

サブ課題A: 新エネルギー源の創出・確保ー太陽光エネルギー

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	CARRIER DYNAMICS OF ORGANIC-INORGANIC METAL HALIDE PEROVSKITES	山下 晃一	ベニス(REMOO/国際エネルギー会議)	2017/5/10-5/12	国外	
2	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	京都大学(第20回理論化学討論会)	2017/5/16-5/18	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	第一原理計算に基づくペロブスカイト型太陽電池の動作機構および性能向上指針に関する研究	浦谷浩輝, 山下晃一	京都大学(第20回理論化学討論会)	2017/5/16-5/18	国内	
2	キノイド型縮環オリゴシロールの共役長に対する特異な LUMO 準位依存性に関する理論的考察	三澤奈々, 藤井幹也, 新谷亮, 津田知拓, 野崎京子, 山下晃一	京都大学(第20回理論化学討論会)	2017/5/16-5/18	国内	
3	Entropy Decreases Free Energy of Charge Separation in Organic Photovoltaics	Eisuke Kawashima, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita	大阪大学(Interdisciplinary Symposium for Up-and-coming Materials Scientists (ISUMS) 2017)	2017/6/8-6/9	国外	
4	Design Principles for Perovskite Solar Cells: Insights from Density Functional Theory Calculations	Hiroki Uratani, Koichi Yamashita	大阪大学(Interdisciplinary Symposium for Up-and-coming Materials Scientists (ISUMS) 2017)	2017/6/8-6/9	国外	
5	Origin of Unusual Dependency of LUMO Levels on Conjugation Length in Quinoidal Fused Oligosiloles	Nana Misawa, Mikiya Fujii, Ryo Shintani, Tomohiro Tsuda, Kyoko Nozaki, Koichi	大阪大学(Interdisciplinary Symposium for Up-and-coming Materials Scientists (ISUMS) 2017)	2017/6/8-6/9	国外	
6	LaMg <sub>x</sub> Ta <sub>1-x</sub> O <sub>1+3x</sub> N <sub>2-3x</sub> のバンド構造の組成依存性に関する第一原理計算	久保綾子, 山下晃一	近畿大学(第36回光がかかわる触媒化学シンポジウム)	2017/6/30	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	NTChem: A High-Performance Software Package for Quantum Chemistry Simulation	T. Nakajima	The PASC17 Conference, Lugano	2017年6月	国外	○
2	Structural and Electronic Features of Hybrid Organic-Inorganic Halide Perovskite Clusters and Surfaces: Insights from First Principles	山下 晃一	ギリシャ(ICCMSE2017)	2017/4/21-4/25	国外	○
3	計算科学を駆使した水分解光触媒の機能解析と材料探索	山下 晃一	富士通労働組合会館(ユニオンビル) 電子セラミック・プロセス研究会 「人工光合成技術に関する最新研究開発動向」	2017年6月	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	First-principles study on effects of buffer layer, Li depletion, and ion mixing at interfaces between LiCoO <sub>2</sub> and sulfide electrolyte in all-solid-state battery	Yoshitaka Tateyama, Jun Haruyama, Keitaro Sodeyama	21st International Conference on Solid State Ionics (SSI-21)	2017/6/18-2017/6/23	国外	

## (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	Extensive investigations of surface properties of $ABO_3$ perovskite materials toward surface machine learning	Shota Iizuka, Sergey Levchenko, Yoshitaka Tateyama, Matthias Scheffler	2017 International Workshop on Electrified Interfaces for Energy Conversions	2017/5/18-2017/5/21	国内	
2	First-principles study on interfaces between sulfide electrolyte and oxide cathode in all-solid-state battery	Yoshitaka Tateyama, Jun Haruyama, Keitaro Sodeyama	Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC17)	2017/6/26-2017/6/28	国外	
3	A Role of Monomer Molecule in an Active Site Opening Process of Olefin Polymerization Catalyst (Pyridylamide)Hf(IV) Complex	K. Matsumoto, M. Takayanagi, S. K. Sankaran, N. Koga, M. Nagaoka	Strasbourg, France(1st Molecular Technology Workshop)	2017年6月28日～30日 (28, 29日)	国外	
4	Analysis on MMA Monomer Behavior in PCP Nanochannels toward Quantitative	M. Takanagi, S. Pakhira, K. Matsumoto, M. Nagaoka	Strasbourg, France(1st Molecular Technology Workshop)	2017年6月28日～30日 (28, 29日)	国外	
5	(pyridylamide)Hf(IV)触媒によるプロピレン重合反応における対アニオン効果	松本 健太郎、高柳 昌芳、S. K. Sankaran、古賀 伸明、長岡 正隆	名古屋大学 (第33回化学反応討論会)	2017年6月7日～9日 (8日)	国内	
6	高濃度電解液を用いたLiイオン電池の固体電解液相間(SEI)膜形成機構の理論的解析	竹中 規雄、藤江 拓哉、長岡 正隆	京都大学 (第20回理論化学討論会)	2017年5月16日～18日 (16日)	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	DFT molecular dynamics study on battery materials; SEI film and superconcentrated electrolyte	Yoshitaka Tateyama	Frontiers in Materials Processing Applications, Research and Technology (FIMPART2017)	2017/7/9-2017/7/12	国外	○
2	タンパク質反応の大規模分子動力学計算—ヘモグロビンサブユニットへの酸素分子侵入経路の統計的解析—	長岡正隆	分子科学研究所 (分子研研究会 「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」)	2017年6月14日	国内	○
2	タンパク質反応の大規模分子動力学計算—ヘモグロビンサブユニットへの酸素分子侵入経路の統計的解析—	長岡正隆	分子科学研究所 (分子研研究会 「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」)	2017年6月14日	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	分割統治 SCF 計算における誤差の自動制御手法の開発	藤森俊和, 小林正人, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
2	Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミンの異性化経路の探索とグラフを用いた経路最適化	吉村誠慶, 前田理, 澤村正也, 武次徹也, 諸熊奎治, 森聖治	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	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	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機構の解明	蝦名昌徳, 原渕祐, 岩佐豪, 武次徹也	ナノ学会第15回大会(札幌)	2017/5/10-2017/5/12	国内	
2	クラスターモデルでの酸化物担持金属クラスター触媒の電子物性	岩佐豪, 武次徹也	ナノ学会第15回大会(札幌)	2017/5/10-2017/5/12	国内	
3	Wide Catalytic Activation Area of h-BN Surface by Doping C Atoms	M. Gao, M. Adachi, A. Lyalin, T. Taketsugu	ナノ学会第15回大会(札幌)	2017/5/10-2017/5/12	国内	
4	Theoretical Study of Palladium-Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quininoxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand	M. Ratanasak, M. Suginome, J. Hasegawa	The 2nd International Symposium on Precision Controlled Reaction Field(大阪)	2017/5/12-2017/5/13	国内	
5	Theoretical Study of Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of Ketones: Chalk-Harrod vs Modified Chalk-Harrod Mechanism	L. Zhao, N. Nakatani, J. Hasegawa	The 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis, Kaderu 27(札幌)	2017/5/15-2017/5/17	国内	
6	Reaction Mechanism of DMC Formation from CO <sub>2</sub> and Methanol over CeO <sub>2</sub> (111): A DFT Study	T. Sugiyama, A. Nakayama, J. Hasegawa	The 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis, Kaderu 27(札幌)	2017/5/15-2017/5/17	国内	
7	演算子変換による効率的な時間発展法: 3 項間漸化式法	赤間知子, 小林理, 南部伸孝, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
8	第一原理ダイナミクスによる NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> 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	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	

9	ポテンシャル交差構造探索の新実装: 勾配射影法と人工力誘起反応法に基づく構造探索	原 遼祐, 齊田謙一郎, 武次徹也, 前田理	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
10	AIMD/spin-flip TDDFT による $\alpha$ -メチルスチルベンの光異性化ダイナミクスの解明	堤拓朗, 山本梨奈, 原 遼祐, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
11	Zn(II)錯体の励起状態プロトン移動に由来した発光機構の解明	蝦名昌徳, 岩佐豪, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
12	Cu/CeO <sub>2</sub> の電子物性と NO 解離反応に対する触媒活性	岩佐豪, A. Lyalin, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
13	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	高敏, 中原真希, A. Lyalin, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
14	分割統治 Hartree-Fock-Bogoliubov エネルギー勾配法の開発	小林正人, 児玉良輔, 武次徹也	第20回理論化学討論会(京都)	2017/5/16-2017/5/18	国内	
15	Theoretical Design of Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction: When Boron Nitride Meets Gold	A. Lyalin, K. Uosaki, T. Taketsugu	2017 International Workshop on Electrified Interfaces for Energy Conversions (EIC2017) (Shonan)	2017/5/18-2017/5/21	国内	
16	Theoretical study of photoreaction mechanism based on automated exploration of minimum energy conical intersection and seam of crossing geometries	Y. Harabuchi, K. Saita, T. Taketsugu, S. Maeda	The 28th International Conference on Photochemistry (ICP 2017) (Strasbourg, France)	2017/7/16-2017/7/21	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・国際的別	招待講演(○を記入)
1	Exploring adiabatic and nonadiabatic pathways for understanding and designing chemical reactions	S. Maeda	33rd symposium on chemical kinetics and dynamics (Nagoya)	2017/6/7-2017/6/9	国内	○
2	Theoretical approach to reaction-path bifurcation	T. Taketsugu	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
3	Analyzing Quantum Chemical Calculation Results with Informatics Techniques: Toward Application to Catalyst Development	M. Kobayashi	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
4	Theoretical Spectroscopy beyond the Dipole Approximation	T. Iwasa	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○

5	Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach	J. Hasegawa, K. Yanai, K. Ishimura	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
6	First-principles simulations of catalytic reactions at the liquid/CeO <sub>2</sub> interface: role of the acid-base sites	A. Nakayama	INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC) 2017 (Ho Chi Minh, Vietnam)	2017/6/8-2017/6/10	国外	○
7	A Hidden Feature in Static Intrinsic Reaction Coordinate Analysis: Bifurcation	T. Taketsugu	3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017 (Yokohama)	2017/7/14-2017/7/15	国内	○
8	Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach	J. Hasegawa	3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017 (Yokohama)	2017/7/14-2017/7/15	国内	○
9	Automated search for nonradiative pathways in molecules and organometallic complexes	S. Maeda	The 28th International Conference on Photochemistry (ICP 2017) (Strasbourg, France)	2017/7/16-2017/7/21	国外	○
10	Computational approach to design of non-platinum catalyst for oxygen reduction reaction: boron nitride with gold	T. Taketsugu	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
11	Theoretical study of frustrated Lewis pair for activation of stable chemical bonds	J. Hasegawa	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
12	Catalytic reactions at the liquid/metal-oxide interface: role of the acid-base sites	A. Nakayama	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
13	Reactivity of gold clusters in the regime of structural fluxionality	M. Gao	The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21) (Pathum Thani, Thailand)	2017/8/3-2017/8/4	国外	○
14	Chemical Reaction Simulations treated by Linear-Scaling Divide-and-Conquer type Density-Functional based Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method	Hiromi Nakai	253rd ACS National Meeting	2017年4月	国外	○