

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

サブ課題代表者:天能 精一郎

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	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	
2	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	
3	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	
4	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	
5	NTChem: Quantum Chemistry on K Computer	T. Nakajima	12th ICCMSE 2016, Athens	2016年3月	国外	
6	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	
7	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	
8	Recent Progress in NTChem	T. Nakajima	7th Asia-Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry, Taiwan	2016年1月	国外	
9	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	
10	NTChem: A high-performance software package for molecular electronic structure calculation	T. Nakajima	PACIFICHEM2015, Honolulu	2015年12月	国外	
11	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	
12	NTChemと相対論的分子理論	中嶋隆人	分子研研究会 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	
13	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	

14	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	
15	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	
16	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	
17	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	ICIQ-FIFC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems	2015年11月	国外	
18	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	JCS-2015 Symposium	2015年10月	国外	
19	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	
20	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	
21	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	
22	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	
23	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	Gordon Research Conferences “Dynamics at Surfaces”	2015年8月	国外	
24	Carrier Dynamics of Organic-Inorganic Metal Halide Perovskite Semiconductors	Koichi Yamashita	9th Ultrafast Surface Dynamics	2015年5月	国外	
25	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	

(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)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	“NTChem: Quantum Chemistry on K Computer”	Takahito Nakajima	12th ICCMSE 2016	2016年3月	国外	○

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

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2回公開シンポジウム	2016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2回公開シンポジウム	2016年3月	国内	
3	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	
4	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	
5	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	
6	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	
7	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	
8	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	
9	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	
10	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	
11	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	
12	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	
13	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	
14	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	
15	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	

16	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	
17	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	
18	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	
19	Computational Molecular Technology towards Macroscopic Chemical Phenomena: Molecular Control of Complex Chemical Reactions, Stereospecificity and	Masataka Nagaoka	Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	
20	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	
21	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	

(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	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	
2	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	
3	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	
4	First-Principles Study of LiCoO ₂ /Sulfide Interfaces for Solid-Dtate 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	
5	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	
6	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	
7	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	

8	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	
9	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	
10	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	
11	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	
12	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	
13	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	
14	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	
15	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	
16	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	
17	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	
18	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 structure calculations	2015年6月	国外	
19	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	
20	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	
21	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	

22	Additive Effect of Difluoroethylene Carbonate on the Solid Electrolyte Ineterphase Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Quantum Chemical and Hybrid MC/MD Simulation Study	Purushotham Uppula, Norio Takenaka, Masataka Nagaoka	Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7)	2016年1月	国外	
23	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	
24	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, 榑茂好, 岡崎進	第38回溶液化学シンポジウム	2015年10月	国内	
25	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, 榑茂好, 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	
26	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	
27	高速多重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	

(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	○

サブ課題C: エネルギー・資源の有効利用ー化学エネルギー

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	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	
2	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	
3	「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	
4	「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	2016/9/13-2106/9/15	国内	
5	「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	
6	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	
7	「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	
8	「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	
9	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 遼祐, 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	
10	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	
11	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	
12	Non-radiative decay pathways of trans-para-methoxy methylcinnamate	K. YAMAZAKI, Y. HARABUCHI, T. TAKETSUGU, S. MAEDA, Y. MIYAZAKI, S. KINOSHITA, Y.	32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (Saitama)	2016/6/1-2016/6/3	国内	

13	Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of fac-[ReI(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	
14	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	
15	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 Environmental Issues", 札幌	2016/6/30-2016/7/1	国内	
16	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	
17	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	斉田謙一郎、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	
18	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	
19	Transition states of spin-crossing reactions	J. Hasegawa	BIC-ICAT Workshop、札幌	2016年8月	国内	
20	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	
21	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	
22	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	
23	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、	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	
24	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	
25	炭素ドーブによる 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	
26	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	
27	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	
28	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	

29	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	
30	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	
31	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、	応用物理学会春季学術講演会(横浜)	2017/3/14-2017/3/17	国内	
32	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	
33	分割統治法とHartree-Fock-Bogoliubov法を組み合わせた大規模強相関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	
34	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:多成分連続反応への応用	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	
35	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	
36	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	
37	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	
38	「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	
39	「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	
40	「局所ユニタリ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	
41	「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	
42	「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	
43	「量子化学計算とインフォー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回ケモインフォーマティクス討論会(旧情報化学討論会)	2016年9月	国内	

44	「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	
45	「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	
46	「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	
47	「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	
48	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	
49	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	
50	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	
51	「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	
52	「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	
53	「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	
54	「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	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	
2	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	
3	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	
4	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	
5	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	
6	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	
7	Cu ₁₃ 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	
8	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	
9	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	
10	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	齊田謙一郎、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	
11	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、榎茂好	第19回理論化学討論会、早稲田大学	2016/5/23-2016/5/25	国内	
12	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	
13	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	
14	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	

15	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、原渕祐、 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	
16	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	
17	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	
18	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	
19	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	
20	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 Environmental Issues"、札幌	2016/6/30-2016/7/1	国内	
21	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 Environmental Issues"、札幌	2016/6/30-2016/7/1	国内	
22	Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of fac-[Re(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	
23	Theoretical Study on Organocatalytic Diboration of Pyrazines: Radical-Mediated Catalytic Reaction	T. Ichino, T. TAKETSUGU, T. Ohno, M. Suginome, and S. MAEDA	the 23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC23) (Sydney)	2016/7/3-2016/7/8	国外	
24	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	
25	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	
26	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	
27	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	原渕祐、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(京都工繊大)	2016/8/8-2016/8/10	国内	
28	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	

29	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	
30	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	
31	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	
32	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	
33	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	
34	結晶中における分子の発光能と項間交差経路探索	斉田謙一郎、岡田治樹、高木牧人、原淵祐、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	
35	[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	
36	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	
37	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	
38	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	
39	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	
40	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、原淵祐、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	
41	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、原淵祐、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	
42	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	
43	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、原淵祐、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	

44	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	
45	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	
46	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	
47	第1,2,3級アミンとO ₃ 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	
48	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	
49	[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	
50	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	
51	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	
52	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	
53	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	
54	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	
55	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	
56	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	
57	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	
58	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	

59	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	
60	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、原渕祐、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	
61	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	
62	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	
63	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	
64	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	
65	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	
66	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	
67	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	
68	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	
69	A Computational Study on Structures and Reactivity of $[\text{Rh}_6(\text{NO})_n]^{q+}$ ($n = 0-7$) ($q = 0, 1$) 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	
70	Multi-step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-based UV-B Sunscreens	K. YAMAZAKI, Y. MIYAZAKI, Y. HARABUCHI, T. TAKETSUGU, S. MAEDA, Y.	Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Kyoto	2016/10/26-2016/10/28	国内	
71	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)	原渕祐、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	
72	$[\text{Rh}_6(\text{NO})_x]^{q+}$ ($x=0-7$) ($q=0, 1$)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	

73	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	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	
74	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	
75	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、原渕祐、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	
76	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、原渕祐、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	
77	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、原渕祐、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	
78	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	
79	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	
80	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	
81	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	
82	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	
83	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	
84	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	

85	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	
86	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	
87	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	
88	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	
89	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	
90	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、小野田遼、武次徹也	第119回触媒討論会(八王子)	2017/3/21-2017/3/22	国内	
91	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	
92	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	
93	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	
94	「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	
95	「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	
96	「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	
97	「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	

98	「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	
99	「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	
100	「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	
101	「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	
102	「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	
103	「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	
104	「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	
105	「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	
106	「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	
107	「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	
108	「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回ケモインフォーマティクス討論会 (旧情報化学討論会)	2016年9月29日	国内	
109	「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	
110	「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	
111	「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	
112	「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	

113	「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	
114	「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	
115	「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	
116	「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	
117	「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	
118	「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	
119	「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	
120	「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	
121	「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	
122	「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	
123	「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	
124	「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	
125	「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	
126	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	
127	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	
128	「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	

129	「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	
130	「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	
131	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	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	○
2	「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	○
3	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	○
4	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	○
5	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	○
6	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	○
7	量子化学計算とインフォマティクス: 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マティクス 研究会	2016年7月	国内	○
8	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	○
9	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	○

10	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	○
11	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	○
12	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	○
13	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	○
14	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	○
15	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	○
16	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	○
17	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	○
18	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	○
19	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	○
20	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	○
21	Ab Initio Approach to Photoreaction Dynamics	T. Taketsugu	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
22	Constraint Structure Optimization on Potential Energy Surface	J. Hasegawa	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
23	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	○
24	Computational Spectroscopy beyond the Dipole Approximation	T. Iwasa	Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang-Mai, Thailand	2016年11月	国外	○
25	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	○
26	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	○

27	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	○
28	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	○
29	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	○
30	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	○
31	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	○
32	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	○
33	「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	○
34	「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	○
35	「Computational Study on CO ₂ Chemical Absorption Process」	Hiromi Nakai	2016 International Congress for Innovation in Chemistry (PERCH-CIC Congress IX)	2016年6月27日	国外	○
36	「Chemical Reaction Simulations of Large Systems」	Hiromi Nakai	VISTEC Symposium on Novel Chemistry and Engineering	2016年6月30日	国外	○
37	「Nuclear Orbital plus Molecular Orbital (NOMO) Theory: Overview and Recent Progress」	Hiromi Nakai	9th Workshop on Mathematical Methods for Ab Initio Quantum Chemistry	2016年7月4日-5日	国外	○
38	「Harmonic Solvation Model (HSM) to Evaluate Condensed-Phase Thermochemistry by Quantum Chemical Calculation」	Hiromi Nakai	2016 Canadian Symposium on Theoretical and Computational Chemistry (CSTCC2016)	2016年7月13日	国外	○
39	「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	○
40	「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」	Hiromi Nakai	Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2016)	2016年8月30日	国外	○
41	「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	○
42	「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	○

43	「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	○
44	「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	○
45	「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	○
46	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	○
47	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	○
48	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	○
49	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	○
50	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	○
51	Molecular dynamics simulations for assembly and disassembly of A β amyloid fibrils	奥村久士	8th IKUSTAR	2016/6/2-3	国外	○
52	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	○
53	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	○
53	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	○