

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