

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, 原渕祐, 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 ₂ 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	礪嶋拓朗、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 ₂ CO ⁺ 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	岩淵雄太, 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, 原淵祐, 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 ₂ 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 ₂ 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 ₂ 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 ω -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 ₂ ⁺ +e ⁻ 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 ₃ ⁺ -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	岩渕雄太、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 ₂₅ SR ₁₈ -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 ω -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 ₂ -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	<i>o</i> -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 ₂ 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	櫛島拓朗、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)- γ -Al ₂ O ₃ 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、礒島拓朗、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 ₂ 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 ₁₃	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DCDFTBMD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