

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	
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 Aggregate Structures	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, 楠茂好, 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-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	
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、後瀧敬介、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	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	

(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	○