

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

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)
1	A theoretical study on hot charge-transfer states and dimensional effects of organic photocells based on the ideal diode model	T. Shimazaki, T. Nakajima	Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 12517–12526 (2017).	2017年4月	国外	○
2	An extrapolation scheme for solid-state NMR chemical shift calculations	T. Nakajima	Chem. Phys. Lett. 677, 99–106 (2017).	2017年4月	国外	○
3	The Born-Oppenheimer molecular simulations of infrared spectra of crystalline poly-(R)-3-hydroxybutyrate with analysis of weak C-H...O=C hydrogen bonds	M. Z. Brela, M. Boczar, M. J. Wójcik, H. Sato, T. Nakajima, Y. Ozaki	Chem. Phys. Lett. 678, 112–118 (2017).	2017年6月	国外	○

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

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)
1	"Toward full simulation of the electrochemical oxygen reduction reaction on Pt with first-principles and kinetic calculations"	Tamio Ikeshoji and Minoru Otani	PCCP	to be published	国外	○
2	A Transformation Theory of Stochastic Evolution in Red Moon Methodology to Time Evolution of Chemical Reaction Process in the Full Atomistic System	Y. Suzuki, M. Nagaoka	The Journal of Chemical Physics, 146, 204102	2017年5月	国外	○
3	Molecular dynamics study of the aggregation rate for zwitterionic dodecyltrimethylamine oxide and cationic dodecyltrimethylammonium chloride micelles	Kazushi Fujimoto, Yousuke Kubo, Shinji Kawada, Noriyuki Yoshii, and Susumu Okazaki	Mol. Sim. DOI: 10.1080/08927022.2017.1328557	2017年5月	国外	○

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

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)
1	Transition-Metal-Free Boryl Substitution using Silylboranes and Alkoxy Bases	E. Yamamoto, S. Maeda, T. Taketsugu, and H. Ito	Synlett, 28, 1258–1267 (2017).	2017年4月	国外	○

2	Exploring the Full Catalytic Cycle of Rhodium(I)BINAP-Catalysed Isomerisation of Allylic Amines: A Graph Theory Approach for Path Optimisation	T. Yoshimura, S. Maeda, T. Taketsugu, M. Sawamura, K. Morokuma, and S. Mori	Chemical Science, 8, 4475–4488 (2017).	2017年5月	国外	○
3	Autocatalytic Cycle in Autoxidation of Triethylborane	R. Uematsu, C. Saka, Y. Sumiya, T. Ichino, T. Taketsugu, and S. Maeda	Chem. Comm., 53, 6557–6670 (2017).	2017年4月	国外	○
4	A Luminescent Mechanochromic 9-Anthryl Gold(I) Isocyanide Complex with an Emission Maximum at 900 nm after Mechanical Stimulation	T. Seki, N. Tokodai, S. Omagari, T. Nakanishi, Y. Hasegawa, T. Iwasa, T. Taketsugu, and H. Ito	J. Am. Chem. Soc. (Communication), 139, 6514–6517 (2017).	2017年5月	国外	○
5	Global search for low-lying crystal structures using the artificial force induced reaction method: A case study on carbon	M. Takagi, T. Taketsugu, H. Kino, Y. Tateyama, K. Terakura, and S. Maeda	Phys. Rev. B, 95, 184110 (2017).	2017年5月	国外	○
6	Oxygen Reduction Reaction Catalyzed by Small Gold Cluster on h-BN/Au(111) Support	A. Lyalin, K. Uosaki, and T. Taketsugu	Electrocatalysis, in press.	2017年6月	国外	○
7	A Coordination Strategy to Realize a Sextuply Bonded Complex	Y. Chen, J. Hasegawa, K. Yamaguchi, S. Sakaki	Phys. Chem. Chem. Phys., 19, 14947–14954 (2017)	2017年6月	国外	○
8	Selective Dehydration of Mannitol to Isomannide over H-Beta Zeolite	H. Yokoyama, H. Kobayashi, J. Hasegawa, A. Fukuoka	ACS Catal., 7, 4828–4834 (2017)	2017年6月	国外	○
9	Enhanced Luminescence of Asymmetrical Seven-coordinate Eu(III) Complexes Including LMCT Perturbation	K. Yanagisawa, Y. Kitagawa, T. Nakanishi, T. Seki, T. Akama, M. Kobayashi, T. Taketsugu, H. Ito, K. Fushimi, and Y. Hasegawa	Eur. J. Inorg. Chem., in press.	2017年7月	国外	○
10	Hidden radical reactivity of the [FeO] ₂ ⁺ group in the H-abstraction from methane: DFT and CASPT2 supported mechanism by the example of model iron (hydro) oxide species	V. Kovalskii, A. Shubin, Y. Chen, D. Ovchinnikov, S. Ruzankin, J. Hasegawa, I. Zilberberg, V. N. Parmon	Chem. Phys. Lett., 679, 193–199 (2017)	2017年7月	国外	○
11	Selected configuration interaction method using sampled first-order corrections to wave functions	Y. Ohtsuka, J. Hasegawa	J. Chem. Phys., in press	2017年7月	国外	○
12	Photo-induced β-Elimination of 9-Fluorenylmethanol Leading to Dibenzofulvene	H. Nageh, Z. Liming, A. Nakayama, J. Hasegawa, Y. Wang, T. Nakano	Chem. Commun., in press	2017年7月	国外	○