

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」 オーバービュー	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3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
2	サブ課題A 研究事例「高効率光エネルギー変換を目指した強相関電子状態理論の開発」	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3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
3	「スピン反転励起の完全スピン空間への射影による強電子相関の記述」	土持崇嗣、天能精一郎	第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマー	2016/9/13-2016/9/15	国内	
4	「光システムⅡ マンガンクラスタの射影 Hartree-Fock電子状態解析」	上島基之、北浦和夫、 天能精一郎	第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマー	2016/9/13-2016/9/15	国内	
5	「射影 Hartree-Fock 法の構造最適化とその応用」	上島基之、北浦和夫、 天能精一郎	第19回理論化学討論会,早稲田大学 西早稲田キャンパス	2016/5/23-2016/5/25	国内	
6	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3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
7	「太陽電池設計のための非断熱分子動力学シミュレーションの実装」	嶺澤 範行	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	
8	サブ課題A 研究事例「計算科学による太陽光エネルギー変換の機構解析と材料探索」	山下 晃一	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	
9	「Zero-Dimensional Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles」	Giacomo Giorgi and Koichi Yamashita	26th IUPAC Symposium on Photochem	2016/4/3-2016/4/8	国外	
10	「Development of classical force fields for thermal transport in methylammonium lead halide」	Tomoyuki Hata	公開セミナー (Università degli Studi di Perugia)	2016年7月	国外	
11	Zero-Dimensional Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles	Giacomo Giorgi and Koichi Yamashita	ANM2016 7th International conference on Advanced Nanomaterials	2016/7/25-2016/7/27	国外	

12	On the nature of the intermolecular interactions in CH ₃ NH ₃ Pb(/Sn)I ₃ photovoltaic perovskite solar cells	Varadwaj, A, Varadwaj, PR, Yamashita K.	First European Symposium on Chemical Bonding	2016/8/29–2016/9/2	国外	
13	Tin/Lead halide perovskite nanowires	Varadwaj, A, Varadwaj, PR, Yamashita K.	Electronic structure studies using Gaussian 09 and Aimall. Gaussian 09 Workshop	2016/9/5–2016/9/9	国内	
14	Zero-Dimensional Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Modeling: Insights from First Principles	Giacomo Giorgi and Koichi Yamashita	Spanish-Portuguese Conference on Photochemistry	2016/9/7–2016/9/10	国外	
15	有機薄膜太陽電池 P3HT/PCBM 界面の電子励起状態における電荷分離機構の計算化学的考察	藤井幹也, 幸田 奨平, 川嶋 英佑, 山下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13–2016/9/15	国内	
16	Can gas phase calculations be effective in generating the novel chemistry of halide perovskite materials?	Varadwaj Pradeep, Varadwaj Arpita, Yamashita Koichi	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13–2016/9/15	国内	
17	「On the environmental stability of the CH ₃ NH ₃ Pb(/Sn)I ₃ perovskite materials」	Varadwaj Arpita, Varadwaj Pradeep r., Yamashita Koichi	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13–2016/9/15	国内	
18	「有機無機複合構造における熱伝導特性の理解とその制御」	畑 智行	第77回応用物理学会秋季学術講演会	2016/9/13–2016/9/16	国内	
19	First-principles study on photocatalytic properties of (Ga1-xZnx)(N1-xOx) alloys: Band-edge character, band bending and visible light response	山下 晃一	CECAM Workshop	2016/9/27–2016/9/30	国外	
20	計算科学による二次電池の機能解析と材料探索	山下 晃一	触媒・電池元素戦略研究拠点第9回公開シンポジウム	2016年10月	国内	
21	Photoexcitation Mechanism of Metallic Sr1-xNbO3 for Watersplitting Photocatalyst	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13–2017/3/17	国外	
22	Origin of low thermal conductivity in organic-inorganic thermoelectric materials	畑 智行, Giorgi Giacomo, 山下 晃一	APS March Meeting 2017	2017/3/13–2017/3/17	国外	
23	Atomistic modeling of the sodium diffusion in black phosphorus anode.	saeid Arabnejad Khanooki, Shunsuke KURAHASHI, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13–2017/3/17	国外	
24	CH3NH3PbI3 and CsPbI3 Supramolecular Clusters in 1D: Do They Evolve with the Same Principle of Cooperative Binding?	Arpita Varadwaj, Pradeep R. Varadwaj, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13–2017/3/17	国外	
25	A theoretical study on charge transfer type excitons at donor/acceptor interfaces of organic solar cells.	Azusa Muraoka, Reina Tachibana, Mikiya Fujii, Kenji Mishima, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13–2017/3/17	国外	
26	Morphological Effect on Performance of Organic Photovoltaics—In Terms of Entropy and Helmholtz Energy	Eisuke Kawashima, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13–2017/3/17	国外	
27	金属-La ₂ O ₃ 表面におけるCO酸化反応の理論的研究	岩田理比等, 牛山 浩, 山下 晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16–2017/3/19	国内	
28	有機薄膜太陽電池の電荷移動状態解析に対する密度汎関数パラメータの最適化	寺尾仁志, 藤井幹也, 山下 晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16–2017/3/19	国内	

29	K イオンのグラファイトへの挿入過程における理論的研究	平井悠登,山下晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	国内	
30	非フラレンアクセプター有機薄膜太陽電池の軌道準位と電荷移動状態に関する計算化学的研究	田中健斗,藤井幹也,山下晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	国内	
31	光触媒材料 SrTiO ₃ における助触媒効果に関する理論的研究	津田昌俊,山下晃一	日本化学会第97春季年会	2017/3/16-2017/3/19	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A 研究事例「Bridging single-reference and multi-reference regimes for electron correlation with spin-extended coupled electron pair approximation」	土持 崇嗣	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A 研究事例「Assessment of truncation schemes from the active space coupled cluster expansion through sextuple excitation levels」	XU ENHUA	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	サブ課題A 研究事例「射影Hartree-Fock法の二次収束法開発とマンガングラスタへの適用」	上島 基之	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	「露わに相関したグリーン関数法による高分子のイオン化ポテンシャルの高精度計算」	大西裕也、天能精一郎	第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマート	2016/9/13-2016/9/15	国内	
5	サブ課題A 研究事例「太陽光エネルギー変換を担う励起電子の非断熱量子動力学を扱う為の理論手法開発」	米原 文博	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	
6	サブ課題A 研究事例「反対称ジェミナル積を用いた配置間相互作用法による高精度第一原理計算」	植村 涉	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	サブ課題A 研究事例「Coarray Fortranを用いた時間依存密度汎関数法の並列計算」	澤田 啓介	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	

8	”領域分割的量子化学アプローチによる光化学系II水分解触媒サイトの構造決定”	中嶋隆人	第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会	2016年10月	国内	
9	サブ課題A 研究事例「非フラレン型アクセプターに関する量子化学計算」	三嶋 謙二	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	
10	「DFT 計算を用いた d1 型水分解光触媒 Sr1-xNbO3 の光吸収およびバンド構造」	金子 正徳, Giacomo Giorgi, 山下 晃一	第19回理論化学討論会 2016	2016/5/23-2016/5/25	国内	
11	有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるモルフォロジーの影響	川嶋英佑, 藤井幹也, 山下晃一	第19回理論化学討論会 2016	2016/5/23-2016/5/25	国内	
12	「Theoretical studies on the structural dependence of the electronic properties of perovskite oxynitride photocatalysts」	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita.	32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics	2016/6/1-3	国外	
13	「周期境界量子化学計算に基づく、高誘電率ドナーの理論設計」	三嶋 謙二、山下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
14	有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるエントロピーの影響	川嶋英佑, 藤井幹也, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
15	「P3HT/PCBMにおける電荷分離機構」	幸田 奨平, 藤井幹也, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
16	「DFT計算を用いたd1型水分解光触媒Sr1-xNbO3の光吸収およびバンド構造」	金子 正徳, Giacomo Giorgi, 山下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
17	「改良Basin-Hopping法を用いた反応中間体の構造探索」	今村友信, 牛山浩, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
18	「Naイオン二次電池負極材料MXeneに関する理論的研究」	倉橋駿介、牛山浩、山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
19	「Ta系ペロブスカイト型酸窒化物光触媒のキャリア拡散に関する理論的研究」	入口 広紀, 渡部 絵里子, 山下 晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
20	「Naイオン電池負極材料Snにおける充放電過程の理論的研究」	児玉涼介, Arabnejad Saeid, 牛山浩, 山下晃一	第10回分子科学討論会2016	2016/9/13-2016/9/15	国内	
21	「Ta系ペロブスカイト型酸窒化物光触媒のキャリア拡散に関する理論的研究」	入口 広紀, 渡部 絵里子, 山下 晃一	第118回触媒討論会	2016/9/21-2016/9/23	国内	
22	Newly Discovered Low Band Gap Lead Iodide Perovskite Materials for Photovoltaic Solar Cells	Varadwaj, PR, Varadwaj, A, Yamashita K.	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condense-Phase Reacting System	2016/10/10-2016/10/12	国外	
23	「Morphological Effect on Performance of Organic Photovoltaics」	Eisuke Kawashima, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
24	「Ab-initio Investigations on MgTaO ₂ N as a Novel Photocatalyst Material: Insights from Anion Ordering, Octahedral-tilting and Crystal Polymorphism」	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita.	JFS-Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	

25	「Effect of Sr vacancies and substitutionals on the optical absorption and the band position of SrNbO ₃ : a DFT analysis」	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Japan・France・Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
26	「On the Physical Understanding of the Outdoor Environmental Stability of the Zero-Dimensional Lead Halide Perovskite Complexes in Water」	Varadwaj Arpita, Varadwaj Pradeep r., Yamashita Koichi	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
27	「Unusually High Cooperativity Revealed in the Chemical Bonding Interactions Exploited: Novel Lead Iodide Perovskite Complex System as a Prototype」	Varadwaj, PR, Varadwaj, A, Yamashita K.	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	
28	有機薄膜太陽電池の電荷分離過程の相分離構造依存性	藤井幹也	新化学技術推進協会第3回学産交流ポスターセッション	2016年12月	国内	
29	Charge Carrier Trapping at Surface Defects of Perovskite Solar Cell Absorbers: A First-Principles Study	Hiroki Uratani, Koichi Yamashita	AP-HOPV17	2017/2/2-2017/2/4	国内	
30	Effect of Sr vacancies and substitutionals on the bandstructure of SrNbO ₃ : a DFT analysis.	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
31	Theoretical studies of carrier diffusion in perovskite tantalum oxynitride photocatalyst	Hiroki IRIGUCHI, Eriko WATANABE, Koichi YAMASHITA	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
32	EFFECTS OF CO-CATALYST ON WATER-SPLITTING PHOTOCATALYST: A DFT ANALYSIS	水野花春、山下晃一	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
33	Ab initio investigations on perovskite-type photocatalysts: Impacts of structural features on electronic properties.	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	Artificial Photosynthesis: Faraday Discussion	2017/2/28-2017/3/2	国外	
34	Photoexcitation Mechanism of Metallic Sr _{1-x} NbO ₃ for Watersplitting Photocatalyst	Masanori Kaneko, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
35	Effect of Co-catalyst on Water-splitting Photocatalyst: A DFT Analysis	水野花春、山下晃一	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
36	Theoretical studies of carrier diffusion in perovskite tantalum oxynitride photocatalyst	Hiroki IRIGUCHI, Eriko WATANABE, Koichi YAMASHITA	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
37	STRUCTURAL AND ELECTRONIC FEATURES OF PEROVSKITE-TYPE PHOTOCATALYSTS: INSIGHTS FROM FIRST-PRINCIPLES.	Ayako Kubo, Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis	2017/3/2-2017/3/5	国外	
38	Theoretical Studies of Carrier Diffusion in Perovskite Tantalum Oxynitride Photocatalyst	Hiroki IRIGUCHI, Eriko WATANABE, Koichi YAMASHITA	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
39	The Effect of Co-catalyst on Water-splitting Photocatalyst: A DFT Analysis	水野花春、山下晃一	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
40	Disorder effects on the charge separation pathway by intermixing of donor and acceptor molecules	幸田奨平 藤井幹也 山下晃一	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	

41	Are The Chemical Bonding Interactions in Halide Perovskite Solar Cells Cooperative?	Pradeep Varadwaj, Arpita Varadwaj, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
42	First-principles investigation of charge carrier trapping at surface defects of organic-inorganic hybrid perovskites as photovoltaic materials	Hiroki Uratani, Koichi Yamashita	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
43	Origin of Unusual Dependencies of LUMO Levels on Conjugation Length in Quinoidal Fused Oligosiloles	Nana Misawa, Mikiya Fujii, Ryo Shintani, Tomohiro Tsuda, Kyoko Nozaki, Koichi	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	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	Advances in model space quantum Monte Carlo	Seiichiro Ten-no	Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques (LUEST), Telluride, CO, USA.	2016/6/1-2016/6/4	国外	○
2	Model space quantum Monte Carlo in conjunction with F12 theory	Seiichiro Ten-no	Comenius University, Bratislava, Slovakia.	2016年6月	国外	○
3	Massively Parallel Calculation of Accurate Electronic Structures	Seiichiro Ten-no	ISTOP IX, Grand Forks, ND, USA.	2016/7/17-2016/7/22	国外	○
4	Massively Parallel Computation of Accurate Electronic Structures	Seiichiro Ten-no	MESBA 2016, Buenos Aires, Argentina.	2016/9/19-2016/9/23	国外	○
5	Effective Hamiltonians in Stochastic Quantum Chemistry	Seiichiro Ten-no	IRSAMC Université Paul Sabatier et Université de Toulouse, Toulouse, France.	2016年9月	国外	○
6	Static and dynamic electron correlations from restorations of broken symmetries	Seiichiro Ten-no	RAMET2017, Goa, India.	2017/2/9-2017/2/12	国外	○
7	「スピン射影を露わに考慮した配置間相互作用:非直交Wick定理と応用」	土持崇嗣、天能精一郎	第19回理論化学討論会,早稲田大学 西早稲田キャンパス	2016/5/23-2016/5/25	国内	○
8	“NTChem: and Relativistic Molecular Theory”	Takahito Nakajima	RMET 2016	2016年9月	国内	○
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	2016年7月	国内	○
10	”京コンピュータと理論分子科学”	中嶋隆人	第4回CUTEシンポジウム・コンピュータ化学「京コンピュータと理論化学」	2016年6月	国内	○

11	”相対論的電子論に基づく電子機能材料設計”	中嶋隆人	”相対論的電子論に基づく電子機能材料設計”, 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	2016年12月	国内	○
12	”相対論的時間依存密度汎関数法の開発”	神谷宗明	第4回CUTEシンポジウム・コンピュータ化学「京コンピュータと理論化学」, 津	2016年6月	国内	○
13	計算科学を駆使したリチウムイオン・ナトリウムイオン2次電池の機能解析と材料探索	山下 晃一	光機能材料研究会 第58回講演会	2016年5月	国内	○
14	”Charge separation pathway on electronically excited states of PCBM/P3HT interfaces”	藤井幹也	EMN Prague Meeting, Energy Materials Nanotechnology	2016/6/21-2016/6/24	国外	○
15	「A Theoretical Modelling of High-dielectric-constant Donors and Acceptors Based on Periodic Boundary Condition Calculations」	三嶋 謙二	EMN Prague Meeting, Energy Materials Nanotechnology	2016/6/21-2016/6/24	国外	○
16	「Designing organic-inorganic photovoltaic materials using methylammonium lead halide perovskites for applications in solar cells: Unraveling the importance of ultra-strong hydrogen bonding interactions」	Varadwaj, A, Varadwaj, PR, Yamashita K	EMN Prague Meeting, Energy Materials Nanotechnology	2016/6/21-2016/6/24	国外	○
17	計算科学を駆使したペロブスカイト太陽電池の機能解析と材料探索	山下 晃一	光機能材料研究会 第60回記念講演会	2016年7月	国内	○
18	PHOTON-ABSORBING CHARGE-BRIDGING STATES IN ORGANIC PHOTOVOLTAIC DEVICES OF DIKETOPYRROLOPYRROLE-BASED DONOR AND PCBM	Mikiya FUJII, Shohei KODA, and Koichi YAMASHITA	252nd ACS National Meeting & Exposition	2016/8/21-2016/8/25	国外	○
19	有機薄膜太陽電池 P3HT/PCBM 界面の電子励起状態における電荷分離機構の計算化学的考察	藤井幹也	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」	2016年9月	国内	○
20	不均一触媒反応に対する理論化学手法による取り組み	牛山 浩	第118回触媒討論会	2016/9/21-9/23	国内	○
21	Theoretical Study on Energy Conversion Processes of Perovskite Solar Cells	山下 晃一	IUPAC 12th International Conference on	2016/10/14-2016/10/19	国外	○
22	「Computational description of charge dissociation in organic photovoltaics」	藤井幹也	Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems	2016/10/26-2016/10/28	国外	○
23	International workshop on numerical methods and simulations for materials design and strongly correlated quantum matters	藤井幹也	Charge separation pathway via highly excited electronic states in organic photovoltaics	2017/3/24-2017/3/25	国内	○

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	サブ課題B「エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー」オー バービュー	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3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
2	サブ課題B 研究事例「酸化物系電極触媒ZrO ₂ における酸素還 元反応」	山本 良幸	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	「計算科学は電極反応を正確に記述できるか? : 計算屋からの 視点」	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	「第一原理シミュレーションによる固体触媒表面上でのNO, CO, CO ₂ 分子の吸着と反応過程の研究」	森川 良忠	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	
5	「正方晶ZrO ₂ (101)表面における水分子吸着構造の被覆率依存 性」	山本 良幸	日本物理学会2016年秋季大会	2016/9/13-2016/9/16	国内	
6	“First-principles study of oxygen reduction reaction on the tetragonal ZrO ₂ (101) surface”	山本 良幸	APS March Meeting 2017	2017/3/13-2017/3/17	国外	
7	第一原理計算を基盤とした酸化物触媒の活性メカニズム解析	笠松秀輔	触媒学会界面分子変換研究会・日本表面科 学会触媒表面科学研究部会合同ワークショッ プ 「放談会: 触媒研究の最前線と未来」	2017年3月	国外	
8	サブ課題B 研究事例「stat-CPMDを用いたリチウムイオン電池 界面被膜に関する第一原理計算研究」	館山 佳尚	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	
9	ボロンドープダイヤモンド(Boron-Doped Diamond:BDD)電極によ るOHラジカル発生機構	館山佳尚、 Zdenek Futera、 渡辺剛志、栄長泰明	第118回触媒討論会	2016/09/21 - 2016/09/23	国内	
10	第一原理計算による層状化合物MXene負極へのカチオン挿入 機構の解析	Lucie Szabova、袖山慶太 郎、梶山智司、大久保将史、 山田淳夫、館山佳尚	第57回電池討論会	2016/11/29-2016/12/1	国内	

11	第一原理計算による全固体Liイオン電池のLiCoO ₂ 正極/硫化物電解質界面のCo拡散の研究	春山潤、袖山慶太郎、 館山佳尚	日本物理学会2016年秋季大会	2016/09/13 - 2016/09/16	国内	
12	First-Principles Study on LiCoO ₂ /Sulfide Interfaces in All-Solid-State Li-Ion Battery: Space-Charge Layer and Interfacial Co Mixing	春山潤、袖山慶太郎、 高田和典、館山佳尚	PRiME 2016/230th ECS Meeting	2016/10/02 - 2016/10/07	国外	
13	第一原理計算を用いたLiCoO ₂ 正極/LiPS4電解質界面のCo拡散機構の研究	春山潤、袖山慶太郎、 館山佳尚	第57回電池討論会	2016/11/29 - 2016/12/01	国内	
14	第一原理計算を用いたヨウ化鉛メチルアンモニウム/酸化チタン界面の研究	春山潤、袖山慶太郎、 館山佳尚	日本物理学会第72回年次大会	2017年3月	国内	
15	密度汎関数法計算に基づくラジカル重合反応シミュレーションによるポリメタクリル酸メチル立体規則性の解析	高柳 昌芳・松本 健太郎・長岡 正隆	日本化学会第97回春季年会(横浜市)	2017年3月16日～19日 (16日)	国内	
16	An active site opening mechanism in ion pair of (pyridylamide)Hf(IV) catalyst: An associative mechanism	K.Matsumoto, S.K.SANKARAN, .M.Takayanagi, N.Koga, NAGAOKA, M.Nagaoka	日本化学会第97回春季年会(横浜市)	2017年3月16日～19日 (17日)	国内	
17	サブ課題B 研究事例「電極反応の複合効果を考慮した被膜形成シミュレーション手法の開発」	長岡 正隆	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	
18	The Electronic Transitions of Paranitrophenol and Paranitrophenolate in Gas and Water: A Study Combining Ab Initio Multiconfigurational Calculations and the Free Energy Gradient Method	C.Bistafa, Y.Kitamura, M.Nagaoka, S.Canuto	複雑・複合系の理論計算科学に関する 日・仏・スペイン合同シンポジウム(京都大学福井謙一記念研究センター)	2016年10月26日～28日 (26日)	国内	
19	Theoretical Study on Solid Electrolyte Interphase (SEI) Film Formation in Secondary Batteries	N.Takenaka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (11日)	国内	
20	Dual Approach to Vibrational Spectra in Solution: Microscopic Influence of Hydrogen Bonding to the State of Motion of Glycine in Water	Y.Kitamura, N.Takenaka, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (11日)	国内	
21	Theoretical Study on Behaviors of Host PCP and Guest Methyl Methacrylate toward Understanding Tacticity Control Mechanism	M.Takayanagi	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
22	Combining Sequential-QM/MM and Free Energy Gradient Methods to Obtain Excited State Geometries in Solvent at Reasonable Computational Cost	C.Bistafa	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
23	ピンサー型Hf錯体を用いたオレフィン重合反応における対アニオンの活性点占有挙動	松本健太郎, S.K.Sankaran, 高柳昌芳, 古賀伸明, 長岡正隆	第10回分子科学討論会(神戸ファッションマート)	2016年9月13日～15日 (15日)	国内	
24	トロンビンのNa ⁺ 結合空洞が基質結合ポケットの脱水和に果たす役割	栗崎以久男, C.Barberot, 高柳昌芳, 長岡正隆	第19回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日～25日 (23日)	国内	
25	分子動力学計算における高速多重展開法の拡張	吉井範行、安藤嘉倫、 岡崎進	第19回理論化学討論会	2016年5月23～5月25日	国内	

26	分子動力学計算ソフトウェアMODYLASのメニーコアアーキテクチャ対応並列化に関する研究 (オーガナイズドセッション)	安藤嘉倫, 大島聡史, 鈴木惣一朗	HPCS2016	2016年6月6日～6月7日	国内	
27	異方性のある系に対する高速多重展開法	吉井範行・安藤嘉倫・岡崎進	第10回分子科学討論会	2016年9月13日～9月15日	国内	
28	Molecular dynamics study on the morphology of hydrated perfluorosulfonic acid membranes	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	第10回分子科学討論会	2016年9月13日～9月15日	国内	
29	マルチタイムステップ数値積分法 (RESPA) に基づく分子動力学計算での圧力値算出における問題	安藤嘉倫, 吉井範行, 山田篤志, 岡崎進	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月30日～12月2日	国内	
30	「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・進捗	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3回公開シンポジウム	2016/12/15-2016/12/16	国内	
31	サブ課題B 研究成果「MODYLASの開発を促進するためのリファクタリングと新機能の追加」	坂下達哉	文部科学省 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年12月15日～12月16日	国内	
32	肝臓細胞膜を模した脂質二重層膜の全原子分子動力学計算	安藤嘉倫, 青木則之, 岡崎進	第10回分子科学討論会	2016年9月13日～9月15日	国内	
33	Effect of the hydration on the morphology of the perfluorosulfonic acid polymer membrane with molecular dynamics simulations	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	第67回コロイドおよび界面化学討論会	2016年9月22日～9月24日	国内	
34	Molecular simulation study of perfluorosulfonic acid polymer membranes using multi-scale molecular modeling	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	第65回高分子討論会	2016年9月14日～9月16日	国内	
35	Coarse-grained modeling of polymer electrolyte membranes	Wataru Shinoda, An-Tsung Kuo, Susumu Okazaki	2016 AIChE Annual Meeting	2016年11月13日～11月18日	国外	
36	ミセル、ヘキサゴナル、膜構造における界面活性剤分子の拡散および集団運動	吉井範行・岡崎進	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月30日～12月2日	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	“A neural network approach to adsorbed structures of water molecules on an oxide surface”	山本 良幸	“TIAかけはし”ポスター交流会 ～計算科学・計測技術・インフォマティクスの融合によるインテリジェント解析～	2016年8月	国内	
2	「正方晶ZrO ₂ (101)表面における水の構造と酸素還元反応活性」	山本 良幸	PComS シンポジウム&スパコン共用事業報告会	2016/10/17-10/18	国内	
3	“Oxygen reduction reaction on the defective tetragonal ZrO ₂ (101) surface”	山本 良幸	18th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods	2017/1/12-2017/1/14	国外	
4	サブ課題B 研究事例「CPMDへのDFT-D3実装と有機電解液シミュレーションに向けたvdW相互作用のベンチマーク」	飯塚 将太	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	
5	色素増感・ペロブスカイト太陽電池界面の電荷移動機構に関する第一原理計算解析	濱田幾太郎、館山佳尚、袖山慶太郎、大谷優介	第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会	2016年10月	国内	
6	First-principles study for all-solid-state Li-ion battery and perovskite solar cell	春山潤、袖山慶太郎、館山佳尚	TIA”かけはし”ポスター交流会	2016年8月	国内	
7	First-Principles Study of Ion Diffusions in CH ₃ NH ₃ PbI ₃ and (NH ₂) ₂ CHPbI ₃ for Perovskite Solar Cells	春山潤、袖山慶太郎、韓礼元、館山佳尚	PRiME 2016/230th ECS Meeting	2016/10/02 - 2016/10/07	国外	
8	第一原理計算を用いたリチウムイオン全固体電池正極/電解質界面の研究	春山潤、館山佳尚、木野日織	第3回HPCI成果報告会	2016年10月	国内	
9	サブ課題B 研究事例「混合MC/MD反応法による二次電池被膜形成過程の理論的解析」	稲垣 泰一	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	
10	混合MC/MD 反応法におけるQM/MM 計算による汎用的エネルギー評価法の開発	藤江 拓哉、竹中 規雄、鈴木 雄一、長岡 正隆	第30回分子シミュレーション討論会(大阪大学豊中キャンパス)	2016年11月30日～12月2日 (12月1日)	国内	
11	アロステリーの概念拡張に向けて:トロンビンのアロステリック制御・再訪	栗崎以久男、高柳昌芳、Chantal Barberot、長岡正隆	第54回生物物理学会(つくば国際会議場)	2016年11月25日～27日 (26日)	国内	
12	Dual Approach to Vibrational Spectra in Solution: Microscopic Influence of Hydrogen Bonding to the State of Motion of Glycine in Water	Y.Kitamura, N.Takenaka, M.Nagaoka	複雑・複合系の理論計算科学に関する 日・仏・スペイン合同シンポジウム(京都大学福井謙一記念研究センター)	2016年10月26日～28日 (26日)	国内	

13	On Additive Effect of Solid Electrolyte Interphase (SEI) Film Formation in Sodium-ion Batteries	N.Takenaka, U.Purushotham, M.Nagaoka	複雑・複合系の理論計算科学に関する日・仏・スペイン合同シンポジウム (Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems)(京都大学福井謙一記念研究センター)	2016年10月26日～28日 (26日)	国内	
14	Active Site Opening Mechanism in Olefin Polymerization Reaction Catalyzed by (Pyridylamide)Hf(IV) Complex	K. Matsumoto, S.K.Sankaran, M. Takayanagi, N. Koga, M. Nagaoka	The 4th International Conference on Molecular Simulation (Shanghai, China)	2016年10月23日～26日 (24日)	国外	
15	Anisotropic Behavior of Methyl Methacrylate Monomers in Nanochannels of Porous Coordination Polymers	M.Takayanagi, S.Pakhira, M.Nagaoka	The 4th International Conference on Molecular Simulation (Shanghai, China)	2016年10月23日～26日 (24日)	国外	
16	混合 MC/MD 反応法による二次電池被膜形成過程の理論的解析	竹中 規雄、藤江 拓哉、高柳 昌芳、長岡 正隆	PCoMSシンポジウム & 計算物質科学スパコン共用事業報告会(東北大学片平キャンパス)	2016年10月17日～18日 (17日)	国内	
17	Active Site Opening Mechanism of an Olefin Polymerization Catalyst (pyridylamide)Hf(IV) Complex	K. Matsumoto, S.K.Sankaran, M. Takayanagi, N. Koga, M. Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
18	Alternative Role of Thrombin Sodium Ion-binding Cavity P11 Additive Effect of Difluoroethylene Carbonate in Sodium-ion Batteries: Its Dual Roles in Solid Electrolyte Interphase Film Properties	I.Kurisasi, M.Takayanagi, C.Barberot, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
19	Development of Hybrid MC/MD Reaction Method Combined with QM/MM Method: Application to Solid Electrolyte Interphase (SEI) Film Formation in Lithium-ion Batteries	T.Fujie, N.Takenaka, Y.Suzuki, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (11日)	国内	
20	Critical Role of Deep Hydrogen Tunneling to Accelerate the Antioxidant Reaction of Ubiquinol and Vitamin E	T.Inagaki, T Yamamoto	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
21	Theoretical Study on the Aromatic Polyamide Membrane Formation: Influence of Monomer Mixing Ratio on Membrane Nanostructure	Y.Suzuki, Y.Koyano, M.Nagaoka	International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016)(名古屋大学)	2016年10月10日～13日 (12日)	国内	
22	トロンビン基質結合ポケットの脱水和におけるNa ⁺ 結合空洞の役割	栗崎以久男, 高柳昌芳, C.Barbero, 長岡正隆	第10回分子科学討論会(神戸ファッションマート)	2016年9月13日～15日 (14日)	国内	
23	Naイオン電池の固体電解液相間(SEI)膜形成に対する塩濃度効果の理論的解析	竹中 規雄、長岡 正隆	第10回分子科学討論会(神戸ファッションマート)	2016年9月13日～15日 (13日)	国内	
24	ポリメタクリル酸メチルのラジカル重合反応シミュレーションによる立体規則性の解析	高柳 昌芳、松本 健太郎、長岡 正隆	第10回分子科学討論会(神戸ファッションマート)	2016年9月13日～15日 (14日)	国内	

25	QM/MM法を導入した混合MC/MD反応法の開発:二次電池の固体電解液相間(SEI)膜形成への適用	藤江 拓哉、竹中規雄、鈴木 雄一、長岡 正隆	第10回分子科学討論会(神戸ファッションマート)	2016年9月13日~15日(13日)	国内	
26	エネルギー揺らぎの制御スキームを導入した定pH分子シミュレーション法の開発	北村勇吉、長岡正隆	第10回分子科学討論会(神戸ファッションマート)	2016年9月13日~15日(14日)	国内	
27	混合MC/MD反応法における化学反応過程の実時間解釈:二次の可逆反応系への適用	鈴木 雄一、長岡 正隆	第19回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日~25日(24日)	国内	
28	(Pyridylamide)Hf(IV)錯体の活性化機構におけるイオンペア解離過程の分子動力学的研究	松本健太郎, S.K. Sankaran, 高柳昌芳, 古賀伸明, 長岡正隆	第19回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日~25日(24日)	国内	
29	The Dissociation Free Energy of [CH ₃ B(C ₆ F ₅) ₃][H ₂ SiCp ₂ ZrMe(C ₂ H ₄)] ion Pair Catalyst in Molecular Dynamics Simulation (分子動力学シミュレーションによる [CH ₃ B(C ₆ F ₅) ₃][H ₂ SiCp ₂ ZrMe(C ₂ H ₄)] イオン対の解離自由エネルギーに関する研究)	S.K. Sankaran, M.Takayanagi, N.Koga, M.Nagaoka	第19回理論化学討論会(早稲田大学)	2016年5月23日~25日(23日)	国内	
30	A mechanism of the formation of zwitter ionic DDAO spherical micelles studied by molecular dynamics calculations	藤本 和士、久保洋介、吉井 範行、岡崎 進	Joint EMLG/JMLG Annual Meeting 2016	2016年9月11日~9月16日	国外	
31	An attempt to estimate correct atomic pressure in the multiple time-step integration algorithm	Y. Andoh, N. Yoshii, A. Yamada, and S. Okazaki	ICMS2016	2016年10月23日~10月26日	国内	
32	サブ課題B 研究事例「高速多重展開法の拡張」	吉井 範行	文部科学省 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年12月15日~12月16日	国内	
33	高分子材料の大規模分子動力学計算に向けたMODYLASの拡張	安藤嘉倫	文部科学省 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年12月15日~12月16日	国内	
34	分子動力学シミュレーションによる高分子材料破壊の分子機構の解明と破壊シミュレーション手法の確立	藤本 和士	第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会	2016年10月	国内	
35	リン脂質二重層膜中でのコレステロール間側方相互作用のリン脂質種依存性	松岡漢斗、安藤嘉倫、岡崎進	第39回溶液化学シンポジウム	2016年11月9日~11月11日	国内	
36	親水性および疎水性の異なる直鎖界面活性剤分子添加によるDMPC脂質二重層膜の物性変化	鬼頭咲帆、安藤嘉倫、岡崎進	第39回溶液化学シンポジウム	2016年11月9日~11月11日	国内	
37	atomistic simulation study on the morphology of the hydrated perfluorosulfonic acid membrane	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	2016 AIChE Annual Meeting	2016年11月13日~11月18日	国外	
38	parameterization of a coarse grained model for perfluorosulfonic acid polymer	An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	2016 AIChE Annual Meeting	2016年11月13日~11月18日	国外	

39	リン脂質二重層膜中でのコレステロール間側方相互作用のリン脂質種依存性	松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進	第30回分子シミュレーション討論会	2016年11月30日～12月2日	国内	
40	All-atom and coarse-grained molecular simulations for perfluorosulfonic acid polymer membranes	○An-Tsung Kuo, Wataru Shinoda, Susumu Okazaki	IPC2016	2016年12月13日～12月16日	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	First-Principles Simulation of Electrochemical Reactions at Solid/Liquid Interface: From a Microscopic Analysis to the Current-Voltage Characteristic Curve	大谷実	The 67th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry	2016/08/21-2016/08/26	国外	○
2	Ab-initio MD simulations of redox reactions of liquid electrolytes and SEI formation	館山佳尚	CPMD2016 Conference	2016/05/18 - 2016/05/20	国外	○
3	スパコンを用いた二次電池電解液・電極界面の微視的機構研究	館山佳尚	第381回電池技術委員会	2016年6月	国内	○
4	Ab-initio MD simulations of redox reactions of liquid electrolytes and SEI formation	館山佳尚	IMLB2016 (18th International Meeting on Lithium Batteries)	2016/06/19 - 2016/06/24	国外	○
5	二次電池電解液・電極界面の計算材料科学	館山佳尚	日本物理学会2016年秋季大会	2016/09/13 - 2016/09/16	国内	○
6	計算科学技術支援による蓄電池機構解明と材料設計	館山佳尚	NIMS WEEK 2016	2016/10/20 - 2016/10/21	国内	○
7	Surface termination & ion migration of perovskite materials for carrier transport and aging	館山佳尚	ENGE2016	2016/11/06-2016/11/09	国外	○
8	DFT molecular dynamics studies on battery materials: SEI film and superconcentrated electrolyte	館山佳尚	IWAMSN2016	2016/11/08-2016/11/12	国外	○
9	高濃度Li塩電解液の反応解析:リチウムイオン電池の新規電解液材料探索に向けて	袖山慶太郎	第一回材料設計討論会	2016年8月	国内	○

10	Superconcentrated electrolytes for electrochemically stable and fast-charging lithium-ion batteries: first-principles molecular dynamics study	袖山慶太郎	11th Japan-France joint seminar on batteries	2016/9/20-2016/9/22	国外	○
11	マテリアルズ・インフォマティクスによるLiイオン電池の高濃度電解液探索	袖山慶太郎	PF研究会「測定しているけど見えていない情報を引き出すためには？～不可逆反応、不均一反応での情報科学/計算科学×計測技術の融合～」	2017年1月	国内	○
12	First-principles study of superconcentrated electrolytes for electrochemically stable and fast-charging lithium-ion batteries	袖山慶太郎	41st international conference and exposition on advanced ceramics and composites	2017/1/20-2017/1/22	国外	○
13	「DFT-MD法を用いたLiイオン電池における負極/電解液界面被膜の生成メカニズム解析」	袖山慶太郎	第1回 表界面計測技術研究会－電子と光子をプローブとした表界面計測－	2017年2月	国内	○
14	計算科学技術による蓄電池機構解明・材料設計	館山佳尚	日本化学会第97春季年会	2017年3月	国内	○
15	「第一原理分子動力学計算による高濃度Li塩電解液の反応解析:Liイオン電池の新規材料探索に向けて」	袖山慶太郎	資源・素材学会 平成29年度春季大会	2017年3月	国内	○
16	Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Computational Chemical Study	M.Nagaoka	2nd International Symposium on Post-Lithium Ion Batteries (Tokyo, Japan)	2017年3月11日	国外	○
17	Allosteric Regulation of Thrombin, Revisited	I. Kurisak, M. Takayanagi, C. Barberot, M. Nagaoka	5th-Modeling of Chemical and Biological (Re)Activity (Chennai, India)	2017年2月18日～21日 (20日)	国外	○
18	Toward CDMSI by Computational Molecular Technology of Complex Chemical Reaction Systems: Applications of Red Moon Methodology	M.Nagaoka	CDMSI International Workshop on "Scale bridging for the atomistic design of high performance materials" (Tokyo, Japan)	2017年2月20日～21日 (21日)	国外	○
19	Computational Molecular Technology towards Macroscopic Chemical Phenomena: Molecular Control of Complex Chemical Reactions, Stereospecificity and Aggregate Structures	M.Nagaoka	The 4th International Conference on Molecular Simulation (Shanghai, China)	2016年10月23日～26日 (24日)	国外	○
20	Computational Molecular Technology towards Energy Challenges: Molecular Control of Complex Chemical Reactions and Aggregate Structures	M.Nagaoka	5th International Symposium on Energy Challenges and Mechanics Working on Small Scales (Inverness/Scotland, U.K.)	2016年7月10日～14日 (13日)	国外	○
21	Toward Specific Synthesis of Functional Polymers in Hyper-Nano-Space: A Computational Molecular Technology	M.Nagaoka	EMN Meeting on Mesoporous Materials-Energy Materials Nanotechnology (Prague, Czech Republic)	2016年6月13日～17日 (15日)	国外	○
22	ソフトウェアMODYLASを用いた大規模分子動力学シミュレーション	安藤 嘉倫	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」	2016年4月4日～4月5日	国内	○
23	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	岡崎 進	SS研HPCフォーラム2016 ポスト「京」の挑戦 ～サイエンスの未来～	2016年8月	国内	○
24	汎用MDソフトMODYLASによる大規模シミュレーション	安藤嘉倫	第2回材料系ワークショップ	2016年10月	国内	○

25	《特別講演》ポスト「京」重点課題(5)紹介「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」	岡崎 進	第2回CDMSI(ポスト「京」重点課題(7))シンポジウム ～次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成～	2016年12月6日～12月7日	国内	○
26	汎用MDソフトMODYLASの開発と大規模系での最近の研究事例	安藤嘉倫	第30期Cammフォーラム	2017年2月	国内	○
26	汎用MDソフトMODYLASの開発と大規模系での最近の研究事例	安藤嘉倫	第30期Cammフォーラム	2017年2月	国内	○

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	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	原渕祐、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. INOKUCHI, T. EBATA, M. SUMIDA, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, and M. EHAR	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	齊田謙一郎、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	齊田謙一郎、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系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: 多成分連結反応への応用	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、齊田謙一郎、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	「局所ユニタリー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	Cu13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)ビピリジルトリカルボニル錯体の光反応性と項間交差	斉田謙一郎、原渕祐、 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、榊茂好	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 潤祐、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	齊田謙一郎、岡田治樹、高木牧人、原潤祐、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	[Rh ₆ (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	金チオレ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、原渕祐、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、原渕祐、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	反応経路網路上における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、原渕祐、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O3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、原渕祐、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、原淵祐、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 $[\text{Rh6}(\text{NO})_n]^{q+}$ ($n = 0-7$) ($q = 0, 1$) 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 遼 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	$[\text{Rh6}(\text{NO})_x]^{q+}$ ($x=0-7$) ($q=0, 1$)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、原遼祐、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、原遼祐、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、原遼祐、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、原遼祐、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	「インフォー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 Systems」	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	○