

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 Yamashita	大阪大学(Interdisciplinary Symposium for Up-and-coming Materials Scientists (ISUMS) 2017)	2017/6/8-6/9	国外	

6	LaMg _x Ta _{1-x} O _{1+3x} N _{2-3x} 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	○