

## 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

### 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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
1	量子化学プログラムGELLANの開発	Ladoczki Bence、天能精一郎	第21回理論化学討論会	2018年5月	国内
2	Massively parallel implementation of model space quantum Monte Carlo method	上島基之、天能精一郎	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回若手勉強会	2018年8月	国内
3	イニシエーター近似の摂動補正に関する研究	土持崇嗣、天能精一郎	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4回公開シンポジウム	2018年9月	国内
4	量子化学プログラムGELLANの開発	上島基之、天能精一郎	第12回分子科学討論会	2018年9月	国内
5	ポスト京に向けた、高精度強相関ソルバーの開発状況	天能 精一郎	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
6	基盤アプリ設計・開発と重点課題アプリ5WGにおけるポスト「京」に向けた取り組み	中嶋隆人	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
7	マテリアルズ・インテグレーションによるエネルギー材料の開発	中嶋隆人	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

8	大規模分子計算に向けた密度汎関数計算法の開発	神谷宗明、中嶋隆人	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
9	計算科学による太陽光エネルギー変換の機構解析と材料探索	山下 晃一	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5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
10	光エネルギー変換の理論・計算化学	山下 晃一	化学技術推進協会先端科学・材料技術部会・コンピュータケミストリ分科会 次世代CCWG 講演会 (東京)	2018年7月	国内
11	光エネルギー変換の理論・計算化学	山下 晃一	スパコンプロフェッショナル (金属材料研究所)	2018年6月	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(学会等名)	発表した時期	国内・外の別
1	錯体系強相関ソルバーの超並列実装と半導体系触媒の理論開発	上島 基之	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
2	Full coupled cluster reduction for strong electron correlations	Xu Enhua	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
3	AGP状態を用いたより大きな基底関数系による分子系の記述	植村 渉	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
4	分子集合系における光励起電子動力学の解明に向けた理論計算手法の開発	米原文博	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

5	太陽電池設計に向けた非断熱分子動力学シミュレーションの実装	嶺澤範行	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
6	PTB7/ITIC非フラーレン型有機薄膜太陽電池における電荷移動メカニズムの理論的研究	太田希, 村岡梓, 山下晃一	第12回分子科学討論会 (福岡国際会議場)	2018年9月	国内
7	Development of Organic Solar Cell Simulators for Material Design	Eisuke Kawashima, Koichi Yamashita	計算科学アライアンス国際シンポジウム (RECS 2018) (東京大学本郷キャンパス 小柴ホール)	2018年9月	国内
8	Naイオン電池負極材料 Sn における充放電過程と NMRの理論的研究	工藤慧, 村岡梓, 児玉涼介, Saeid Arabnejad, 山下晃一	日本コンピュータ化学会秋期年会 (弘前大学)	2018年11月	国内
9	有機無機鉛ハライドペロブスカイト・クラスタの励起状態	近藤 友美, 村岡 梓, 山下 晃一	日本コンピュータ化学会秋期年会 (弘前大学)	2018年11月	国内
10	Mechanism of charge transfer in polymer/fullerene-free type organic solar cell	Nozomi Ohta, Azusa Muraoka, Koichi Yamashita	APS March Meeting	2019年3月	国外
11	Regression model for stabilization energies associated with anion ordering in Perovskite materials	Masanori Kaneko, Mikiya Fujii, Takashi Hisatomi, Koichi Yamashita, Kazunari Domen	Advances in Organic and Hybrid Electronic Materials (Dubrovnik, Croatia)	2019年3月	国外
12	Organic Photovoltaics Simulators for Material Design	Eisuke Kawashima, Koichi Yamashita	Advances in Organic and Hybrid Electronic Materials (Dubrovnik, Croatia)	2019年3月	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 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
-----	---------------	-------	---------------	--------	--------

1	Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms	天能精一郎	The 7th (Japan-Czech-Slovakia) Symposium on Theoretical Chemistry	2018年5月	国外
2	Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms	天能精一郎	Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques (LUEST2018)	2018年6月	国外
3	Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms	天能精一郎	The Molecular Electronic Structure in Metz (MESM)	2018年8月	国外
4	Full coupled cluster reduction	天能精一郎	Mainz-Kobe joint workshop on solving the full configuration interaction problem	2018年11月	国外
5	Stochastic and deterministic coupled-cluster approaches for accurate treatment of strong electron correlations	天能精一郎	Quantum Simulations: From Chemistry to Materials Science	2018年12月	国外
6	“京”で新機能材料を探索する	中嶋隆人	早稲田大学先進理工学部応用化学科主催セミナー, 西早稲田	2018年5月	国内
7	Quantum Chemistry on the K Computer	T. Nakajima	ISC High Performance 2018, Frankfurt	2018年6月	国外
8	京を利用した第一原理計算による材料設計手法	中嶋隆人	技術情報協会 第一原理計算による材料設計, 解析手法と活用事例, 五反田	2018年10月	国内
9	Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites & Lead-Free Perovskites Cs <sub>2</sub> Au <sub>2</sub> I <sub>6</sub>	Koichi Yamashita	nanoGe-FallMeeting 18, Fundamental Aspects of Perovskite Solar Cells and Optoelectronics (スペイン)	2018年10月	国外

10	Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites	Koichi Yamashita	256th ACS National Meeting Computational Photocatalysis: Modeling of Photophysics & Photochemistry at Interfaces (米国)	2018年8月	国外
11	Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites	Koichi Yamashita	CMCEE2018 (シンガポール)	2018年7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

### 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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
1	貴金属系および酸化物系電極界面の第一原理シミュレーション	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
2	First-principles simulation of TiO <sub>2</sub> electrocatalyst for polymer electrolyte fuel cell	山本良幸	重点課題5第1回若手勉強会	2018年8月	国内
3	First-Principles Study of Oxygen Reduction Reaction at Defective TiO <sub>2</sub> surfaces	山本良幸	Cancun, Mexico, Americas International Meeting on Electrochemistry and Solid State Science	2018年10月	国外
4	第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発とイオン結晶の不規則性への応用	笠松秀輔	東京大学物性研究所、 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」	2018年4月	国内
5	Direct coupling of first-principles calculation with replica exchange Monte Carlo sampling of ion disorder in solids	笠松秀輔	Lecture Atami-Momoyama, 重点課題5 第1回若手勉強会 (CSE 1st Young Researcher Workshop)	2018年8月	国内

6	第一原理熱力学サンプリングによる酸化物中の欠陥間相互作用の解析	笠松秀輔	湯沢ニューオータニ、第14回固体イオニクスセミナー	2018年9月	国内
7	第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発と欠陥を有するイオン結晶への応用	笠松秀輔	同志社大学京田辺キャンパス、日本物理学会2018年秋期大会	2018年9月	国内
8	vdW-DF+U $\ddot{A}$ iOdescription of solid oxygen in ambient pressure and its magnetic-field induced phase transition	笠松秀輔	Kashiwanoha Conference Center, 16th International Conference on Megagauss Field Generation and Related Topics	2018年9月	国内
9	第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発と欠陥を有するイオン結晶への応用	笠松秀輔	東北大学金属材料研究所、PCoMSシンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会	2018年10月	国内
10	第一原理熱力学サンプリングによる酸化物中の欠陥間相互作用の解析	笠松秀輔	京都大学吉田キャンパス、第44回固体イオニクス討論会	2018年12月	国内
11	First-Principles Study on the Microscopic Origin of Interfacial Resistance between Oxide Cathode and Sulfide Electrolyte in All Solid State Battery	館山佳尚, 春山潤, 袖山慶太郎	2018 MRS Spring Meeting & Exhibit	2018年4月	国外
12	Combined experimental and computational investigation on the electrochemical reactivity of garnet-type solid electrolyte in an all-solid-state battery cell	Randy Jalem, Yasuyuki Morishita, Takashi Okajima, Yuki Kondo, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama	2018 MRS Spring Meeting & Exhibit	2018年4月	国外
13	Computational Investigation on Oxide Electrolytes with Garnet Structure and Conduction-Pathway-Blocking Dopants	Randy Jalem, Ryosuke Natsume, Masanobu Nakayama	2018 MRS Spring Meeting & Exhibit	2018年4月	国外
14	NO + CO Reaction on Rh Surface: DFT Investigation Combined with Microkinetic Analysis	石川敦之, 館山佳尚	The 7th JCS (Japan-Czech-Slovak) Symposium	2018年5月	国外
15	Reversible O redox in Layered Hexagonal Transition Metal Oxides for Na Ion Battery Cathodes with High Potential and High Capacity	M. H. N. Assadi, 大久保将史, 山田淳夫, 館山佳尚	ACEMD18, Australian Computationally enhanced Materials Design 18	2018年7月	国外

16	第一原理計算・微視的反応論・反応工学に基づくメタン酸化カップリング活性と選択性の理論予測	石川敦之, 館山佳尚	第12回分子科学討論会	2018年9月	国内
17	第一原理計算と微視的反応速度論に基づく理論計算によるメタン酸化カップリングの活性と選択性の予測	石川敦之, 館山佳尚	第122回触媒討論会	2018年9月	国内
18	DFT Study on CO <sub>2</sub> Reduction on Boron-doped diamond Electrode	館山佳尚, Maofeng Dou, 飯塚将太, 栄長泰明	69th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry	2018年9月	国外
19	Investigation of Interface Reaction between LiCoO <sub>2</sub> and Sulfide Electrolyte in an All-Solid-State Battery from First-Principle Structure Prediction Method	Bo Gao, Randy Jalem, Yanming Ma, 館山佳尚	第59回電池討論会	2018年11月	国内
20	層状構造を持つLi(NixCoyMnz)O <sub>2</sub> 正極材料の表面欠陥に関する第一原理計算解析	Shukri Ganes, Jalem Randy, 館山佳尚	第59回電池討論会	2018年11月	国内
21	Efficient search of novel ion conductive ceramics by combining first-principles calculations and materials informatics	Randy Jalem, Kenta Kanamori, Ichiro Takeuchi, Yoshitaka Tateyama, Masanobu Nakayama	第59回電池討論会	2018年11月	国内
22	Theoretical Study on Termination Dependent Redox Reactivity of Boron Doped Diamond / Water Interface	飯塚将太, 夏井啓介, 栄長泰明, 館山佳尚	2018 Materials Research Society Fall Meeting	2018年11月	国外
23	Surface Orientation Dependence of Oxygen Vacancy and Ni/Li Cation Mixing Defects Formation in Li(Ni <sub>0.8</sub> Co <sub>0.1</sub> Mn <sub>0.1</sub> )O <sub>2</sub> Cathode Materials	Ganes Shukri, Randy Jalem, 館山佳尚	2018 Materials Research Society Fall Meeting	2018年11月	国外
24	電解液および界面過程のシミュレーションに向けたコード開発と応用	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

25	重点課題5 インフォマティクス活用WGについて	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
26	材料シミュレーションとベイズ最適化を用いた全固体電池材料の探索	ハレム ランディ、 中山 将伸	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
27	電極分極効果とイオン液体界面カインेटクス	稲垣 泰一	研究会「凝縮系の理論化学2019	2019年3月	国内
28	二次電池負極界面における不動態被膜形成に関する計算化学的研究	長岡 正隆	触媒・電池元素戦略研究拠点第14回公開シンポジウム(東京大学)	2019年3月	国内
29	Toward Computational Molecular Technology for Complex Chemical Reaction Systems including Biological Macromolecules	Masataka Nagaoka	The Role of Fluctuations and Dynamics in Biomolecular Function(Telluride, USA)	2019年1月	国外
30	二次電池電解液の新規開発へ向けた複合反応系の計算化学	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5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
31	Microscopic Mechanism of FEC Concentration Effect on SEI Film Formation in Na-ion Batteries	Amine Bouibes, Norio Takenaka, Takuya Fujie, Kei Kubota, Shinichi Komaba, and Masataka Nagaoka	6th Edition of the International Renewable and Sustainable Energy Conference (Rabat, Morocco)	2018年11月	国外
32	Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium Ion Batteries :A Computational Chemical Study based on Red Moon Methodology	Masataka Nagaoka	Physical Chemistry Seminar (Boston University, USA)	2018年8月	国外
33	複合化学反応系の理論化学・計算化学に向けて	長岡正隆	ワークショップ「複合系の理論化学・計算化学: 最近の研究状況と展望」(京都大学福井謙一記念研究センター)	2018年4月	国内
34	高速多重極展開法の適用可能なシミュレーションセル形状の拡張	吉井 範行、安藤 嘉倫、岡崎 進	第21回理論化学討論会	2018. 5. 15-5. 17	国内

35	ガラス状高分子PMMAの衝撃破壊に関する分子論的研究	藤本和士, 服部智成, 篠田 渉, 岡崎 進	第21回理論化学討論会	2018. 5. 15-5. 17	国内
36	Extensions of the Fast Multipole Method(高速多重極展開法の拡張)	吉井 範行	重点課題5第1回若手勉強会	2018. 8. 20-8. 22	国内
37	Performance improvements of software MODYLAS for the post-K computer	Yoshimichi Ando	重点課題5第1回若手勉強会	2018. 8. 20-8. 22	国内
38	Consideration of accelerating MODYLAS by utilizing single-precision SIMD on Post-K	Jiachao Zhang	重点課題5第1回若手勉強会	2018. 8. 20-8. 22	国内
39	Fracture Simulation of a Glassy Polymer by all atomistic Molecular Dynamics Calculation	Kazushi Fujimoto	重点課題5第1回若手勉強会	2018. 8. 20-8. 22	国内
40	脂質組成に非対称性をもつモデル脂質二重層膜の分子動力学計算	安藤 嘉倫, 早川 志保 岡 崎 進	第12回分子科学討論会	2018. 9. 10-9. 13	国内
41	異方性の高いシミュレーションセルにおける高速多重極展開法	吉井範行, 安藤嘉倫, 岡崎 進	第12回分子科学討論会	2018. 9. 10-9. 13	国内
42	非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究	藤本和士, 服部智成, 篠田 渉, 岡崎 進	第12回分子科学討論会	2018. 9. 10-9. 13	国内
43	非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 I: 脆性材料 - PMMA	藤本和士, 湯 之也, パヤ ル ラジディープ, 篠田 渉, 岡崎 進	第67回高分子討論会	2018. 9. 12-9. 14	国内
44	非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 II: 延性材料 - PC	藤本和士, 湯 之也, 篠田 渉, 岡崎 進	第67回高分子討論会	2018. 9. 12-9. 14	国内

45	周期境界条件下における静電相互作用のsurface term	吉井範行, 安藤嘉倫, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
46	非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究II: 分子論的解釈	湯之也、藤本和士、篠田渉、岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
47	ポスト「京」重点課題5全体概要	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2回実験・産業との連携シンポジウム	2018. 12. 11-12. 12	国内
48	燃料電池の電極4相界面における物質輸送分子機構の解明に向けて	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5回公開シンポジウム	2018. 12. 11-12. 12	国内
49	Molecular Study of Impact Fracture of Amorphous Polymer I: Brittle Material - PMMA	Kazushi Fujimoto, Zhiye Tang, Rajdeep Payal, Wataru Shinoda and Susumu Okazaki	28th Annual Meeting of MRS-Japan 2018	2018. 12. 18-12. 20	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 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
1	欠陥のあるTiO <sub>2</sub> における酸素還元反応中間体の吸着エネルギー間の関係	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5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
2	Solvation and nuclear quantum effects for hydrogen adsorption on Pt(111)	Yan Lei	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5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
3	チタニア表面における欠陥誘起の酸素還元反応	山本良幸	東京大学物性研究所、物性研スパコン共同利用・CCMS合同研究会	2018年4月	国内

4	Ab initio Pourbaix diagram of defective oxide: A feasibility study of SCAN and ACFDT-RPA functional	山本良幸	ISSP, UTokyo, The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations	2018年7月	国内
5	TiO <sub>2</sub> -酸性溶液界面における酸素還元反応の第一原理計算	山本良幸	同志社大学京田辺キャンパス、日本物理学会秋季大会	2018年9月	国内
6	TiO <sub>2</sub> 電極触媒の電気化学的安定性の第一原理計算	山本良幸	東北大学片平キャンパス、PCoMSシンポジウム&スパコン共用事業成果報告会2018	2018年11月	国内
7	First-principles study of hydrogen adsorption on Pt	山本良幸	奈良先端科学技術大学院大学、第12回物性科学領域横断研究会	2018年11月	国内
8	First-principles design of TiO <sub>2</sub> electrocatalyst for oxygen reduction reaction	山本良幸	TIAかけはしポスター交流会2018「-計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査-」	2018年12月	国内
9	First-principles study of hydrogen adsorption on Pt	山本良幸	奈良先端科学技術大学院大学、第12回物性科学領域横断研究会	2018年12月	国内
10	DFT+U and molecular dynamics study of H <sub>2</sub> O interaction with metal/ceria materials	Lucie Szabova, Matteo Farnesi Camellone, Fabio Negreiros Ribeiro, 館山佳尚, Vladimir Matolin, Stefano Fabris	The 7th JCS (Japan-Czech-Slovak) Symposium	2018年5月	国外
11	First-Principles Study on Adsorption and Decomposition of Carbonate Electrolyte Molecules at LiNi <sub>0.5</sub> Mn <sub>1.5</sub> O <sub>4</sub> Cathode Interface	館山佳尚, 奥野幸洋, 後瀧敬介, 袖山慶太郎	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外
12	Grignard Reagent Based Electrolytes in Magnesium-Ion Battery : A First-Principles Study	Ashu Choudhary, 袖山慶太郎, 館山佳尚	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外

13	Surveying Ilmenite Type 4d Transition Metal Oxides for Na Ion Battery Cathodes with High Potential and High Capacity	M. H. N. Assadi, 大久保將史, 山田淳夫, 館山佳尚	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外
14	Computational Investigation on the Sodium Ion Transport Property of Oxyfluorinated Titanium(IV) Phosphate Na <sub>3</sub> Ti <sub>2</sub> P <sub>2</sub> O <sub>10</sub> F for Sodium Ion Battery Application	Randy Jalem, Ryosuke Natsume, Masanobu Nakayama	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外
15	NO + CO Reaction on Rh Surface: First Principle Density Functional Theory Investigation Combined with Microkinetic Analysis	石川敦之, 館山佳尚	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis (ICAT)	2018年8月	国外
16	Structure Search and Property Analysis of Interfaces between LiCoO <sub>2</sub> Cathode and Sulfide Electrolyte in Solid-State Battery via DFT-CALYPSO Method	Bo Gao, Randy Jalem, Yanming Ma, 館山佳尚	International Workshop on Computational Design and Discovery of Novel Materials	2018年9月	国外
17	Towards Efficient Search of Novel Fast Ionic Conductors by Combining DFT Methods and Informatics Approaches	Randy Jalem, Kenta Kanamori, Yusuke Noda, Tam Le, Ichiro Takeuchi, Yoshitaka Tateyama, Masanobu Nakayama	International Workshop on Computational Design and Discovery of Novel Materials	2018年9月	国外
18	Development of a General Representation Scheme for Crystalline Solids by Combining Real Values from Voronoi Partitioning Features of Atomic Positions and Atomic Property Data	Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	The Thomas Young Centre and its partners: the University of Kent, University of Oxford, Queen's University Belfast and the University of Southampton	2018年9月	国外
19	Combining DFT Methods and Informatics Approaches for Efficient Search of Novel Fast Ion Conductors	Randy Jalem	NIMS Week 2018	2018年9月	国内
20	Theoretical Study on Termination Dependent Redox Reactivity of Boron Doped Diamond / Water Interface	飯塚将太, 夏井啓介, 栄長泰明, 館山佳尚	14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14)	2018年10月	国外
21	DFT Investigations of Surface Defects in Li(NixCoyMnz)O <sub>2</sub> Layered Materials: Promising Cathode for Next Generation Battery	Ganes Shukri, Randy Jalem, 館山佳尚	14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14)	2018年10月	国外
22	ポストリチウムイオン電池に向けた電解質界面・被膜の物性解明と材料設計	館山佳尚	第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会	2018年11月	国内

23	炭素ダイヤモンド電極界面の触媒・化学反応に関する第一原理計算解析	濱田幾太郎, 館山佳尚	第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会	2018年11月	国内
24	Development of Polarizable Force Field for Lithium-ion Battery Applications	Xichan Gao	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
25	Grignard Reagent and beyond : The electrolytes for Mg ion batteries	Ashu Choudhary	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
26	非晶質炭素電極モデルを用いた電極電解液界面の分子動力学シミュレーション解析	藤江拓哉、竹中規雄、稲垣泰一、長岡正隆	日本化学会第99春季年会	2018年3月	国内
27	分子動力学法による非晶質炭素電極モデルを用いた電極-電解液界面構造の解析	藤江拓哉、竹中規雄、稲垣泰一、長岡正隆	研究会「凝縮系の理論化学2019(石垣市民会館)	2019年3月	国内
28	二次電池におけるSEI膜形成シミュレーションに関する研究開発	藤江 拓哉、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5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
29	分極可能な電極表面モデルが与えるイオン液体分子の界面カイネティクスへの影響	稲垣泰一、長岡正隆	第32回分子シミュレーション討論会(産業技術総合研究所 つくば中央キャンパス内共用講堂)	2018年11月	国内
30	定電位分子動力学法を用いたLiイオン電池における固体電解液相間(SEI)膜の構造安定性の解析	松田圭太郎、稲垣泰一、長岡正隆	第32回分子シミュレーション討論会(産業技術総合研究所 つくば中央キャンパス内共用講堂)	2018年11月	国内
31	Application of QM/MM-Red Moon Method to Solid Electrolyte Interphase Film Formation in Lithium-ion Battery System	Takuya Fujie, Norio Takenaka, Yuichi Suzuki, and Masataka Nagaoka	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	国内
32	リチウムイオン電池における不動態被膜の構造安定性の理論的解析	稲垣泰一、松田圭太郎、長岡正隆	PCoMSシンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会2018(東北大学 片平キャンパス 金属材料研究所)	2018年10月	国内

33	水系Liイオン電池用ハイドレートメルト電解液の電極界面における微視的構造	竹中規雄、稲垣泰一、長岡正隆	第12回分子科学討論会（福岡国際会議場）	2018年9月	国内
34	イオン液体による金電極電位シフトの理論的解析	稲垣泰一、竹中規雄、長岡正隆	第12回分子科学討論会（福岡国際会議場）	2018年9月	国内
35	Microscopic Origin of the SEI Formation Difference Between in Cis- and in Trans-2,3-Butylene Carbonate Based Electrolyte	Kasumi Miyazaki, Norio Takenaka, Takuya Fujie, Eriko Watanabe, Atsuo Yamada, Masataka Nagaoka	the 19th International Meeting on Lithium Batteries (Kyoto International Conference Center)	2018年6月	国内
36	Macroscopic Mechanisms of SEI Film Formation in Li-Ion Batteries with Highly Concentrated Electrolyte	Norio Takenaka, Takuya Fujie, Amine Bouibes, Yuki Yamada, Atsuo Yamada, and Masataka Nagaoka	the 19th International Meeting on Lithium Batteries (Kyoto International Conference Center)	2018年6月	国内
37	Microscopic Effect of FEC Additive Concentration on SEI Film Formation in Na-ion Batteries	Amine Bouibes, Norio Takenaka, Takuya Fujie, Kei Kubota, Shinichi Komaba, and Masataka Nagaoka	the 19th International Meeting on Lithium Batteries (Kyoto International Conference Center)	2018年6月	国内
38	trans/cisブチレンカーボネート電解液中で形成されるSEI膜の相違とその微視的起源	宮崎かすみ、竹中規雄、藤江拓哉、渡部絵里子、山田裕貴、山田淳夫、長岡正隆	第21回理論化学討論会	2018年5月	国内
39	大規模分子動力学計算高速化のための新規MPI 通信方法の開発	安藤 嘉倫、坂下達哉、吉井 範行、岡崎 進	第21回理論化学討論会	2018. 5. 15-5. 17	国内
40	Solvent effect on lateral interaction between two cholesterol molecules in lipid bilayers	A. Matsuoka, Y. Andoh and S. Okazaki	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018. 11. 5-11. 8	国外
41	Molecular dynamics study of collective dynamics of surfactant molecular assemblies	Noriyuki Yoshii, Susumu Okazaki	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018. 11. 5-11. 8	国外
42	Molecular Dynamics Study on Hydrogen Dynamics through Polymer Electrolyte Membranes	K. Takeuchi, A. T. Kuo, A. Tanaka, S. Urata, W. Shinoda and S. Okazaki	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018. 11. 5-11. 8	国外

43	親水性ナノチャンネル内における水の液膜の負圧安定性メカニズムの解明	伊藤有毅, 安藤嘉倫, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
44	脂質二重層膜中のコレステロール二分子間側方相互作用にリン脂質および水が果たす役割の解明	松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
45	大規模分子動力学計算高速化のための新規 MPI 通信方法の開発	安藤嘉倫, 坂下達哉, 吉井範行, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
46	不均一系の物質輸送の理解に向けて、位置に依存する自己拡散係数の再検討	弦巻周平, 浦野諒, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
47	分子動力学計算によるポリスチレンの衝撃破壊における分子論	伊藤直紀, 藤本和士, 湯之也, 篠田 渉, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
48	高分子電解質膜の水素透過性の分子動力学法による研究	竹内琴乃, An-Tsung Kuo, 浦田新吾, 岡崎進, 篠田渉	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
49	非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究I:延性と脆性	藤本和士, 湯之也, Rajdeep Payal篠田渉, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018. 11. 28-11. 30	国内
50	高速多重極展開法の分極可能モデルへの適用	吉井 範行	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5回公開シンポジウム	2018. 12. 11-12. 12	国内
51	大規模分子動力学計算高速化のための新規 MPI 通信方法の開発	安藤 嘉倫	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5回公開シンポジウム	2018. 12. 11-12. 12	国内
52	Research on accelerating MODYLAS through maximum SIMD on Post-K via Mixed-Precision	張 家超 (ZHANG JIACHAO)	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5回公開シンポジウム	2018. 12. 11-12. 12	国内

53	位置に依存する拡散係数、透過係数の再考 -不均一系における物質輸送の理解に向けて-	弦巻 周平	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5回公開シンポジウム	2018. 12. 11-12. 12	国内
54	Empirical Valence BondのMODYALSへの実装	藤本 和士	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5回公開シンポジウム	2018. 12. 11-12. 12	国内
55	A molecular dynamics study of the molecular origin of the ductile rupture of PC	Zhiye Tang, Kazushi Fujimoto, Wataru Shinoda and Susumu Okazaki	28th Annual Meeting of MRS-Japan 2018	2018. 12. 18-12. 20	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 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
1	High precision required for electrochemical interface simulations	杉野修	東京両国CSW2019	2019年1月	国外
2	Insights from Computational Modeling and Experiments on the Li-Ion Dynamics and Electrochemical Stability of Garnet-Based Solid Electrolytes	Randy Jalem	233rd ECS Meeting	2018年5月	国外
3	Interfacial ionics and electronics in battery and catalyst	館山佳尚	Simulations (and theory) in Physical chemistry: an International Kermesse in Paris	2018年5月	国外
4	Combining First-Principles DFT Calculations and Informatics to Search for Novel Fast Ionic Conductors (第一原理計算とインフォマティクスを利用した新規イオン伝導体探索)	Randy Jalem	JSTさきがけ第2回公開シンポジウム	2018年8月	国内
5	DFT Sampling Calculation Studies on Electrode / Electrolyte Interfaces in Li Ion Batteries	館山佳尚	12th Japan-France Joint Seminar on Batteries	2018年9月	国外

6	Insights from Computational Modeling and Experiment on the Ionic Diffusion and Electrochemical Stability of Garnet-Type Oxide Electrolytes for All-Solid-State Lithium Ion Batteries	Randy Jalem	12th Japan-France Joint Seminar on Batteries	2018年9月	国外
7	蓄電池の技術課題に対する第一原理計算研究	館山佳尚	PCoMSシンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2018	2018年10月	国内
8	電池界面イオニクスに関する第一原理統計サンプリング研究	館山佳尚	2018年日本表面真空学会学術講演会	2018年11月	国内
9	DFT sampling approaches to microscopic interfacial processes in batteries and catalysts	館山佳尚	Computational Sciences Workshop 2019	2019年1月	国外
10	First-principles sampling simulation approaches to battery science and technology	館山佳尚	第1回R-CCS国際シンポジウム	2019年2月	国外
11	Theoretical Study on Redox Reactions at Boron-Doped Diamond / Water Interfaces	Shota Iizuka, Zdenek Futera, Takeshi Watanabe, Keisuke Natsui, Yasuaki Einaga, Yoshitaka Tateyama	JST-ACCEL「ダイヤモンド電極の物質科学と応用展開」国際シンポジウム	2019年3月	国外
12	複雑な凝集系化学反応の分子シミュレーション技術の現状と将来展望	長岡正隆	第43回産協セミナー(東京都)	2019年2月	国内
13	計算分子技術Red Moon法によるコンピュータ科学	長岡正隆	スーパーコンピュータワークショップ2018(自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター)	2019年1月	国内
14	Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Computational Chemical Study based on Red Moon Methodology	M. Nagaoka	IRSEC' 18 - 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (Rabat, Morocco)	2018年12月	国外

15	Red Moon Methodology: A Computational Molecular Technology for Complex Chemical Reaction Systems - Its Theoretical Treatment and Applications -	M. Nagaoka	26th International Conference on Current Trends in Computational Chemistry (CCTCC) (Jackson, USA)	2018年11月	国外
16	計算分子技術 Red Moon 法によるコンピュータ化学 - 二次電池電解液開発と触媒重合研究への展開 -	長岡正隆	日本コンピュータ化学会2018秋季年会 (弘前大学 創立50周年記念会館)	2018年11月	国内
17	Red Moon Methodology: A computational molecular technology of complex chemical reaction systems - Its theoretical treatment and applications -	M. Nagaoka	11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2018) (Toredo, Spain)	2018年7月	国外
18	Toward Computational Molecular Technology of Complex Chemical Reaction Systems: Applications of Red Moon Methodology	M. Nagaoka	24th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (Faro, Portugal)	2018年7月	国外
19	A Computational Chemical Study Based on Red Moon Methodology: Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium-Ion Batteries	M. Nagaoka	Institute of Inorganic Chemistry Seminar (Bratislava, Slovakia)	2018年5月	国外
20	A Computational Molecular Technology of Complex Chemical Reaction Systems: Red Moon Methodology - Its Theoretical Treatment and Applications -	M. Nagaoka	Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium on Theoretical Chemistry (Prague, Czech Republic)	2018年5月	国外
21	All-Atomistic Molecular Dynamics Calculation of Impact Fracture of Glassy Polymers	K. Fujimoto, W. Shinoda, and S. Okazaki	First International Conference on 4D Materials and Systems (4DMS) 第1回 4Dマテリアル・システムに関する国際会議	2018. 8. 26-8. 30	国外
22	エネルギー課題に電子、原子、分子のミクロな立場から挑戦する -ポスト京重点課題⑤-	岡崎 進	PCoMSシンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2018	2018. 10. 22-10. 23	国内
23	All-Atomistic Molecular Dynamics Study of Impact Fracture of Glassy Polymers	Susumu Okazaki	28th Annual Meeting of MRS-Japan 2018	2018. 12. 18-12. 20	国外
24	非晶性樹脂衝撃破壊の全原子分子動力学シミュレーション	岡崎 進	高分子学会東海支部 2018東海シンポジウム 主題=高分子計算科学とその利用	2019. 1. 10-1. 11	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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
1	メタン、炭化水素ハイドレートの安定性と相変化の理論と計算	田中 秀樹	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
2	固体酸化物への金属ドーピングによる表面改質効果の系統的評価	中山哲	第3回触媒インフォマティクス研究会	2018年4月	国内
3	メタン活性化の計算化学とインフォマティクス	大塚勇起, 中山哲, 長谷川淳也	第3回触媒インフォマティクス研究会	2018年4月	国内
4	CeX (X=F, H) の擬縮退電子状態に対するスピン軌道相互作用を考慮した精密計算	近藤有輔、小林正人、赤間知子、野呂武司、武次徹也	第21回理論化学討論会（岡崎）	2018/5/15-5/17	国内
5	非一様電場下でのラマン分光計算手法の開発	竹中将斗、岩佐豪、武次徹也	第21回理論化学討論会（岡崎）	2018/5/15-5/17	国内
6	静的反応経路網に基づく AIMD 古典軌道解析	堤拓朗, 原潤祐, 小野ゆり子, 前田理, 武次徹也	第21回理論化学討論会（岡崎）	2018/5/15-5/17	国内

7	シリカ担持白金触媒によるエチレンの完全酸化反応機構の解析: C=C結合活性化メカニズムに関する理論的研究	宮崎玲, 中谷直輝, 横谷卓郎, 中島清隆, 福岡淳, 長谷川淳也	第2回統合物質(IRCCS)若手の会	2018/6/15-6/16	国内
8	金チオラートクラスターの高位励起状態と発光	岩佐豪、蝦名昌徳、原渕祐、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会(札幌)	2018/7/14-7/16	国内
9	Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/CeO <sub>2</sub> Interface: First-Principle Simulations	Akira Nakayama, Toshiyuki Sugiyama, Masazumi Tamura, Ken-ichi Shimizu, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国外
10	近接場、クラスターの励起状態と触媒: TURBOMOLEとVASP	岩佐豪	ESICB若手研究会 触媒・電池の実践的理論化学の最前線(千歳)	2018/8/26-8/29	国内
11	液体インジウムによるメタンの脱水素多量化機構に関する理論的研究	大塚 勇起, 中山 哲, 西川 祐太, 荻原 仁志, 山中 一郎, 長谷川 淳也	第12回分子科学討論会2018(福岡)	2018/9/10-9/13	国内
12	プラズモン場を用いたラマン分光理論	竹中将斗、岩佐豪、武次徹也	第12回分子科学討論会2018(福岡)	2018/9/10-9/13	国内
13	分割統治型MP2計算における誤差自動制御スキームの開発	藤森俊和, 小林正人, 武次徹也	第12回分子科学討論会2018(福岡)	2018/9/10-9/13	国内
14	多次元尺度構成法に基づく固有反応座標および反応経路ネットワークの可視化	堤拓朗、小野ゆり子、荒井迅、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018(福岡)	2018年9月	国内
15	二酸化炭素とメタノールからの炭酸ジメチル合成に関する第一原理計算 - 固体酸化物触媒を用いた反応機構の理論的解析 -	杉山 利行, 中山 哲, 長谷川 淳也	第122回触媒討論会(函館)	2018/9/26-9/28	国内

16	インジウム金属液体によるメタンの脱水素多量化反応に関する理論的研究	大塚勇起, 中山哲, 長谷川淳也, 西川祐太, 荻原仁志, 山中一郎	第122回触媒討論会 (函館)	2018/9/26-9/28	国内
17	機械学習を利用した第一原理MDトラジェクトリの自動分類	小林正人, 原渕祐, 堤拓朗, 小野ゆり子, 瀧川一学, 武次徹也	日本コンピュータ化学会2018秋季年会 (弘前)	2018/11/3-11/4	国内
18	理論計算に基づく触媒反応機構解明と未知触媒探索へむけて	武次 徹也	ホスト「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5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
19	光免疫療法における細胞障害メカニズムに関する計算化学的研究	原田芽生・小林正人・安藤完太・高倉栄男・小川美香子・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会 (札幌)	2019/1/22-1/23	国内
20	二酸化炭素とメタノールからの炭酸ジメチル合成に関する第一原理計算: 固体酸化物触媒を用いた反応機構の理論的解析	杉山利行, 中山哲, 長谷川淳也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会 (札幌)	2019/1/22-1/23	国内
21	金属ドーピングされた酸化セリウムを用いたメタンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会 (札幌)	2019/1/22-1/23	国内
22	分子結晶における励起状態と発光過程の理論的解明	岩佐豪	ソフトクリスタル領域会議	2019年1月	国内
23	表面モデル計算データベースの作成とメタン水蒸気改質触媒活性の評価	小野田遼・黒田悠介・小林正人・武次徹也	日本化学会第99春季年会 (甲南大学)	2019/3/16-3/19	国内
24	多次元データ縮約法に基づいた固有反応座標及び反応経路ネットワークの可視化	堤拓朗・小野ゆり子・荒井迅・武次徹也	日本化学会第99春季年会 (甲南大学)	2019/3/16-3/19	国内

25	ヒドロキシメチルフルフラールの安定性に関する理論的研究	田代啓介・小林正人・中島清隆・武次徹也	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
26	ケイ素フタロシアニンの軸配位子開裂反応：癌光免疫療法薬剤の細胞障害機構に関する計算化学的検討	原田芽生・小林正人・安藤完太・高倉栄男・小川美香子・武次徹也	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
27	Study of the substitution and solvation effect on the trans → cis photoisomerization of cinnamate derivatives	S. KINOSHITA, Y. INOKUCHI, Y. EBATA, K. INOUE, K. NAGAMORI, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, N. AKAI, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, K. YAMAZAKI, Y. HARABUCHI, S. MAEDA, T. TAKETSUGU	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
28	Mechanochemical Selective Activation in Competing Chitin Hydrolysis Reactions	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
29	Controlled intersystem crossing in iron porphycene substituted myoglobin for cyclopropanation reaction: a theoretical study	Liming Zhao, Akira Nakayama, Koji Oohora, Takashi Hayashi, Jun-ya Hasegawa	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
30	金クラスター触媒上での酸素によるピペリドンのC-H結合活性化機構に関する理論的研究	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
31	金属ドーパされた酸化セリウムを用いたメタンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
32	量子化学計算を用いた光免疫療法における細胞障害メカニズムの検討	原田芽生・小林正人・安藤完太・高倉栄男・武次徹也・小川美香子	日本薬学会第139年会（千葉）	2019/3/20-3/23	国内
33	大規模化学反応シミュレーション手法の開発とその応用～分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法を中心に～	中井浩巳	東京大学第319回化学システム工学専攻公開セミナー	2018/4/10	国内

34	理論/実験化学におけるインフォマティクスの活用例とその問題点	清野淳司	第5回さきがけ研究会	2018/04/19- 2018/04/20	国内
35	2成分picture change補正相対論的密度汎関数理論の開発	五十幡康弘、大山拓郎、速水雅生、清野淳司、中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15- 2018/05/17	国内
36	Naイオン二次電池用高濃度電解液におけるキャリアイオン拡散の理論的解析	大越昌樹、周建斌、中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15- 2018/05/17	国内
37	Artificial Intelligence for Quantum Chemistry	Hiromi Nakai	7th JCS symposium 2018	2018/05/21- 2018/05/24	国外
38	光受容タンパク質の機構解明に向けた分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の開発	河本奈々、吉川武司、小野純一、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2018春季年会	2018/06/07- 2018/06/08	国内
39	基盤研究(S)の概要	中井浩巳	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018年9月	国内
40	GPUを用いた分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学プログラムの高速化	吉川武司	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018年9月	国内
41	バクテリオロドプシンのプロトン移動ダイナミクス	小野純一	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018年9月	国内
42	大規模励起状態シミュレーション手法の開発とPYPへの応用	河本奈々	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018年9月	国内
43	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)計算プログラムの開発・整備と応用	西村好史	PCoMSシンポジウム&計算物質科学スパコン共用事業報告会2018	2018/10/22- 2018/10/23	国内

44	機械学習を用いたOrbital-free密度汎関数理論計算手法の開発	影山 椋、清野 淳司、藤波 美起登、五十幡 康弘、中井 浩巳	第41回ケモインフォマティクス討論会	2018/10/26-2018/10/27	国内
45	DC-DFTB-MDプログラムの公開	中井 浩巳、西村 好史、吉川 武司	日本コンピュータ化学会2018秋季年会	2018/11/03-2018/11/04	国内
46	Theoretical Analysis on Solution Structure and Ion Conduction Mechanism in Superconcentrated Electrolyte Solution for Na-ion Battery	Masaki Okoshi, Chien-Pin Chou, Hiromi Nakai	5th International Conference on Sodium Batteries	2018/11/12-2018/11/15	国外
47	プログラムの開発・公開とその先に	中井 浩巳	量子会	2018年11月	国内
48	Naイオン二次電池用高濃度電解液における溶液構造とキャリアイオン拡散機構の理論的解析	大越 昌樹、周建斌、中井 浩巳	第59回電池討論会	2018/11/27-2018/11/29	国内
49	ナトリウム金属の高効率析出溶解反応を可能にするフッ素フリー電解液	土肥 恭輔、山田 裕貴、大越 昌樹、小野 純一、周建斌、中井 浩巳、山田 淳夫	第59回電池討論会	2018/11/27-2018/11/29	国内
50	バクテリオロドプシンの1段階目のプロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション	小野 純一、今井 みの莉、西村 好史、中井 浩巳	第32回分子シミュレーション討論会	2018/11/28-2018/11/30	国内
51	CO2吸収シミュレーションのための超並列量子分子動力学法の開発	中井 浩巳、西村 好史、周建斌	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
52	Recent Advances of Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations for Catalysts and Batteries Applications	Aditya Wibawa Sakti	次世代ESICBセミナー2019-1	2019年3月	国内
53	イリジウム触媒によるベンズアニリド類の位置選択的かつエナンチオ選択的C-H共役付加ならびに反応機構解析	栗田 久樹、高島 千波、五十幡 康弘、高野 秀明、Kyalo Stephen Kanyiva、中井 浩巳、柴田 高範	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内

54	ジアザジボレチジン-シクロブタジエンBNアナログの分子・電子構造と励起状態特性	庄子良晃、Ryzhii Ivan、五十幡康弘、王祺、中井浩巳、生駒忠昭、福島孝典	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内
55	大規模単参照型静的相関手法の開発	土井俊輝、吉川武司、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内
56	イリジウム触媒を用いたベンズアニリド類のC-H結合活性化反応における相対論効果の解析	高島千波、五十幡康弘、栗田久樹、高野秀明、柴田高範、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内
57	機械学習を用いたpost-Hartree-Fock電子相関モデルの開発	礒嶋拓朗、五十幡康弘、清野淳司、吉川武司、影山 椋、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内
58	基盤アプリ設計・開発と重点課題アプリ5WGIにおけるポスト「京」に向けた取り組み	石村 和也	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
59	Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation	Kazuya Ishimura	International Workshop on Massively Parallel Programming	2019年1月	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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
1	包接水和物の速度論的阻害剤の最適サイズとゲスト依存性	矢ヶ崎 琢磨	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5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
2	銅クラスターとNO解離反応触媒：反応経路自動探索法とスパースモデリング解析	岩佐豪、佐藤貴暁、高敏、Andrey Lyalin、小林正人、高木牧人、前田理、武次徹也	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」（札幌）	2018/5/11	国内

3	Auクラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構：クラスターの荷電状態と反応活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
4	固体酸化物触媒を用いた二酸化炭素とメタノールからのジメチルカーボネート合成に関する理論的研究	杉山利行, 中山哲, 長谷川淳也	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
5	Theoretical Study on Enantioselective of Palladium Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinoxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
6	Theoretical Study on Rh-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds	L. Zhao, N. Nakatani, Y. Sunada, H. Nagashima, J. Hasegawa	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
7	近接場光と分子の相互作用：多重極ハミルトニアンと最小結合ハミルトニアンの比較	岩佐豪, 海老澤修一, 武次徹也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
8	分割統治 MP2 計算における相関バッファ領域の自動決定	藤森俊和, 小林正人, 武次徹也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
9	固有反応座標に基づく CF <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> 解離過程の理論的研究	織田耕平, 堤拓朗, 古屋謙治, 武次徹也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
10	Pd クラスター触媒による C-X 結合解離反応の理論的研究	岩渕雄太, 高敏, 武次徹也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
11	4f 電子の凍結近似による希土類錯体の簡便な基底・励起電子状態計算	大場祐汰, 小林正人, 武次徹也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
12	振動マッピング-AIMD 法による動的エネルギー分割の試み	小西里緒, 高敏, 堤拓朗, 小野ゆり子, 原渕祐, 武次徹也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内

13	Auクラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構：クラスターの荷電状態と反応活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
14	固体酸化物触媒を用いた二酸化炭素とメタノールからのジメチルカーボネート合成に関する第一原理計算	杉山利行, 中山哲, 長谷川淳也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
15	金属ドーピングされた酸化セリウムを用いた低級アルカンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	第21回理論化学討論会 (岡崎)	2018/5/15-5/17	国内
16	Application of informatics techniques to quantum chemical calculations of catalyst and surface adsorption systems	Masato Kobayashi, Haruka Onoda, Takeshi Iwasa, Maki Nakahara, Min Gao, Andrey Lyalin, Makito Takagi, Satoshi Maeda	7th JCS (Japan-Czech-Slovak) SYMPOSIUM (Quantum chemistry, from methodology to applications in organic, inorganic, biochemistry and material sciences) (PRAGUE)	2018/5/21-5/24	国外
17	Enantioselective Hydrosilylation of Styrene Catalyzed by Palladium Catalyst with Chiral Polymeric Ligands	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	Computational Catalysis for Sustainable Chemistry	2018/6/13-6/15	国外
18	Automatic error control scheme for the divide-and-conquer electronic structure calculation	Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu	16TH INTERNATIONAL CONGRESS OF QUANTUM CHEMISTRY (16th-ICQC), (Menton, France)	2018/6/18-6/23	国外
19	Theoretical Analysis of Mechanically Induced Selective Hydrolysis of Chitin	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	16TH INTERNATIONAL CONGRESS OF QUANTUM CHEMISTRY (16th-ICQC), (Menton, France)	2018/6/18-6/23	国外
20	Auクラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構：クラスターの荷電状態と反応活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第58回オーロラセミナー	2018/7/8-7/9	国内
21	A DFT mechanistic study on the complete oxidation of ethylene by silica supported Pt catalyst: C=C activation via ethylene dioxide intermediate	Ray Miyazaki, Naoki Nakatani, Takuro Yokoya, Kiyotaka Nakajima, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	9th CSE Summer School 2018 (Sapporo)	2018/7/14-7/15	国内

22	7配位希土類錯体の構造・発光に関する理論的研究	赤間知子、小林正人、柳澤慧、北川裕一、中西貴之、長谷川靖哉、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会（札幌）	2018/7/14-7/16	国内
23	CeX (X = F, H) のスピン軌道相互作用を考慮した擬縮退電子状態に関する理論的研究	近藤有輔、小林正人、赤間知子、野呂武司、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会（札幌）	2018/7/14-7/16	国内
24	励起プロトン移動由来発光性亜鉛錯体の励起状態と発光機構	蝦名昌徳、岩佐豪、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会（札幌）	2018/7/14-7/16	国内
25	希土類錯体の発光過程を標的とする簡便な量子化学計算手法の構築	大場祐汰、小林正人、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会（札幌）	2018/7/14-7/16	国内
26	A DFT study of C-H bond activation of methane over transition metal-doped CeO <sub>2</sub> catalyst	Masahiro Iseka, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国内
27	Theoretical Study on Conversion of Methane to Higher Hydrocarbons by Liquid-Metal Indium	Y. Ohtsuka, A. Nakayama, Y. Nishikawa, H. Ogihara, I. Yamanaka, J. Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国内
28	Theoretical Insights in Mechanochemical Selective Chitin Hydrolysis	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国内
29	Reaction mechanism of the direct synthesis of dimethyl carbonate from CO <sub>2</sub> and methanol over metal-oxide catalysis: a theoretical study	Toshiyuki Sugiyama, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国内
30	Enantioselective Hydrosilylation of Styrene Catalyzed by Palladium Catalyst with Chiral Polymer Ligands	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国内
31	Photocatalytic CO <sub>2</sub> reduction mechanism of fac-[Re(bpy)(CO)3Cl]	Maximilian J. Krämer, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国内

32	Theoretical study for dehydrogenation mechanism of 1-methyl-4-piperidone on Au cluster catalysis: relationship between charge state and catalytic activity	Ray Miyazaki, Xiongjie Jin, Daichi Yoshii, Takafumi Yatabe, Kazuya Yamaguchi, Noritaka Mizuno, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018/8/3-8/4	国内
33	金属ドーピングされた酸化セリウムを用いた低級アルカンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	第58回分子科学若手の会 夏の学校	2018/8/20-8/24	国内
34	Auクラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構: クラスターの荷電状態と反応活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第58回分子科学若手の会 夏の学校	2018/8/20-8/24	国内
35	RhクラスターのNO還元に関する理論的研究	近藤有輔, 岩佐豪, 武次徹也	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
36	励起プロトン移動由来発光性亜鉛錯体の配位子の発光挙動に関する理論的研究	蝦名昌徳, 岩佐豪, 武次徹也	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
37	スチルベン誘導体に関する励起状態分岐反応の理論的説明	堤拓朗, 山本梨奈, 原湊祐, 前田理, 武次徹也	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
38	Theoretical study on aryl isocyanides adsorbed on the metal surface	Ben Wang, Min Gao, Tetsuya Taketsugu	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
39	AIMDおよび電子ダイナミクスを用いた解離性再結合反応 $\text{NH}_2^+ + e^-$ に関する理論的研究	小山拓也, 赤間知子, 武次徹也	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
40	固有反応座標に基づく $\text{CF}_3^+ + \text{CO}$ 反応の理論的研究	織田耕平, 堤拓朗, 古屋謙治, 武次徹也	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
41	RhクラスターのNO還元に関する理論的研究	岩渕雄太, 高敏, 武次徹也	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内

42	振動マッピング法による1,2-ブタジエンのAIMD古典軌道の解析	小西里緒, 高敏, 堤拓朗, 小野ゆり子, 原渕祐, 武次 徹也	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
43	Theoretical Study of Ruthenium Catalyzed Enantioselective Asymmetric Dehydrative Cyclization of $\omega$ -Hydroxy Allyl Alcohol	Manussada Ratanasak, Shinji Tanaka, Masato Kitamura, Jun-ya Hasegawa	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
44	Controlled intersystem crossing in iron porphycene substituted myoglobin for cyclopropanation reaction: a theoretical study	Liming Zhao, Akira Nakayama, Koji Oohora, Hiroyuki Meichin, Takashi Hayashi, Jun-ya Hasegawa	第12回分子科学討論会2018 (福岡)	2018/9/10-9/13	国内
45	h-BN/Au(111)に担持した金クラスターの水素発生反応に対する触媒活性に関する理論的研究	高敏、中原真希、Andrey Lyalin、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018/9/14	国内
46	励起プロトン移動由来の発光を引き起こす配位子の励起状態に関する理論的研究	蝦名昌徳、岩佐豪、武次徹 也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018年9月	国内
47	プラズモン触媒を用いた酸素解離反応の反応経路	竹中将斗、岩佐豪、武次徹 也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018年9月	国内
48	分割統治電子相関計算に対する誤差の自動制御化	藤森俊和、小林正人、武次 徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018年9月	国内
49	Theoretical Study on Arylisocyanide Molecules Adsorbed on the Pt(111) Surface	Wang Ben, Min Gao, T. Taketsugu	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018年9月	国内
50	AIMD・電子ダイナミクスによる解離性再結合反応NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> +e <sup>-</sup> に関する理論的研究	小山拓也、赤間知子、武次 徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018年9月	国内
51	固有反応座標に基づくCF <sub>3</sub> <sup>+</sup> -CO衝突反応の理論的研究	織田耕平、堤拓朗、古屋謙 治2、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018年9月	国内

52	C-X結合解離反応におけるPdクラスター触媒の活性支配因子の理論的研究	岩淵雄太、高敏、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018/9/14	国内
53	1,2-ブタジエン励起緩和過程のダイナミクスの振動マッピング解析	小西里緒、高敏、堤拓朗、小野ゆり子、原渕祐、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018 (福岡)	2018/9/14	国内
54	量子化学計算と実験条件のスパースモデリングによる触媒活性評価	小林正人、小野田遼、武次徹也	第122回触媒討論会 (函館)	2018/9/26-9/28	国内
55	Theoretical Study on Enantioselective of Palladium Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinoxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	第122回触媒討論会 (函館)	2018/9/26-9/28	国内
56	金属ドーピングされた酸化セリウムを用いたメタンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	第122回触媒討論会 (函館)	2018/9/26-9/28	国内
57	金クラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構に関する理論的研究: 荷電状態と触媒活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第122回触媒討論会 (函館)	2018/9/26-9/28	国内
58	Electronic Structure Origin of Mechanochemically Activated Chitin Depolymerization	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	統合物質創製化学研究推進機構 第4回国内シンポジウム	2018/10/29-10/30	国内
59	金クラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構に関する理論的研究: 荷電状態と触媒活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	統合物質創製化学研究推進機構 第4回国内シンポジウム	2018/10/29-10/30	国内
60	h-BN/Au(111)に担持金クラスターの安定性と水素発生反応に関する理論的研究	高敏, 中原真希, Andrey Lyalin, 武次徹也	統合物質創製化学研究推進機構 第4回国内シンポジウム	2018/10/29-10/30	国内

61	表面モデル計算データベースの作成とその活用	小野田遼、黒田悠介、小林正人、武次徹也	日本コンピュータ化学会2018秋季年会（弘前）	2018/11/3-11/4	国内
62	超並列電子状態計算ソフトウェアとGRRMの連結による大規模系反応経路探索に向けた試み	小野 ゆり子	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
63	Au <sub>25</sub> SR <sub>18</sub> -の高位励起状態	岩佐 豪	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
64	古典的多次元尺度構成法に基づく反応経路地図の可視化	堤 拓朗	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
65	二酸化炭素とメタノールからの炭酸ジメチル合成に関する第一原理計算-固体酸化触媒を用いた反応機構の理論的解析-	杉山 利行	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
66	金クラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構に関する理論的研究：荷電状態と触媒活性の関連性について	宮崎 玲	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
67	Controlled intersystem crossing in iron porphycene substituted myoglobin for cyclopropanation reaction: a theoretical study	Liming Zhao	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
68	金属ドーパされた酸化セリウムを用いた低級アルカンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家 正裕	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内

69	Theoretical Study of Ruthenium Catalyzed Enantioselective Asymmetric Dehydrative Cyclization of $\omega$ -Hydroxy Allyl Alcohol	Manussada Ratanasak	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
70	表面モデル計算データベースを活用したメタン水蒸気改質反応の活性予測	小野田 遼	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
71	金属クラスターとアンモニアの相互作用	毛利広野・岩佐豪・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019/1/22-1/23	国内
72	SiO <sub>2</sub> -MgO系高温融体のDFTB-MDシミュレーションとその構造解析	宮越洸二・小林正人・小野寺陽平・小原真司・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019/1/22-1/23	国内
73	o-ニトロフェノールの励起状態プロトン移動に関する理論的研究	和田諒・堤拓朗・新田優輝・関川太郎・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019/1/22-1/23	国内
74	配位子保護金クラスターの触媒機構	高原里奈・岩佐豪・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019/1/22-1/23	国内
75	ヒドロキシメチルフルフラールの安定性に関する計算化学的研究	田代啓介・小林正人・中島清隆・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019/1/22-1/23	国内
76	Controlled Intersystem Crossing in Iron Porphycene Substituted Myoglobin for Cyclopropanation Reaction: a Theoretical Study	Liming Zhao, Akira Nakayama, Koji Oohora, Hiroyuki Meichin, Takashi Hayashi, Jun-ya Hasegawa	IRCCS The 2nd International Symposium	2019/1/25-1/26	国内
77	Reaction Mechanism of the Direct Synthesis of Dimethyl Carbonate from CO <sub>2</sub> and Methanol over Metal-Oxide Catalysis: a Theoretical Study	Toshiyuki Sugiyama, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa	IRCCS The 2nd International Symposium	2019/1/25-1/26	国内

78	Theoretical Study on Geometry Effect on the Catalytic Activity of Gold Clusters	Gao Min, Andrey Lyalin, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu	IRCCS The 2nd International Symposium	2019/1/25-1/26	国内
79	Studies on metal nanocluster catalyst with informatics and automated reaction path search	Masato Kobayashi	PRESTO International Symposium on Materials Informatics (東京)	2019/2/9-2/11	国内
80	金クラスター触媒上での酸素によるピペリドンのC-H結合活性化機構に関する理論的研究	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第123回触媒討論会(大阪市立大)	2019/3/20-3/21	国内
81	単核ReOxCeO2触媒による脱酸素脱水反応の理論的研究	保坂龍, 中山哲, 田村正純, 中川善直, 富重圭一, 長谷川淳也	第123回触媒討論会(大阪市立大)	2019/3/20-3/21	国内
82	分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法に基づく大規模励起状態ダイナミクス	河本奈々, 吉川武司, 小野純一, 中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15-2018/05/17	国内
83	Local Hybrid Functionals within the Infinite-Order Douglas-Kroll-Hess Method	Toni Maier, 五十幡康弘, 中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15-2018/05/17	国内
84	有限温度における時間依存密度汎関数法の開発	土井俊輝, 吉川武司, 中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15-2018/05/17	国内
85	円錐交差構造における電子状態に関する理論的研究	稲森真由, 五十幡康弘, 王禎, 中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15-2018/05/17	国内
86	重み付きヒストグラム解析法のメタダイナミクスへの拡張とシクロファンの異性化反応への応用	小野純一, 西村好史, 黄毅聰, 鹿又宣弘, 中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15-2018/05/17	国内

87	機械学習による半局所運動エネルギー密度汎関数の開発：計算精度の記述子依存性	清野淳司、影山椋、藤波美起登、五十幡康弘、中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15-2018/05/17	国内
88	機械学習を用いた反応条件最適化シミュレータの開発	藤波美起登、清野淳司、中井浩巳	第21回理論化学討論会	2018/05/15-2018/05/17	国内
89	ポテンシャルエネルギー曲面の交差構造に関する理論的研究	稲森真由、五十幡康弘、王祺、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2018春季年会	2018/06/07-2018/06/08	国内
90	メタダイナミクスに基づく重み付きヒストグラム解析法の開発とシクロファン異性化反応への応用	小野純一、西村好史、黄毅聰、鹿又宣弘、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2018春季年会	2018/06/07-2018/06/08	国内
91	Development of picture-change corrected relativistic density functional theory	Yasuhiro Ikabata, Takuro Oyama, Masao Hayami, Junji Seino, Hiromi Nakai	16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC)	2018/06/18-2018/06/23	国外
92	Divide-and-conquer-based higher-order electron-correlation methods	Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai	16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC)	2018/06/18-2018/06/23	国外
93	群知能を用いたアミン-CO2吸収反応に対する速度論解析	長門澄香、清野淳司、中井浩巳	第12回分子科学討論会	2018/09/10-2018/09/13	国内
94	密度汎関数強束縛法に基づくペロブスカイト太陽電池におけるキャリア特性の研究	浦谷浩輝、周建斌、中井浩巳	第12回分子科学討論会	2018/09/10-2018/09/13	国内
95	機械学習による電子密度最適化のための運動ポテンシャル汎関数の開発	影山椋、清野淳司、藤波美起登、五十幡康弘、中井浩巳	第12回分子科学討論会	2018/09/10-2018/09/13	国内

96	機械学習を用いた交換相関汎関数の開発	髙島拓朗、五十幡康弘、清野淳司、影山椋、藤波美起登、中井浩巳	第12回分子科学討論会	2018/09/10-2018/09/13	国内
97	Large-scale quantum-mechanical molecular dynamics simulations for the primary proton transfer in bacteriorhodopsin	Junichi Ono, Minori Imai, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	第56回日本生物物理学会年会	2018/09/15-2018/09/17	国内
98	Development of large-scale excited-state calculation method and applied research on photoactive yellow protein	Nana Komoto, Takeshi Yoshikawa, Junichi Ono, Hiromi Nakai	第56回日本生物物理学会年会	2018/09/15-2018/09/17	国内
99	反応予測に寄与する量子化学的記述子の解析	藤波美起登、清野淳司、中井浩巳	第41回ケモインフォマティクス討論会	2018/10/26-2018/10/27	国内
100	有機反応における高い収率を与える溶媒のデータ科学的探索	前川原大貴、藤波美起登、清野淳司、一色遼大、山口潤一郎、中井浩巳	第41回ケモインフォマティクス討論会	2018/10/26-2018/10/27	国内
101	インフォマティクスを用いた結合エネルギー密度解析手法の開発	中村海里、清野淳司、中井浩巳	第41回ケモインフォマティクス討論会	2018/10/26-2018/10/27	国内
102	バクテリオロドプシンのプロトン輸送ダイナミクスに関する理論的研究	小野純一、今井みの莉、西村好史、中井浩巳	第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会	2018年11月	国内
103	分割統治法に基づく有限温度単参照静的相関手法の開発	土井俊輝、吉川武司、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2018秋季年会	2018/11/03-2018/11/04	国内
104	バクテリオロドプシンの長距離プロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション	岡田千果、小野純一、西村好史、中井浩巳	第32回分子シミュレーション討論会	2018/11/28-2018/11/30	国内

105	Density-Functional Tight-Binding Metadynamics Study of Carbonaceous Species Diffusion on (100)- $\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Surface	Aditya Wibawa Sakti, Chien-Pin Chou, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	第32回分子シミュレーション討論会	2018/11/28- 2018/11/30	国内
106	DC-DFTB-MDプログラムの開発と公開	西村好史、吉川武司、中井浩巳	第32回分子シミュレーション討論会	2018/11/28- 2018/11/30	国内
107	Density-Functional Tight-Binding Parameterization: Accumulated Wisdom and New Directions	周建斌、中井浩巳	第32回分子シミュレーション討論会	2018/11/28- 2018/11/30	国内
108	バクテリオロドプシンの1段階目のプロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション	小野純一、今井みの莉、西村好史、中井浩巳	第32回分子シミュレーション討論会	2018/11/28- 2018/11/30	国内
109	Post-Hartree-Fock関連エネルギー密度の機械学習による関連エネルギー計算手法の開発	五十幡康弘、礪島拓朗、清野淳司、影山椋、藤波美起登、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
110	大規模化学反応シミュレーションに向けたDC-DFTBプログラムの開発と整備	西村好史、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
111	Recent Development of Density-Functional Tight-Binding Parameterization	周建斌、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
112	インフォマティクスを利用した軌道非依存密度汎関数理論計算手法の開発	清野淳司、影山椋、藤波美起登、五十幡康弘、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
113	インフォマティクス手法を取り入れた結合エネルギー密度解析の開発	中村海里、清野淳司、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
114	円錐交差構造における電子状態的な支配因子の探索	稲森真由、五十幡康弘、王祺、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内

115	分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の二段階並列化	河本奈々、吉川武司、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
116	機械学習を用いた化学反応の予測と反応条件の最適化	藤波美起登、前川原大貴、清野順次、中井浩巳	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5回公開シンポジウム	2018/12/11-12/12	国内
117	ポテンシャルエネルギー曲面の交差構造における電子状態的な支配因子の探索	稲森真由、五十幡康弘、王祺、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018/12/17-12/19	国内
118	大規模励起状態ダイナミクス法の開発とその応用	河本奈々、吉川武司、小野純一、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018/12/17-12/19	国内
119	インフォマティクス手法を導入したエネルギー密度解析手法の開発	中村海里、清野淳司、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018/12/17-12/19	国内
120	カチオン性金属触媒を用いたC-H活性化反応に対する理論的研究	高島千波、五十幡康弘、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018/12/17-12/19	国内
121	バクテリオロドプシンの長距離プロトン移動過程に対する大規模量子的分子動力学シミュレーション	岡田千果、小野純一、西村好史、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018/12/17-12/19	国内
122	Rh/CeO <sub>2</sub> 界面におけるNO-CO反応の理論的解析	藤代天佑、大越昌樹、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018/12/17-12/19	国内
123	Rh上のNO+CO反応の理論的解析に向けた密度汎関数強束縛法パラメータの精度検証	中村崇久、周建斌、大越昌樹、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018/12/17-12/19	国内
124	Orbital-free density functional theory with semi-local machine-learned kinetic energy density functional	Junji Seino, Ryo Kageyama, Mikito Fujinami, Yasuhiro Ikabata, Hiromi Nakai	さきがけ「マテリアルズインフォマティクス」国際会議	2018/2/9-2/11	国内

125	有限温度密度汎関数強束縛法によるRhナノクラスターの安定性・反応性の解析	中村崇久、周建斌、土井俊輝、吉川武司、大越昌樹、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内
126	機械学習を用いた有機反応における最適溶媒選択手法の開発	前川原大貴、藤波美起登、清野淳司、一色遼大、山口潤一郎、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内
127	Development of Massively Parallel Software for Quantum Chemistry Calculations	Kazuya Ishimura	7th Japan-Czech-Slovak Symposium	2018年5月	国外
128	SMASH: Massively Parallel Software for Quantum Chemistry Calculations	Kazuya Ishimura	16th International Congress of Quantum Chemistry	2018年6月	国外
129	Pythonを用いた大規模並列量子化学計算プログラムSMASHの制御	石村和也	第21回理論化学討論会	2018年5月	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（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
1	An Interesting Twist in Liquid Water	M. Matsumoto	The 8th SFG Symposium	2018年10月	国外
2	固有反応座標と動力学効果	武次徹也	ワークショップ「複合系の理論化学・計算化学：最近の研究状況と展望」（京都）	2018年4月	国内
3	理論と実験のインタープレイから生まれた新しい触媒：BN/Au	武次徹也	新学術領域研究「精密制御反応場」ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」（札幌）	2018年5月	国内

4	Dynamic Reaction Routes beyond the IRC network	T. Taketsugu	7th JCS (Japan-Czech-Slovak) SYMPOSIUM (Quantum chemistry, from methodology to applications in organic, inorganic, biochemistry and material sciences), (PRAGUE)	2018/5/21-5/24	国外
5	大規模系の量子化学計算とデータ科学を利用した量子化学計算結果の解析・触媒への応用	小林正人	分子科学研究所講演会（岡崎）	2018年5月	国内
6	双極子近似を超えた光と分子の相互作用：未知の光学現象と光反応と分子科学の未来	岩佐豪	分子研研究会「光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来に向けて」（岡崎）	2018年6月	国内
7	Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/Metal-Oxide Interface: First-Principle Simulations	A. Nakayama	PERCH-CIC Congress X: 2018 International Congress for Innovation in Chemistry	2018/7/4-7/7	国外
8	Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/Metal-Oxide Interface: First-Principle Simulations	A. Nakayama	Special seminar	2018年7月	国外
9	Reaction Path Concept in Quantum Chemistry and Dynamics Effects	T. Taketsugu	Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, TSRC workshop (Telluride)	2018/7/17-7/27	国外
10	Methane to Ethane Conversion by Liquid Metal Indium: A DFT Mechanistic Study	Y. Ohtsuka, Y. Nishikawa, H. Ogihara, I. Yamanaka, J. Hasegawa	2018 International Symposium on Advancement and Prospect of Catalysis Science & Technology	2018/7/25-7/27	国外
11	Theoretical suggestion and experimental proof for functionalization of h-BN by gold as electrocatalysts for ORR and HER	T. Taketsugu	256th ACS National Meeting "Fundamental Understanding of Catalysis at Interface through Computational Approach" (Boston)	2018/8/19-8/23	国外
12	インフォマティクスと反応経路自動探索を活用した触媒・表面吸着系の計算・解析・予測	小林正人	さきがけ「マテリアルズ・インフォマティクス」第2回公開シンポジウム（東京）	2018年8月	国内
13	インフォマティクスと人工知能・機械学習チュートリアル	小林正人	ESICB若手研究会 触媒・電池の実践的理論化学の最前線（千歳）	2018/8/26-8/29	国内

14	Catalytic reactions at the liquid/metal-oxide interface: first-principle molecular dynamics simulation	A. Nakayama	The 8th IUPAC International Conference on Green Chemistry	2018/9/9-9/14	国外
15	Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/Metal-Oxide Interface: First-Principle Simulations	A. Nakayama	Nanotalk	2018年9月	国外
16	分子結晶における励起状態と発光過程の理論的解明	岩佐豪	ソフトクリスタル領域会	2018年10月	国内
17	Computational Chemistry with Constraint Force	J. Hasegawa	A Satellite Symposium to celebrate Prof. Kenichi Fukui' s 100th birthday	2018年10月	国内
18	Exploring the Enantioselective Mechanism of Pd Catalyst with Polyquinoxaline Ligand for Asymmetric Hydrosilylation of Styrene	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	2019 National Symposium for Molecular Chirality	2018/10/20-10/21	国外
19	Ab initio MD analysis based on a reaction path network	T. Taketsugu	INTERNATIONAL CONGRESS ON PURE & APPLIED CHEMISTRY Langkawi (ICPAC Langkawi) 2018, Langkawi, Malaysia	2018/10/29-11/2	国外
20	クラスターモデルにおけるアンモニアと金属の相互作用	岩佐豪	第4回アンモニア合成・利用研究会	2018/11/1-11/2	国内
21	Quantum chemical studies for cluster catalysis: Case study of NO dissociation with Cu <sub>13</sub>	T. Iwasa	Johnson Matthey Japan Academic Conference 2018	2018年11月	国内
22	Calculation, Analysis, and Prediction for Catalyst and Surface Adsorption Systems with Informatics Techniques and Automated Reaction Path Search	M. Kobayashi	2nd International Workshop on Phase Interfaces Science for Highly Efficient Energy Utilization (Baltimore, USA)	2018/11/26-11/28	国外
23	第一原理反応ダイナミクスと触媒・光反応における実験との協働	武次徹也	第1回ICReDDミーティング (札幌)	2018年12月	国内

24	On-the-fly molecular dynamics approach to photoisomerization of stilbene derivatives	T. Taketsugu	10th Aisan Photochemistry Conference (APC2018) (Taipei, Taiwan)	2018/12/16-12/20	国外
25	クラスター触媒の理論研究	岩佐豪	ESICB電子論検討会（浜松）	2018年12月	国内
26	反応経路ネットワークを超えた動的反応描像構築にむけて	武次徹也	JACI 公益社団法人新化学技術推進協会 先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会 講演会（東京）	2019年1月	国内
27	量子ビーム実験・宇宙実験・データ駆動型構造モデリングの協奏によるガラス・超高温融体の構造物性研究（招待）	小原真司、小野寺陽平、田原周太、小山千尋、田丸晴香、増野敦信、岡田純平、水野章敏、織田裕久、渡邊重基、仲田結衣、尾原幸	第5回放射光連携研究ワークショップ「先端計測とインフォマティクスによる可視化物質科学の発展」（東京）	2019年2月	国内
28	Theoretically inspired new catalyst: boron nitride with gold	Tetsuya Taketsugu	The 20th GREEN Symposium (Tsukuba)	2019年2月	国内
29	第一原理計算に基づく電子励起状態反応素過程とダイナミクスの解明（招待）	武次徹也	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
30	開殻電子系が関与する反応の理論化学：系間交差のポテンシャル面	長谷川淳也	日本化学会第99春季年会 中長期企画講演「開殻性分子種：ファジーボンドが拓く新たな化学」（甲南大学）	2019/3/16-3/19	国内
31	Fast Quantum Chemical Simulations using the Density-Functional Tight-Binding Method	Chien-Pin Chou	The 2018 Chemistry Research Symposium, ChRS2018	2018/05/26-2018/05/27	国外
32	大規模化学反応シミュレーション手法の実現に向けて～分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法の開発と応用～	中井浩巳	東工大講演会	2018年6月	国内

33	What is the Best Choice of Embedding-Fragmentation Scheme for Practical Quantum Chemical Simulation?	Hiromi Nakai	16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC)	2018/06/18-2018/06/23	国外
34	理論・計算・実験化学とインフォマティクスの融合研究	清野淳司	分子研・理論・計算分子科学領域セミナーシリーズ	2018年6月	国内
35	光受容タンパク質の機能解明を目指した大規模励起状態ダイナミクス手法の開発とその応用	吉川武司	第7回新化学技術研究奨励賞	2018年6月	国内
36	Divide-and-Conquer density-functional tight-binding molecular dynamics simulations for the primary proton transfer in bacteriorhodopsin	Junichi Ono	Telluride workshop on "Multi-scale quantum mechanical analysis of condensed phase systems: methods and applications"	2018/07/23-2018/07/27	国外
37	人工知能を用いた化学反応の予測と反応条件の最適化	清野淳司	技術情報協会・講習会 触媒開発における人工知能、計算科学の活用-新しい触媒の探索、設計の具体的手法-	2018年8月	国内
38	計算化学とインフォマティクスに関する基礎講座	中井浩巳	顔料物性講座	2018年11月	国内
39	表面触媒反応に対する大規模シミュレーション	中井浩巳	2018年日本表面真空学会学術講演会	2018/11/19-2018/11/21	国内
40	Development of Automatized Density-Functional Tight-Binding Parameterization	Chien-Pin Chou	The 4th China-Japan-Korea Workshop on Theoretical & Computational Chemistry (CJK-WTCC4)	2019/1/9-2019/1/12	国外
41	大規模化学反応シミュレーションプログラムDCDFBMDの開発と応用	中井浩巳	スーパーコンピュータワークショップ2018「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」	2019/1/16-2019/1/17	国内
42	データ科学と理論・計算化学の融合	中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019/3/16-2019/3/19	国内

43	Acceleration of divide-and-conquer density tight-binding method on GPU	Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai	GTC 2019	2019/3/17- 2019/3/21	国外
44	大規模並列量子化学計算プログラムSMASHの開発と応用計算	石村 和也	第7回材料系ワークショップ	2019年2月	国内
45	Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation Program SMASH and its Applications	Kazuya Ishimura	34th Computational Materials Design (CMD) Workshop	2019年2月	国内