

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. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別	査読（有り）
1	Phase Diagrams of TIP4P/2005, SPC/E, and TIP5P Water at High Pressure	T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Phys. Chem. B 122 , 7718–7725 (2018).	2018年7月	国外	有
2	On the Phase Behaviors of Hydrocarbon and Noble Gas Clathrate Hydrates: Dissociation Pressures, Phase Diagram, Occupancies, and Equilibrium with Aqueous Solution	H. Tanaka, T. Yagasaki, M. Matsumoto	J. Chem. Phys. 149 , 074502, 1–15 (2018).	2018年8月	国外	有
3	Phase diagram of ice polymorphs under negative pressure considering the limits of mechanical stability	T. Matsui, T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Chem. Phys. 150 , 04102, 1–6 (2019).	2019年1月	国外	有
4	Molecular Dynamics Study of Kinetic Hydrate Inhibitors: The Optimal Inhibitor Size and Effect of Guest Species	T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Phys. Chem. C 123 , 1806–1816 (2019).	2019年1月	国外	有
5	Lithiation Products of a Silicon Anode Based on Soft X-ray Emission Spectroscopy: A Theoretical Study	A. Lyalin, V. G. Kuznetsov, A. Nakayama, I. V. Abarenkov, I. I. Tupitsyn, I. E. Gabis, K. Uosaki, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. C, 122 , 11096–11108 (2018).	2018年5月	国外	有
6	A First-Order Interacting Space Approach to Excited-State Molecular Interaction: Solvatochromic Shift of p-Coumaric Acid and Retinal Schiff Base	K. Yanai, K. Ishimura, A. Nakayama, and J. Hasegawa	J. Chem. Theory Comput., 14 , 3643 (2018).	2018年6月	国外	有
7	Defect-induced efficient dry reforming of methane over two-dimensional Ni/h-boron nitride nanosheet catalysts	Y. Gao, P. Maitarad, M. Gao, T. Taketsugu, H. Li, T. Yan, L. Shi, and D. Zhang	App. Catal. B: Environ., 238 , 51–60 (2018).	2018年7月	国外	有

8	Visualization of the Intrinsic Reaction Coordinate and Global Reaction Route Map by Classical Multidimensional Scaling	T. Tsutsumi, Y. Ono, Z. Arai, and T. Taketsugu	J. Chem. Theory Comput., 14 , 4263–4270 (2018).	2018年7月	国外	有
9	Microscopic Electrode Processes in the Four-Electron Oxygen Reduction on Highly Active Carbon-Based Electrocatalysts	K. Sakaushi, M. Eckardt, A. Lyalin, T. Taketsugu, R. J. Behm, and K. Uosaki	ACS Catalysis, 8 , 8162–8176 (2018).	2018年7月	国外	有
10	On-the-fly molecular dynamics study of the excited-state branching reaction of α -methyl-cis-stilbene	T. Tsutsumi, Y. Harabuchi, R. Yamamoto, S. Maeda, and T. Taketsugu	Chem. Phys., 515 , 564–571 (2018).	2018年8月	国外	有
11	Theoretical investigations on hydrogen peroxide decomposition in aquo	T. Tsuneda and T. Taketsugu	Phys. Chem. Chem. Phys., 20 , 24992–24999 (2018).	2018年9月	国外	有
12	Constraint Structure Optimization to a Specific Minimum Using Ionization Energy	I. Harada, A. Nakayama, J. Hasegawa	J. Comput. Chem., 40 , 507–514 (2019)	2018年10月	国外	有
13	Ab initio surface hopping excited-state molecular dynamics approach on the basis of spin-orbit coupled states: An application to the A-band photodissociation of CH3I	M. Kamiya and T. Taketsugu	J. Comput. Chem., 40 , 456–463 (2019).	2018年11月	国外	有
14	CO ₂ Adsorption on Ti3O6 ⁻ : A Novel Carbonate Binding Motif	S. Debnath, X. Song, M. Fagiani, M. Weichman, M. Gao, S. Maeda, T. Taketsugu, W. Schölkopf, A. Lyalin, D. Neumark, and K. Asmis	J. Phys. Chem. C, 123 , 8439–8446 (2019).	2018年12月	国外	有
15	Combined Automated Reaction Pathway Searches and Sparse Modeling Analysis for Catalytic Properties of Lowest Energy Twins of Cu13	T. Iwasa, T. Sato, M. Takagi, M. Gao, A. Lyalin, M. Kobayashi, K. Shimizu, S. Maeda, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. A, 123 , 210–217 (2019).	2019年1月	国外	有

16	Soft X-ray Li-K and Si-L _{2,3} Emission from Crystalline and Amorphous Lithium Silicides in Lithium-ion Batteries Anode	A. Lyalin, V. G. Kuznetsov, A. Nakayama, I. V. Abarenkov, I. I. Tupitsyn, I. E. Gabis, K. Uosaki, and T. Taketsugu	J. Electrochem. Soc., 166 , A5362-A5368 (2019).	2019年1月	国外	有
17	The Role of Nitrogen-doping and the Effect of the pH on the Oxygen Reduction Reaction on Highly Active Nitrided Carbon Sphere Catalysts	M. Eckardt, K. Sakaushi, A. Lyalin, M. Wassner, N. Hüsing, T. Taketsugu, and R. J. Behm	Electrochimica Acta, 299 , 736-748 (2019).	2019年1月	国外	有
18	Ab initio surface hopping molecular dynamics on the dissociative recombination of CH ₃ ⁺	T. Taketsugu and Y. Kobayashi	Comp. Theo. Chem., 1150 , 1-9 (2019).	2019年1月	国外	有
19	Low-lying Excited States of hqxcH and Zn-hqxc Complex: Toward Understanding Intramolecular Proton Transfer Emission	M. Ebina, Y. Kondo, T. Iwasa, T. Taketsugu	Inorg. Chem., 58 , 4686-4698 (2019).	2019年3月	国外	有
20	Perspective on Density-Functional Tight-Binding Parameterization towards Transition Metals	周建斌、中井浩巳	分子シミュレーション研究会会誌アンサンブル 20 , 8 (2018)	2018年1月	国内	有
21	分割統治型密度汎関数強束縛 (DC-DFTB) 法に対する最近の開発と応用	西村好史、中井浩巳	分子シミュレーション研究会会誌アンサンブル 20 , 18-23 (2018)	2018年1月	国内	有
22	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	J. Comput. Chem. Jpn 17 , 127 (2018)	2018年10月	国内	有
23	Development of Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Method for Theoretical Research on Li-ion Battery	Chien-Pin Chou, Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	Chem. Rec. 19 , 746-757 (2019).	2018年11月	国外	有
24	Development of Large-Scale Excited-State Calculations Based on the Divide-and-Conquer Time-Dependent Density Functional Tight-Binding Method	Nana Komoto, Takeshi Yoshikawa, Junichi Ono, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	J. Chem. Theory Comput. 15 , 1719-1727 (2019)	2019年1月	国外	有

25	DCDFTBMD: Divide-and-Conquer Density Functional Tight-Binding Program for Huge-System Quantum Mechanical Molecular Dynamics Simulations	Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	J. Comput. Chem. 40 , 1538–1549 (2019)	2019年3月	国外	有
26	DCDFTBMDプログラムの公開	西村好史、吉川武司、中井 浩巳	J. Comput. Chem. Jpn 17 , A21 (2018)	2019年3月	国内	有