

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/Li3PS4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, 鈴木惣一郎	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	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ケット)	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ケット)	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ケット)	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「高速多重極展開法の拡張」	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説明・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	○