

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	○