

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	Lectore 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 $\ddot{O}$ description 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	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
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, 大久保将史, 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 thechnology	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ーワークショップ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) (Toledo, 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