

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

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I ₂ 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	原淵祐、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Au ₆ 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	