

## 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・資源の有効利用ー化学エネルギー」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	
2	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	
3	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	
4	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	
5	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	
6	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	
7	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 <sub>2</sub> 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	
8	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	
9	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	
10	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	
11	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	
12	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	

13	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	日本コンピュータ化学会2015春季年会	2015年5月	国内	
14	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	
15	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	
16	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	
17	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	
18	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	
19	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	
20	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	
21	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	
22	インフォー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回ケモインフォーマティクス討論会(旧情報化学討論会)	2015年10月	国内	
23	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	
24	化学反応シミュレーションによるCO <sub>2</sub> 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	
25	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	
26	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	
27	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	

28	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	
29	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	
30	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	
31	Computational study on CO <sub>2</sub> 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	
32	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	
33	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	
34	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	
35	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	
36	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	
37	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	
38	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	
39	産業・実験との共同研究から理論へのフィードバック~CO <sub>2</sub> 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	
40	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	
41	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	

42	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	
43	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	
44	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	
45	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	
46	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	
47	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	

(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 <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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 <sup>3</sup> )-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 $\gamma$ 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： $\gamma$ 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 $\pi$ -stacked trioxotriangulene derivatives	Qi Wang, Yasuhiro Iwabata, Takeshi Yoshikawa, Akira Ueda, Tsuyoshi Murata, Kazuki Kariyazono, Hiroshi Okamoto, Yasushi Morita,	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 Iwabata, 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 <sub>2</sub> 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	

(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	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	○
2	Development of the Global Reaction Route Mapping Strategy for Catalysis	S. Maeda	3rd Challenges in Computational Homogeneous Catalysis	2015年9月	国外	○
3	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	○
4	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	○
5	Ab initio excited-state molecular dynamics approach to photoreactions	T.Taketsugu	6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry	2015年10月	国外	○
6	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	○
7	Theoretical Study of CO <sub>2</sub> 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	○
8	CO <sub>2</sub> fixation mechanism of bifunctional porphyrin catalyst: a theoretical study	J. Hasegawa	Pacificchem2015	2015年12月	国外	○
9	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	○



10	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	○
11	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	○
12	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	○
13	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	○
14	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	○