分子科学討論会	2016年9月13日～9月15日	国内	
55	Molecular dynamics study on the morphology of hydrated perfluorosulfonic acid membranes	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	第10回分子科学討論会	2016年9月13日～9月15日	国内	

56	マルチタイムステップ数値積分法 (RESPA) に基づく分子動力学計算での圧力値算出における問題	安藤嘉倫, 吉井範行, 山田篤志, 岡崎進	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月30日~12月2日	国内	
57	「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」全体計画・進捗	岡崎進	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15~2016/12/16	国内	
58	サブ課題B 研究成果「MODYLASの開発を促進するためのリファクタリングと新機能の追加」	坂下達哉	文部科学省 ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016年12月15日~12月16日	国内	
59	肝臓細胞膜を模した脂質二重層膜の全原子分子動力学計算	安藤嘉倫, 青木則之, 岡崎進	第10回分子科学討論会	2016年9月13日~9月15日	国内	
60	Effect of the hydration on the morphology of the perfluorosulfonic acid polymer membrane with molecular dynamics simulations	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	第67回コロイドおよび界面化学討論会	2016年9月22日~9月24日	国内	
61	Molecular simulation study of perfluorosulfonic acid polymer membranes using multi-scale molecular modeling	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	第65回高分子討論会	2016年9月14日~9月16日	国内	
62	Coarse-grained modeling of polymer electrolyte membranes	Wataru Shinoda, An-Tsung Kuo, Susumu Okazaki	2016 AIChE Annual Meeting	2016年11月13日~11月18日	国外	
63	ミセル、ヘキサゴナル、膜構造における界面活性剤分子の拡散および集団運動	吉井範行・岡崎進	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月30日~12月2日	国内	

(2)ポスター発表

No.	発表した成果 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Theoretical Investigation at Oxide Cathode/Sulfide Electrolyte Interfaces for All-Solid-State Li-Ion Batteries、	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	つくばエポカル (MANA International Symposium 2015)	2015年3月	国内	
2	First-principles simulations of water dissociation and adsorption of OH groups under a ClO4 molecule on Pt (322) stepped surface	木崎栄年、濱田幾太郎、森川良忠	114th General Assembly of the German Bunsen Society for Physical Chemistry ドイツ (ポッフム)	2015年5月	海外	
3	Electrode - electrolyte interface under controlled chemical potential	杉野修	スペイン (サン・セバスチャン) Psi-K 2015 congress	2015年9月	海外	
4	Space-Charge Layer Effect at Interfaces of Oxide Cathode/Buffer Layer/Sulfide Electrolyte in All-Solid-State Lithium-Ion Battery	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	Psi-k 2015 Conference	2015/9/6~2015/9/10	国外	
5	First-Principles Study of LiCoO ₂ /Sulfide Interfaces for Solid-State Li-Ion Batteries	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	MANA シンポジウム	2015年10月	国内	
6	第一原理計算を用いたリチウムイオン二次電池正極/電解質界面の研究	春山潤、館山佳尚、木野日織	第2回HPCI成果報告会	2015年10月	国内	
7	First-Principles Investigation of Oxide Cathode/Sulfide Electrolyte Interfaces	春山潤	第2回東北大 & GREEN 合同シンポジウム (The 11th GREEN Symposium)	2015年10月	国内	

8	Oxide Cathode/Sulfide Electrolyte Interfaces in All-Solid-State Li-Ion Batteries: A First-Principles Investigation	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	The 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations	2015/11/25-2015/11/27	国内	
9	Co-sensitizer effect of black (N749) dye by DFT molecular dynamics investigations of TiO ₂ (101)/black dye/acetonitrile interfaces	館山佳尚、大谷優介、相川小春、韓礼元、袖山慶太郎	International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics (HOPV15)	2015/05/10-2015/05/13	国外	
10	A novel Double-QM/MM method for donor-acceptor electron transfer in solution	館山佳尚、Zdenek Futera、袖山慶太郎	Psi-k 2015 Conference	2015/09/06-2015/09/10	国外	
11	Formation Processes of Solid Electrolyte Interphase at Electrode Interfaces in Lithium-Ion Battery	館山佳尚、後瀉敬介、袖山慶太郎、奥野幸洋	Psi-k 2015 Conference	2015/09/06-2015/09/10	国外	
12	Density Functional Theory Investigation of Co-sensitization Effect in Ru/Organic Dye-Sensitized Solar Cell	大谷優介、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics	2015/05/10-2015/05/13	国外	
13	色素増感太陽電池におけるRu/有機色素混合系の共増感効果	大谷優介、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	物性研究所 短期研究会 機能物性融合科学研究会シリーズ(3)「反応と輸送」	2015/06/24-2015/06/26	国内	
14	DFT study of the effect of cosensitization with Ru and squaraine dye on a TiO ₂ surface	大谷優介、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	MANA-RSC symposium: Materials for Energy Generation and Storage	2015/10/15-2015/10/16	国内	
15	Density functional theory investigation of Ru/organic dye co-sensitized TiO ₂ surface for solar cell application	大谷優介、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	THE INTERNATIONAL CHEMICAL CONGRESS OF PACIFIC BASIN SOCIETIES 2015	2015/12/15-2015/12/20	国外	
16	DFT-MD study of highly concentrated Li-salt electrolyte for electrochemically stable and fast-charging lithium-ion batteries	袖山慶太郎	PSI-K 2015 CONFERENCE	2015/09/06-2015/09/10	国外	
17	DFT-MD study of highly concentrated Li-salt electrolyte for electrochemically stable and fast-charging Li-ion batteries	袖山慶太郎、山田裕貴、山田淳夫、館山佳尚	The 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations	2015/11/09-2015/11/11	国内	
18	配位子および置換基効果に基づく青色燐光Ir 錯体の理論設計	吉長 晴信、麻田 俊雄、小関 史朗、松下 武司	第18回理論化学討論会	2015年5月	国内	
19	Toward Improvement of DSSC through Calculation of Lifetime	David Sulzer, Satoru Iuchi, Koji Yasuda	The satellite symposium of International Congress of Quantum Chemistry 2015: Novel computational methods for quantitative electronic	2015年6月	国外	
20	塗布型有機EL素子のための青色燐光罪障の理論設計	吉長 晴信、麻田 俊雄、小関 史朗、松下 武司	第9回分子科学討論会	2015年9月	国内	
21	自由エネルギー解析に基づく加水分解酵素によるbeta-lactam環分解反応の理論的研究	安藤 寛太、麻田 俊雄、小関 史朗	第9回分子科学討論会	2015年9月	国内	
22	Theoretical Analysis of the Electron Injection Rate in the Dye-Sensitized Solar Cells	David Sulzer, Satoru Iuchi, Koji Yasuda	International Symposium on EcoTopia Science 2015	2015年11月	国外	
23	Additive Effect of Difluoroethylene Carbonate on the Solid Electrolyte Interphase Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Quantum Chemical and Hybrid MC/MD Simulation Study	Purushotham Uppala, Norio Takenaka, Masataka Nagaoka	Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	

24	A HIGHLY PARALLELIZED GENERAL-PURPOSE MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION PROGRAM, MODYLAS, AND ITS APPLICATION TO LARGE-SCALE SYSTEMS	Yoshimichi Andoh, Noriyuki Yoshii, Kazushi Fujimoto, Hidekazu Kojima, Atsushi Yamada, Kensuke Iwahashi, Fumiyasu Mizutani and Susumu Okazaki	The 2015 Conference on Foundations of Molecular Modeling and Simulation (FOMMS2015)	2015年7月	国外	
25	量子化学計算による非晶質高分子鎖化学結合切断のポテンシャル開発	服部智成, 藤本和士, 中垣雅之, 榊茂好, 岡崎進	第38回溶液化学シンポジウム	2015年10月	国内	
26	高分子の衝撃破壊I: ポリエチレンの切断ポテンシャルモデルの開発	服部智成, 藤本和士, 中垣雅之, 榊茂好, 篠田渉, 岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会	2015年11月	国内	
27	汎用MD ソフトウェアMODYLAS の異方的なMPI プロセス分割および基本セル分割への拡張	安藤嘉倫, 吉井範行, 岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会	2015年11月	国内	
28	高速多重極展開法における圧力テンソル	吉井範行, 安藤嘉倫, 岡崎進	第29回分子シミュレーション討論会	2015年12月	国内	
29	"A neural network approach to adsorbed structures of water molecules on an oxide surface"	山本 良幸	"TIAかけはし"ポスター交流会 ~計算科学・計測技術・インフォマティクスの融合によるインテリジェント解析~	2016年8月	国内	
30	「正方晶ZrO ₂ (101)表面における水の構造と酸素還元反応活性」	山本 良幸	PCoMS シンポジウム&スパコン共用事業報告会	2016/10/17-10/18	国内	
31	"Oxygen reduction reaction on the defective tetragonal ZrO ₂ (101) surface"	山本 良幸	18th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods	2017/1/12-2017/1/14	国外	
32	サブ課題B 研究事例「CPMDへのDFT-D3実装と有機電解液シミュレーションに向けたvdW相互作用のベンチマーク」	飯塚 将太	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
33	色素増感・ペロブスカイト太陽電池界面の電荷移動機構に関する第一原理計算解析	濱田幾太郎, 館山佳尚, 袖山慶太郎, 大谷優介	第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会	2016年10月	国内	
34	First-principles study for all-solid-state Li-ion battery and perovskite solar cell	春山潤, 袖山慶太郎, 館山佳尚	TIA"かけはし"ポスター交流会	2016年8月	国内	
35	First-Principles Study of Ion Diffusions in CH ₃ NH ₃ PbI ₃ and (NH ₂) ₂ CHPbI ₃ for Perovskite Solar Cells	春山潤, 袖山慶太郎, 韓礼元, 館山佳尚	PRiME 2016/230th ECS Meeting	2016/10/02 - 2016/10/07	国外	
36	第一原理計算を用いたリチウムイオン全固体電池正極/電解質界面の研究	春山潤, 館山佳尚, 木野日織	第3回HPCI成果報告会	2016年10月	国内	
37	Extensive investigations of surface properties of ABO ₃ perovskite materials toward surface machine learning	Shota Iizuka, Sergey Levchenko, Yoshitaka Tateyama, Matthias Scheffler	2017 International Workshop on Electrified Interfaces for Energy Conversions	2017/5/18-2017/5/21	国内	
38	First-principles study on interfaces between sulfide electrolyte and oxide cathode in all-solid-state battery	Yoshitaka Tateyama, Jun Haruyama, Keitaro Sodeyama	Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC17)	2017/6/26-2017/6/28	国外	

39	サブ課題B 研究事例「混合MC/MD反応法による二次電池被膜形成過程の理論的解析」	稲垣 泰一	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
40	混合MC/MD 反応法におけるQM/MM 計算による汎用的エネルギー評価法の開発	藤江 拓哉、竹中 規雄、鈴木 雄一、長岡 正隆	第30回分子シミュレーション討論会(大阪大学豊中キャンパス)	2016年11月30日～12月2日 (12月1日)	国内	
41	アロステリーの概念拡張に向けて:トロンビンのアロステリック制御・再訪	栗崎以久男、高柳昌芳、Chantal Barberot、長岡正隆	第54回生物物理学会(つくば国際会議場)	2016年11月25日～27日 (26日)	国内	
42	Dual Approach to Vibrational Spectra in Solution: Microscopic Influence of Hydrogen Bonding to the State of Motion of Glycine in Water	Y.Kitamura, N.Takenaka, M.Nagaoka	複雑・複合系の理論計算科学に関する日・仏・スペイン合同シンポジウム(京都大学福井謙一記念研究センター)	2016年10月26日～28日 (26日)	国内	
43	On Additive Effect of Solid Electrolyte Interphase (SEI) Film Formation in Sodium-ion Batteries	N.Takenaka, U.Purushotham, M.Nagaoka	複雑・複合系の理論計算科学に関する日・仏・スペイン合同シンポジウム(Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems)(京都大学福井謙一記念研究センター)	2016年10月26日～28日 (26日)	国内	
44	Active Site Opening Mechanism in Olefin Polymerization Reaction Catalyzed by (Pyridylamide)Hf(IV) Complex	K. Matsumoto, S.K.Sankaran, M. Takayanagi, N. Koga, M. Nagaoka	The 5th International Conference on Molecular Simulation (Shanghai, China)	2016年10月23日～26日 (24日)	国外	
45	Anisotropic Behavior of Methyl Methacrylate Monomers in Nanochannels of Porous Coordination Polymers	M.Takayanagi, S.Pakhira, M.Nagaoka	The 6th International Conference on Molecular Simulation (Shanghai, China)	2016年10月23日～26日 (24日)	国外	
46	混合 MC/MD 反応法による二次電池被膜形成過程の理論的解析	竹中 規雄、藤江 拓哉、高柳 昌芳、長岡 正隆	PCoMSシンポジウム & 計算物質科学スパコン共用事業報告会(東北大学片平キャンパス)	2016年10月17日～18日 (17日)	国内	
47	Active Site Opening Mechanism of an Olefin Polymerization Catalyst (pyridylamide)Hf(IV) Complex	K. Matsumoto, S.K.Sankaran, M. Takayanagi, N. Koga, M. Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2020)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
48	Alternative Role of Thrombin Sodium Ion-binding Cavity P11 Additive Effect of Difluoroethylene Carbonate in Sodium-ion Batteries: Its Dual Roles in Solid Electrolyte Interphase Film Properties	I.Kurisaki, M.Takayanagi, C.Barberot, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2021)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
49	Development of Hybrid MC/MD Reaction Method Combined with QM/MM Method: Application to Solid Electrolyte Interphase (SEI) Film Formation in Lithium-ion Batteries	T.Fujie, N.Takenaka, Y.Suzuki, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2022)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (11日)	国内	
50	Critical Role of Deep Hydrogen Tunneling to Accelerate the Antioxidant Reaction of Ubiquinol and Vitamin E	T.Inagaki, T Yamamoto	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2023)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
51	Theoretical Study on the Aromatic Polyamide Membrane Formation: Influence of Monomer Mixing Ratio on Membrane Nanostructure	Y.Suzuki, Y.Koyano, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2024)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
52	トロンビン基質結合ポケットの脱水和におけるNa+結合空洞の役割	栗崎以久男、高柳昌芳、C.Barbero, 長岡正隆	第6回分子科学討論会(神戸ファッションマー	2016年9月13日～15日 (14日)	国内	

53	Naイオン電池の固体電解液相間(SEI)膜形成に対する塩濃度効果の理論的解析	竹中 規雄、長岡 正隆	第7回分子科学討論会(神戸ファッションマー ト)	2016年9月13日～15日 (13日)	国内	
54	ポリメタクリル酸メチルのラジカル重合反応シミュレーションによる立体規則性の解析	高柳 昌芳、松本 健太郎、長 岡 正隆	第8回分子科学討論会(神戸ファッションマー ト)	2016年9月13日～15日 (14日)	国内	
55	QM/MM法を導入した混合MC/MD反応法の開発:二次電池の固体電解液相間(SEI)膜形成への適用	藤江 拓哉、竹中規雄、 鈴木 雄一、長岡 正隆	第9回分子科学討論会(神戸ファッションマー ト)	2016年9月13日～15日 (13日)	国内	
56	エネルギー揺らぎの制御スキームを導入した定pH分子シミュレーション法の開発	北村勇吉、長岡正隆	第10回分子科学討論会(神戸ファッションマー ト)	2016年9月13日～15日 (14日)	国内	
57	混合MC/MD反応法における化学反応過程の実時間解釈: 二次の可逆反応系への適用	鈴木 雄一、長岡 正隆	第20回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日～25日 (24日)	国内	
58	(Pyridylamide)Hf(IV)錯体の活性化機構におけるイオンペア解離過程の分子動力学的研究	松本健太郎, S.K. Sankaran, 高柳昌芳, 古賀伸明, 長岡正隆	第21回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日～25日 (24日)	国内	
59	The Dissociation Free Energy of [CH ₃ B(C ₆ F ₅) ₃][H ₂ SiCp ₂ ZrMe(C ₂ H ₄)] ion Pair Catalyst in Molecular Dynamics Simulation (分子動力学シミュレーションによる [CH ₃ B(C ₆ F ₅) ₃][H ₂ SiCp ₂ ZrMe(C ₂ H ₄)] イオン対の解離自由エネルギーに関する研究)	S.K. Sankaran, M.Takayanagi, N.Koga, M.Nagaoka	第22回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日～25日 (23日)	国内	
60	A Role of Monomer Molecule in an Active Site Opening Process of Olefin Polymerization Catalyst (Pyridylamide)Hf(IV) Complex	K. Matsumoto, M. Takayanagi, S. K. Sankaran, N. Koga, M. Nagaoka	Strasbourg, France(1st Molecular Technology Workshop)	2017年6月28日～30日 (28, 29 日)	国外	
61	Analysis on MMA Monomer Behavior in PCP Nanochannels toward Quantitative	M. Takanagi, S. Pakhira, K. Matsumoto, M. Nagaoka	Strasbourg, France(1st Molecular Technology Workshop)	2017年6月28日～30日 (28, 29 日)	国外	
62	(pyridylamide)Hf(IV)触媒によるプロピレン重合反応にお ける対アニオン効果	松本 健太郎、高柳 昌芳、 S. K. Sankaran、古賀 伸 明、長岡 正隆	名古屋大学 (第33回化学反応討論会)	2017年6月7日～9日 (8日)	国内	
63	高濃度電解液を用いたLiイオン電池の固体電解液相間(SEI) 膜形成機構の理論的解析	竹中 規雄、藤江 拓哉、長 岡 正隆	京都大学 (第20回理論化学討論会)	2017年5月16日～18日 (16日)	国内	
64	A mechanism of the formation of zwitter ionic DDAO spherical micelles studied by molecular dynamics calculations	藤本 和士、久保洋介、吉井 範行、岡崎 進	Joint EMLG/JMLG Annual Meeting 2016	2016年9月11日～9月16日	国外	
65	An attempt to estimate correct atomic pressure in the multiple time-step integration algorithm	Y. Andoh, N. Yoshii, A. Yamada, and S. Okazaki	ICMS2016	2016年10月23日～10月26日	国内	
66	サブ課題B 研究事例「高速多重極展開法の拡張」	吉井 範行	文部科学省 ポスト「京」重点課題5エネルギー の高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基 盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016年12月15日～12月16日	国内	
67	高分子材料の大規模分子動力学計算に向けたMODYLASの拡 張	安藤嘉倫	文部科学省 ポスト「京」重点課題5エネルギー の高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基 盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016年12月15日～12月16日	国内	

68	分子動力学シミュレーションによる高分子材料破壊の分子機構の解明と破壊シミュレーション手法の確立	藤本 和士	第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会	2016年10月	国内	
69	リン脂質二重層膜中でのコレステロール間側方相互作用のリン脂質種依存性	松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進	第39回溶液化学シンポジウム	2016年11月9日～11月11日	国内	
70	親水性および疎水性の異なる直鎖界面活性剤分子添加によるDMPC脂質二重層膜の物性変化	鬼頭咲帆, 安藤嘉倫, 岡崎進	第39回溶液化学シンポジウム	2016年11月9日～11月11日	国内	
71	atomistic simulation study on the morphology of the hydrated perfluorosulfonic acid membrane	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	2016 AIChE Annual Meeting	2016年11月13日～11月18日	国外	
72	parameterization of a coarse grained model for perfluorosulfonic acid polymer	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	2016 AIChE Annual Meeting	2016年11月13日～11月18日	国外	
73	リン脂質二重層膜中でのコレステロール間側方相互作用のリン脂質種依存性	松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月30日～12月2日	国内	
74	All-atom and coarse-grained molecular simulations for perfluorosulfonic acid polymer membranes	○An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	IPC2016	2016年12月13日～12月16日	国外	

(3)招待講演

No.	発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 （○を記入）
1	Electrochemical systems simulated by First-principles molecular dynamics simulations	大谷実	スペイン（サン・セバスチャン） Psi-K 2015 congress	2015年9月	海外	○
2	Bias Potential Controlled First-Principles Calculations in Batteries and Energy Storage Devices	大谷実	米国（フェニックス） 228th ECS Meeting	2015年10月	海外	○
3	Electrochemical interface from ab initio molecular dynamics simulation	杉野 修	米国（フェニックス） MRS2016 Spring meeting	2016年3月	海外	○
4	LIB の酸化還元反応、電極被膜、イオン伝導に対する第一原理計算アプローチ	館山佳尚	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム設立シンポジウム	2015年4月	国内	○
5	DFT-MD Simulations Reveal Novel Mechanisms of Electrolyte and Electrode Interface in Li-ion Battery	館山佳尚	MOST-NIMS Workshop	2015/04/21 - 2015/04/23	国内	○
6	リチウムイオン電池電極-電解質界面の第一原理計算研究	館山佳尚	講演会「計算と実験による蓄電池材料研究」	2015年4月	国内	○
7	DFT study on surface and interface states of tetragonal CH ₃ NH ₃ PbI ₃ for understanding interfacial charge transfer	館山佳尚	第10回 NIMS GREENシンポジウム	2015年6月	国内	○
8	固液界面・酸化還元・電気化学反応の第一原理計算	館山佳尚	第55回分子科学若手の会夏の学校	2015/08/17-2015/08/21	国内	○

9	Surface termination & ion migration of perovskite materials	館山佳尚	CECAM workshop: Perovskite solar cells: the quest for a theoretical description	2015/08/25-2015/08/27	国外	○
10	Lithium space-charge layer at interfaces between oxide cathode and sulfide electrolyte for interfacial resistance in all solid state lithium ion battery: A DFT simulation study	館山佳尚	The 11th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM11)	2015/08/30-2015/09/04	国外	○
11	固液界面酸化還元反応の第一原理計算解析	館山佳尚	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム	2015年9月	国内	○
12	DFT-MD Study on Formation Processes of Solid Electrolyte Interphase at Negative Electrode Interfaces in Lithium-Ion Battery	館山佳尚	MANA-RSC symposium: Materials for Energy Generation and Storage	2015/10/04-2015/10/09	国外	○
13	第一原理計算に基づく表面・界面の計算科学	館山佳尚	関西接着ワークショップ 2015年度 第2回研究会	2015年10月	国内	○
14	DFT samplings reveal atomistic mechanisms in electrolyte and at electrode interface in Li-ion battery	館山佳尚	MANA-RSC symposium: Materials for Energy Generation and Storage	2015/10/15-2015/10/16	国内	○
15	固液界面反応に関する第一原理計算アプローチ：現状と展望	館山佳尚	第6回真空・表面科学若手研究会	2015年12月	国内	○
16	Semiconductor-water interfaces investigated by first principles calculations of boron doped diamond	館山佳尚	Pacificchem2015	2015/12/15-2015/12/20	国外	○
17	Elucidation of complicated reactions around electrolyte - electrode interfaces in Li-ion battery	館山佳尚	Pacificchem2015	2015/12/15-2015/12/20	国外	○
18	『京』で見たリチウムイオン電池の電解液分解反応 新規電解液の探索に向けて	袖山慶太郎	第29期CMMフォーラム 本例会	2015年11月	国内	○
19	「京」を用いたリチウムイオン電池の電解液反応解析：マテリアルズ・インフォマティクスによる材料探索に向けて	袖山慶太郎	第14回学融合ビジュアライゼーションシンポジウム	2016年3月	国内	○
20	First-Principles Simulation of Electrochemical Reactions at Solid/Liquid Interface: From a Microscopic Analysis to the Current-Voltage Characteristic Curve	大谷実	The 67th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry	2016/08/21-2016/08/26	国外	○
21	Ab-initio MD simulations of redox reactions of liquid electrolytes and SEI formation	館山佳尚	CPMD2016 Conference	2016/05/18 - 2016/05/20	国外	○
22	スパコンを用いた二次電池電解液・電極界面の微視的機構研究	館山佳尚	第381回電池技術委員会	2016年6月	国内	○
23	Ab-initio MD simulations of redox reactions of liquid electrolytes and SEI formation	館山佳尚	IMLB2016 (18th International Meeting on Lithium Batteries)	2016/06/19 - 2016/06/24	国外	○
24	二次電池電解液・電極界面の計算材料科学	館山佳尚	日本物理学会2016年秋季大会	2016/09/13 - 2016/09/16	国内	○

25	計算科学技術支援による蓄電池機構解明と材料設計	館山佳尚	NIMS WEEK 2016	2016/10/20 - 2016/10/21	国内	○
26	Surface termination & ion migration of perovskite materials for carrier transport and aging	館山佳尚	ENGE2016	2016/11/06-2016/11/09	国外	○
27	DFT molecular dynamics studies on battery materials: SEI film and superconcentrated electrolyte	館山佳尚	IWAMSN2016	2016/11/08-2016/11/12	国外	○
28	高濃度Li塩電解液の反応解析:リチウムイオン電池の新規電解液材料探索に向けて	袖山慶太郎	第一回材料設計討論会	2016年8月	国内	○
29	Superconcentrated electrolytes for electrochemically stable and fast-charging lithium-ion batteries: first-principles molecular dynamics study	袖山慶太郎	11th Japan-France joint seminar on batteries	2016/9/20-2016/9/22	国外	○
30	マテリアルズ・インフォマティクスによるLiイオン電池の高濃度電解液探索	袖山慶太郎	PF研究会「測定しているけど見えていない情報を引き出すためには? ~不可逆反応、不均一反応での情報科学/計算科学×計測技術の融合~」	2017年1月	国内	○
31	First-principles study of superconcentrated electrolytes for electrochemically stable and fast-charging lithium-ion batteries	袖山慶太郎	41st international conference and exposition on advanced ceramics and composites	2017/1/20-2017/1/22	国外	○
32	「DFT-MD法を用いたLiイオン電池における負極/電解液界面被膜の生成メカニズム解析」	袖山慶太郎	第1回 表界面計測技術研究会-電子と光子をプローブとした表界面計測-	2017年2月	国内	○
33	計算科学技術による蓄電池機構解明・材料設計	館山佳尚	日本化学会第97春季年会	2017年3月	国内	○
34	「第一原理分子動力学計算による高濃度Li塩電解液の反応解析:Liイオン電池の新規材料探索に向けて」	袖山慶太郎	資源・素材学会 平成29年度春季大会	2017年3月	国内	○
35	DFT molecular dynamics study on battery materials: SEI film and superconcentrated electrolyte	Yoshitaka Tateyama	Frontiers in Materials Processing Applications, Research and Technology (FiMPART2017)	2017/7/9-2017/7/12	国外	○
36	Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Computational Chemical Study	M.Nagaoka	2nd International Symposium on Post-Lithium Ion Batteries (Tokyo, Japan)	2017年3月	国外	○
37	Allosteric Regulation of Thrombin, Revisited	I. Kurisak, M. Takayanagi, C. Barberot, M. Nagaoka	5th-Modeling of Chemical and Biological (Re)Activity (Chennai, India)	2017年2月18日~21日 (20日)	国外	○
38	Toward CDMSI by Computational Molecular Technology of Complex Chemical Reaction Systems: Applications of Red Moon Methodology	M.Nagaoka	CDMSI International Workshop on "Scale bridging for the atomistic design of high performance materials"(Tokyo,Japan)	2017年2月20日~21日 (21日)	国外	○
39	Computational Molecular Technology towards Macroscopic Chemical Phenomena:Molecular Control of Complex Chemical Reactions, Stereospecificity and Aggregate Structures	M.Nagaoka	The 4th International Conference on Molecular Simulation (Shanghai, China)	2016年10月23日~26日 (24日)	国外	○
40	Computational Molecular Technology towards Energy Challenges: Molecular Control of Complex Chemical Reactions and Aggregate Structures	M.Nagaoka	5th International Symposium on Energy Challenges and Mechanics Working on Small Scales (Inverness/Scotland, U.K.)	2016年7月10日~14日 (13日)	国外	○

41	Toward Specific Synthesis of Functional Polymers in Hyper-Nano-Space: A Computational Molecular Technology	M.Nagaoka	EMN Meeting on Mesoporous Materials-Energy Materials Nanotechnology (Prague, Czech Republic)	2016年6月13日～17日 (15日)	国外	○
42	タンパク質反応の大規模分子動力学計算—ヘモグロビンサブユニットへの酸素分子侵入経路の統計的解析—	長岡正隆	分子科学研究所(分子研研究会「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」)	2017年6月14日	国内	○
43	ソフトウェアMODYLASを用いた大規模分子動力学シミュレーション	安藤 嘉倫	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」	2016年4月4日～4月5日	国内	○
44	エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	岡崎 進	SS研HPCフォーラム2016 ポスト「京」の挑戦 ～サイエンスの未来～	2016年8月	国内	○
45	汎用MDソフトMODYLASによる大規模シミュレーション	安藤嘉倫	第2回材料系ワークショップ	2016年10月	国内	○
46	《特別講演》ポスト「京」重点課題(5)紹介「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」	岡崎 進	第2回CDMSI(ポスト「京」重点課題(7))シンポジウム ～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～	2016年12月6日～12月7日	国内	○
47	汎用MDソフトMODYLASの開発と大規模系での最近の研究事例	安藤嘉倫	第30期CMMフォーラム	2017年2月	国内	○

サブ課題C: エネルギー・資源の有効利用－化学エネルギー

サブ課題代表者: 田中 秀樹

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)
1	Mechanism of slow crystal growth of tetrahydrofuran clathrate hydrate	Takuma Yagasaki, Masakazu Matsumoto, Hideki Tanaka	J. Phys. Chem. C. 120, 3305–3313	2016年2月	国外	○
2	Anomalous thermodynamic properties of Ice XVI and metastable hydrates	Takuma Yagasaki, Masakazu Matsumoto, Hideki Tanaka	Phys. Rev. B 93, 054118	2016年2月	国外	○
3	Platinum-catalyzed reduction of amides with hydrosilanes bearing dual Si-H groups: a theoretical study of the reaction mechanism	N. Nakatani, J.-y. Hasegawa, Y. Sunada, and H. Nagashima	Dalton Transactions, 44, 19344–19356 (2015)	2015年10月	国外	○
4	Kinetic Analysis for the Multistep Profiles of Organic Reactions: Significance of the Conformational Entropy on the Rate Constants of the Claisen Rearrangement	Y. Sumiya, Y. Nagahata, T. Komatsuzaki, T. Taketsugu, and S. Maeda	J. Phys. Chem. A, 119, 11641–11649 (2015)	2015年11月	国外	○
5	Gold Nanoparticle Decoration of Insulating Boron Nitride Nanosheet on Inert Gold Electrode Towards an Efficient Electrocatalyst for the Reduction of Oxygen to Water	G. Elumalai, H. Noguchi, A. Lyalin, T. Taketsugu, and K. Uosaki	Electrochemistry Communications, 66 53–57 (2016)	2016年3月	国外	○
6	Long Range Functionalization of h-BN Monolayer by Carbon Doping	M. Gao, M. Adachi, A. Lyalin, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. C, in press http://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b12706	2016年3月	国外	○
7	Revisiting the extrapolation of correlation energies to complete basis set limit	Masaki Okoshi, Teruo Atsumi, Hiromi Nakai	J. Comput. Chem. 36, 1075 (2015)	2015年4月	国外	○
8	A divide-and-conquer method with approximate Fermi levels for parallel computations	Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai	Theor. Chem. Acc. 134, 53 (2015)	2015年4月	国外	○
9	Accompanying coordinate expansion and recurrence relation method using a transfer relation scheme for electron repulsion integrals with high angular momenta and long contractions	Masao Hayami, Junji Seino, Hiromi Nakai	J. Chem. Phys. 142, 204110 (2015)	2015年5月	国外	○
10	Theoretical Analysis of the Oxidation Potentials of Organic Electrolyte Solvents	Masaki Okoshi, Atsushi Ishikawa, Yoshiumi Kawamura, Hiromi Nakai	ECS Electrochem. Lett. 4, A103 (2015).	2015年7月	国外	○
11	Theoretical Study of Extremely Long yet Stable Carbon-Carbon Bonds: Effect of Attractive C-H Interactions and Small Radical Stabilization of Diamondoids	Daeheum Cho, Yasuhiro Ikabata, Takeshi Yoshikawa, Jin Yong Lee, Hiromi Nakai	Bull. Chem. Soc. Jpn. 88, 1636 (2015)	2015年9月	国外	○
12	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法の最近の展開	西村好史、海寶文彰、中井浩巳	J. Comput. Chem. Jpn. 14, 43 (2015)	2015年9月	国内	○
13	Divide-and-Conquer-Type Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations of Proton Diffusion in a Bulk Water System	Hiromi Nakai, Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura	J. Phys. Chem. B 120, 217 (2016)	2015年12月	国外	○

14	Efficient two-component relativistic method for large systems	Hiromi Nakai	AIP Conf. Proc. 1702, 090030 (2015)	2015年12月	国外	○
15	Contrasting mechanisms for CO ₂ absorption and regeneration processes in aqueous amine solutions: Insights from density-functional tight-binding molecular dynamics simulations	Hiromi Nakai, Yoshifumi Nishimura, Takeaki Kaiho, Takahito Kubota, Hiroshi Sato	Chem. Phys. Lett. 647, 127 (2016)	2016年1月	国外	○
16	Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry (III): Accurate evaluation of proton hydration energy and standard hydrogen electrode potential	Atsushi Ishikawa, Hiromi Nakai	Chem. Phys. Lett. 650, 159 (2016)	2016年3月	国外	○
17	Formation of clathrate hydrates of water-soluble guest molecules	Takuma Yagasaki, Masakazu Matsumoto, Hideki Tanaka	J. Phys. Chem. C. 120, 21512–21521 (2016)	2016年9月	国外	○
18	Exploring the Mechanism of Ultrafast Intersystem Crossing in Re(I) Carbonyl Bipyridine Halide Complexes: Key Vibrational Modes and Spin-Vibronic Quantum Dynamics	Y. Harabuchi, J. Eng, E. Gindensperger, T. Taketsugu, S. Maeda, and C. Daniel	J. Chem. Theo. Comp., 12, 2335–2345 (2016).	2016年4月	国外	○
19	Core-Structure-Dependent Luminescence of Thiolato-Bridged Copper(I) Cluster Complexes	K. Shimada, A. Kobayashi, Y. Ono, H. Ohara, T. Hasegawa, T. Taketsugu, E. Sakuda, S. Akagi, N. Kitamura, and M.	J. Phys. Chem. C, 120, 16002–16011 (2016).	2016年4月	国外	○
20	Highly Active and Robust Metalloporphyrin Catalysts for the Synthesis of Cyclic Carbonates from a Broad Range of Epoxides and Carbon Dioxide	Maeda Chihiro, Shimonishi Junta, Miyazaki Ray, Hasegawa Jun-ya, Ema Tadashi	Chemistry, Eur. J. 22, 6556–6563 (2016).	2016年5月	国外	○
21	Nonadiabatic Pathways of Furan and Dibenzofuran: What Makes Dibenzofuran Fluorescent?	Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and S. Maeda	Chem. Lett., 45, 940–942 (2016).	2016年5月	国外	○
22	Theoretical Study of Hydrogenation Catalysis of Phosphorus Compound and Prediction of Catalyst with High Activity and Wide Application Scope	G. Zeng, S. Maeda, T. Taketsugu, and S. Sakaki	ACS Catal., 6, 4859–4870 (2016).	2016年5月	国外	○
23	Structural dynamics of photochemical reactions probed by time-resolved photoelectron spectroscopy using high harmonic pulse	R. Iikubo, T. Sekikawa, Y. Harabuchi, and T. Taketsugu	Faraday Discuss., 194, 147–160 (2016).	2016年5月	国外	○
24	Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of fac-[ReI(bpy)(CO)3(PR3)] ⁺ complex	K. Saita, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, O. Ishitani, and S. Maeda	Phys. Chem. Chem. Phys., 18, 17557–17564 (2016).	2016年6月	国外	○
25	Artificial Force Induced Reaction (AFIR) Method for Exploring Quantum Chemical Potential Energy Surfaces	S. Maeda, Y. Harabuchi, M. Takagi, T. Taketsugu, and K. Morokuma	Chem. Rec., 16, 2232–2248 (2016).	2016年6月	国外	○
26	A DFT and Multi-configurational Perturbation Theory Study on O ₂ Binding to a Model Heme Compound via the Spin-change Barrier	Y. Kitagawa, Y. Chen, N. Nakatani, A. Nakayama, and J. Hasegawa	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 18137–18144 (2016).	2016年7月	国外	○
27	When inert becomes active: fascinating route for catalyst design	A. Lyalin, M. Gao, and T. Taketsugu	Chem. Rec., 16, 2324–2337 (2016).	2016年7月	国外	○
28	Spin-blocking effect in CO and H ₂ binding reactions to molybdenocene and tungstenocene: A theoretical study on the reaction mechanism via minimum energy intersystem-crossing point	K. Watanabe, N. Nakatani, A. Nakayama, M. Higashi, and J. Hasegawa	Inorg. Chem. 55, 8082–8090 (2016).	2016年8月	国外	○

29	Divide-and-Conquer Hartree-Fock-Bogoliubov Method and Its Application to Conjugated Diradical Systems	M. Kobayashi and T. Taketsugu	Chem. Lett., 45, 1268–1270 (2016).	2016年8月	国外	○
30	Highly Efficient Electrochemical Hydrogen Evolution Reaction at Insulating Boron Nitride Nanosheet on Inert Gold Substrate	K. Uosaki, G. Elumalai, H. C. Dinh, A. Lyalin, T. Taketsugu, and H. Noguchi	Scientific Reports, 6, 32217 (2016).	2016年8月	国外	○
31	Multi-Step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-Based UV-B Sunscreens	K. Yamazaki, Y. Miyazaki, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, S. Maeda, Y. Inokuchi, S.-n. Kinoshita, M. Sumida, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, M. Ehara, and T. Ebata	J. Phys. Chem. Lett., 7, 4001–4007 (2016).	2016年9月	国外	○
32	Catalytic Hydrogenation of Carbon Dioxide with Ammonia-Borane by Pincer-type Phosphorus Compound: A Theoretical Prediction	G. Zeng, S. Maeda, T. Taketsugu, and S. Sakaki	J. Am. Chem. Soc. (Communication), 138, 13481–13484 (2016).	2016年10月	国外	○
33	Theoretical Study on Highly Active Bifunctional Metalloporphyrin Catalysts for the Coupling Reaction of Epoxides with Carbon Dioxide	J. Hasegawa, R. Miyazaki, C. Maeda, and T. Ema	Chem. Rec. 16 2260–2267 (2016).	2016年10月	国外	○
34	Ab initio Molecular Dynamics Study of H ₂ Formation Inside POSS Compounds. 2. The Effect of an Encapsulated Hydrogen Molecule	T. Kudo, T. Taketsugu, and M. S. Gordon	J. Phys. Chem. A, 120, 8699–8715 (2016).	2016年10月	国外	○
35	Ab Initio Molecular Dynamics Study of the Photoreaction of 1,1'-Dimethylstilbene Upon S ₀ → S ₁ Excitation	Y. Harabuchi, R. Yamamoto, S. Maeda, S. Takeuchi, T. Tahara, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. A, 120, 8804–8812 (2016).	2016年10月	国外	○
36	Full Rate Constant Matrix Contraction Method for Obtaining Branching Ratio of Unimolecular Decomposition	Y. Sumiya, T. Taketsugu, and S. Maeda	J. Comp. Chem., 38, 101–109 (2017).	2016年10月	国外	○
37	Atomically thin hexagonal boron nitride nanofilm for Cu protection: The importance of film perfection	M. H. Khan, S. S. Jamali, A. Lyalin, P. J. Molino, L. Jiang, H. K. Liu, T. Taketsugu, and Z. Huang	Adv. Mater., 29, 1603937 (2017).	2016年11月	国外	○
38	Electronic Polarization Effect of the Water Environment in Charge-Separated Donor-Acceptor Systems: An Effective Fragment Potential Model Study	Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, Akira Nakayama, Michael Schmidt, Mark Gordon, Jun-ya Hasegawa	J. Phys. Chem. A 120, 10273–10280 (2016)	2016年12月	国外	○
39	Isomerization in Gold Clusters upon O ₂ Adsorption	M. Gao, D. Horita, Y. Ono, A. Lyalin, S. Maeda, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. C, 121, 2661–2668 (2017).	2017年1月	国外	○
40	Interface Effects in Hydrogen Elimination Reaction from Isopropanol by Ni ₁₃ Cluster on θ -Al ₂ O ₃ (010) Surface	A. Lyalin, K. Shimizu, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. C, 121, 3488–3495 (2017).	2017年1月	国外	○
41	Two-Dimensional Corrugated Porous Carbon-, Nitrogen-Framework/Metal Heterojunction for Efficient Multi-Electron Transfer Processes with Controlled Kinetics	K. Sakaushi, A. Lyalin, S. Tominaka, T. Taketsugu, and K. Uosaki	ACS Nano, 11, 1770–1779 (2017).	2017年1月	国外	○
42	Combined Gradient Projection / Single Component Artificial Force Induced Reaction (GP/SC-AFIR) Method for an Efficient Search of Minimum Energy Conical Intersection (MECI) Geometries	Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and S. Maeda	Chem. Phys. Lett., 674, 141–145 (2017).	2017年2月	国外	○

43	Density matrix renormalization group (DMRG) method as a common tool for large active-space CASSCF/CASPT2 calculations	N. Nakatani and S. Guo	J. Chem. Phys., 146, 094102 (2017)	2017年2月	国外	○
44	Thermally activated delayed fluorescence OLEDs with fully solution processed organic layers exhibiting nearly 10% external quantum efficiency	K. Albrecht, K. Matsuoka, D. Yokoyama, Y. Sakai, A. Nakayama, K. Fujita, and K. Yamamoto	Chem. Commun., 53, 2439–2442 (2017)	2017年2月	国外	○
45	Transition–Metal–Free Boryl Substitution using Silylboranes and Alkoxy Bases	E. Yamamoto, S. Maeda, T. Taketsugu, and H. Ito	Synlett, 28, 1258–1267 (2017).	2017年4月	国外	○
46	Exploring the Full Catalytic Cycle of Rhodium(I)BINAP–Catalysed Isomerisation of Allylic Amines: A Graph Theory Approach for Path Optimisation	T. Yoshimura, S. Maeda, T. Taketsugu, M. Sawamura, K. Morokuma, and S. Mori	Chemical Science, 8, 4475–4488 (2017).	2017年5月	国外	○
47	Autocatalytic Cycle in Autoxidation of Triethylborane	R. Uematsu, C. Saka, Y. Sumiya, T. Ichino, T. Taketsugu, and S. Maeda	Chem. Comm., 53, 6557–6670 (2017).	2017年4月	国外	○
48	A Luminescent Mechanochromic 9–Anthryl Gold(I) Isocyanide Complex with an Emission Maximum at 900 nm after Mechanical Stimulation	T. Seki, N. Tokodai, S. Omagari, T. Nakanishi, Y. Hasegawa, T. Iwasa, T. Taketsugu, and H. Ito	J. Am. Chem. Soc. (Communication), 139, 6514–6517 (2017).	2017年5月	国外	○
49	Global search for low-lying crystal structures using the artificial force induced reaction method: A case study on carbon	M. Takagi, T. Taketsugu, H. Kino, Y. Tateyama, K. Terakura, and S. Maeda	Phys. Rev. B, 95, 184110 (2017).	2017年5月	国外	○
50	Oxygen Reduction Reaction Catalyzed by Small Gold Cluster on h–BN/Au(111) Support	A. Lyalin, K. Uosaki, and T. Taketsugu	Electrocatalysis, in press.	2017年6月	国外	○
51	A Coordination Strategy to Realize a Sextuply Bonded Complex	Y. Chen, J. Hasegawa, K. Yamaguchi, S. Sakaki	Phys. Chem. Chem. Phys., 19, 14947–14954 (2017)	2017年6月	国外	○
52	Selective Dehydration of Mannitol to Isomannide over H–Beta Zeolite	H. Yokoyama, H. Kobayashi, J. Hasegawa, A. Fukuoka	ACS Catal., 7, 4828–4834 (2017)	2017年6月	国外	○
53	Enhanced Luminescence of Asymmetrical Seven–coordinate EuIII Complexes Including LMCT Perturbation	K. Yanagisawa, Y. Kitagawa, T. Nakanishi, T. Seki, T. Akama, M. Kobayashi, T. Taketsugu, H. Ito, K. Fushimi, and Y. Hasegawa	Eur. J. Inorg. Chem., in press.	2017年7月	国外	○
54	Hidden radical reactivity of the [FeO]2+ group in the H–abstraction from methane: DFT and CASPT2 supported mechanism by the example of model iron (hydro) oxide species	V. Kovalskii, A. Shubin, Y. Chen, D. Ovchinnikov, S. Ruzankin, J. Hasegawa, I. Zilberberg, V. N. Parmon	Chem. Phys. Lett., 679, 193–199 (2017)	2017年7月	国外	○
55	Selected configuration interaction method using sampled first–order corrections to wave functions	Y. Ohtsuka, J. Hasegawa	J. Chem. Phys., in press	2017年7月	国外	○

56	Photo-induced B-Elimination of 9-Fluorenylmethanol Leading to Dibenzofulvene	H. Nageh, Z. Liming, A. Nakayama, J. Hasegawa, Y. Wang, T. Nakano	Chem. Commun., in press	2017年7月	国外	○
57	Implementation of Analytical Energy Gradient of Spin-Dependent General Hartree-Fock Method Based on the Infinite-Order Douglas-Kroll-Hess Relativistic Hamiltonian with Local Unitary Transformation	Yuya Nakajima, Junji Seino, Hiromi Nakai	J. Chem. Theory Comput. 12, 2181 (2016)	2016年4月	国外	○
58	Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry (IV): Solubility of gaseous molecules	Atsushi Ishikawa, Masahiro Kamata, Hiromi Nakai	Chem. Phys. Lett. 655-656, 103 (2016)	2016年5月	国外	○
59	Assessment of self-consistent field convergence in spin-dependent relativistic calculations	Masahiko Nakano, Junji Seino, Hiromi Nakai	Chem. Phys. Lett. 657, 65 (2016)	2016年5月	国外	○
60	Three pillars for achieving quantum mechanical molecular dynamics simulations of huge systems: Divide-and-conquer, density-functional tight-binding, and massively parallel computation	Hiroaki Nishizawa, Yoshifumi Nishimura, Masato Kobayashi, Stephan Irle, Hiromi Nakai	J. Comput. Chem. 37, 1983 (2016)	2016年6月	国外	○
61	Quantum chemistry beyond Born-Oppenheimer approximation on a quantum computer: A simulated phase estimation study	Libor Veis, Jakub Visnak, Hiroaki Nishizawa, Hiromi Nakai, Jiri Pittner	Int. J. Quantum Chem. 116, 1328 (2016)	2016年6月	国外	○
62	CO ₂ 化学吸収法に対する計算化学研究: エネルギー・環境問題への挑戦	寺西慶, 石川敦之, 中井浩巳	J. Comput. Chem. Jpn. 15, A15 (2016)	2016年7月	国内	○
63	Informatics-Based Energy Fitting Scheme for Correlation Energy at Complete Basis Set Limit	Junji Seino, Hiromi Nakai	J. Comput. Chem. 37, 2304 (2016)	2016年7月	国外	○
64	The divide-and-conquer second-order proton propagator method based on nuclear orbital plus molecular orbital theory for the efficient computation of proton binding energies	Yusuke Tsukamoto, Yasuhiro Ikabata, Jonathan Romero, Andres Reyes, Hiromi Nakai	Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 27422 (2016)	2016年9月	国外	○
65	Relativistic frozen core potential scheme with relaxation of core electrons	Yuya Nakajima, Junji Seino, Masao Hayami, Hiromi Nakai	Chem. Phys. Lett. 663, 97 (2016)	2016年9月	国外	○
66	Efficient pole-search algorithm for dynamic polarizability: Toward alternative excited-state calculation for large systems	Hiromi Nakai, Takeshi Yoshikawa, Yutaro Nonaka	J. Comput. Chem. 38, 7 (2017)	2016年10月	国外	○
67	量子化学計算情報を記述子とした機械学習に基づく反応予測手法の開発	藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳	J. Comput. Chem. Jpn. 15, 63 (2016)	2016年10月	国内	○
68	Implementation of Efficient Two-component Relativistic Method Using Local Unitary Transformation to GAMESS Program	Yuya Nakajima, Junji Seino, Michael W. Schmidt, Hiromi Nakai	J. Comput. Chem. Jpn. 15, 68 (2016)	2016年10月	国内	○
69	核・電子軌道法における原子核軌道エネルギーとプロトン束縛エネルギー計算	五十幡康弘, 中井浩巳	J. Comput. Chem. Jpn. 15, 148 (2016)	2016年10月	国内	○
70	Theoretical Analysis of Interactions between Potassium Ions and Organic Electrolyte Solvents: A Comparison with Lithium, Sodium, and Magnesium Ions	Masaki Okoshi, Yuki Yamada, Shinichi Komaba, Atsuo Yamada, Hiromi Nakai	J. Electrochem. Soc. 164, A54 (2017)	2016年12月	国外	○

71	Development of spin-dependent relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry (I): The unrestricted approach	M. Nakano, J. Seino, H. Nakai	Int. J. Quantum Chem., 117 (10), e25356 (9 pages) (2017)	2017年1月	国外	○
72	Divide-and-conquer-type density-functional tight-binding simulations of hydroxide ion diffusion in bulk water	A. W. Sakti, Y. Nishimura, H. Nakai	J. Phys. Chem. B, 121 (6), 1362-1371 (2017)	2017年1月	国外	○
73	Systematic investigation of thermodynamic properties of amine solvents for CO ₂ chemical absorption Using the cluster-continuum model	K. Teranishi, A. Ishikawa, H. Sato, H. Nakai	Bull. Chem. Soc. Jpn., 90 (4), 451-460 (2017)	2017年1月	国外	○
74	Unveiling a new aspect of simple aryboronic esters: Long-lived room-temperature phosphorescence from the heavy atom-free molecules	Y. Shoji, Y. Ikabata, Q. Wang, D. Nemoto, A. Sakamoto, N. Tanaka, J. Seino, H. Nakai, T. Fukushima	J. Am. Chem. Soc., 139 (7), 2728-2733 (2017)	2017年1月	国外	○
75	Relativistic effect on enthalpy of formation for transition-metal complexes	Y. Nakajima, J. Seino, H. Nakai	Chem. Phys. Lett., 673, 24-29 (2017)	2017年1月	国外	○
76	Development of spin-dependent relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry (II): The restricted open-shell approach	M. Nakano, Nakamura, J. Seino, H. Nakai	Int. J. Quantum Chem., 117 (10), e25366 (12 pages) (2017)	2017年2月	国外	○
77	Universal formulation of second-order generalized Møller-Plesset perturbation theory for a spin-dependent two-component relativistic many-electron Hamiltonian	M. Nakano, J. Seino, H. Nakai	Chem. Phys. Lett., 675, 137-144 (2017)	2017年3月	国外	○
78	Development of an excited-state calculation method for large systems using dynamical polarizability: A divide-and-conquer approach at the time-dependent density functional level	H. Nakai, T. Yoshikawa	J. Chem. Phys., 146 (12), 124123 (12 pages) (2017)	2017年3月	国外	○
79	Decomposition of effective exchange integrals of radical dimers using bond energy density analysis	Y. Ikabata, H. Nakai	Chem. Lett.10.1246/cl.170208(2017)	2017年3月	国外	○
80	Intel Xeon Phi上でのSMASHIによる並列化DFT計算の性能評価	齊藤 天菜, 望月 祐志, 山崎 大, 石村 和也	J. Comput. Chem. Jpn., 15, 92-96 (2016).	2016年11月	国内	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

(1)口頭発表

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	Structure, Dynamics, and Thermodynamic Stability of Clathrate Hydrates and High Pressure Filled Ices, Plenary	H. Tanaka	The 5th Annual Basic Science International Conference (BaSIC 2015), ATRIA HOTEL & CONFERENCE MALANG, Malang, Indonesia	2015年2月	国外	
2	サブ課題C「エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー」研究計画概要	田中 秀樹	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
3	サブ課題C 研究事例「二酸化炭素分離回収に関する理論化学シミュレーション:「京」の成果とポスト「京」の計画」	中井 浩巳	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	

4	Efficient Two-Component Relativistic Method for Large Systems	Hiromi Nakai	11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering(ICCMSE 2015) (Athens/Greece)	2015年3月	国外	
5	近接場光による分子振動励起の理論計算手法の開発	岩佐豪、武次徹也	日本物理学会第70回年次大会	2015年3月	国内	
6	表面固定化Ir触媒による高位置選択的C-Hホウ素化反応に関する理論的研究: GRRM/SC-AFIR法の応用	高敏、前田理、村上遼、岩井智弘、澤村正也、武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
7	無輻射失活経路の自動探索: 蛍光量子収率の定性的な予測へ向けて	原渕祐、前田理、武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
8	GRRM/AFIR法によるトリエチルボラン/酸素系の自動酸化機構に関する理論的研究	坂千尋、植松遼平、前田理、武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
9	パラジウム(II)触媒を用いるチオベンズアニリドのC-H官能基化/分子内C-S結合形成反応の機構解析: GRRM/AFIR法による理論的研究	植松遼平・前田理・Musaev Djmaladdin G.・武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
10	わずかな構造相違を鋭敏に反映する異方性Au6クラスターの発光特性	張明哲・岩佐豪・小野ゆり子・武次徹也・大曲駿・中西貴之・長谷川靖哉・七分勇勝・小西克明	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
11	サブ課題C「エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー」研究計画概要	田中 秀樹	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
12	サブ課題C 研究事例「メタンハイドレートの分解機構と阻害剤効果」	矢ヶ崎 琢磨	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
13	時間発展を考慮した反応経路自動探索	住谷陽輔、前田理、武次徹也	第9回分子科学討論会	2015年9月	国内	
14	Toward theoretical prediction of reactivity of small metal clusters: H-H bond activation by small Au-Ag alloy clusters	M. Takagi, M. Gao, S. Maeda, and T. Taketsugu	The 11st Hokkaido Univ.-Nanjing Univ. Joint symposium: 2015 HU-NU-NIMS/MANA Jopint symposium	2015年10月	国外	
15	Theoretical investigation of catalytic activity of BN-based nanomaterials for ORR and interplay with experiment	T. Taketsugu, A. Lyalin, A. Nakayama, G. Elumalai, H. Noguchi, T. Masuda, and K. Uosaki	Pacificchem2015	2015年12月	国外	
16	Theoretical study of the dehydrogenation of isopropanol on Ni13 cluster supported on theta-Al2O3 surface	A. Lyalin, K.-i. Shimizu, and T. Taketsugu	Pacificchem2015	2015年12月	国外	
17	系間交差を経由する反応経路の理論的研究: モリブドセンにおけるCOとH ₂ の吸着	渡邊恵二郎、東雅大、中谷直輝、中山哲、長谷川淳也	化学系学協会北海道支部2016年冬季研究発表会	2016年1月	国内	
18	メソポーラスシリカ白金触媒によるエチレンの酸化メカニズムに関する理論・I研究	宮崎玲、中谷直輝、横谷卓郎、中島清隆、福岡淳、長谷川淳也	化学系学協会北海道支部2016年冬季研究発表会	2016年1月	国外	

19	Exploration of Adiabatic and Nonadiabatic Channels in Organic Molecules and Organometallic Complexes	S. Maeda	the Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7)	2016年1月	国外	
20	生体触媒反応場の精密制御に資する理論計算手法の開発と応用	長谷川淳也	新学術領域研究「精密制御反応場」第1回公開シンポジウム	2016年1月	国内	
21	Novel Approach for Condensed-Phase Thermochemistry: Proposal and Applications of Harmonic Solvation Model (HSM)	Hiromi Nakai	Mini-symposium at Sungkyunkwan University (SKKU), Sungkyunkwan University (Suwon, Korea)	2015年4月	国外	
22	Kramers制限を課した相対論的開殻Hartree-Fock法の開発	中野匡彦、中村亮太、清野淳司、中井浩巳	第18回理論化学討論会	2015年5月	国内	
23	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法の最近の展開	西村好史、海寶丈彰、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2015春季年会	2015年5月	国内	
24	量子化学計算による気体分子の溶解度:調和溶媒モデルによる検討	石川敦之、鎌田将宏、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2015春季年会	2015年5月	国内	
25	Koopmansの定理と時間反転対称性を同時に考慮した相対論的開殻Hartree-Fock法	中村亮太、中野匡彦、清野淳司、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2015春季年会	2015年5月	国内	
26	大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発:元素戦略の理論基盤確立を目指して	清野淳司、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2015春季年会	2015年5月	国内	
27	Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry: Harmonic solvation model (HSM)	Hiromi Nakai	Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国外	
28	Development of linear-scaling two-component relativistic method with a small prefactor	Hiromi Nakai	New Frontiers of Relativistic Quantum Chemistry – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国外	
29	機械学習による完全基底関数極限における電子相関エネルギーの推定	清野淳司、大越昌樹、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
30	ナノスケール化学反応系に対する分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーション	西村好史、Sakti Aditya Wibawa、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
31	凍結内殻ポテンシャル法の拡張:内殻軌道緩和の考慮	中嶋裕也、清野淳司、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
32	インフォマティクス技術を用いた完全基底関数極限における電子相関エネルギーの評価	清野淳司、大越昌樹、中井浩巳	第38回ケモインフォマティクス討論会(旧情報化学討論会)	2015年10月	国内	
33	Development of linear-scaling divide-and-conquer DFTB method	Hiromi Nakai	Development of next generation accurate approximate DFT/B methods – Flagship workshop and tutorial	2015年10月	国外	
34	化学反応シミュレーションによるCO ₂ 分離回収のためのアミン溶液の探索(hp140164)	中井浩巳	第2回HPCI利用研究課題成果報告会	2015年10月	国内	

35	ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス	中井浩巳、Stephan Irle、 武次徹也、吉澤一成、小林正 人、西村好史	第6回CMSI研究会 (HPCI戦略プログラム分野2 最終報告会)	2015年12月	国内	
36	Development of linear-scaling excited-state calculations: divide-and-conquer approaches	Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
37	Relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry	Masahiko Nakano, Ryota Nakamura, Junji Seino, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
38	Theoretical Study on the Mechanisms of the Selective Fluorescence of PicoGreen	Masaki Okoshi, Patchreenart Saparpakorn, Yuta Takada, Supa Hannongbua, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
39	Accurate two-component relativistic theory based on local unitary transformation and frozen potential schemes	Junji Seino, Yuya Nakajima, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
40	Density-dependent dispersion correction for density functional theory: local response dispersion approach	Yasuhiro Ikabata	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
41	Computational study on CO ₂ chemical absorption process: Thermodynamic and dynamic analyses	Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
42	Development of massive parallel code for quantum mechanical molecular dynamics simulations: DC-DFTB-K program	Yoshifumi Nishimura, Hiroaki Nishizawa, Masato Kobayashi, Stephan Irle, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
43	Parallelization of quantum chemical calculations by using divide- and-conquer method	Yoshikwa Takeshi, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
44	材料機能設計における電子論計算の限界とこれから	中井浩巳	第2回元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型 >/大型研究施設連携シンポジウム	2016年1月	国内	
45	Development of linear-scaling divide-and-conquer based density-functional tight-binding (DC-DFTB) method suitable for massively parallel computation	Hiromi Nakai	The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	
46	Application of divide-and-conquer type density-functional tight- binding simulation for proton diffusion in bulk water system	Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	
47	Implementation of efficient infinite-order two-component relativistic scheme into GAMESS	Yuya Nakajima, Junji Seino, Mike Schmidt, Hiromi Nakai	The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	
48	相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計	中井浩巳	元素戦略/希少金属代替材料開発<第10回 合同シンポジウム>	2016年2月	国内	
49	産業・実験との共同研究から理論へのフィードバック~CO ₂ 分離・ 回収の研究を例に~	中井浩巳	産応協、CMSI、ポスト京重点課題5・6・7合同 産学官連携シンポジウム2016	2016年2月	国内	

50	ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス:分割統治密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーションの開発と応用	中井浩巳	TCCI第6回研究会	2016年3月	国内	
51	Entropy barrier in potential energy curve: a quantum chemical study	石川敦之、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
52	周期表を網羅する線形スケーリングな相対論的量子化学の構築	中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
53	相対論的密度汎関数理論のための交換相関汎関数	大山拓郎、五十幡康弘、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
54	相対論的量子化学計算の高精度化・高効率化を目指した群知能によるパラメータ自動最適化手法の開発	清野淳司、速水雅生、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
55	動的分極率を用いた高速な分割統治型非局所励起状態計算手法の開発	吉川武司、吉原詢也、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
56	量子化学計算と機械学習を利用した有機化学反応予測手法の開発	藤波美起登、清野淳司、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
57	調和溶媒和モデルへの非調和性の導入	今井みの莉、石川敦之、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
58	サブ課題C「エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー」オーバービュー	田中 秀樹	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
59	サブ課題C 研究事例「ハイドレートの熱力学的安定性と相転移阻害機構」	田中 秀樹	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
60	「包接水和物の生成・分解機構」	矢ヶ崎 琢磨	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ:触媒元素戦略研究との連携を求めて	2016/11/29-2016/11/30	国内	
61	「速度論的阻害剤のガスハイドレート表面への吸着機構」	矢ヶ崎 琢磨、松本正和、田中秀樹	第10回分子科学討論会	2016/9/13-2016/9/15	国内	
62	「包接水和物の生成過程の分子動力学シミュレーション」	矢ヶ崎 琢磨、松本正和、田中秀樹	第8回メタンハイドレート総合シンポジウム	2016/12/7-2016/12/8	国内	
63	サブ課題C 研究事例「理論計算が拓く非白金燃料電池触媒探索の試み」	武次 徹也	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
64	「反応経路自動探索プログラムGRRMの開発と触媒への展開」	前田 理	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ:触媒元素戦略研究との連携を求めて	2016/11/29-2016/11/30	国内	
65	「酸化セリウム触媒の酸・塩基点の役割:第一原理シミュレーションによる解析」	中山 哲	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ:触媒元素戦略研究との連携を求めて	2016/11/29-2016/11/30	国内	

66	光反応の反応経路自動探索:内部転換・項間交差・蛍光・りん光過程の包括的解析に向けて	原渕祐、山本梨奈、 齊田謙一郎、前田理、 武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
67	人工力誘起反応(AFIR)法の周期系への拡張:炭素の結晶構造探索への適用	高木牧人、前田理、 武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
68	多重極ハミルトニアンに基づいた赤外吸収分光計算手法への電場計算の導入と応用	竹中将斗、岩佐豪、 武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
69	Non-radiative decay pathways of trans-para-methoxy methylcinnamate	K. TAMAZAKI, T. HARABUCHI, T. TAKETSUGU, S. MAEDA, Y. MIYAZAKI, S. KINOSHITA, Y. INOKUCHI, T. EBATA, M. SUMIDA, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI and M. EHARA	32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (Saitama)	2016/6/1-2016/6/3	国内	
70	Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of fac-[Re(bpy)(CO)3(PR3)]+ complex	K. SAITA, Y. HARABUCHI, S. MAEDA, and T. TAKETSUGU	32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (Saitama)	2016/6/1-2016/6/3	国内	
71	酵素的な機能を示す分子触媒に関する理論的研究	長谷川淳也	第16回日本蛋白質科学会、福岡	2016/6/7-2016/6/9	国内	
72	First-Principles Simulations of Catalytic Reactions at the Water/CeO ₂ (111) Interface: Role of the Acid-Base Sites	A. Nakayama, M. Tamura, K. Shimizu, and J. Hasegawa	Pre-symposium of 16th International Congress on Catalysis (16th ICC-Pre)& 2nd International Symposium of Institute for Catalysis "Novel Catalysts for Energy and	2016/6/30-2016/7/1	国内	
73	大規模量子化学計算を簡便化する自動制御型分割統治法の開発	藤森俊和、小林正人、 武次徹也	日本化学会北海道支部2016年夏季研究発表会	2016年7月	国内	
74	トリカルボニルジイミンRe(I)錯体における項間交差と光反応性	齊田謙一郎、原渕祐、武次徹也、 石谷治、前田理	第28回配位化合物の光化学討論会(京都工繊大)	2016/8/8-2016/8/10	国内	
75	Conformational entropy in Claisen rearrangement studied by a new kinetic approach	Y. Sumiya, T. TAKETSUGU, and S. MAEDA	International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, Kuching, Malaysia	2016/8/15-2016/8/18	国外	
76	Transition states of spin-crossing reactions	J. Hasegawa	BIC-ICAT Workshop、札幌	2016年8月	国内	
77	ピンサー型リン化合物の協同触媒効果に関する理論的研究:反応機構、電子的過程、および、新触媒の予測	曾桂香、前田理、 武次徹也、榊茂好	第27回基礎有機化学討論会(広島)	2016/9/1-2016/9/3	国内	
78	Theoretical Design of Boron Nitride Based Electrocatalysts	A. Lyalin, G. Elumalai, H. Noguchi, K. Uosaki, T. Taketsugu	International Symposium on Electrocatalysis (ECAT2016) (Kanagawa)	2016/9/11-2016/9/14	国内	
79	Towards an Efficient Electrocatalyst for the Reduction of Oxygen to Water – Insulating Boron Nitride Nanosheet Decorated with Gold Nanoparticle on Inert Gold Electrode	G. Elumalai, H. Noguchi, A. Lyalin, T. Taketsugu, and K. Uosaki	International Symposium on Electrocatalysis (ECAT2016) (Kanagawa)	2016/9/11-2016/9/14	国内	

80	桂皮酸エステル誘導体の多段階項間交差経路	山崎馨、宮崎康典、 原渕祐、武次徹也、 前田理、井口佳哉、 木下真之介、住田聖太、 鬼塚侑樹、高口博志、 江原正博、江幡孝之	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
81	分割統治Hartree-Fock-Bogoliubov法による大規模系の静的電子相関計算	小林正人、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
82	炭素ドープによるh-BN 表面活性領域拡大に関する理論的研究	高敏、Ben Wang、足立将、 Andrey Lyalin、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
83	分子性結晶における項間交差経路の系統的探索:リン光能および光触媒能への理論的アプローチ	斉田謙一郎、岡田治樹、 原渕祐、前田理、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
84	酸化セリウム触媒の酸・塩基特性に関する理論的研究	中山哲、田村正純、 清水研一、長谷川淳也	第118回触媒討論会、盛岡	2016/9/21-2016/9/23	国内	
85	量子化学計算と機械学習を用いた金属クラスター触媒の活性因子の検討	小林正人、岩佐豪、高敏、高 木牧人、前田理、 武次徹也	第39回ケモインフォマティクス討論会(浜松)	2016/9/29-2016/9/30	国内	
86	NH ₂ ⁺ の解離性再結合反応に関する理論的研究	小山拓也、赤間知子、 武次徹也	化学系学協会北海道支部2017年冬季研究発表会(札幌)	2017/1/17-2017/1/18	国内	
87	Theoretical Study of Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of Ketones: A New Insight into a Classical Problem	Liming Zhao, Naoki Nakatani, Jun-ya Hasegawa	化学系学協会北海道支部2017年冬季研究発表会(札幌)	2017/1/17-2017/1/18	国内	
88	置換基効果を利用した共役ジエン系の励起緩和経路の制御	天宅建晴、荒木孝太郎、 跡部龍之介、佐藤壮太、 原渕祐、武次徹也、 関川太郎	応用物理学会春季学術講演会(横浜)	2017/3/14-2017/3/17	国内	
89	分割統治(DC)法に基づいた大規模近似量子化学計算における誤差の自動制御化	藤森俊和、小林正人、 武次徹也	日本化学会春季年会(日吉)	2017/3/16-2017/3/19	国内	
90	分割統治法とHartree-Fock-Bogoliubov法を組み合わせた大規模強相関系電子状態計算手法の開発とグラフェンナノリボンへの適用	児玉良輔、小林正人、 武次徹也	日本化学会春季年会(日吉)	2017/3/16-2017/3/19	国内	
91	速度定数行列縮約法を用いた反応経路自動探索の効率化:多成分連結反応への応用	住谷陽輔、武次徹也、 前田理	日本化学会春季年会(日吉)	2017/3/16-2017/3/19	国内	
92	塩化アルミニウムを用いるFriedel-Craftsアルキル化反応の触媒機構及び速度論に関する理論的研究	三瓶匡史、住谷陽輔、 前田理、武次徹也	日本化学会春季年会(日吉)	2017/3/16-2017/3/19	国内	
93	Pt(111)表面によるCO 酸化に対する反応経路ネットワークとその解析	杉山佳奈美、高木牧人、 斉田謙一郎、前田理、 武次徹也	日本化学会春季年会(日吉)	2017/3/16-2017/3/19	国内	
94	分割統治 SCF 計算における誤差の自動制御手法の開発	藤森俊和、小林正人、武次徹 也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	

95	Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミンの異性化経路の探索とグラフを用いた経路最適化	吉村誠慶, 前田理, 澤村正也, 武次徹也, 諸熊奎治, 森聖治	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
96	サブ課題C 研究事例「CO ₂ の低コスト分離・回収のためのシミュレーション技術の開発」	中井 浩巳	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
97	「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーションの開発・応用と展望」	西村 好史	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ:触媒元素戦略研究との連携を求めて	2016/11/29-2016/11/30	国内	
98	「Theoretical Development of Divide-and-Conquer based Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method and its Applications」	中井浩巳	名古屋大学講演会	2016年4月	国内	
99	「局所ユニタリー変換を用いた効率的な2成分相対論法のGAMESSへの実装」	中嶋裕也, 清野淳司, 中井浩巳	日本コンピュータ化学会2016春季年会	2016年6月	国内	
100	「核の量子効果を考慮した密度汎関数強束縛分子動力学法の開発とプロトンダイナミクスへの応用」	小野純一, 西村好史, 安藤耕司, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月	国内	
101	「結合クラスター線形応答理論を用いた分割統治型非局所励起状態計算法の開発」	吉原詢也, 吉川武司, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月	国内	
102	「量子化学計算とインフォマティクス技術を用いた反応予測システムの開発」	藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳	第39回ケモインフォマティクス討論会(旧情報化学討論会)	2016年9月	国内	
103	「高並列化学反応シミュレーションプログラムDC-DFTB-Kの高機能化とCO ₂ 分離回収過程への適用」	西村好史	PCoMSシンポジウム&計算物質科学スパコン共用事業報告会	2016年10月	国内	
104	「理論化学の最近の発展～個人的な視点から」	中井浩巳	東北大学 一般雑誌会講演会	2016年11月	国内	
105	「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」	中井浩巳	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月	国内	
106	「Excited-state calculation method using dynamical polarizabilities for large systems based on divide-and-conquer method」	Takeshi Yoshikawa	Third China-Japan-Korea tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-III)	2017年1月	国外	
107	CO ₂ の低コスト分離・回収のためのシミュレーション技術の開発	中井浩巳	重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016年12月	国内	
108	Linear-scaling quantum mechanical molecular dynamics simulations with divide-and-conquer density-functional tight-binding method	西村好史, Sakti Aditya Wibawa, 中井浩巳	日本化学会 第97春季年会(2017)	2017年3月	国内	
109	サブ課題C 研究事例「大規模並列量子化学計算プログラムSMASHの開発・公開とその応用計算」	石村 和也	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
110	「大規模並列量子化学計算プログラムの開発とその応用」	石村 和也	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ:触媒元素戦略研究との連携を求めて	2016/11/29-2016/11/30	国内	

111	「凝縮系の電荷分離状態における分子間相互作用に関する理論的研究」	石村 和也	第10回分子科学討論会	2016/9/13-2016/9/15	国内	
112	「Cu38微粒子によるNO-CO反応の理論研究」	石村 和也	第10回分子科学討論会	2016/9/13-2016/9/15	国内	
113	「SMASH: Massively parallel quantum chemistry program」	石村 和也	3rd Accelerated Data Analytics and Computing Institute Workshop	2017/1/25-2017/1/27	国内	

(2)ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	Application of Automated Reaction Path Search Methods to a Systematic Search of H ₂ dissociation Pathways Catalyzed by Gold Clusters	M. Gao, A. Lyalin, M. Takagi, S. Maeda, and T. Taketsugu	31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics	2015年6月	国内	
2	Catalytic Transfer Hydrogenation by Trivalent Phosphorus Compound: Phosphorus-Ligand Cooperation Compatible with PI/PIII Redox	G. Zeng, S. Maeda, T. Taketsugu, and S. Sakaki	31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics	2015年6月	国内	
3	A GRRM/AFIR Study on the Mechanism of Radical Generation and Propagation in the Autoxidation of Et3B/O ₂ System	C. Saka, R. Uematsu, S. Maeda, and T. Taketsugu	31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics	2015年6月	国内	
4	Automated search for reaction pathways of C(sp ³)-H activation catalysed by silica-supported monophosphine-Ir complex	M. Gao S. Maeda, M. Sawamura and T. Taketsugu	The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC)	2015年6月	国外	
5	Mechanistic study on C-H alkylation of alkenes with alcohols catalyzed by a cationic Ru(II) hydride complex: direct C-O bond activation	G. Zeng, S. Maeda, T. Taketsugu, and S. Sakaki	The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC)	2015年6月	国外	
6	人工力誘起反応法による表面化学反応の経路探索:Au表面によるCO酸化反応への適用	高木牧人、前田理、武次徹也	第9回分子科学討論会	2015年9月	国内	
7	トリエチルボラン/酸素系のラジカル発生機構: 反応経路探索と速度論解析による活性種の予測	坂智尋、植松遼平、住谷陽輔、前田理、武次徹也	第9回分子科学討論会	2015年9月	国内	
8	タンタル酸化物を用いた抵抗変化型メモリにおける動作機構の検討	中山哲、長谷川淳也、中村恒夫	第6回分子アーキテクニクス研究会	2015年10月	国内	
9	First-principles simulations of the switching mechanism in tantalum oxide-based resistive memory devices	A. Nakayama, J. Hasegawa, and H. Nakamura,	First International Symposium of Institute for Catalysis-Global Collaboration in Catalysis Science toward Sustainable Society	2015年10月	国外	
10	Theoretical study on the cavity effect of semihollow-ligands in gold(I)-catalyzed alkyne cyclizations	M. Gao, S. Maeda, T. Iwai, M. Sawamura, T. Taketsugu	Pacificchem2015	2015年12月	国外	
11	First-principles simulations of the switching mechanism in tantalum oxide-based resistive memory devices	A. Nakayama, J. Hasegawa, and H. Nakamura	Pacificchem2015	2015年12月	国外	

12	反応経路自動探索法を用いた金属クラスターのNO還元能評価法の検討	森田啓嗣、高木牧人、前田理、武次徹也	化学系学協会北海道支部2016年冬季研究発表会	2016年1月	国内	
13	Friedel-Craftsアルキル化反応の系統的理論研究: 反応設計指針の抽出を目指して	三瓶匡史、前田理、武次徹也	化学系学協会北海道支部2016年冬季研究発表会	2016年1月	国内	
14	Mechanism of ethylene oxidation by Pt catalyst supported on mesoporous silica: a theoretical study	R. Miyazaki, N. Nakatani, T. Yokoya, K. Nakajima, A. Fukuoka, J.-y. Hasegawa	The 5th International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis "Chemical Science for Future Societies"	2016年1月	国外	
15	First-principles simulations of oxygen vacancy transport at the metal/metal-oxide interface	A. Nakayama, J. Hasegawa, and H. Nakamura,	The 5th International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis "Chemical Science for Future Societies"	2016年1月	国外	
16	Exploration of Crystal Structures by Artificial Force Induced Reaction Method: Applications to Carbon Crystal	M. Takagi, M. Gao, S. Maeda, and T. Taketsugu	The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium "Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations"	2016年2月	国内	
17	Mechanism of ethylene oxidation by Pt catalyst supported on mesoporous silica: a theoretical study	R. Miyazaki, N. Nakatani, T. Yokoya, K. Nakajima, A. Fukuoka, J.-y. Hasegawa	The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium -Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations-	2016年2月	国外	
18	メソポーラスシリカ白金触媒によるエチレンの酸化メカニズムに関する理論的研究	宮崎玲、中谷直輝、長谷川淳也、横谷卓郎、中島清隆、福岡淳	第117回触媒討論会	2016年3月	国内	
19	白金触媒によるアミドのヒドロシラン還元に関する理論的研究	中谷直輝、砂田祐輔、永島英夫、長谷川淳也	第117回触媒討論会	2016年3月	国内	
20	大規模系に対するプロトン束縛エネルギー計算手法の開発とその応用	五十幡康弘、塚本祐介、中井浩巳	第18回理論化学討論会	2015年5月	国内	
21	核・電子軌道法による陽電子消滅 γ 線スペクトルの系統的解析	岩撫徹、五十幡康弘、中井浩巳	第18回理論化学討論会	2015年5月	国内	
22	重原子化合物の構造最適化計算のための高速な電子反撥積分の微分計算アルゴリズムの開発	速水雅生、清野淳司、中井浩巳	第18回理論化学討論会	2015年5月	国内	
23	陽電子消滅に関する理論的研究: γ 線スペクトル半値幅の系統的解析	岩撫徹、五十幡康弘、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2015春季年会	2015年5月	国内	
24	分割統治型自己無撞着場計算における収束性の改善	野中佑太郎、吉川武司、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2015春季年会	2015年5月	国内	
25	Evaluation of oxidation potentials of organic electrolyte solvents with highly accurate quantum chemical models for condensed-phase systems	Masaki Okoshi, Atsushi Ishikawa, Yoshiumi Kawamura, Hiromi Nakai	Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) - Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国外	

26	Photo-absorption property investigation of π -stacked trioxotriangulene derivatives	Qi Wang, Yasuhiro Ikabata, Takeshi Yoshikawa, Akira Ueda, Tsuyoshi Murata, Kazuki Kariyazono, Hiroshi Okamoto, Yasushi Morita, Hiromi Nakai	Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国外	
27	Rapid algorithms of electron repulsion integral for heavy-element systems	Masao Hayami, Junji Seino, Hiromi Nakai	Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国内	
28	Development of an efficient computational method for proton binding energies	Yasuhiro Ikabata, Yusuke Tsukamoto, Hiromi Nakai	Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国内	
29	Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry : a harmonic solvation model	Atsushi Ishikawa, Hiromi Nakai	Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国内	
30	Recent advances in divide-and-conquer density-functional tight-binding molecular dynamics simulations	Yoshifumi Nishimura, Hiroaki Nishizawa, Masato Kobayashi, Stephan Irle, Hiromi Nakai	Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国内	
31	Overall linear-scaling two-component relativistic scheme and its extension to molecular properties	Junji Seino, Yuya Nakajima, Hiromi Nakai	Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国内	
32	A divide-and-conquer method with approximate Fermi levels for parallel computations	Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai	Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations – Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015)	2015年6月	国内	
33	量子化学計算による気体の溶解度: 調和溶媒モデルによる検討	石川敦之、鎌田将宏、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
34	動的分極率を用いた非局所励起状態計算手法の開発: 密度汎関数理論によるアプローチ	吉川武司、王祺、五十幡康弘、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
35	動的分極率を用いた非局所励起状態計算手法の開発: 波動関数理論によるアプローチ	吉原詢也、吉川武司、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
36	金属ナノ粒子上での吸着活性化への担体効果に関する理論的研究	出牛史子、石川敦之、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
37	Divide and Conquer type Density Functional based Tight Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Simulation	Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	
38	局所応答分散力(LRD)法に基づく分極型力場の開発	若山和史、五十幡康弘、中井浩巳	第9回分子科学討論会2015東京	2015年9月	国内	

39	Development of linear-scaling divide-and-conquer DFTB method: Massively parallel DC-DFTB calculations on the K computer	Yoshifumi Nishimura, Hiroaki Nishizawa, Masato Kobayashi, Stephan Irle, Hiromi Nakai	Development of next generation accurate approximate DFT/B methods - Flagship workshop and tutorial	2015年10月	国外	
40	CO ₂ 分離・回収に用いるアミンの熱力学計算:高精度量子化学計算による検討	寺西慶、石川敦之、佐藤裕、中井浩巳	第5回CSJ化学フェスタ2015	2015年10月	国内	
41	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法によるプロトン拡散シミュレーション	西村好史、Sakti Aditya Wibawa、中井浩巳	第6回CMSI研究会(HPCI戦略プログラム分野2最終報告会)	2015年12月	国内	
42	Geometries and molecular properties of heavy main-group molecules based on two-component relativistic scheme	Yuya Nakajima, Junji Seino, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
43	Theoretical and experimental investigations on near-infrared absorption of trioxotriangulene derivatives with pi-stacked columnar structures	Qi Wang, Yasuhiro Ikabata, Takeshi Yoshikawa, Akira Ueda, Tsuyoshi Murata, Kazuki Kariyazono, Hiroshi Okamoto, Yasushi Morita, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
44	Quantum chemistry calculation for condensed-phase free energy: application to chemical reactions in solution	Atsushi Ishikawa, Hiromi Nakai	The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem) 2015	2015年12月	国外	
45	Efficient Evaluation of Electron Repulsion Integral and its Derivative for Molecules Including Heavy Elements	Masao Hayami, Junji Seino, Hiromi Nakai	The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	
46	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法によるプロトン拡散シミュレーション	西村好史、Sakti Aditya Wibawa、中井浩巳	TCCI第6回研究会	2016年3月	国内	
47	金属ナノ粒子によるCO酸化反応に関する理論的研究:CO被覆率及び担体効果に関する検討	石川敦之、出牛史子、中井浩巳	第117回触媒討論会	2016年3月	国内	
48	周期的境界条件を取り込んだ埋め込みクラスターモデルの開発	平井貴裕、石川敦之、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
49	2成分相対論に基づく励起状態計算のプログラム実装と応用計算	平賀健太、五十幡康弘、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
50	NO還元反応におけるRh触媒のサイズ効果に関する理論的研究	出牛史子、石川敦之、中井浩巳	日本化学会 第96春季年会 (2016)	2016年3月	国内	
51	サブ課題C 研究事例「クラスレートハイドレートの生成機構」	矢ヶ崎 琢磨	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
52	An interesting twist in the supercooled liquid water	Masakazu Matsumoto	The 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS2016)	2016/10/24-2016/10/27	国外	
53	サブ課題C 研究事例「京」を用いた反応経路探索の超並列化に向けた試み」	小野 ゆり子	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	

54	酸化セリウム触媒の酸・塩基特性に関する理論的研究	中山哲、田村正純、清水研一、長谷川淳也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
55	超配位構造の自動探索	松田光希、森田啓嗣、前田理、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
56	多成分系の量子化学計算解析のためのXMLスキーマの検討	小林正人、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
57	Cu13クラスターの構造異性体とNO吸着解離反応触媒活性)	岩佐豪、佐藤貴暁、高敏、Andrey Lyalin、小林正人、前田理、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
58	Long range functionalization of h-BN monolayer by carbon doping	高敏、Ben Wang、足立将、Andrey Lyalin、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
59	3項間漸化式に基づく効率的な時間発展法の開発	赤間知子、小林理、南部伸孝、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
60	レニウム(I)ピリジリトリカルボニル錯体の光反応性と項間交差	斉田謙一郎、原淵祐、前田理、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
61	Theoretical Study on Cooperative Catalysis of Constrained Pincer-type Phosphorus Compound: Mechanism, Electronic Process and Prediction	曾桂香、前田理、武次徹也、榊茂好	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
62	有機分子触媒によるピラジン誘導体ジホウ素化の反応機構に関する理論的研究	市野智也、武次徹也、前田理、大村智通、杉野目道紀	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
63	複雑反応経路網上で起こる単分子解離反応の分岐比の厳密解	住谷陽輔、前田理、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
64	Friedel-Craftsアルキル化反応の選択性に関する速度論的研究	三瓶匡史、住谷陽輔、前田理、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
65	反応経路地図上のAIMD古典軌道追跡によるダイナミクスの解析	堤拓朗、原淵祐、小野ゆり子、前田理、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
66	階層型バッファ領域を用いた分割統治(DC)法における誤差の自動制御	藤森俊和、小林正人、武次徹也	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
67	Theoretical design of novel nanocatalysts based on abundant elements	A. Lyalin and T. Taketsugu	第13回 GREENシンポジウム、NIMS	2016年6月	国内	
68	酸化セリウム触媒の酸・塩基特性に関する理論的研究	中山哲、田村正純、清水研一、長谷川淳也	物質創製化学研究推進機構キックオフシンポジウム、名古屋	2016年6月	国内	
69	鉄-硫黄クラスターの構造および電子状態に関する理論的研究	中谷直輝	物質創製化学研究推進機構キックオフシンポジウム、名古屋	2016年6月	国内	

70	Coupling Reaction of CO ₂ and Epoxide for Cyclic Carbonate Synthesis by Bifunctional Porphyrin Catalysts: a Theoretical Study	J. Hasegawa	Pre-symposium of 16th International Congress on Catalysis (16th ICC-Pre)& 2nd International Symposium of Institute for Catalysis "Novel Catalysts for Energy and	2016/6/30-2016/7/1	国内	
71	Geometry and electronic structures of iron-sulfur clusters: A theoretical study on the basis of density matrix renormalization group	N. Nakatani and J. Hasegawa	Pre-symposium of 16th International Congress on Catalysis (16th ICC-Pre)& 2nd International Symposium of Institute for Catalysis "Novel Catalysts for Energy and	2016/6/30-2016/7/1	国内	
72	Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of fac-[ReI(bpy)(CO) ₃ (PR ₃) ₂] ⁺ complex	K. SAITA, Y. HARABUCHI, T. TAKETSUGU, and S. MAEDA	the 23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC23) (Sydney)	2016/7/3-2016/7/8	国外	
73	Theoretical Study on Organocatalytic Diboration of Pyrazines: Radical-Mediated Catalytic Reaction	T. Ichino, T. TAKETSUGU, T. Ohno, M. Sugimoto, and S. MAEDA	the 23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC23) (Sydney)	2016/7/3-2016/7/8	国外	
74	Kinetic Analysis for Complex Reaction Networks: Importance of Conformational Entropy	Y. SUMIYA, T. TAKETSUGU, and S. MAEDA	the 23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC23) (Sydney)	2016/7/3-2016/7/8	国外	
75	Fragmentation-based approach to static electron correlation: Divide-and-conquer Hartree-Fock-Bogoliubov method	M. Kobayashi, T. Taketsugu	The 9th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics	2016/7/17-2016/7/22	国外	
76	Theoretical approach to photophysical properties of thiolate-protected icosahedral gold cluster	M. Ebina, T. Iwasa, and T. Taketsugu	The 12th Hokkaido University-Nanjing University-NIMS/MANA Joint Symposium	2016/7/29-2016/7/30	国内	
77	内部転換・項間交差経路の系統的自動探索: 蛍光・りん光強度の予測に向けて	原 遡 祐、齊 田 謙 一 郎、 前 田 理、武 次 徹 也	第28回配位化合物の光化学討論会(京都工 織大)	2016/8/8-2016/8/10	国内	
78	A TDDFT study on the excited states of ligand-protected icosahedral gold cluster	M. Ebina, T. Iwasa, and T. Taketsugu	ISSPIC XVIII – International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters	2016/8/14-2016/8/19	国外	
79	Systematic investigation on the geometry effect on the catalytic activity of gold clusters	M. Gao, M. Takagi, A. Lyalin, S. Maeda, and T. Taketsugu	International Symposium on small particles and inorganic Clusters	2016/8/14-2016/8/19	国外	
80	Statistical analysis for correlations between electronic properties and catalytic activity of a small metal cluster	T. Iwasa, T. Sato, M. Gao, M. Kobayashi, M. Takagi, S. Maeda, A. Lyalin, T. Taketsugu	18th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters	2016/8/15-2016/8/19	国外	
81	A theoretical study on the cavity effect of semi-hollow-ligand on Gold(I)-catalyzed alkyne cyclization	高敏、武次徹也、前田理、澤村正也	第33回有機合成化学セミナー	2016/9/6-2016/9/8	国内	
82	Theoretical Study on Copper-Catalyzed Allylic Alkylation of Terminal Alkynes: Mechanism, Origins of Regio- and Enantioselectivity	G. Zeng, S. Maeda, T. Taketsugu, H. Ohmiya and M. Sawamura	第33回有機合成化学セミナー	2016/9/6-2016/9/8	国内	
83	遷移状態構造データベースを使った金属クラスター触媒活性因子の抽出	小林正人、岩佐豪、高敏、高木牧人、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
84	結晶中における分子の発光能と項間交差経路探索	齊田謙一郎、岡田治樹、高木牧人、原遡祐、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	

85	[Rh6(NO)n]m+ (n = 0-7), (m = 0, 1)クラスターの構造と反応性に関する理論的研究	市野智也、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
86	単分子解離反応の分岐比を算出する速度定数行列完全縮約法の開発	住谷陽輔、武次徹也、前田理	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
87	非常に長いC-C単結合を有する化合物における分散力及び環境効果	黒田悠介、小林正人、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
88	金チオラートクラスターの励起状態と発光機構の解明	蝦名昌徳、岩佐豪、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
89	AFIR法を用いた結晶構造探索: 炭素の結晶構造探索への適用	高木牧人、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
90	1,2-ブタジエンの電子励起緩和による振動励起機構の解析	佐藤壮太、原渕祐、小野ゆり子、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
91	スチルベン誘導体の励起状態ポテンシャル曲面とダイナミクス	山本梨奈、原渕祐、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
92	塩化アルミニウムを用いるFriedel-Craftsアルキル化反応の機構解明	三瓶匡史、住谷陽輔、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
93	反応経路網上におけるAIMD古典軌道解析手法の開発と金クラスターへの応用	堤 拓朗、原渕祐、小野ゆり子、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
94	ステップのあるPt(111)表面上でのCO酸化反応の経路の系統的探索	杉山佳奈美、高木牧人、住谷陽輔、前田理、武次徹也	シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2016」(京都)	2016年9月	国内	
95	酸化セリウム触媒の酸・塩基特性に関する理論的研究	中山哲、田村正純、清水研一、長谷川淳也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
96	金属クラスターの触媒活性を決める電子物性のデータ科学的探索	岩佐豪、小林正人、佐藤貴暁、高 敏、高木牧人、Andrey Lyalin、前田理、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
97	第1,2,3級アミンとO3の反応速度定数に関する理論的考察	古濱彩子、今村隆史、前田理、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
98	プロトン付加フェニルアラニン・セリン2量体の多段階項間交差経路と光異性化反応路	山崎馨、原渕祐、前田理、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
99	[Rh _x (NO) _y] _z クラスターの系統的構造探索: 構造と反応性	市野智也、前田理、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
100	時間解像度に依存した反応ネットワークの階層的变化とその予測手法の開発	永幡裕、前田理、寺本央、武次徹也、小松崎民樹	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	

101	分子内Diels-Alder反応におけるコンフォメーションエントロピー	住谷陽輔、前田理、 武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
102	チオール分子で保護された金クラスターの励起状態と発光特性の解明	蝦名昌徳、岩佐豪、 武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
103	非常に長いC-C単結合を有するDSAPの構造に対する分散力環境の効果	黒田悠介、小林正人、 武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
104	人工力誘起反応法を用いた窒化ホウ素の結晶構造探索	高木牧人、前田理、 武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
105	振動マッピングによるAIMD古典軌道解析手法の開発	佐藤壮太、原淵祐、 小野ゆり子、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
106	スチルベン誘導体の光反応ダイナミクスに関する理論的研究	山本梨奈、原淵祐、 前田理、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
107	Friedel-Craftsアルキル化反応の位置選択性における助触媒効果の理論研究	三瓶匡史、住谷陽輔、 前田理、武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
108	反応経路網に基づくAIMD古典軌道解析と金クラスターへの応用	堤拓朗、原淵祐、 小野ゆり子、前田理、 武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
109	人工力誘起反応法によるPt(111)表面上でのCO酸化反応の系統的経路探索	杉山佳奈美、高木牧人、 住谷陽輔、前田理、 武次徹也	第10回分子科学討論会(神戸)	2016年9月	国内	
110	フェムト秒時間分解質量分析による共役ジエンの光励起緩和ダイナミクスの観測	跡部龍之介、天宅建晴、 関川太郎、佐藤壮太、 原淵祐、武次徹也、 赤木浩、板倉隆二	第10回分子科学討論会(神戸)	2016/9/13-2016/9/15	国内	
111	局所説明変数を用いたスパースモデリングによる異性体エネルギーの推定	小野田遼、小林正人、 武次徹也	第39回ケモインフォマティクス討論会(浜松)	2016/9/29-2016/9/30	国内	
112	演算子変換に基づく効率的な時間発展法の開発	赤間知子、小林理、 南部伸孝、武次徹也	第39回ケモインフォマティクス討論会(浜松)	2016/9/29-2016/9/30	国内	
113	反応経路自動探索法と多変量解析を用いた銅クラスターの触媒活性予測と解析	岩佐豪、小林正人、 佐藤貴暁、高敏、 高木牧人、Andrey Lyalin、 前田理、武次徹也	PCoMSシンポジウム&計算物質科学スパコン共有事業報告会	2016/10/17-2016/10/18	国外	
114	Electron dynamics described by real-time time-dependent Hartree-Fock and/or time-dependent density functional theory (RT-TDHF/TDDFT) calculation	T. Akama and T. Taketsugu	Workshop on Interstellar Matter 2016 (Sapporo)	2016/10/19-2016/10/21	国内	
115	Theoretical study on dissociative recombination reaction of NH ₂ ⁺	T. Koyama, T. Akama, and T. Taketsugu	Workshop on Interstellar Matter 2016 (Sapporo)	2016/10/19-2016/10/21	国内	
116	タンタル酸化物を用いた抵抗変化型メモリの動作機構に関する第一原理計算	中山哲、長谷川淳也、 中村恒夫	第7回分子アーキテクトニクス研究会、九州大学	2016/10/20-2016/10/21	国内	

117	Mechanism of the Photochemical Ligand Substitution of Tricarbonyl Re(I) Complex	K. Saita, Y. Harabuchi, S. Maeda, and T. Taketsugu	Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Kyoto	2016/10/26-2016/10/28	国内	
118	Systematic Exploration of Non-radiative Decay Pathways: Application to Photoreactions	Y. Harabuchi, K. Saita, S. Maeda, and T. Taketsugu	Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Kyoto	2016/10/26-2016/10/28	国内	
119	A Computational Study on Structures and Reactivity of $[Rh_6(NO)_n]^{q+}$ ($n = 0-7$) ($q = 0, 1$) by Artificial Force Induced Reaction Method	T. Ichino, S. Maeda, and T. Taketsugu	Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Kyoto	2016/10/26-2016/10/28	国内	
120	Multi-step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-based UV-B Sunscreens	K. YAMAZAKI, Y. MIYAZAKI, Y. HARABUCHI, T. TAKETSUGU, S. MAEDA, Y. INOKUCHI, S. KINOSHITA, M. SUMIDA, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, M. EHAR, and T. EBATA	Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Kyoto	2016/10/26-2016/10/28	国内	
121	内部転換・項間交差経路の系統的自動探索: 蛍光強度の理論予測に向けて(ポスター発表)	原 潤祐、齊田 謙一郎、前田 理、武次 徹也	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
122	$[Rh_6(NO)_x]^{q+}$ ($x=0-7$) ($q=0, 1$)の構造と NO 解離反応に関する理論的研究(ポスター発表)	市野 智也、前田 理、武次 徹也	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
123	桂皮酸エステル誘導体の多段階無輻射失活経路(ポスター発表)	山崎 馨、宮崎 康典、原 潤祐、武次 徹也、前田 理、井口 佳哉、木下 真之介、住田 聖太、鬼塚 侑樹、高口 博志、江原 正博、江幡 孝之	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
124	AFIR 法と周期境界条件を用いた結晶構造予測: 炭素結晶への適用(ポスター発表)	高木 牧人、前田 理、武次 徹也	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
125	1,3-ブタジエン誘導体の励起失活機構に関する理論的研究(ポスター発表)	佐藤 壮太、原 潤祐、武次 徹也	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
126	スチルベン光異性化ダイナミクスへの置換基効果に関する理論的研究(ポスター発表)	山本 梨奈、原 潤祐、前田 理、武次 徹也	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
127	反応経路網に基づく AIMD 解析: 金クラスターへの適用(ポスター発表)	堤 拓朗、原 潤祐、小野 ゆり子、前田 理、武次 徹也	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
128	h-BN/Au(111)に担持した金クラスターの触媒活性に関する理論的研究(ポスター発表)	中原 真希、高敏、A.Lyalin、武次 徹也	CREST 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」公開シンポジウム(札幌)	2016年12月	国内	
129	h-BN/Au(111)に担持した金クラスターの触媒活性に関する理論的研究	中原 真希、高敏、A.Lyalin、武次 徹也	化学系学協会北海道支部2017年冬季研究発表会(札幌)	2017/1/17-2017/1/18	国内	

130	物性値に拘束条件を課した構造最適化計算手法の開発	原田伊織, 中山哲, 長谷川淳也	化学系学協会北海道支部2017年冬季研究発表会(札幌)	2017/1/17-2017/1/18	国内	
131	酸化セリウム触媒の酸・塩基特性に関する理論的研究	中山哲, 田村正純, 清水研一, 長谷川淳也	第2回統合物質機構シンポジウム(札幌)	2017/1/26-2017/1/27	国内	
132	物性値に拘束条件を課した構造最適化計算手法の開発	原田伊織, 中山哲, 長谷川淳也	第2回統合物質機構シンポジウム(札幌)	2017/1/26-2017/1/27	国内	
133	Ab initio MD study of branching reactions in the excited-state potential energy surface	T. Taketsugu, R. Yamamoto, T. Tsutsumi, Y. Harabuchi, and S. Maeda	57th Sanibel Symposium, St. Simons Island, USA	2017/2/19-2017/2/24	国外	
134	A Theoretical Method for Infrared Absorption Spectroscopy based on the Multipolar Hamiltonian	T. Iwasa, M. Takenaka, and T. Taketsugu	57th Sanibel Symposium, St. Simons Island, USA	2017/2/19-2017/2/24	国外	
135	Promising catalytic activity of h-BN monolayer by doping C atoms	M. Gao, B. Wang, M. Adachi, A. Lyalin, T. Taketsugu	57th Sanibel Symposium, St. Simons Island, USA	2017/2/19-2017/2/24	国外	
136	Ab initio excited-state molecular dynamics approach including spin-orbit coupling and nonadiabatic coupling effects: An application to the photodissociation of CH ₃ I	M. Kamiya and T. Taketsugu	57th Sanibel Symposium, St. Simons Island, USA	2017/2/19-2017/2/24	国外	
137	Quantum Chemical Methods for Large-Scale Stimuli-Responsive Chemical Species: Divide-and-Conquer and Hartree-Fock-Bogoliubov Methods	M. Kobayashi, T. Fujimori, R. Kodama, T. Taketsugu	The 2nd International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules (Hiroshima)	2017/3/6-2017/3/7	国内	
138	Theoretical Study on the Surrounding Effect and Elongation of the Ultralong C-C Single Bond	Y. Kuroda, M. Kobayashi, T. Taketsugu	The 2nd International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules (Hiroshima)	2017/3/6-2017/3/7	国内	
139	表面モデル計算と統計手法によるメタン水蒸気改質触媒活性の評価	小野田遼, 小林正人, 武次徹也	日本化学会春季年会(日吉)	2017/3/16-2017/3/19	国内	
140	量子化学計算とインフォマティクスを用いたメタン水蒸気改質触媒能の評価	小林正人, 小野田遥, 武次徹也	第119回触媒討論会(八王子)	2017/3/21-2017/3/22	国内	
141	酸化セリウム触媒を用いた二酸化炭素とメタノールからのジメチルカーボネート合成に関する理論的研究	杉山利行, 中山哲, 長谷川淳也	第119回触媒討論会(八王子)	2017/3/21-2017/3/22	国内	
142	チオール分子で保護された金クラスターの励起状態と発光機構の解明	蝦名昌徳, 原淵祐, 岩佐豪, 武次徹也	ナノ学会第15回大会(札幌)	2017/5/10-2017/5/12	国内	
143	クラスターモデルでの酸化物担持金属クラスター触媒の電子物性	岩佐豪, 武次徹也	ナノ学会第15回大会(札幌)	2017/5/10-2017/5/12	国内	
144	Wide Catalytic Activation Area of h-BN Surface by Doping C Atoms	M. Gao, M. Adachi, A. Lyalin, T. Taketsugu	ナノ学会第15回大会(札幌)	2017/5/10-2017/5/12	国内	
145	Theoretical Study of Palladium-Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quininoxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand	M. Ratanasak, M. Suginome, J. Hasegawa	The 2nd International Symposium on Precision Controlled Reaction Field(大阪)	2017/5/12-2017/5/13	国内	
146	Theoretical Study of Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of Ketones: Chalk-Harrod vs Modified Chalk-Harrod Mechanism	L. Zhao, N. Nakatani, J. Hasegawa	The 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis, Kaderu 27(札幌)	2017/5/15-2017/5/17	国内	

147	Reaction Mechanism of DMC Formation from CO ₂ and Methanol over CeO ₂ (111): A DFT Study	T. Sugiyama, A. Nakayama, J. Hasegawa	The 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis, Kaderu 27 (札幌)	2017/5/15-2017/5/17	国内	
148	演算子変換による効率的な時間発展法: 3 項間漸化式法	赤間知子, 小林理, 南部伸孝, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
149	第一原理ダイナミクスによる NH ₂ ⁺ の解離性再結合反応に関する理論的研究	小山拓也, 赤間知子, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
150	ポテンシャル交差構造探索の新実装: 勾配射影法と人工力誘起反応法に基づく構造探索	原淵祐, 斉田謙一郎, 武次徹也, 前田理	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
151	AIMD/spin-flip TDDFT による α -メチルステルベンの光異性化ダイナミクスの解明	堤拓朗, 山本梨奈, 原淵祐, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
152	Zn(II)錯体の励起状態プロトン移動に由来した発光機構の解明	蝦名昌徳, 岩佐豪, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
153	Cu/CeO ₂ の電子物性と NO 解離反応に対する触媒活性	岩佐豪, A. Lyalin, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
154	h-BN/Au(111)に担持した金クラスターの触媒活性に関する理論的研究	高敏, 中原真希, A. Lyalin, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
155	分割統治 Hartree-Fock-Bogoliubov エネルギー勾配法の開発	小林正人, 児玉良輔, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
156	Theoretical Design of Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction: When Boron Nitride Meets Gold	A. Lyalin, K. Uosaki, T. Taketsugu	2017 International Workshop on Electrified Interfaces for Energy Conversions (EIC2017) (Shonan)	2017/5/18-2017/5/21	国内	
157	Theoretical study of photoreaction mechanism based on automated exploration of minimum energy conical intersection and seam of crossing geometries	Y. Harabuchi, K. Saita, T. Taketsugu, S. Maeda	The 28th International Conference on Photochemistry (ICP 2017) (Strasbourg, France)	2017/7/16-2017/7/21	国外	
158	サブ課題C 研究事例「Acceleration of divide-and-conquer DFTB calculation for huge periodic systems」	西村 好史	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
159	サブ課題C 研究事例「Automatized Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Transition Metals」	Chien-Pin Chou	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
160	「群知能による凍結内殻ポテンシャル法を参照としたモデルポテンシャル自動決定手法の開発」	清野淳司, 速水雅生, 中嶋裕也, 中井浩巳	第19回理論化学討論会	2016年5月23日	国内	
161	「金属ナノ粒子によるCO酸化反応に関する理論的研究: CO被覆率及び担体効果の検討」	石川敦之, 出牛史子, 中井浩巳	第19回理論化学討論会	2016年5月23日	国内	
162	「調和近似を超えた液相の比熱の量子化学計算」	今井みの莉, 石川敦之, 中井浩巳	第19回理論化学討論会	2016年5月23日	国内	
163	「Picture change補正による電子密度を用いた2成分相対論的密度汎関数理論の開発」	大山拓郎, 五十幡康弘, 清野淳司, 中井浩巳	第19回理論化学討論会	2016年5月23日	国内	

164	「2成分相対論的時間依存密度汎関数理論による内殻励起計算」	平賀健太, 五十幡康弘, 中井浩巳	第19回理論化学討論会	2016年5月23日	国内	
165	「量子化学計算と機械学習を用いた化学反応予測システムの開発」	藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳	第19回理論化学討論会	2016年5月24日	国内	
166	「量子化学計算情報を記述子とした機械学習に基づく反応予測手法の開発」	藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳	日本コンピュータ化学会2016春季年会	2016年6月2日	国内	
167	「局所応答分散力(LRD)法に基づく非経験的分極型力場の開発」	若山和史, 五十幡康弘, 中井浩巳	日本コンピュータ化学会2016春季年会	2016年6月3日	国内	
168	「スカラー相対論法に基づく分割統治型電子相関プログラムの自動実装」	吉川武司, 中野匡彦, 平田聡, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月15日	国内	
169	「ラジカル1次元鎖の励起状態と光吸収に関する理論的研究」	五十幡康弘, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月15日	国内	
170	「有機ラジカル結晶における電荷キャリア移動度に関する理論的研究」	王祺, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月15日	国内	
171	「アミンへのCO ₂ 吸収反応に対する反応シミュレータの開発」	長門澄香, 寺西慶, 清野淳司, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月15日	国内	
172	「不均一触媒系の反応活性に対する理論的研究: 様々な金属種におけるアンモニア合成の解析」	土井俊輝, 石川敦之, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月15日	国内	
173	「NO還元反応におけるRhナノクラスターのサイズ効果に関する理論的研究」	出牛史子, 平井貴裕, 石川敦之, 中井浩巳	第10回分子科学討論会	2016年9月15日	国内	
174	「量子化学計算と群知能を用いたアミン-CO ₂ 系反応に対する反応シミュレータの開発」	長門澄香, 寺西慶, 清野淳司, 中井浩巳	第39回ケモインフォマティクス討論会(旧情報化学討論会)	2016年9月29日	国内	
175	「Acceleration of divide-and-conquer DFTB calculation for huge periodic systems」	Yoshifumi Nishimura	International CECAM-Workshop~Approximate quantum methods in the ab initio world	2016年11月9日	国外	
176	「DFTB application on interlayer vibrations in pi-stacked organic crystals」	Qi Wang	International CECAM-Workshop~Approximate quantum methods in the ab initio world	2016年11月9日	国外	
177	「Divide-and-Conquer Type DFTB Application for Hydronium and Hydroxide Ions Diffusion in the Bulk Water System」	Aditya Wibawa Sakti	International CECAM-Workshop~Approximate quantum methods in the ab initio world	2016年11月9日	国外	
178	「Rh表面上でのNO還元反応に対する温度及び圧力効果に関する理論的研究」	平井貴裕, 石川敦之, 中井浩巳	第6回CSJ化学フェスタ2016	2016年11月15日	国内	
179	「アミン-CO ₂ 系反応におけるローディング依存性を予測する反応シミュレータの開発」	長門澄香, 寺西慶, 清野淳司, 佐藤裕, 古川行夫, 中井浩巳	第6回CSJ化学フェスタ2016	2016年11月15日	国内	
180	「量子化学計算と機械学習を用いた反応予測システムの開(2): 量子化学計算条件に対する依存性」	藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳	第6回CSJ化学フェスタ2016	2016年11月16日	国内	

181	「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学法のシクロファン類の異性化反応への応用」	黄毅聰, 西村好史, 小野純一, 鹿又宣弘, 中井浩巳	第30回分子シミュレーション討論会	2016年12月1日	国内	
182	「白金触媒を用いたトルエンの水素化反応に関する理論的研究」	菊池那明	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
183	「インフォマティクス技術と量子化学を活用した化学反応予測システムの開発」	清野淳司	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
184	「RhクラスターによるNO還元反応におけるサイズ効果に関する理論的研究」	石川敦之	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
185	「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学法の開発と応用」	西村好史	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
186	「有機ラジカル結晶における電荷キャリア移動度と分子間振動に関する理論的研究」	王祺	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
187	「次世代汎用相対論的量子化学計算パッケージRAQETの現状」	速水雅生	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
188	「カチオン性イリジウム触媒を用いたC-H活性化反応の理論的研究」	中村亮太	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
189	「2成分相対論的密度汎関数理論におけるPicture change効果」	大山拓郎	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
190	「Rh(111)におけるNOの吸着・解離に関する理論的研究: 温度および表面構造の効果」	平井貴裕	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月13日	国内	
191	「無限次Douglas-Kroll-Hess法に基づく相対論的スピン依存密度汎関数理論」	平賀健太	相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計	2016年12月	国内	
192	Acceleration of divide-and-conquer DFTB calculation for huge periodic systems	西村好史	重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016年12月	国内	
193	Automatized Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Transition Metals	周建斌	重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム	2016年12月13日	国内	
194	「大規模並列MP2エネルギー微分計算アルゴリズムの開発と実装」	石村 和也	第19回理論化学討論会	2016/5/23-2016/5/25	国内	
195	「SMASH: Massively parallel quantum chemistry program」	石村 和也	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2017	2017/1/9-2017/1/10	国内	
196	「大規模並列量子化学計算プログラムSMASH」	石村 和也	自然科学研究機構計算科学研究センター スーパーコンピュータワークショップ2016	2017/2/1-2017/2/2	国内	
197	All-atom molecular dynamics simulations of amyloid beta fibril in explicit water	奥村久士	STATPHYS 26	2016/7/18-22	国外	

(3)招待講演

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	Structure, Dynamics, and Thermodynamic Stability of Clathrate Hydrates and High Pressure Filled Ices, Plenary	H. Tanaka	The 5th Annual Basic Science International Conference (BaSIC 2015), ATRIA HOTEL & CONFERENCE MALANG, Malang, Indonesia	2015年2月	国外	○
2	理論と実験のインタープレイによる電極触媒設計へのアプローチ	T. Taketsugu and A. Lyalin	第10回ナノ材料科学環境拠点シンポジウム	2015年6月	国内	○
3	Development of the Global Reaction Route Mapping Strategy for Catalysis	S. Maeda	3rd Challenges in Computational Homogeneous Catalysis	2015年9月	国外	○
4	人工力誘起反応法を用いる有機反応・光反応の機構解析:手法開発から応用まで	前田理	化学反応経路探索のニューフロンティア2015	2015年9月	国内	○
5	反応経路自動探索法による反応機構解析	前田理	2015年有機反応機構研究会	2015年9月	国内	○
6	Ab initio excited-state molecular dynamics approach to photoreactions	T. Taketsugu	6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry	2015年10月	国外	○
7	Development of the Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy toward Systematic Understanding of Organic and Photochemical Reactions	S. Maeda	Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems	2015年11月	国外	○
8	Theoretical Study of CO ₂ Fixation by a Bifunctional Porphyrin Catalyst	J. Hasegawa	ICIQ-FIFC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Comple Systems	2015年11月	国外	○
9	CO ₂ fixation mechanism of bifunctional porphyrin catalyst: a theoretical study	J. Hasegawa	Pacificchem2015	2015年12月	国外	○
10	Ab initio dynamics study on photo-chemical reactions	T. Taketsugu	2016 Joint Japan-Thai-Vietnam Workshop on Theoretical and Computational Chemistry	2016年1月	国内	○
11	QC-DMRG Algorithm on the Tree Tensor Network States	N. Nakatani	The 75th Okazaki Conference Tensor Network States: Algorithms and Applications	2016年1月	国外	○
12	触媒反応への理論化学からのアプローチ:実験との協働と概念の提案	武次徹也	分子研研究会 触媒の分子科学:理論と実験のインタープレイ最前線	2016年3月	国内	○
13	大規模系の量子化学計算と高次元データ抽出	小林正人	分子技術イニシアティブセミナー「分子技術と理論計算・データ科学」	2016年3月	国内	○
14	First-principles simulations of oxygen vacancy transport at the metal/metal-oxide interface	A. Nakayama	ICCMSE 2016 (Computational Chemistry)	2016年3月	国外	○
15	量子化学における多体相関問題と密度行列繰込み群	中谷直輝	トポロジカル物性と計算物質科学が創出する新物質科学に関する研究会	2016年3月	国内	○

16	氷、ハイドレートの熱力学的安定性と相転移ダイナミクス	田中秀樹	第10回分子科学討論会	2016/9/13-15	国内	○
17	「包接水和物の分子シミュレーション」	矢ヶ崎 琢磨, 松本正和, 田中秀樹	PCoMSシンポジウム & 計算物質科学スパコン 共用事業報告会	2016/10/17-2016/10/18	国内	○
18	Structure, Dynamics, and Thermodynamic Stability of High Pressure Ices and Clathrate Hydrates	Hideki Tanaka	The 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS2016)	2016/10/24-2016/10/27	国外	○
19	氷、ハイドレートの熱力学的安定性と相転移ダイナミクス	田中秀樹	PCoMS合宿セミナー	2016年10月	国内	○
20	クラスレートハイドレートの分子動力学シミュレーション	矢ヶ崎 琢磨	「自然科学における階層と全体」シンポジウム	2017/2/14-2017/2/15	国内	○
21	有機反応の系統的な理解と設計へ向けた反応経路自動探索法の開発	前田理	第28回万有札幌シンポジウム	2016年7月	国内	○
22	量子化学計算とインフォーマティクス: 触媒開発への応用を目指して	小林正人	触媒開発への応用を目指したインフォーマティクス研究会	2016年7月	国内	○
23	Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy for Automated Exploration of Reaction Pathways	S. Maeda	The 12th Hokkaido University-Nanjing University-NIMS/MANA Joint Symposium	2016/7/29-2016/7/30	国内	○
24	Ab initio study of photo-isomerization reaction dynamics	T. Taketsugu	International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, Kuching, Malaysia	2016/8/15-2016/8/18	国外	○
25	Role of the Acid-Base Sites in Catalytic Reactions at the Water/CeO ₂ (111) Interface: First-Principles Simulations	A. Nakayama	International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, Kuching, Malaysia	2016/8/15-2016/8/18	国外	○
26	Transition states of spin-crossing reactions	J. Hasegawa	International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, Kuching, Malaysia	2016/8/15-2016/8/18	国外	○
27	反応経路分岐の理論化学	武次徹也	2016年有機反応機構研究会(長崎県工業技術センター)	2016/9/5-2016/9/7	国内	○
28	反応経路自動探索法の開発と触媒への展開	前田理	第118回触媒討論会	2016/9/21-2016/9/23	国内	○
29	Theoretical study of substituent effects on excited-state dynamics of stilbene	T. Taketsugu	2nd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2016 (Yokohama)	2016/9/21-2016/9/22	国内	○
30	Catalytic Reactions at the Water/Ceria Interface: Role of the Acid-Base Sites	A. Nakayama	International Symposium on Multi-Scale Simulation of Condensed-Phase Reacting Systems, Nagoya, Japan	2016/10/10-2016/10/13	国内	○
31	Static and dynamical electron correlation calculations of large systems based on the divide-and-conquer method	M. Kobayashi	EMN Meeting on Computation and Theory 2016	2016/10/10-2016/10/14	国外	○
32	Transition states of spin-crossing reactions	J. Hasegawa	EMN Meeting on Computation and Theory, Las Vegas, USA	2016/10/10-2016/10/14	国外	○

33	On-the-fly dynamics study on the photoisomerization mechanism of stilbene and its derivative	T. Taketsugu	Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Kyoto	2016/10/26-2016/10/28	国内	○
34	Catalytic reactions at the liquid/metal-oxide interface: role of the acid-base sites	A. Nakayama	Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Kyoto	2016/10/26-2016/10/28	国内	○
35	拘束条件を付したポテンシャル面上の最適化問題	長谷川淳也	第3回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学	2016年11月	国内	○
36	Ab Initio Approach to Photoreaction Dynamics	T. Taketsugu	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
37	Constraint Structure Optimization on Potential Energy Surface	J. Hasegawa	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
38	Quantum Chemical Calculation Meets Informatics: Toward Application to Catalyst Development	M. Kobayashi	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
39	Computational Spectroscopy beyond the Dipole Approximation	T. Iwasa	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
40	A theoretical design of catalyst based on h-BN surface	M. Gao	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
41	人工力誘起反応法:最近の応用例と今後の可能性	前田理	IQCE量子化学探索講演会2016「量子化学で探る化学の最先端」	2016年11月	国内	○
42	反応経路自動探索法を用いた有機反応の機構解析と予測	前田理	第9回有機触媒シンポジウム	2016/12/1-2016/12/2	国内	○
43	触媒開発に理論化学は役に立つか? 未知触媒と未知反応機構へのアプローチ	武次徹也	住友化学講演会(千葉)	2016年12月	国内	○
44	大規模量子化学計算の基礎	小林正人	第6回量子化学スクール「基礎理論と複雑分子系の理論」	2016/12/19-2016/12/20	国内	○
45	Ab initio MD study of branching reactions in the excited-state potential energy surface	T. Taketsugu	GAMESS7557SSEMAG Palindromic birthday theory symposium, Kauai, USA	2017/1/15-2017/1/18	国外	○
46	反応経路自動探索GRRMプログラムの最近の展開	前田理	第7回NTChemワークショップ(東京)	2017年3月	国内	○
47	データ科学を利用した量子化学計算結果の解析と触媒への応用	小林正人	1st AICS materials informatics school: 情報・データ科学との連携・融合による物性物理・量子化学の新展開(神戸)	2017/3/22-2017/3/23	国内	○
48	Exploring adiabatic and nonadiabatic pathways for understanding and designing chemical reactions	S. Maeda	33rd symposium on chemical kinetics and dynamics (Nagoya)	2017/6/7-2017/6/9	国内	○
49	Theoretical approach to reaction-path bifurcation	T. Taketsugu	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○

50	Analyzing Quantum Chemical Calculation Results with Informatics Techniques: Toward Application to Catalyst Development	M. Kobayashi	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
51	Theoretical Spectroscopy beyond the Dipole Approximation	T. Iwasa	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
52	Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach	J. Hasegawa, K. Yanai, K. Ishimura	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
53	First-principles simulations of catalytic reactions at the liquid/CeO ₂ interface: role of the acid-base sites	A. Nakayama	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
54	A Hidden Feature in Static Intrinsic Reaction Coordinate Analysis: Bifurcation	T. Taketsugu	3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017 (Yokohama)	2017/7/14-2017/7/15	国内	○
55	Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach	J. Hasegawa	3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017 (Yokohama)	2017/7/14-2017/7/15	国内	○
56	Automated search for nonradiative pathways in molecules and organometallic complexes	S. Maeda	The 28th International Conference on Photochemistry (ICP 2017) (Strasbourg, France)	2017/7/16-2017/7/21	国外	○
57	Computational approach to design of non-platinum catalyst for oxygen reduction reaction: boron nitride with gold	T. Taketsugu	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
58	Theoretical study of frustrated Lewis pair for activation of stable chemical bonds	J. Hasegawa	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
59	Catalytic reactions at the liquid/metal-oxide interface: role of the acid-base sites	A. Nakayama	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
60	Reactivity of gold clusters in the regime of structural fluxionality	M. Gao	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
61	「理論化学シミュレーションによる二次電池用電解液の物性評価」	大越昌樹	次世代ESICBセミナー2016-1	2016年4月25日	国内	○
62	「分割統治(DC)法の理論と応用」	中井浩巳	近畿化学協会コンピュータ化学部会例会(講演会)	2016年6月13日	国内	○
63	「Computational Study on CO ₂ Chemical Absorption Process」	Hiroshi Nakai	2016 International Congress for Innovation in Chemistry (PERCH-CIC Congress IX)	2016年6月27日	国外	○
64	「Chemical Reaction Simulations of Large Systems」	Hiroshi Nakai	VISTEC Symposium on Novel Chemistry and Engineering	2016年6月30日	国外	○
65	「Nuclear Orbital plus Molecular Orbital (NOMO) Theory: Overview and Recent Progress」	Hiroshi Nakai	9th Workshop on Mathematical Methods for Ab Initio Quantum Chemistry	2016年7月4日-5日	国外	○

66	「Harmonic Solvation Model (HSM) to Evaluate Condensed-Phase Thermochemistry by Quantum Chemical Calculation」	Hiromi Nakai	2016 Canadian Symposium on Theoretical and Computational Chemistry (GSTCC2016)	2016年7月13日	国外	○
67	「Linear-Scaling Method for Nonlocal Excited States by Dynamical Polarizability Computations」	Hiromi Nakai	9th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics(ISTCP-IX)	2016年7月19日	国外	○
68	「Development of Divide-and-Conquer type Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method and its Applications to Chemical Reaction Simulations of Large Systems」	Hiromi Nakai	Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2016)	2016年8月30日	国外	○
69	「Relativistic spin-dependent open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry: Unrestricted and restricted approaches」	Masahiko Nakano, Ryota Nakamura, Junji Seino, Hiromi Nakai	Workshop on Current Trends and Future Directions in Relativistic Many Electron Theories (RMET2016)	2016年9月26日	国内	○
70	「Divide-and-conquer density-functional tight-binding molecular-dynamics (DC-DFTB-MD) simulations for nano-scale chemical reaction systems」	Hiromi Nakai	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016年10月26日	国内	○
71	「Recent Advances of DC-DFTB-K Program」	Hiromi Nakai	International CECAM-Workshop~Approximate quantum methods in the ab initio world	2016年11月9日	国外	○
72	「Theoretical Study on CO ₂ Chemical Absorption Process」	Hiromi Nakai	Thai-Japan Symposium in Chemistry	2016年11月14日-16日	国外	○
73	「ナノスケール化学反応系に対する分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーション」	中井浩巳	第30回分子シミュレーション討論会	2016年12月1日	国内	○
74	Chemical Reaction Simulations treated by Linear-Scaling Divide-and-Conquer type Density-Functional based Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method	Hiromi Nakai	253rd ACS National Meeting	2017年4月	国外	○
75	Molecular dynamics simulations for creation and disruption of amyloid fibrils	奥村久士	International Symposium on Molecular Science - Physical Chemistry/Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, Computational Chemistry	2017/3/16-19	国内	○
76	All-atom molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils	奥村久士	Institute for Protein Research (IPR) Seminar	2017/1/26-27	国内	○
77	Equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils	奥村久士	10th International Conference on Computational Physics	2017/1/17-20	国外	○
78	Computational molecular science to reveal dynamical ordering of amyloid fibril	奥村久士	Okazaki Institute for Integrative Bioscience Retreat	2016/11/21-22	国内	○
79	Molecular dynamics simulations to study dynamical ordering of amyloid fibril	奥村久士	NCTS October Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems	2016年10月	国外	○
80	Molecular dynamics simulations for assembly and disassembly of A β amyloid fibrils	奥村久士	8th IKUSTAR	2016/6/2-3	国外	○
81	Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation Program	石村和也	2017 NCTS International Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems	2017/3/30-31	国外	○
82	Molecular dynamics simulations for fluctuation and disruption of amyloid fibril	奥村久士	2017 NCTS International Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems	2017/3/30-31	国外	○

