

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 ₂ 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	○