

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「元素戦略を基軸とする物質・材料の革
新的機能の創出」
研究課題「相対論的電子論が拓く革新的機能材料
設計」

研究終了報告書

研究期間 平成24年 9月～平成30年 3月

研究代表者：中井 浩巳
(早稲田大学理工学術院、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

本研究課題では、元素戦略プロジェクトのための共通理論基盤となる相対論的量子化学理論を構築するとともに、相対論的電子論に基づき元素の特性を理解し、革新的な機能を持つ物質・材料の設計を目指した。

研究内容は共通基盤整備と機能材料設計に大別される。共通基盤整備では、周期表のあらゆる元素を含む物質・材料を取り扱うための理論およびプログラムを、中井グループ(以下、中井 G などと略す)と平田 G により開発した。中井 G では、大規模系に適用可能かつ相対論効果を高精度に取り込んだ2成分相対論的量子化学理論を開発した。平田 G では、高次電子相関法の自動導出・自動プログラム合成を行った。2つのグループで開発した基盤技術を統合することで、従来法に比べてはるかに高効率な相対論的量子化学計算法が完成した。さらに、開発された理論基盤が実装されたプログラムとして、次世代相対論的量子化学計算プログラム RAQET(Relativistic And Quantum Electronic Theory)を開発した。

機能材料設計では、研究対象を触媒活性、電磁気特性、電子機能材料、生体光機能、機能性高分子の5つに分け、6つのグループにより分担して研究を行った。中井 G は触媒活性を担当した。触媒活性に対する金属ナノクラスターのナノサイズ効果、金属ナノクラスターを担持する担体による効果などを解析した。

波田 G は電磁気特性を担当した。重原子に特化した NMR 計算プログラムを開発し、重原子化合物の NMR スペクトルにおける相対論効果の挙動を解析した。4成分相対論と高次電子相関理論を組み合わせて分子内部電場と電子の電気双極子モーメントとの相互作用を精密に計算し、同位体交換反応における核体積効果などの電磁気特性についても検討した。

中嶋 G は電子機能材料を担当した。スピン軌道相互作用を考慮できる新たな相対論的量子化学の理論開発を行い、開発した相対論的量子化学手法を用いた大規模シミュレーションにより、スピン軌道相互作用を有効に利用した太陽電池材料などの次世代材料の理論設計を行った。さらに、マテリアルズ・インフォマティクス手法を用いた新規材料の探索も行った。

長谷川 G は生体光機能材料を担当し、主に系間交差が関与する化学反応や光化学反応のメカニズムを研究し、生体分子においては光防護のための失活しやすい分子構造、遷移金属錯体においては系間交差を促進しうる配位子設計を提案した。

青木 G は機能性高分子を担当し、開発中の相対論的 Elongation 法を高度化した上で擬一次元型の理論的機能設計を行った。含重元素材料の代替となりうる有機磁性化合物、導電材料、非線形光学材料、光スイッチ高分子材料、太陽電池材料等の物性予測および、それらの機能発現メカニズムの解析と新材料設計に向けた予測を行った。

森 G は、平成 27-28 年度に本研究課題に参画し、触媒活性および電子機能材料に関する研究を担当した。前者については、金属クラスターの触媒活性を解析するとともに、高い触媒活性が期待されるクラスターを予測した。後者については、白色有機 LED の発光機構を解析した。

以上の研究に加えて、チーム間連携研究および本 CREST 以外の研究プロジェクトとの連携研究を行った。チーム間連携研究については、中井 G が森田チーム(以下、森田 T など)と開殻 π 電子材料の研究を行い、新規化合物の理論設計、光学特性の理論評価などを行った。長谷川 G は永島 T とアミドの水素化触媒の研究を行い、触媒作用のメカニズムを明らかにした。さらに、ケトンとオレフィンのヒドロシリル化についての新しい反応機構を提案した。他研究プロジェクトとの連携研究は、CREST「超空間」領域の関根 T(早稲田大学)と電場印加遷移金属触媒に関して、新学術領域「 π 造形」の福島 G(東京工業大学)と有機ホウ素化合物のりん光に関して実施した。どちらの項目も中井 G が相対論効果を考慮した理論計算を行い、相対論的電子論が関連する現象のメカニズムを明らかにした。

(2) 顕著な成果

＜優れた基礎研究としての成果＞

1. 相対論的量子化学理論へのパラダイムシフトを実現する元素戦略の理論基盤開発

概要: 本研究では、周期表上のあらゆる元素を含む物質・材料に対して確証性の高い結果を与え、大規模系にも適用可能な高精度相対論的量子化学理論を開発した。この理論は本研究課題の理論基盤として重要である。従来の高精度相対論的量子化学理論と同等の精度を維持しつつ、非相対論的量子化学計算と同等の計算時間であることから、相対論的量子化学へのパラダイムシフトの可能性が示唆された。

2. スピン軌道相互作用を考慮した励起状態理論による次世代色素増感太陽電池材料の理論設計

概要: 本研究では、重元素化合物の励起状態計算において重要な役割を果たす、スピン軌道相互作用を考慮した時間依存密度汎関数理論を開発した。また、本理論を用いて系間交差を利用した次世代の色素増感太陽電池材料を理論先導により設計した。実験的に提案された Ru 錯体を含む DX1 色素およびその誘導体に関して理論解析を行った結果、中心金属が系間交差の発現に大きく寄与することが示された。さらに同族の元素 (Fe と Os) に置き換えた計算を行うことで、有望な新規候補色素を提案した。

3. 「京」コンピュータを利用した非鉛化ペロブスカイト太陽電池の探索

概要: 本研究では、元素戦略的な材料スクリーニングに基づいたマテリアルズ・インフォマティクス手法により、非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新規材料探索を実現した。本研究の特徴は、「京」コンピュータを用いたハイスループットコンピューティングにより、従来よりも多数 (11,025 個) の候補化合物に対しスクリーニングを実施した点にある。その結果、51 個の低毒性非鉛化候補化合物を実験に先立って提案した。

＜科学技術イノベーションに大きく寄与する成果＞

1. 安定ラジカルが示す新しい近赤外光吸収機構(森田 T とのチーム間連携)

概要: 安定なラジカルであるトリオキソトリアンギュレン (TOT) 誘導体の結晶は、1000 nm より長波長の近赤外光を吸収する。本研究では、中井 G 独自の手法を用いて大規模系の量子化学計算を行った。その結果、 π 積層ラジカルポリマーと呼ばれる 1 次元積層構造において、不対電子が分子間で相互作用する新たな長波長吸収のメカニズムを明らかにした。本成果に基づいた近赤外光を利用するセンサーなどの開発などが見込まれる。

2. アミドの水素化触媒に関する反応機構の解明(永島 T とのチーム間連携)

概要: 永島 T によって、2 つの近接 Si-H 基を持つヒドロシランと Pt 触媒によるアミドのヒドロシリル化反応が報告されている。本研究では、反応機構を量子化学計算で解明するとともに、近接 Si-H 基の効果を解析した。工業的に重要な不飽和結合の水素化に関する知見が得られ、触媒に用いられる元素の特性を配位子によって変えるための制御機構も明らかとなり、今後の反応設計の指針となることが期待される。

3. 電場印加触媒を用いた新規アンモニア合成法 (CREST「超空間」領域との連携)

概要: 直流電場中に半導体触媒を置くことで、低温で効率よくアンモニアを合成できることを JST-CREST「超空間」との共同研究により示した。電場印加によって表面でプロトンホッピングが起こり、中間体 N_2H^+ を経由する新たな反応機構を、理論計算を用いて明らかにした。本手法はハーバー・ボッシュ法に代わる高効率アンモニア合成法として期待され、再生可能エネルギーなどを利用した小型・オンデマンド型合成が見込まれる。

§2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

① 「中井」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
中井 浩巳	早稲田大学理工学術院	教授	H24.10～H30.3
清野 淳司	同上	研究員	H24.10～H30.3
菊池 那明	同上	研究員	H24.11～H29.3
石川 敦之	同上	研究員	H25.4～H29.3
王 祺	同上	研究員	H25.10～H30.2
五十幡 康弘	同上	D3 助手 研究員	H24.11～H25.3 H25.4～H27.3 H27.4～H30.3
吉川 武司	同上	D1～3 助手 助教	H24.10～H27.3 H27.4～H28.3 H28.4～H30.3
中嶋 裕也	同上	M1～D3	H24.10～H29.3
中野 匡彦	同上	M1～D3	H24.10～H29.3
速水 雅生	同上	M1～D3	H25.4～H30.3
中村 亮太	同上	M2	H28.4～H29.3
大山 拓郎	同上	M2	H29.7～H30.3
平賀 健太	同上	M2	H29.7～H30.3
小林 正人	早稲田大学高等研究所 北海道大学理学部 同上	助教 助教 講師	H24.10～H26.2 H26.3～H29.6 H29.7～H30.3
Chidthong, Rungtiwa	早稲田大学理工学術院 ナコーンパトム・ラーチャ パット大学	研究員 講師	H25.4～H26.3 H26.4～H30.3
Saue, Trond	トゥールーズ大学	教授	H24.10～H30.3
Liu, Wenjian	北京大学	教授	H24.10～H30.3
小河原 侑子	早稲田大学理工学術院	研究補助員	H24.10～H27.6

研究項目

- ・相対論的電子論に基づいた共通基盤開発
- ・相対論的電子論に基づく触媒設計
- ・開殻 π 電子系材料の電気・光学・磁気物性の理論評価と新規材料設計
- ・他プロジェクト研究との連携

② 「波田」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
波田 雅彦	首都大学東京	教授	H24.10～H30.3
中谷 直輝	同上	准教授	H29.4～H30.3
阿部 穰里	同上	助教	H24.10～H30.3
Gopakumer Geetha	同上	特任研究員	H24.10～H26.9

吉澤 輝高	同上	特任研究員	H25.4～H27.9 H29.7～H30.3
今村 穰	同上	特任教授	H27.4～H30.3
猪俣 健輔	同上	D 1～D 4	H24.10～H28.3
河村 俊秋	同上	M 1～M 2	H24.10～H26.3
根本 佳介	同上	M 1～M 2	H24.10～H26.3
今福 裕史	同上	M 1～M 2	H25.4～H27.3
宇梶 かすみ	同上	M 1～M 2	H26.4～H28.3
浅井 久留美	同上	M 1～M 2	H26.4～H28.3
Narayanan Radhika	同上	D 1～D 3	H26.4～H28.9
Archana Velloth Jayaprakash	同上	D 1～D 3	H27.4～H29.9
砂賀 彩光	同上	M 1～D 1	H27.4～H30.3
菅野 翔平	同上	M 1～D 1	H27.4～H30.3
筒井 隆史	同上	M 1～M 2	H28.4～H30.3
宮本 優弥	同上	M 1～M 2	H28.4～H30.3
岩瀬 響	同上	D 1～D 2	H28.4～H30.3
小野 克真	同上	M 2	H28.4～H29.3
松島 彬子	同上	M 2	H28.4～H29.3
Yi Jun	同上	D 1	H29.4～H30.3
Salmahaminati Mami	同上	D 1	H29.10～H30.3
Ma Zhifeng	同上	D 1	H29.10～H30.3
村田 レオ	同上	M 1	H29.4～H30.3

研究項目

・相対論的電子論に基づく電磁気特性評価

③「中嶋」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
中嶋 隆人	理化学研究所計算科学 研究機構	チームリーダー	H24.10～H30.3
神谷 宗明	同上	客員研究員	H24.10～H30.3
今村 穰	同上	研究員	H25.4～H27.3
小杉 太一	同上	特別研究員	H27.4～H28.10
島崎 智実	同上	研究員	H29.4～H30.3

研究項目

・相対論的電子論に基づく電子機能材料設計

④「長谷川」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
長谷川 淳也	北海道大学触媒科学研 究所	教授	H24.10～H30.3

中谷 直輝	同上	助教	H26.10～H28.12
北川 裕也	同上	研究員	H25.4～H27.3
Chen Yue	同上	研究員	H27.5～H29.2
Siwarut Siwaipram	同上	研究員	H29.7～H29.7
Supawadee Namuangruk	同上	研究員	H29.9～H29.10
Sarinya Hadsadee	Ubon Ratchathani University	D2	H29.8～H29.10
Liming Zhao	北海道大学	D1	H29.9～H30.3
Maximilian Kraemer	同上	研究員	H30.1～H30.3

研究項目

- ・相対論的電子論に基づく生体光機能設計
- ・アミドの水素化触媒の作用機構に関する理論的研究

⑤ 「平田」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
平田 聡	イリノイ大学 アーバナ・シャンペン校	教授	H24.10～H30.3
山田 朋範	同上	博士研究員	H24.10～H27.3
Soohaeng Yoo Willow	同上	上級研究員	H25.11～H28.3
Jun Zhang	同上	博士研究員	H28.6～H29.3
Alexander Kunitsa	同上	博士研究員	H29.4～H30.3

研究項目

- ・相対論的電子相関理論に基づいた共通基盤開発

⑥ 「青木」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
青木百合子	九州大学 総合理工学研究院	教授	H24.10～H30.3
水上 渉	同上	助教	H27.4～H30.3
大川 育子	同上	テクニカルスタッフ	H25.4～H30.3
Liu, Kai	同上	学術研究員	H26.9～H27.1
Jin, Lin	同上	学術研究員	H28.4～H28.6

研究項目

- ・相対論的電子論に基づく機能性高分子設計

⑦ 「森」グループ

研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	森 寛敏	お茶の水女子大学	准教授	H27.4～H28.9

	松田 彩	同上	D3	H27.4～H28.4
	黒木 菜保子	同上	M2, D1	H27.4～H28.9
	宮崎 かすみ	同上	M1～M2	H27.4～H28.9
	谷中 あゆみ	同上	M2	H28.4～H28.9

研究項目

- ・相対論的電子論に基づく触媒設計および電子機能材料設計

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

1. 大型プロジェクトの連携

- 超並列環境に対応した分割統治法プログラム「DC」および「DC-DFTB-K」の開発および公開 (中井 G)
計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 第3部会「分子機能と物質変換」
特別支援課題「ナノスケール反応系のダイナミクスと制御の計算化学基盤の確立」、
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」サブ課題 C「エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー」
- 自動車三元触媒およびリチウムイオン二次電池に関する実験・理論研究者との連携 (中井 G)
京都大学触媒・電池元素戦略研究拠点 (ESICB)

2. チーム外研究者との連携 (共同研究)

- 均一触媒による C-H 活性化反応の理論評価 (中井 G)
柴田高範 (早稲田大学、教授)
- 電場印加触媒によるアンモニア合成反応の理論評価
関根泰 (早稲田大学、教授)
- 有機ホウ素化合物のりん光に関する理論評価 (中井 G)
福島孝典 (東京工業大学、教授)
- 重元素を含む化合物の相対論的 NMR 計算 (波田 G)
藤井浩 (奈良女子大学、教授)
斎藤雅一 (埼玉大学、教授)
- 電子の電気双極子モーメント (波田 G)
Bahnu P. Das (東京工業大学、教授)
Debashis Mukherjee (インド、インド科学発展協会、教授)
舘脇洋 (名古屋市立大学、教授)
青木貴稔博士 (東京大学)
酒見泰寛 (東北大学、教授)
- 同位体の核サイズ効果 (波田 G)
Frederic Moynier (フランス、パリ地球物理研究所、教授)
- 金属錯体の磁気物性の解析 (波田 G)
P. Venuvanalingam (インド、バラチダサン大学、教授)
崎山博史 (山形大学、准教授)
- メタロセンのスピンブロック (長谷川 G)
東雅大 (琉球大学、助教)
- 分子間相互作用の解析 (長谷川 G)
Mark Gordon (米国、アイオワ州立大学、教授)
- 中間静電場下 Elongation 法の開発 (青木 G)

- Jacek Korchowiec (ポーランド、ヤギェウォ大学、教授)
 - 非直交基底 Elongation 法の共同研究について学部間学術交流協定締結へ (青木 G)
Feng Long Gu (中国、華南師範大学、教授)
 - Elongation 法ドラッグデザイン設計について学部間学術交流協定締結へ (青木 G)
Jian Wan (中国、華中師範大学、教授)
 - ナノチューブ・DNA の機能設計 (青木 G)
Anna Pomogaeva (ロシア、サンクトペテルブルク大学、研究員)
3. チーム外研究者との連携 (共同研究以外)
- NLO-ELG 法の洋書を共同出版 (青木 G)
Feng Long Gu (中国、華南師範大学、教授)
Bernard Kirtman (米国、カリフォルニア大学サンタバーバラ校、教授)
Michael Springborg (ドイツ、ザールランド大学、教授)
 - 高精度固体電子状態計算を目的とする共同研究センターの運営 (平田 G)
David Ceperley (米国、イリノイ大学、教授)
Bryan Clark (米国、イリノイ大学、助教)
Lucas Wagner (米国、イリノイ大学、助教)
笠真生 (米国、シカゴ大学、准教授)
Peter Abbamonte (米国、イリノイ大学、教授)
Garnet Chan (米国、カリフォルニア工科大学、教授)
Shiwei Zhang (米国、ウィリアム・アンド・メアリー大学、教授)

§ 3 研究実施内容及び成果

1. 相対論的電子論に基づいた共通基盤開発(早稲田大学 中井グループ)

(1)研究のねらい

本研究項目では、元素の特性を理解し、革新的な機能を持つ物質・材料を設計するために必要な理論基盤の構築を目指す。元素戦略において重要となる希少元素や規制元素の多くは重元素であり、相対論効果は非常に重要な役割を果たす。本研究では周期表のあらゆる元素を含む物質・材料に対して、確証性の高い特性評価・機能設計を可能にする実用性の高い相対論的量子化学理論を確立する。独自に開発する次世代相対論的量子化学計算プログラム RAQET (Relativistic And Quantum Electronic Theory) を公開し、世界中の誰もが利用できるようにする。本研究項目の推進により、従来の非相対論的なシュレディンガー方程式に基づく量子化学理論から、相対論的なディラック方程式へのパラダイムシフトを実現する。

(2)研究実施方法

本研究項目は理論開発とプログラム開発の2つに分かれる。理論開発においては、平成 24 年度から平成 26 年度にかけて、2 成分相対論法的高速化・構造最適化計算手法・大規模化を実施し、当初の予定通り完成させた。また、開発した理論によるテスト計算の結果、金属クラスターなどに適用するにはさらなる高速化が必要であることがわかり、平成 25 年度より内殻ポテンシャルの開発、平成 26 年度より高速な積分アルゴリズムの開発に新たに着手し、完成させた。さらに、平成 28 年度からは密度汎関数理論 (DFT) にて 4 成分法と等価な計算精度を得るための補正法と、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく励起状態計算手法の開発に取り組んだ。開発した理論の普及のため、一部の手法を標準的な量子化学計算プログラム GAMESS に実装した。

プログラム開発においては、平成 24 年度より、開発メンバーによる RAQET 会議を随時開催し、プログラムの作成ルールなどの詳細な仕様を決定した。決定されたルールに則り、プログラム基盤を作成するために RAQET 合宿を開催した。その後、個々のプログラム作成分担を振り分け、バグの混入などに対するリスクを考慮して、Subversion システムによりプログラムの更新を管理した。RAQET はゼロから作成しているため、理論開発の段階で作成された手法だけでなく、従来の汎用的量子化学プログラムに含まれる様々な手法の導入と、相対論的量子化学計算へのカスタマイズが必要である。そのため、独自の理論・計算技術を逐次実装するとともに、一部の機能を量子化学計算プログラム SMASH から移植した。

実在系に近い大規模分子系の計算を行うためには、「京」コンピュータなどの超並列計算機環境への対応が不可欠である。中井 G では現在、次世代スーパーコンピュータ「ポスト京」のプロジェクトに参画しており、プロジェクト内で蓄積された超並列計算に関するノウハウを生かして、RAQET の並列化を進めている。

(3)研究実施内容及び成果

本研究項目では無限次ダグラス・クロール (IODK) 法を軸に以下の 4 項目の理論開発および汎用プログラム作成を行った。以下に各項目の概略を示す。

1.1 局所ユニタリー変換 (LUT) 法による 2 成分相対論法的高速化

本研究では、IODK 法的高速計算を実現する局所ユニタリー変換 (LUT) 法を開発した。本手法は、相対論効果の局所性に注目することで、分子を構成する原子におけるユニタリー変換のみが必要となるため、線形スケールリング (分子サイズに比例

した計算コスト) で実行できる。

1.2 2成分相対論法に対する構造最適化・分子物性計算法の開発

本研究では、2成分相対論法に基づいた構造最適化および分子物性計算法を開発した。その基盤となる相対論的ハミルトニアンおよび波動関数に対する解析的微分法を提案した。特に LUT 法を用いることで、複雑なユニタリー変換の微分表現を回避し、計算表式の簡略化と計算コストの大幅な削減を実現した。

1.3 2成分相対論法のための波動関数理論構築と分割統治(DC)法による大規模化

本研究では、スピン-軌道相互作用などの内部磁場による相対論効果を記述できる一般化非制限ハートリー・フォック (GHF) 法および電子相関を考慮した一般化非制限メラー・プレセット 2 次摂動 (GMP2) 法の理論・プログラム開発を行った。また、大規模分子系の波動関数計算を実行するため、線形スケール法である分割統治 (DC) 法へと拡張を行った。DC 法は非局在電子・スピン系も扱うことができるため、本研究課題を推進するために重要な役割を果たす。

1.4 次世代相対論的量子化学計算プログラム RAQET の開発

本研究で開発したすべての理論を含み、ゼロから作成するオリジナルの次世代相対論的量子化学計算プログラム RAQET の開発を推進している。

研究項目 1.1 と 1.3 により、2成分相対論法に基づいた量子化学計算全体の線形スケール法を達成する理論が完成した。DC-LUT-IODK 法は、圧倒的に高速であり、非相対論法と同等のコストで計算が実行できることが確かめられた (図 1-1)。これは、もはや非相対論的なシュレディンガー方程式を用いる必要がないことを示し、相対論的なディラック方程式へのパラダイムシフトの可能性を示唆している。

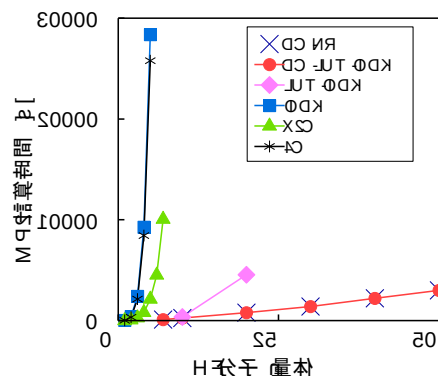


図 1-1. DC-LUT-IODK 法と従来法 (4c, X2C, IODK) の計算時間

研究項目 1.2 では、2成分相対論法におけるエネルギーの解析的微分法を確立し、プログラム実装を行った。現在、構造最適化 (1 階微分) と振動数 (2 階微分) 計算が実行可能になった。振動数計算の結果、非相対論法では Au_2 のような重元素系だけでなく、 Cu_2 のような比較的軽い元素においても 10% 程度の誤差があり、相

表 1-1. RAQET プログラムの開発状況 (黒: 実装済、赤: 実装中)

Contents	Details
HF	R, U, RO, KR, KU, KRO, G (disk, direct)
MP2	R, U, RO, KR, KU, KRO, G (disk, direct)
DFT	R, U, RO, KR, KU, KRO, G (collinear, non-collinear, PCC)
高次電子相関	MPn, CI, CC
励起状態	EOM-CC, TDDFT(R, U, G)
ハミルトニアン	NR, DKHn/NR, IODKH/NR(SF/SD, LUT), IODKH/IODKH (SF/SD, LUT)
初期軌道・電子密度	Hcore, Extended Hückel, Atomic density, Small basis, MO read, DM read
ハミルトニアン微分	NR, IODKH/NR(SF/SD, LUT), IODKH/IODKH (SF/SD, LUT)
HFグラジエント	R, U, RO, KR, KU, KRO, G
MP2グラジエント	R, U, RO, KR, KU, KRO, G
基底関数種類	Cartesian, Spherical harmonics
一電子積分	Overlap, Kinetic, V, pVp (derivative)
二電子積分	ERI, pVp, ppVpp (derivative), FMM
積分アルゴリズム	ACE-RR, ACE-TRR (GC/SC), Gauss-Rys, PH+MD (SMASH)
内殻ポテンシャル	MCP, AIMP, FCP, FCP-MP
SCF収束	C1-DIIS, C2-DIIS, E-DIIS, SO-SCF, Level shifting, Fock extrapolation, Damping, FON
大規模計算	DC-SCF, DC-correlation
構造最適化	BFGS, RFO, Cartesian coordinate, Redundant coordinate, G-DIIS, Hessian
その他	Expectation values, Electric/Magnetic properties, Solvent effect

対論効果の考慮が不可欠であることが示された。

研究項目 1.4 における RAQET プログラムの開発状況を表 1-1 に示す。現在、前述の大部分の手法が実装済みである（表 1-1: 黒）。未実装の部分（表 1-1: 赤）もそれぞれの基盤は完成しているため、適宜実装する予定である。また、ゼロから作成しているため、従来の量子化学計算プログラムで用いられている様々なオプションを、相対論的量子化学計算用にカスタマイズして導入した。並列化については OpenMP によるノード内並列が概ね完成した。現在、MPI によるノード間並列や、プログラムの最適化などを遂行することで、超並列計算に対応できる仕様にしている。

本研究項目で開発してきた手法により、線形スケーリングの計算時間が実現され、従来の相対論的量子化学計算と比べて格段に高速化された。しかし、金属クラスターのように電子が非局在化し、かつ重元素を密に含む場合では、分割された部分系を大きくとる必要があり、電子数の多さと相まって現状においても計算が困難となる。この問題を解決するには計算時間のさらなる削減が不可欠である。そのため本研究項目に加えて、新たに 2 項目の理論開発・プログラム実装を行った。また、RAQET プログラムの公開に先立ち、開発した理論が世界的に認められることは重要である。そのため、デファクトスタンダード量子化学計算プログラム GAMESS に一部の理論を実装した。

1.5 重元素を密に含む化合物の高速計算のための凍結内殻ポテンシャル(FCP)法の開発

本研究では、取り扱うべき電子数の多さの問題を解決するために、凍結内殻ポテンシャル (FCP) 法を開発した。本手法はこれまで提案されてきた内殻ポテンシャル法の中でも最も高精度な相対論的ハミルトニアンを導入が可能である。また、内殻電子および価電子軌道をともに用いることで、内殻ポテンシャル法のように内殻電子を固定して、価電子軌道を求めるだけでなく、その逆も可能となる。これにより全電子計算と同等の精度を、内殻ポテンシャル法と同様の計算コストで得ることができる。

テスト計算の結果、FCP 法では全電子計算と比べて Au_2 で約 50 倍の高速化が達成された。特に重元素になるほど大きく高速化され、重元素を密に含んだ化合物に対して計算時間の大幅な削減が期待される。このように本手法は従来の全電子計算に代わる新たな計算手法となると考えられる。

1.6 重元素化合物に対する高速な電子反発積分(ERI)アルゴリズムの開発

重元素化合物を扱う際に、電子反発積分 (ERI) の計算コストは軽元素化合物に比べて大幅に増加し、大規模分子系の計算を困難にする。これは重元素の基底関数が d や f 軌道以上の高い軌道角運動量を含み、さらにその軌道が内殻から価電子領域までの広範囲にわたって節を持つことに起因する。本研究では、このような重元素化合物における ERI に対して有効となるようにアルゴリズムを最適化し、一般化縮約に対応した随伴座標展開—移行漸化関係式 (GC-ACE-TRR) 法を開発した。

この結果、本研究で開発した GC-ACE-TRR 法では GAMESS と比較して約 100 倍の高速化が達成された。また、重元素化合物の ERI 計算において、世界最速といわれている MOLPRO よりも約 3 倍の高速化が実現された。

1.7 GAMESS への実装

GAMESS の管理者 Michael W. Schmidt 博士（米国、アイオワ州立大学）を早稲田大学に招聘し、研究項目 1.1 と 1.3 で開発した LUT-iodk 法およびその解析的微分法（構造最適化、振動数計算）を実装した。本手法は GAMESS のマニュアルにて「最も正確で、最も速く計算できる相対論的量子化学計算手法であり、LUT-iodk 法の

使用が推奨される」と記載された。GAMESS には DC 法も実装されており、相対論効果を考慮した大規模分子系の計算を世界中の誰もが実行できるようになった。

1.8 2 成分相対論法の密度汎関数理論への拡張

DFT では電子密度の汎関数として交換相関エネルギーおよびポテンシャルを計算するが、2 成分相対論的 DFT では密度演算子に対して適切な変換が必要となる。本研究では、IODK 法に基づいて密度演算子をユニタリー変換し、4 成分 DFT 計算とよく一致する交換相関エネルギー、全エネルギー、軌道エネルギーが得られた。IODK 法に基づく時間依存密度汎関数理論の開発にも取り組み、スピン-軌道相互作用を考慮した励起状態計算が可能となった。

2. 相対論的電子相関理論に基づいた共通基盤開発

(イリノイ大学アーバナ・シャンペン校 平田グループ)

(1)研究のねらい

本研究項目では、中井 G が開発する周期表上のあらゆる元素を含む物質・材料に対する実用性の高い相対論的量子化学理論に対して、相対論的電子相関理論という観点から高精度物性計算を可能にする方法論の開発を目指す。特に電子相関理論では、表式導出と実装の複雑性、低効率な並列性、大規模分子系に対する低い実用性という 3 つの問題があり、これらの解決を行う。

(2)研究実施方法

平田 G では、電子相関理論の表式導出と実装の複雑性に対する解決策として、高精度な電子相関理論表式をコンピュータが自動導出し、その表式に基づくプログラムも自動生成するテンソル縮約エンジン (TCE) を、非相対論的枠組みに基づき確立してきた。本研究では、TCE を相対論計算のために拡張するため、中井 G が開発している相対論的量子化学理論の詳細について情報共有し、自動導出・自動生成するプログラムをカスタマイズした。平成 27 年 10 月に中井 G と共同して RAQET に実装する作業を完了した。

一方、電子相関理論の非相対論/相対論に共通して、計算時間が分子サイズに対して急激に増大するという深刻な問題がある。そこで、超並列化および大規模分子系へと応用可能な 2 つのアプローチによる手法の開発を新たに追加した。この方法は中嶋 G の NTCHEM に実装すべく、共同で開発を進めている。

(3)研究実施内容及び成果

本研究では、表式導出と実装の複雑性に対する解決策として、コンピュータによる自動導出・自動実装プログラムの開発を行った。

2.1 2 成分相対論法に基づく電子相関理論の自動導出およびプログラム合成

本研究では、系統的に精度向上が可能な電子相関理論、多体摂動法および結合クラスター法に対して、コンピュータにより計算表式の自動導出および計算プログラムの自動生成を行う TCE を、中井 G が開発した 2 成分相対論法へと拡張した。2 成分相対論法では、複素数で表された分子軌道や二重群という対称性を考慮した波動関数が用いられる。そこで、TCE をこのような波動関数に対応できるように拡張した。自動生成されない摂動エネルギーの足し上げや結合クラスター方程式の解法に関しては、中井 G で開発した。RAQET に実装済みの非相対論及びスカラー相対論による参照波動関数をもちいた高次電子相関法の TCE による自動合成を完了し、論文発表した。当初の計画を超えた、分割統治法による大規模分子の高速計算法 (中井 G によって開発) との組み合わせも行った。

2.2 2成分相対論法に基づく電子励起状態理論の自動導出およびプログラム合成

本研究では、相対論的な励起状態計算を実行するために、運動方程式型結合クラスター法に対する計算表式を自動導出・生成する TCE を、中井 G が開発した 2 成分相対論法へと拡張した。

2.3 あらわに相関した 2 成分相対論法の自動導出およびプログラム合成

重元素系における電子相関をより高精度に見積るためには、電子相関理論にあらわに相関を考慮した計算理論を組み合わせる必要がある。そこで、より実用的な計算手法として追加で開発したモンテカルロ MP2 法に対して、あらわに相関を考慮した理論を構築した。通常の MP2 法は、分子サイズに対して 5 乗に比例して計算コストが増加する。一方、量子モンテカルロ法は効率の高い並列性を有し、分子サイズに対してスケールアップであるため、大規模かつ電子相関を高精度に取り込んだ超並列計算手法が確立された。

平田 G では、既存の電子状態理論を中井 G で開発した 2 成分相対論法へ拡張するだけでなく、新しい電子状態理論の開発でも大きな成果を挙げた。

2.4 モンテカルロ相対論的電子相関法の開発

多次元積分や並列化が容易な量子モンテカルロ法と、これまでの電子相関理論を組み合わせた新しいアルゴリズム、モンテカルロ MP2 法の提案を行った。通常の MP2 法では、分子サイズの 5 乗に比例した計算時間を要するが、本手法では分子サイズの 3 乗に比例した計算時間となり、大幅な高速化が達成された。

2.5 強相関理論の開発

強相関系をより定量的に検出する index として、「形縮重」(form-degeneracy) という概念を導入した。また、HOMO と LUMO が形縮重している閉殻強相関系では、三重項不安定性が必ず発生するという数学的定理（三重項不安定性定理）を見いだした。同様の状況下で、実数制限ハートリー・フォック (HF) 法が複素数制限 HF 法に対して必ず不安定である事も証明した（一重項不安定性定理）。これらの定理は、フント則、ヤーン・テラー定理、および共有結合の分割に検出されがちな三重項不安定性を説明するばかりでなく、均一電子ガスの低密度におけるスピン密度波の発現も予測する。後者は、銅酸化物系や鉄系の二次元高温超伝導で観測されるモット絶縁体と密接に関係するため、HF 法が高温超伝導物質の計算に有用である可能性を示唆している。

2.6 高次の多体相互作用を取り込んだ振動状態理論の自動導出

振動のハミルトニアンは非調和項など高次の多体相互作用を含むため、相応した高次の結合クラスター理論が必要となるが、ファインマンダイアグラムを用いた場合でも、表式の導出には超人的な根気と正確さが不可欠となる。そこで、任意の次数の結合クラスター法のダイアグラムまたは代数的表式の自動導出と、対応するプログラムの自動合成を行う記号代数プログラムを開発した。このプログラムは、行列の和積からなる定義式の因数分解・並べ替えを行い、最適なアルゴリズムを自動決定するように設計した。このプログラムを利用して、1 次から 8 次の基底状態と励起状態の非調和振動結合クラスター法を開発・応用した。

2.7 分子結晶・非晶質・液体の高速電子相関法の開発・応用

高圧力下・有限温度での分子結晶・分子非晶質・分子液体の各種物性に電子相関を取り込んだ計算手法の開発・応用を行った。水素結合またはそれより弱い相互作用で凝縮している系を重なり合った分子二量体に分割し、各二量体に対してこれま

での電子相関理論・プログラムを応用した。この計算手法によって、凝縮相の多彩な物性を通常の方法論の限界をはるかに上回る高精度で計算することを可能にした。また、本手法はどのような量子化学計算パッケージとも組み合わせることが可能であり、多数の二量体計算をプロセッサごとに割り振ることで、高効率並列化が期待できる。

この手法を用いて、氷（相 Ih と相 VIII）・二酸化炭素結晶（相 I と相 III）・フッ化水素結晶などの高精度計算を行った（図 2-1）。分子液体のダイナミクスにも拡張し、液体水の二次摂動論による第一原理計算を行った。

3. 相対論的電子論に基づく触媒設計（早稲田大学 中井グループ）

(1) 研究のねらい

本研究項目では、相対論的電子論に基づいて金属ナノクラスターと担体からなる

不均一系触媒の物性を理論的に評価し、元素戦略の観点から希少元素および規制元素の使用を削減した新規触媒の設計を目指す。具体的には、触媒活性に対する金属ナノクラスターのサイズや幾何的構造によるナノサイズ効果、金属ナノクラスターを担持する担体による効果、複数の元素を組み合わせた合金化による効果、クラスターの粒径の効果のそれぞれを微視的視点から解明し積極的に活用することで、ユビキタス元素からなる新規機能性触媒の設計を目指す。

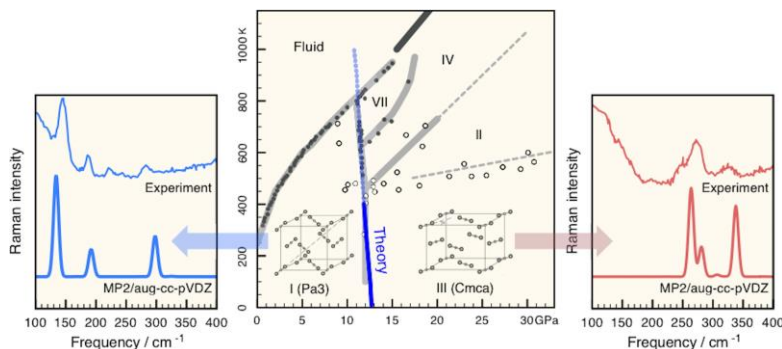


図 2-1. 二酸化炭素結晶の相図と高圧化ラマンスペクトル

(2) 研究実施方法

平成 24 年度に研究項目「金属ナノクラスターの電子状態・構造・安定性・触媒活性」に着手した。研究代表者が拠点教授として参画している京都大学触媒・電池元素戦略研究拠点（ESICB）も同年に発足し、連携して研究を進めた。平成 25 年度からは研究項目「合金ナノクラスターの電子状態・構造・安定性・触媒活性」と「金属・合金ナノクラスターに対する高分子修飾・固体担持効果」に着手した。ESICB における実験研究者らとの議論から、金属・合金ナノクラスターの触媒機能に対する金属酸化物担体の寄与が本質的に重要であると示唆された。3 つの研究項目は不可分であることがわかったため、すべて最終年度まで研究時期を延長することとした。

当初予定していた研究項目「金属・合金ナノクラスターの外部刺激に対する応答」は、平成 27 年度より CREST「超空間」領域の研究課題「超空間制御触媒による不活性低級アルカンの自在転換」を実施している関根 T との共同研究として実施した。そのため、実施内容および成果は「1.1. 他プロジェクト研究との連携」の研究項目「電場印加触媒によるアンモニア合成反応の理論評価」として記載する。

以上に加えてチーム外の研究者との連携研究として、平成 27 年度より早稲田大学柴田 G と研究項目「均一触媒による C-H 活性化反応の理論評価」を実施した。

(3) 研究実施内容及び成果

3.1 金属酸化物担体上の金属ナノクラスターによる CO 酸化反応

金属ナノクラスター上での CO 酸化反応を対象として担持金属とその欠陥が反応に与える効果を研究した。Au ナノクラスターにおける反応では、MgO に担持する

ことで反応の活性化エネルギーが減少し触媒活性が向上することが見出された。また、担体上の酸素欠陥により生じる特徴的な軌道と金属原子の相互作用によるナノクラスターの安定化(アンカー効果)を見出した。金属種については Au 以外に Pt, Ru についても検討を行い、触媒活性の金属ナノクラスター種および担持固体種に対する依存性を見出した。

また、Pt および Ru ナノクラスターに吸着した反応基質 (CO , O_2/O) の安定性と反応性、それらの担体種 (MgO , Al_2O_3) 依存性について検討した。 CO 酸化反応においては吸着 CO による触媒被毒が問題であり、 CO の脱離能および O 原子の吸着能の向上が望ましい。 CO 被覆率の高い状況における CO 脱離、 O_2 の解離吸着について検討し、金属ナノクラスターとして Pt が、担体種として Al_2O_3 が、それぞれ CO 脱離に有利であることを見出した。一方で、 O_2 の吸着においては Ru が大きく有利であることを見出した。吸着エネルギーと吸着サイトについて系統的に検討し、特異的に CO 脱離、 O_2 吸着に有利なサイトがあることを見出した。本知見は、金属ナノクラスターおよびその担体との相互作用の制御による触媒活性向上の指針となる。

3.2 金属バルク、およびナノクラスター上における反応速度のサイズ効果

本研究では NH_3 合成反応について、バルク金属および金属ナノクラスターの理論計算を行った。Ru, Os, Rh についてさまざまなミラー指数の表面エネルギーを計算して任意の粒径におけるクラスターの形状を予測し、そこで表れる反応サイトについて NH_3 合成反応の活性を解析した。扱った金属種についてはいずれも、律速段階の活性化エネルギーが step サイトにおいて最も小さくなり、反応速度定数が特異的に大きいことがわかった。結晶格子の種類によってクラスターの形状は異なるが、いずれの金属種においてもこの step サイトは、ある程度の粒径がなければ出現せず反応速度の粒径依存性に大きく影響することを見出した。

また、Rh ナノクラスターに吸着した NO/CO 反応の反応メカニズム、および反応速度のクラスター粒径依存性について検討した。この反応においては(111)面における N_2 生成が律速であると予測され、表面に占める(111)面の表面積比が大きいほど還元速度が高いことがわかった。Wulff の定理によると、Rh クラスターの粒径が小さいほど表面に占める(111)面の割合が高く、 NO 還元速度が大きいと予測された。一方、直径 1 nm 程度の Rh_{55} 、 Rh_{147} クラスターをあらわに計算したところ、粒径が小さな場合では解離した窒素原子が大きく安定化され、 N_2 生成反応の活性化エネルギーが高くなり、反応速度の低下が確認された。ゆえに触媒の粒径の最適値は、表面積に占める活性サイトの割合とナノクラスター効果のつり合いによって決定されていることを明らかにした。本知見は金属クラスター触媒の粒子径を設定する指針となる。

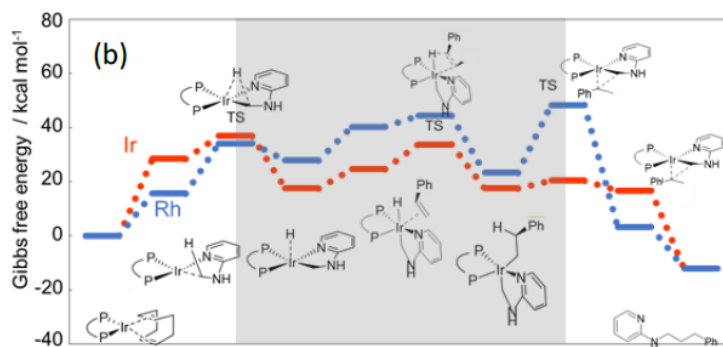


図 3-1. 相対論を考慮した量子化学計算によるカチオン性 Ir・Rh 触媒を用いた C-H 活性化反応の自由エネルギーダイアグラム。

3.3 不均一触媒反応における表面被覆率を考慮した第一原理計算

不均一触媒反応の第一原理計算では、通常は清浄表面を仮定し、表面被覆率の効果は考慮されない。この結果、反応自由エネルギー、活性化自由エネルギーの温度・圧力依

存性は正しく評価できない。本研究では、不均一触媒反応の第一原理計算において表面被覆率をあらわに考慮する理論的枠組みを構築し、Rh(111)表面における NO 還元反応の温度・圧力依存性を検討した。昇温脱離スペクトルを算出したところ、清浄表面モデルでは定性的に誤った結果を与えた一方で、被覆率を考慮するとピークの温度、強度比ともに実験値を再現した。さらに定常状態近似を用いた速度論解析を行い、Rh 表面での NO-CO 反応を検討した。その結果、N 原子の被覆率が高いとき NO 還元活性が高いこと、低温時は NO、高温時は O 原子の被覆により活性が低いことがわかった。本研究で提案したスキームは、三元触媒を用いた NO_x の還元反応のように反応ガスの温度や組成に敏感な触媒反応を微視的に解析する際に有用である。

3.4 均一触媒による C-H 活性化反応の理論評価

柴田 G では、Ir(I)触媒によるオレフィンを用いた sp³ C-H 活性化反応について、sp³ C-H 結合を選択的に活性化すること、Rh(I)触媒下では反応が進行しないことを見出した。本反応は Chalk-Harrod 機構、すなわち、①Ir(III)-H 錯体を生成する酸化的付加、②オレフィンの転移挿入、そして、③生成物の還元的脱離で進行することが指摘されている。本研究項目ではこれらの反応素過程に対し、中間体および遷移状態を量子化学計算により求めた。

図 3-1 に Ir および Rh 触媒に対する反応自由エネルギーダイアグラムを示す。非相対論的な取扱いでは、両者に大きな差は見られない。一方、相対論的な取扱いでは、Ir 触媒において 1 価の状態に比べて 3 価の状態(灰色)が安定化されていることがわかる。Rh 触媒における活性化エネルギーは、還元的脱離が最も高いこともわかる。一方、Ir 触媒では 3 価の安定化によりこの活性化エネルギーは著しく減少している。この相対論効果による違いが、Ir 触媒の特異性の起源である。

4. 相対論的電子論に基づく電磁気特性評価(首都大学東京 波田グループ)

(1)研究のねらい

核磁気共鳴 (NMR) スペクトルなど分子系の電磁気物性の電子状態理論による解析は、理論的にも実験的にも需要の大きい分野である。また、電磁気物性には、電子電気双極子モーメント (電子 EDM) と分子内部電場との相互作用、同位体交換反応における核体積効果など、微小なエネルギー差によって支配されている現象も数多い。これらの現象はそれ自身が科学的に興味深いだけでなく、理論的・実験的取り扱いが極めて困難であり、最先端の研究手法の試金石となる。本研究項目では、電磁気物性を正確に取り扱える精緻な理論の構築と、実験研究者とも連携した重元素の電磁気特性の解明を目指した。

(2)研究実施方法

当初計画通り、平成 24 年度から重元素を含む化合物の相対論的 NMR 計算に着手し、藤井浩教授 (奈良女子大学) および斎藤雅一教授 (埼玉大学) との共同研究のもと、NMR 計算手法の構築と種々の分子における物性計算を行った。研究目的は概ね達成されたが、重元素に対する NMR 計算における相対論効果の重要性が極めて大きいことが示されたので、詳細の解析のため研究期間を平成 27 年度末までに延長した。また、本研究項目で構築した NMR 計算手法の有用性が示されたため、中井 G で開発している汎用プログラム RAQET への導入を初期計画に追加して平成 27 年度より行った。

核サイズ効果に着目した同位体分別機構においては、平成 24 年度に着手し、F. Moynier 教授 (パリ地球物理研究所) との共同研究のもと、同位体分別係数の定量的予測を達成した。当初計画を超え、核体積効果を取り込んだ計算手法を結晶系へ拡張するため、本研究項目の実施期間を平成 28 年度末まで延長した。

電子 EDM を考慮した電子状態計算は、Bahnu P. Das 教授 (インド天体物理学研究所; 東京工業大学に異動)、Devashis Mukherjee 教授 (インド科学発展協会)、舘脇洋

教授（名古屋市立大学）、青木貴稔博士（東京大学）、酒見泰寛教授（東北大学）らと共同で遂行した。当初計画通り平成 26 年度に着手し、必要な理論計算プログラムの構築を完了した。

(3)研究実施内容及び成果

4.1 重元素を含む化合物の相対論的 NMR 計算

本項目では鉛原子を含んだ 5 員環化合物 plumbole とその誘導体（図 4-1）の NMR スペクトルを理論的に算出した。その結果、 ^{207}Pb -NMR の再現において相対論効果の寄与が大きいことがわかった。また、 ^{13}C -NMR では、 C_α が低磁場シフトする実験的傾向を相対論計算だけが再現しており、軽元素においても相対論効果は必須であることが示された。

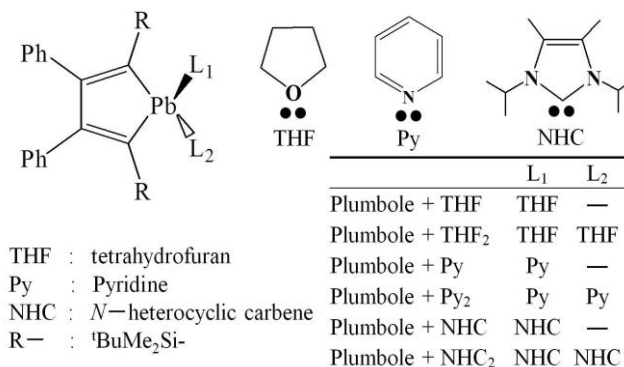


図 4-1. Plumbole 誘導体

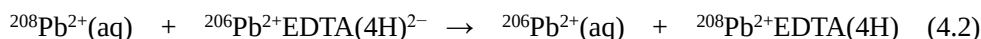
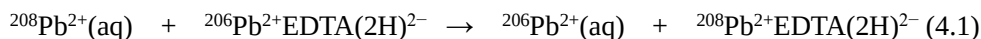
渦電流による遮蔽を示す NICS 値についても計算し、分子構造は明確な結合交替を示す一方で、電子状態の観点からは弱い芳香族性を示すことが明らかとなった。

また、白金ポルフィリン錯体における ^{195}Pt -NMR スペクトルも検討した。ハロゲン置換による ^{195}Pt -NMR 化学シフトの変化がほぼ定量的に再現された。 ^{195}Pt -NMR 化学シフトの計算値において、常磁性項のハロゲン種依存性と Pt の磁気的許容 d-d 遷移エネルギー差との間に明瞭な相関を見出した。

4.2 核サイズ効果に着目した同位体分別機構

本項目では、Douglas-Kroll (DK) 法に基づく 2 成分相対論法を用いて、核サイズ効果が顕著であるウラン分子で核の体積項 $\ln K_{nv}$ の検証を行った。スピナー軌道相互作用や高次の相対論効果の影響について、4 成分相対論法との比較を Hartree-Fock 法を用いて行った。相対論効果における高次の DK 変換項の影響を非相対論法、2 次 DK (DK2) 法、IODK 法を使って比較し、スピナー軌道相互作用の影響についても確認した。ウラン分子系における体積効果 $\ln K_{nv}$ 値を計算したところ、スピン非依存の方法において非相対論法や低次の DK 法は正しい計算ができないことがわかった。スピナー軌道相互作用を考慮することで 4 成分法の値に大きく近づき、2 電子演算子のスピナー軌道相互作用を加えることで、4 成分法とほぼ同精度となった。そのため 2 電子演算子のスピナー軌道相互作用の影響も $\ln K_{nv}$ 値を計算する上で重要であることがわかった。

ウランで得られた結果に基づいて、4 成分相対論法の適用が困難な、より大規模の分子である Pb-EDTA 錯体の同位体交換反応に対して、IODK 法による計算を行った。鉛イオンの水和物と EDTA 錯体における同位体交換反応は、



もしくは ^{208}Pb を ^{207}Pb に置き換えた反応である。反応式(4.1), (4.2)はそれぞれ塩基性条件と酸性条件に対応する。同位体分別係数は実験値を定量的に再現した。 ^{208}Pb と ^{206}Pb の間の同位体分別係数が ^{207}Pb と ^{206}Pb との間と比較して増加する傾向も正しく再現された。実験に先立って、塩基性条件で同位体分別係数が増加することを見出した。

4.3 電気双極子モーメント(EDM)を考慮した電子状態計算

電子 EDM の探索は、素粒子物理学で予言されている CP 対称性の破れを証明する重要な研究課題である。電子 EDM は最後の物理定数と言われている。その決定には分子分光による精密な観測と相対論的電子状態理論に基づく、分子の内部有効電場の精密な算出が不可欠である。本研究では、電子 EDM 探査に必要となる、分子の有効電場の理論値を計算するプログラムを Dirac-Coulomb ハミルトニアンを基に開発した。まずは単配置理論の中でも高精度な手法である CCSD 法を適応し、YbF 分子、水銀ハロゲン分子等へ応用し有効電場を過去最高精度で決定した。特に水銀ハロゲン分子はこれまで実験的な報告はないものの、有効電場が非常に大きな系であることを明らかにし、次世代の EDM 実験の有力な分子であることを示した。またどのような分子であれば有効電場が大きくなるのかを、分子軌道法の観点から解析し、従来考えられていた 2 原子間の電気陰性度の差が重要ではなく、原子軌道のエネルギー差や原子軌道の重なり具合に依存していることを明らかにした。さらに多配置性が重要となる分子に対しては、Dirac-Coulomb-CASPT2 法に基づく有効電場計算の手法を開発した。東工大で測定が検討されている BiO 分子の基底状態に適応したところ、BiO 分子においては CCSD と CASPT2 で有効電場の値に大きな値の差があり、従来法の CCSD 法では記述が困難であることが明らかになった。したがって Dirac-Coulomb-CCSD 法と Dirac-Coulomb-CASPT2 法を分子に応じて適宜使い分けることで、任意の分子の高精度有効電場計算が可能になった。

4.4 2 成分相対論法に基づく NMR 計算のプログラム開発

2 成分相対論法に基づく NMR 計算手法を中井 G で開発している汎用プログラム RAQET へ導入を、中井 G との共同で実行した。さらに、RAQET に組み込むことを想定して、GAMESS ベースで X2C 法を開発した。誤差の原因となるゲージ依存性について解決し、Dirac 法と同等な高精度計算が可能であることをテスト計算によって確認した。

5. 相対論的電子論に基づく電子機能材料設計(理化学研究所 中嶋グループ)

(1)研究のねらい

本研究項目では、スピン-軌道相互作用が重要な役割を果たす電子機能材料の理論先導での分子設計を目指した。そのために従来の量子化学手法では取り扱うことができないスピン-軌道相互作用を考慮できる新たな理論開発を行い、中嶋 G で独自に開発してきた分子科学計算プログラム NTChem に実装した。開発した相対論的量子化学手法を用いた大規模シミュレーションにより、スピン-軌道相互作用を有効に利用した太陽電池材料、記録材料などの次世代材料の理論設計を行うことが本研究の目標である。

(2)研究実施方法

本研究項目では、平成 24 年度より電子機能材料設計に不可欠となる励起状態理論と励起状態動力学法の開発に着手した。この基盤として、中嶋 G が独自に開発している、「京」コンピュータなどのマルチコア超並列クラスター計算システムの性能を引き出すことができる NTChem を用いた。また、ペロブスカイト太陽電池の材料設計には周期系プログラムである VASP を用いた。

(3)研究実施内容及び成果

本研究項目では、新規機能性材料の理論先導での分子設計のため、従来の量子化学理論を超えて系間交差を考慮できる理論を開発した(研究項目 5.1、5.2)。これらの理論開発の進展に合わせて、電子機能材料の分子設計を理論先導で行った(研究項目 5.3、5.4)。

5.1 スピン軌道相互作用を考慮した励起状態理論の開発

本研究項目では、中規模から大規模サイズの分子の価電子励起エネルギーの計算で幅広く用いられている時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) について、高速な計算アルゴリズムに基づいた励起エネルギーおよび解析的エネルギー勾配のプログラムを NTCChem に並列実装した。この実装において、様々な要素の核座標微分が必要となり非常に煩雑で数多くの項を含むため、微分表現の自動導出およびソースコードの自動実装のためのプログラムを開発した。その結果、基底状態計算で通常用いられている種々の汎関数が TDDFT の解析的エネルギー勾配計算においても使用可能になった。

また、平成 25 年度から 27 年度にスピン軌道相互作用を考慮した間接対角化 SO-TDDFT への拡張も行った。スピン反転励起などの振る舞いを正しく記述するために、上記の自動導出・自動実装プログラムを 2 成分相対論法に拡張した。平成 28 年度から、励起緩和を考慮する damped-linear response theory に基づいて、減衰された電場応答より複素分極率を求めることにより、大規模分子の励起スペクトルを直接計算する線形応答 2 成分相対論的 TDDFT を開発し、並列実装した。これらの理論開発により、色素増感太陽電池など、スピン軌道相互作用に基づく高性能な光応答材料開発への理論基盤が完成した。

5.2 系間交差を伴う励起状態動力学法の開発

本項目では、光物質相互作用とスピン軌道結合および電子非断熱性の複合効果を考慮して、非断熱電子動力学過程と系間交差過程を同時に調べることでできる実践的な理論計算手法の開発を行った。任意数の分子集合体における特徴的な局所電子励起状態を用意して分子内/外/間の相互作用を自然に組み込んだ形で様々なパターンの励起直後に生じる電子動力学を計算する新規計算方法を考案した。この方法では、全系の Fock 演算子、非断熱結合、光-電子相互作用、スピン軌道相互作用演算子に対し、group-diabatic-Fock (GDF) 表現行列を用いる。分子構成に応じて相互作用部位に対応した活性軌道空間を抽出することにより、より複雑な系における光励起電子の伝搬を簡明に記述できる。電子機能材料である鉄錯体系やマンガングラスター系の応用計算を行うことで、新たな知見を得ることに成功している。

5.3 系間交差を利用した次世代色素増感太陽電池材料の理論設計

色素増感太陽電池は、1991 年に Grätzel 教授 (ローザンヌ工科大) らにより提案された湿式太陽電池であり、光電変換効率は 10% を超える。さらなる光電変換効率の向上のためには、色素の光吸収の広域化が重要であり、特に長波長領域の光吸収が鍵となる。近年、瀬川教授 (東大) らが太陽電池材料として開発を行った Ru 原子を含む DX1 色素では、長波長領域においてスピン禁制励起が観測された。そこで本研究項目では、DX1 色素およびその誘導体に対し、研究項目 5.1 で開発した SO-TDDFT を用いて理論的な検討を行った。

SO-TDDFT 計算 (図 5-1(a)) に

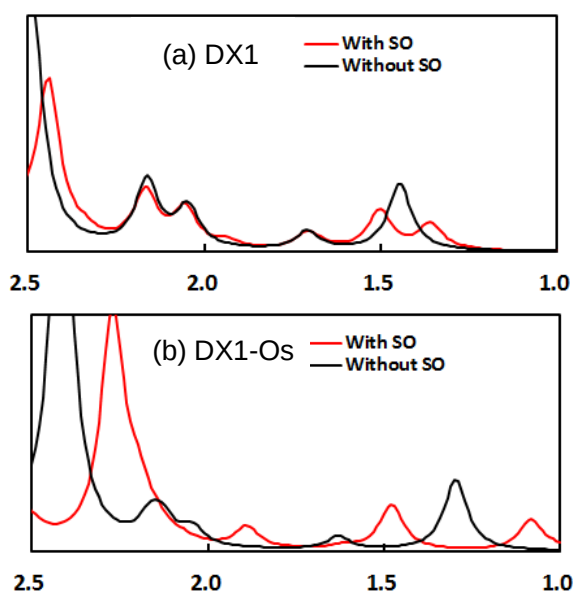


図 5-1. DX1 色素の励起状態スペクトル

より、スピン禁制励起を再現し、また、従来の色素との比較を通してスピン禁制励起の発現機構に関して考察をした。最も長波長領域に現れた 1.3 eV のスピン禁制励起ピークは金属-配位子間電荷移動遷移と帰属され、配位子に比べ、中心金属の影響が大きいことがわかった。そこでさらに、DX1 の中心原子の Ru を Fe と Os に変えた人工的な DX 色素の光吸収スペクトルに関しても詳細に検討した。結果、Fe ではより短波長の光しか吸収できなかったが、Os では長波長の光が吸収できることがわかり、有望な色素であることが示された (図 5-1(b))。

5.4 「京」コンピュータを利用した非鉛化ペロブスカイト太陽電池の探索

ハイブリッド型有機-無機ハライドペロブスカイトは有望な次世代太陽電池材料のひとつである。代表的なハイブリッド型ハライドペロブスカイトはメチルアンモニウム鉛ヨウ素 (MAPbI_3 , $\text{MA} = \text{CH}_3\text{NH}_3$) やホルムアミジン鉛ヨウ素 (FAPbI_3 , $\text{FA} = \text{HC}(\text{NH}_2)_2$) のような鉛化ハロゲン化合物である。これらの鉛化ペロブスカイトは低コストで容易に合成可能である。しかしながら、化学的不安定性や毒性の問題があり、鉛を用いない非毒性元素からなるペロブスカイト材料の探索が望まれている。

本研究では、「京」コンピュータによる元素戦略的な材料スクリーニングに基づいたマテリアルズ・インフォマティクス手法により、非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新規材料探索を実現した。本研究の特徴は、「京」コンピュータを用いたハイスループットコンピューティングにより、従来よりも多数の候補化合物に対しスクリーニングを実施した点にある。 ABX_3 と $\text{A}_2\text{BB}'\text{X}_6$ 型の化合物を考慮した。全組み合わせ数は 11,025 である。スピン-軌道相互作用を考慮した密度汎関数法を使った周期系平面波計算により、スクリーニング手続きにしたがって、非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新規材料探索を実施した。その結果、11,025 個の化合物から 51 個の低毒性非鉛化候補化合物が残った。 $\text{A}_2\text{BB}'\text{X}_6$ 型の 2 重ペロブスカイトに関しては、本研究により初めて提案された化合物である。B サイトに関して周期表の族の組合せで分類すると、次の 6 タイプを提案することができる。(a) 14 族系化合物半導体: $\text{MA}_2\text{GeSnI}_6$ など、(b) 13 族-15 族系化合物半導体: $\text{FA}_2\text{InBiCl}_6$ など、(c) 11 族系化合物半導体: $\text{FA}_2\text{CuAuBr}_6$ など、(d) 9 族-13 族系化合物半導体: $\text{FA}_2\text{RhInI}_6$ など、(e) 11 族-13 族系化合物半導体: $\text{MA}_2\text{CuInI}_6$ など、(f) 11 族-15 族系化合物半導体: $\text{MA}_2\text{CuBiI}_6$ など

6. 相対論的電子論に基づく生体光機能設計(北海道大学 長谷川グループ)

(1)研究のねらい

長谷川 G の研究目的は、相対論的量子化学理論を用いた応用研究を行い、身近な化学において相対論効果の影響を明らかにすることである。その最も顕著な例として、生命化学現象をとりあげ、相対論効果の役割を解析する。また、それに類する化学反応系についても、相対論効果を明らかにし、系統的な知見の獲得を目指す。さらに、機能の制御と分子設計に関する提案を行う。

(2)研究実施方法

本研究は、相対論効果の中でもスピン-軌道相互作用を取り上げる。「化学反応におけるスピン状態遷移」と「光励起状態からの緩和と機能」に力点を置いて研究を行った。前者の具体的な研究対象として、ヘムにおける酸素吸着を取り上げた。後者については、歪んだポルフィリンおよび光合成反応中心におけるカロテノイドを対象とした。さらに当初の計画に追加して、メタロセンのスピンブロック現象、二核金属錯体の磁化率計算、鉄錯体におけるスピンアドミクスチャー現象、六重結合を持つ新規二核金属錯体に関する理論的研究も実施した。

(3)研究実施内容及び成果

6.1 系間交差を経由するヘムの酸素吸着過程

ヘム錯体の酸素吸着過程においては、吸着の前後で分子のスピン状態が変化する

ことが知られている。したがって、系間交差が必要な反応である。系間交差が起きる構造については、これまで鉄－酸素距離が大きい領域における交差メカニズムである“broad crossing”と、結合領域の近くで系間交差が遷移状態になる“crossing-at-barrier”メカニズムが提案されてきた。本研究では、高精度な計算手法を用いて、酸素吸着ポテンシャル面を計算した。鉄－酸素距離が長い領域では、一重項と三重項状態のエネルギー差は大きく、系間交差点が遷移状態となる“crossing-at-barrier”メカニズムが妥当であることがわかった。

次に、系間交差点が作るシーム上におけるエネルギー極少点（MEISC 点）を計算した。その結果、MEISC 点に至るのに必要な活性化エネルギーはわずか 1 kcal/mol であり、単純に Fe-O 距離を反応座標に取った場合より、エネルギー障壁は半分以下になった。また、MEISC 点に至る反応座標を調べた結果、ポルフィリン環の全対称伸縮が寄与することがわかった。すなわち、環が縮むことで三重項状態が不安定化し、同時に一重項状態が安定化して、ポテンシャル面の交差を促進することを見出した。

6.2 歪んだポルフィリン化合物における高速無輻射失活メカニズム

図 6-1 に示したポルフィリン化合物は、メソ位に *tert*-ブチル基を有しているため、大きく平面から逸脱した構造をとる。蛍光、りん光を発する輻射過程が抑制され、高速に基底状態に失活する分子である。最低一重項励起状態 (S_1) のエネルギー準位は、励起三重項状態 (T_2) に極めて近く、系間交差により S_1/T_2 遷移が起きやすいことがわかった。 T_2 状態は速やかに T_1 状態へ緩和すると考えられる。最後に、 T_1 状態から S_0 状態への遷移については、図 6-1 に示すように、 S_0/T_1 交差点を経て緩和する経路が示唆された。 T_1 状態のポテンシャル面は、平面からの歪みに対する変化が小さく、エネルギー極小点から交差点へのアクセスが容易であると考えられる。また、 S_0/T_1 状態間について、有意なスピン軌道相互作用があることを計算により確認した。

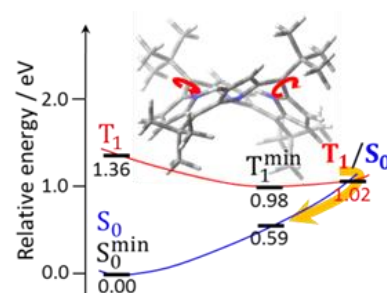


図 6-1. 構造が歪んだポルフィリン化合物における三重項状態 (T_1) から一重項基底状態 (S_0) への系間交差ポテンシャル面の概形図

6.3 カロテノイドの光防護メカニズム

光合成反応中心に存在するカロテノイドは、光化学による分子損傷の原因となる三重項励起エネルギーを一重項基底状態に緩和する。この過程について、DFT を用いてポテンシャル面を計算した。C-C 結合の回転を反応座標にとり、三重項状態のポテンシャルエネルギーを計算すると、回転による交差点が見つかった。また、状態間のスピン軌道相互作用は非常に小さいが、平面から歪んだ構造において、その値が増加することがわかった。

次に交差シーム上の MEISC 点を計算したところ、二面角がより小さいねじれ角において、交差が起きることが示唆された。この原因を明らかにするために、変化が大きい反応座標である共役炭素鎖の結合交替を詳細に調べた。その結果、MEISC 点では一重項状態のエネルギーが不安定になる結合パターンに構造変化することがわかった。その結果、C-C ねじれ角が小さい構造で遷移が起きることが明らかになった。

6.4 メタロセンのスピンブロック現象

[MoCp₂]の基底状態は三重項状態であるが、配位子が付加した[MoCp₂L](L=CO, H₂)は一重項状態である。このため、これらの配位子結合反応は系間交差を経由するスピン禁制反応である。また、配位子結合についても特徴があり、CO の場合は容易で

あるが、水素分子ではより高い温度と圧力が必要であるという実験結果が報告されている。この実験結果を理解するために、一重項および三重項状態のポテンシャル面とそれを繋ぐ MEISC 点の計算を行った。その結果、CO の場合、三重項状態の極小点近傍に MEISC 点が見出されたのに対し、H₂ では MEISC 点がエネルギー的に高い位置に見出された (図 6-2)。また、MEISC 点に至る反応座標について解析したところ、Cp-Mo-Cp 角が曲がることで、二つの状態がエネルギー的に縮退することが分かった。この結果は、Cp-Mo-Cp 角を曲げるような配位子デザインによって、MEISC 点に至る活性化エネルギーを低下しうることを示唆している。実際に、二つの Cp 環を結合させてそのような配位子を設計し、ポテンシャルエネルギープロファイルを計算したところ (図 6-3)、系間交差による活性化エネルギーは約 2 kcal/mol まで低下し、上記の配位子設計コンセプトの妥当性を計算結果として検証することができた。また、この配位子は ansa 配位子として過去に合成され、メタンの酸化的付加に用いられていることが分かり、実験としても有効性を示していると判断できる。

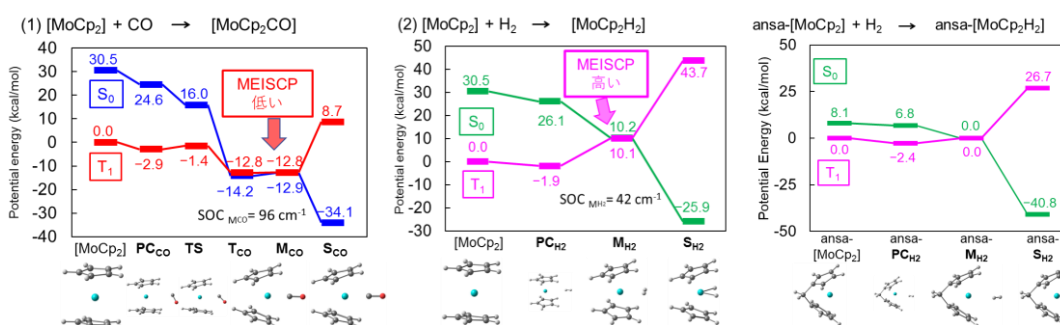


図 6-2. モリブデノセンにおける(1)CO および(2)H₂との配位子結合ポテンシャルエネルギープロファイル

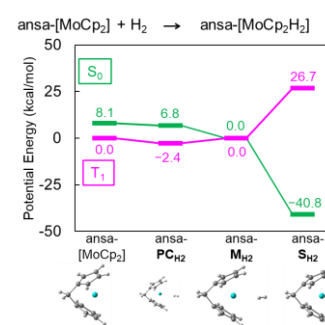


図 6-3. Ansa 配位子を用いた際の、H₂ との配位子結合エネルギープロファイル

6.5 二核金属錯体の磁化率計算におけるスピン軌道相互作用の重要性

単分子磁石ではビット情報をナノオーダーの空間領域に保存することが可能となるため永らく期待されて研究が行われてきた。その中でも、ランタノイドを利用した金属錯体は、磁気ヒステリシスを示す重要な化合物群である。他方で、分子理論においては、相対論が重要となる重原子において、磁性に関する物性値を計算によって再現できた例は乏しい。その主な理由は、狭いエネルギー領域に複数のスピン状態が存在すること、スピナー軌道相互作用によって異なるスピン状態が混合すると磁気モーメントの計算の難易度が上がることにある。そこで本研究では、現在汎用的に使用可能な相対論的電子状態理論を用いて、ランタノイド複核錯体の電子状態計算を行い、磁化率が理論的に再現することを試みた。

その結果、スピナー軌道相互作用を考慮しないと、Gd 錯体を除いて計算結果と実験結果には大きな食い違いが見られ、特に Dy 錯体では三分の一程度に過小評価した。これに対して、スピン軌道相互作用を考慮すると、Dy, Tb, Gd 錯体についての計算結果は、全ての温度領域にわたり、実験結果をよく再現することに成功した。この原因は、Gd 錯体では、高スピン状態が安定であるのに対し、Dy, Tb においては多数の中間スピン状態のエネルギー準位が低下するため、スピン軌道相互作用によるスピン状態の混合が本質的に重要になることにある。

6.6 鉄錯体におけるスピンドミクスチャー現象の理論的検証

第三周期遷移金属元素においては、スピナー軌道相互作用が小さいために、スピン状態の混合に由来する顕著な現象は見られないというのが、これまでの一般的な理解であった。ところが、特定の鉄錯体においては、単一のスピン状態では説明できない磁気モーメントの増大が観測されてきた。この現象は「スピンドミクスチャー」と呼ばれ、現在においても複数のスピン状態への熱分布に由来する現象であるのか、真にスピン状態の混合による現象であるのか区別が定まっていない。そこで、本研究では、異常な磁化率を示す単核鉄錯体を取りあげて、スピナー軌道相互作用を考慮した計算を行い、実験結果にみられる磁化率の解析を行った。

鉄錯体の計算を行った結果、温度の上昇に伴い磁化率が上昇する傾向を比較的精度よく再現することができた。計算結果を解析すると、わずか 100 cm^{-1} のエネルギー範囲に二つの 4 重項状態と二つの 6 重項状態が存在することが分かった。基底状態のエネルギー準位をスピンフリー状態で調べると、低温においては 4 重項状態、温度 150 K 付近から上で 6 重項状態が安定になることが分かった。更に、スピナー軌道相互作用を考慮した電子構造を解析すると、これらの 4 重項状態と 6 重項状態がスピン軌道相互作用を介して混合していることが明らかになった。従って、この鉄錯体におけるスピンドミクスチャー現象は、単なる熱分布による統計的現象ではなく、電子状態に起因する現象であることが明らかになった。

6.7 六重結合を持つ新規二核金属錯体の提案

前述の複核ランタノイド金属錯体の研究を行う中で、現状で安定な六重結合を持つ化合物が存在しないことを知った。低温における希ガス雰囲気下で、 Mo_2 が観測されたことに留まっている。他方で、Roos らによる理論的研究では Mo_2 、 W_2 などの金属原子ダイマーでは六重結合があることが報告されている。そこで本研究では、六重結合を保ちつつ、金属原子二量体を安定化しうる配位子を提案した (図 6-4)。

配位子としては、金属において占有されていない反結合性軌道が、強い軌道間相互作用によって特異的に安定化され、錯体では占有されてしまうことが多い。そこで、電子供与性でありつつ、遷移金属と軌道間相互作用の弱いクラウンエーテルを用いることを考えた。その結果、金属の d 電子に局在化した電子状態によって、六重結合を保ちつつ、錯体を安定化できることが分かった。CASPT2 法や DFT などによる計算では、十分な錯形成エネルギーが期待され、実験的に観測されることを期待している。

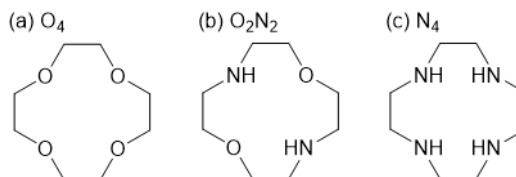


図 6-4. 本研究で提案する配位子。

7. 相対論的電子論に基づく機能性高分子設計 (九州大学 青木グループ)

(1) 研究のねらい

相対論が大きな役割を果たす重元素も含めたあらゆる化合物を対象とし、革新的な機能を持つ物質・材料を設計するという中井 T が掲げる全体課題の高分子部分を担当するものである。ELG 法は、ポリマーの重合反応を模倣するように、小分子に対する電子状態計算を逐次的に実行することで、大規模分子を効率的に計算する手法である。これにより、高分子やナノワイヤに対して非常に高精度かつ高効率に計算できる特長を持つ。青木 G では、Elongation (ELG) 法の手法を高度化し、大規模高分子系に対する高精度な理論的機能設計を目指す。ELG 法ならではの特徴を生か

し、計算過程の副産物として得られる領域局在化分子軌道を利用することにより、高効率な相対論的 ELG 法および機能設計法を開発する。まず量子化学計算に困難を伴う有機磁性化合物（開殻系）の効率的かつ信頼度の高い計算法の構築を行い、さらに導電性、非線形、太陽電池材料等の理論設計への展開を目標とする。

(2)研究実施方法

本研究項目において、まず機能性高分子設計のために不可欠な ELG 法の理論拡張を行った。平成 24 年度より ELG 法を開殻系の取り扱いが可能となるよう理論拡張・プログラム開発を行っている。平成 25 年度より相対論的 ELG 法の構築を開始し、相対論効果を考慮した手法へと拡張した。また、上記 2 項目を統合する形で、平成 26 年度より開殻系用相対論的 ELG 法を構築した。理論開発の進捗と対応して、当初の予定通り、平成 27 年度より機能性高分子設計の初期検討を開始し、現在までに実際の理論設計や本手法の効率化に取り組んだ。

(3)研究実施内容及び成果

7.1 開殻系用 Elongation 法の構築

有機磁性化合物などではスピンが重要な役割を果たす。本研究項目では、従来の ELG 法を開殻系に適用できるように拡張した。高スピン系に対しては、高分子を繋いでいく際に、付加する分子と相互作用する限られた空間だけで高スピン状態で計算していくと、最終的に得られる全系も高スピン状態となる。中間スピン状態の計算では、本手法をベースとして、任意の場所のスピン状態を指定することで表現した。

有機磁性化合物におけるスピン整列機構を解明するため、ELG 法の理論およびプログラムを拡張した。通常これらの化合物は溶媒中で取り扱われるため、溶媒を計算において考慮できるようプログラムを拡張した。また磁性体としての高スピン性を示す新たな尺度 $L_{\min}$ を提案し、その高速な計算方法を開発した。 $L_{\min}$ は非結合性軌道間の混じり易さの指標である。本手法により高スピン状態における安定化エネルギーと $L_{\min}$ の間に線形な相関関係があることを見出すとともに、高速な $L_{\min}$ の計算手法を開発した。

一方、磁性を示す可能性を有する高分子のスピン状態を理に適った方法で精度良く算出する別のアプローチとして、ハイゼンベルクモデルのパラメータを第一原理計算から直接的に計算する方法を構築した。そのために制約密度汎関数法および harmonic Restrain を使用した Restrained DFT (RDFT) を ELG 法に導入した。特に後者については ELG 法との相性が良いため、これらを結合した ELG+RDFT を展開した。応用例として森田 T が正極材料として用いているラジカル有機分子スタッキング系 $[\text{Br}_3\text{TOT}]_n$ に適用した場合の有効交換積分値（図 7.1）を示す。

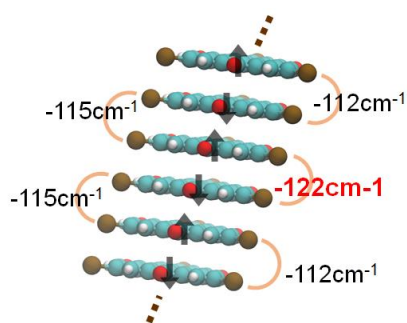
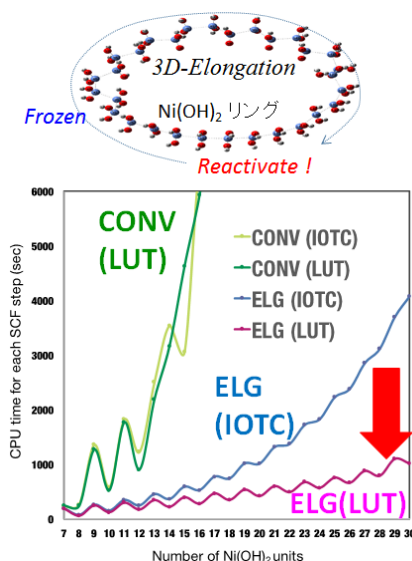


図 7-1. RDFT + ELG 法による有効交換積分値

7.2 相対論的 Elongation 法の構築

レアメタルにより発現する機能やそのメカニズムを理論的観点から解析するために、ELG 法に相対論効果を導入したプログラムを開発した。白金錯体スタッキング系におけるテスト計算の結果、非相対論と同様に高精度な結果を与えることが確認された。また、中井 G にて開発された LUT 法と結びつけることにより、相対論効果の局所性を取り入れた拡張を行い、さらなる高速化が見出された。計算モデルとして水酸化ニッケル環状クラスターに適用したところ、従来法では、リングの様々な鎖長において殆ど収束した結果が得られなかったが、本方法ではあらゆる鎖長に対して安定的かつ高効率に結果が得られることが判明した (図 7.2)。



7.3 開殻系用相対論的 Elongation 法の構築

重元素を含んだ高スピンおよび中間スピン状態をもつ高分子を計算するために、研究項目 7.1 と 7.2 を統合した理論開発を行った。これにより、相対論効果を含めた開殻スピン系の計算が可能となった。

図 7-2. 相対論的 ELG (LUT)法による水酸化ニッケルリングへの計算時間の比較

7.4 機能性高分子設計

研究項目 7.1 から 7.3 にて拡張した ELG 法を用いて、機能性高分子設計の応用に向けた検討を行った。汎用性の高い機能設計を遂行するため、相対論効果を導入した開殻系および開殻系の双方に適用可能な ELG 法へと高度化するとともに、生成物の機能みならず合成過程にも注目し、ELG 法の特徴を生かした反応設計にも利用できるよう拡充を行った。

高(低)非線形光学特性を発現する DNA 塩基配列探索、高導電性を発現し易いカーボンリボンの末端制御による安定構造探索、エレクトロクロミズムによる光学スイッチ高分子の現象解明と設計、有機太陽電池ワイヤとしての機能発現が期待される分子修飾等、(擬)一次元系に対して様々な機能設計を行った。例として、有機太陽電池ワイヤ設計をとりあげると、[2,2']-para-cyclophane-oligo-p-phenylenevinylene (pCp) 分子ワイヤをもつドナー (ポルフィリン) およびアクセプタ (C₆₀) 系に対して、電荷分離有利かつ電荷再結合不利となる電子論的なメカニズムを解析し (図 7.3)、ワイヤ側鎖に -NO₂ や -CN 基をもたせるとさらに効果的であることを提唱した。

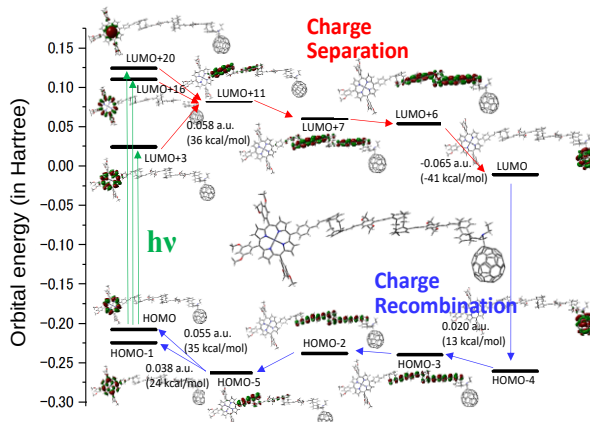


図 7-3. ポルフィリン-pCp ワイヤ-C₆₀ の電荷分離および電荷再結合メカニズムの電子移動経路説明のための模式図

以上に加えてこれまで一方向に伸長していた ELG 法を、両末端から中心 (局所相互作用) 部に向けて伸長できるように改良し、長い系の一部の変化を効率良く扱う

ことに成功した。これにより、導電性や非線形光学特性等の物性と、成長高分子の種類の関係説明や予測が容易となり、計算先行の研究への貢献が期待される。

8. 相対論的電子論に基づく触媒設計および電子機能材料設計 (お茶の水女子大学 森グループ)

(1)研究のねらい

森 G は、中井 G および中嶋 G が推進する相対論的電子論に基づく触媒設計および電子機能材料設計で掲げた研究目標を共有しつつ、独自の視点から研究を展開する。具体的には、金属クラスターの水素吸蔵特性に着目し、合金化による吸蔵特性の変化を解析する。また、スピン-軌道相互作用による三重項励起子を利用した白色有機 LED 材料の発光メカニズムを解明する。

(2)研究実施方法

森 G では、これまで相対論効果を高精度かつ高効率に考慮できる相対論的モデル内殻ポテンシャル(MCP)法を開発してきた。本研究項目では、MCP 法のさらなる高度化および MCP 法の強みを活かした機能材料の理論設計を行った。また、中井 G とのチーム内連携を行い、MCP 法を RAQET に実装した。

(3)研究実施内容及び成果

8.1 水素吸蔵合金材料の理論設計

Pd ナノ粒子の合成では適切にキャッピング剤を利用することで露出表面構造を制御し、(111) 面のみが露出した Pd-nano octahedron と (100) 面のみが露出した Pd-nano cube が合成されている。本研究では、相対論効果を考慮した密度汎関数計算により、Pd ナノ粒子の水素吸蔵ポテンシャルを評価した。その結果、Pd-nano octahedron は Pd-nano cube に比して水素侵入の際の活性化障壁が低いことが分かった。相対論効果を考慮して作成した反応性力場 ReaxFF を用いた分子動力学計算の結果得られた自己拡散係数の解析データからも、同じ結論が得られた。

また、サブナノサイズ Pt クラスターPt_{12,13}の酸素還元反応触媒(ORR)活性の違いについて、電子構造の揺らぎの観点から理論的考察を行った。第一原理分子動力学・モンテカルロ計算の結果、Pt₁₂ は Pt₁₃ に比べて O/OH を強く吸着する状態と弱く吸着する状態の遷移を起こし易く、触媒被毒が起こりにくいことが明らかとなった。さらに、ナノ合金化による吸着エネルギー揺らぎの制御を試みた。M₄Pt₈ (M = Al, Ga, Ge, Sn)について検討した結果、Ga₄Pt₈ の場合に特に高い ORR 活性が見込まれることがわかった。

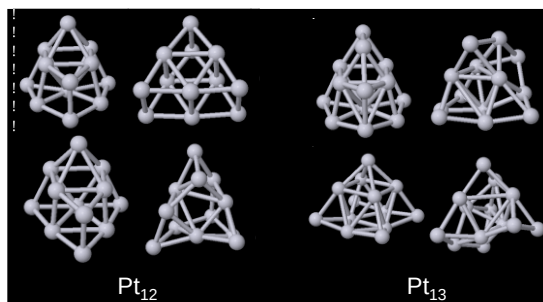


図 8-1. Pt₁₂/Pt₁₃ の安定構造一例

8.2 白色有機 LED 材料の理論設計

本研究では、Pt(II) 錯体の多量体形成メカニズムについて、MCP 法を用いた相対論的量子化学計算により検討した。その結果、高濃度条件において白色発光を示す錯体は、励起状態において多量体形成に有利となる引力的な静電ポテンシャルを有していることを明らかにした。一方、配位子がわずかに異なる白色発光を示さない錯体では、静電ポテンシャルが多量体形成に不利となることを見出した。この成果は、分子間相互作用を利用した白色有機 EL 材料の設計指針となる。

8.3 相対論的モデル内殻ポテンシャル(MCP)法のプログラム開発

MCP 法では化学的に不活性な内殻電子をポテンシャルに置換することで、計算を効率化する。本研究では内殻電子の分極の効果を考慮した新しい MCP 法を開発することで、さらなる高速化を達成した。さらに中井 G との連携により、MCP 法を RAQET に導入した。

9. 開殻 π 電子系材料の電気・光学・磁気物性の理論評価と新規材料設計 (早稲田大学 中井グループ)

(1) 研究のねらい

本チーム間連携研究では、森田 T が合成したトリオキソトリアンギュレン (TOT) などの有機ラジカルおよびその集積体の電気・光学・磁気物性を、中井 G が理論計算により評価する。実験結果と照らし合わせて議論し、諸物性を量子化学的に解析することで森田 T の研究をサポートするとともに、TOT の積層構造 (π 積層ラジカルポリマー) が発現する諸物性の理論評価手法を確立する。さらに、未開発の開殻 π 電子系に対してもその機能を予測することで新たな材料の分子設計指針を築く。

(2) 研究実施方法

本 CREST 研究領域の射場アドバイザーから森田 T の紹介があり、チーム間の打ち合わせ後に連携研究を開始した。その後、研究推進のために本研究課題とは別途に研究費を申請し、博士研究員 1 名を雇用した。森田 T から中井 G に TOT および誘導体の結晶構造、吸収スペクトルなどの実験結果が提供され、それに基づいて中井 G が量子化学計算を行った。中井 G が開発してきた理論も積極的に応用した。定期的にチーム間で進捗状況の報告および研究方針の打ち合わせを行った。新規ラジカルの理論設計については、秋葉欣哉名誉教授 (広島大学) の協力のもとで実施した。

(3) 研究実施内容及び成果

9.1 新規材料の理論設計

本項目では、TOT の分子骨格を拡張した π 共役型の炭化水素ラジカルである「スーパーフェナレニル」を提案した。このラジカルは、不対電子が収容される SOMO やスピン密度が π 共役の内部に分布しているため、水素化によって閉殻分子となる反応はエネルギー的に不利と評価され、炭化水素ラジカルとしては例外的に高い安定性が期待される。また、TOT と同様に縮退した LUMO を有することから、多段階の酸化還元能を有すると予測された。

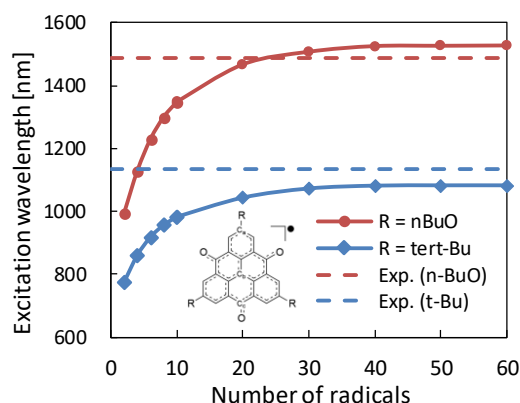


図 9-3. R_3 TOT 多量体の $S_0 \rightarrow S_1$ 励起波長

9.2 光学特性の理論評価

TOT に *tert*-ブチル基や *n*-ブトキシ基を付加した誘導体の結晶は、近赤外光を吸収する。中井 G では、結晶構造から一次元 π 積層カラムをモデル化し、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) による励起状態計算を行った。中井 G で独自に開発したグリーン関数に基づく手法 (DC-TDDFT-GF) を 60 量体までの積層構造に適用したところ、結晶の吸収波長をよく再現し、積層数に関する収束も確認された。近赤外光吸収は π 積層カラムに非局在化した

フロンティア軌道間の電子遷移として解釈され、有機物の新たな長波長吸収機構が明らかとなった。

9.3 電気・磁気物性の理論評価

TOT 誘導体の電氣的性質を解析するために、正孔および電子の移動度を計算した。拘束密度汎関数理論により電子移動過程を取り扱い、マーカス理論を適用することにより移動度を得た。密度汎関数強束縛法によるシミュレーションも行い、熱的ゆらぎにより分子間距離がガウス関数型に分布すること、分子間距離が一様であるときに移動度が最大となる結果を得た。また、様々な配向の TOT 二量体について、磁氣的相互作用を解析した。

10. アミドの水素化触媒の作用機構に関する理論的研究

(北海道大学 長谷川グループ)

(1)研究のねらい

不飽和結合のヒドロシリル化反応は、化学的に重要なだけでなく、工業的にも経済価値が高い。その反応機構の 1 つとして、チョークーハロッド機構が知られている。また、反応系によっては修正チョークーハロッド機構で進行する場合もある。アミドを含むカルボニル化合物に対する Pt 触媒を用いたヒドロシリル化の報告例は少なかったが、永島 T (九州大学) では、2 つの近接 Si-H 基を有するヒドロシランによる反応の進行が見出された。本研究では、量子化学計算による反応メカニズム解明を目指し 2 つの近接 Si-H 基の効果を検討した。

また、カルボニル基のヒドロシリル化についても、エネルギープロファイルに基づいた研究がなされておらず、類推から修正チョークーハロッド機構で進行するものとされてきた。そこで、今回、定説とされる機構のエネルギープロファイルを計算して検証を行うと共に、新しい機構の提案を行った。

(2)研究実施方法

永島 T から提供された実験結果に基づき、長谷川 G が量子化学計算を行い、チーム間連携研究を遂行した。

(3)研究実施内容及び成果

10.1 アミドの水素化触媒反応の理論計算

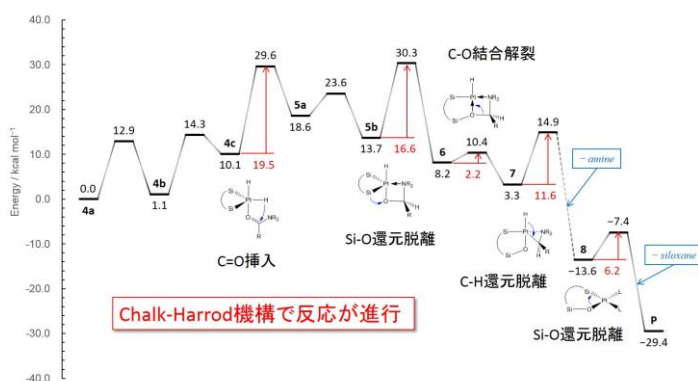


図 10-1. 白金錯体によるアミド結合のヒドロシリル化に関するポテンシャルエネルギープロファイル

は異なる。また、中間体 **4c** における 2 つの Si-H 基のトランス効果による Pt-H 結合の活性化を見出した。

量子化学計算により、鍵中間体 **4c** は特異的な 5 配位構造を有し、C=O 挿入に対して活性であることを見出した。中間体 **4c** はアミドの水素化に有利な配向を有し、チョークーハロッド機構での反応がより有利であることが示された (図 10-1)。これは、従来の Pt 錯体を用いたカルボニル化合物のヒドロシリル化における定説とは異なる。

10.2 ケトンのヒドロシリル化反応の理論計算

また、カルボニル基のヒドロシリル化機構を研究するために、Rh 錯体におけるアセトンのヒドロシリル化反応のエネルギープロファイルを計算により求めた。従来から想定されてきた修正チョークーハロッド機構における律速段階の活性化エネルギーは 40.3 kcal/mol と計算された。これに対し、チョークーハロッド機構については、20.2 kcal/mol と計算され、従来からの想定に反する結果が得られた。この活性化エネルギーの値は、配位子脱離のエネルギーとほぼ同程度であるため、配位子脱離が起きない新しい機構である alternative チョークーハロッド機構と double hydride 機構を検討した。その結果、前者では Rh-H 結合にアセトンが挿入するステップが律速段階（活性化エネルギー 21.5 kcal/mol）になった。後者でも同様のステップが律速段階となったが、活性化エネルギーは 13.7 kcal/mol となり、これまで検討した全ての機構において最もエネルギー障壁の低い反応経路となった。

11. 他プロジェクト研究との連携(早稲田大学 中井グループ)

(1)研究のねらい

CREST「元素戦略」領域以外のプロジェクト研究との共同研究を、当初の計画に追加する形で実施した。共同研究を通して、相対論的電子論が関連する現象を理論的に解析するとともに、相対論を考慮した理論計算の有用性を示すことを目指す。

(2)研究実施方法

研究項目「電場印加触媒によるアンモニア合成反応の理論評価」は、当初中井 G で予定していた研究項目「金属・合金ナノクラスターの外部刺激に対する応答」に対応する。CREST「超空間」領域の関根 T (早稲田大学) は、研究課題「超空間制御触媒による不活性低級アルカンの自在転換」に取り組んでいる。研究項目「有機ホウ素化合物のりん光に関する理論評価」は、福島 G (東京工業大学) と共同で行った。福島 G では、新学術領域「 π 造形科学：電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出」に取り組んでいる。

関根 T、福島 G から提供された実験結果に基づき、中井 G が量子化学計算や第一原理計算を行った。定期的に研究の進捗状況の確認と研究方針の議論に関する打ち合わせの機会を設けた。

(3)研究実施内容及び成果

11.1 電場印加触媒によるアンモニア合成反応の理論評価

関根 G は、種々の不均一系触媒反応において電場印加による触媒活性の飛躍的な向上を見出した。電場印加触媒反応では反応活性化エネルギーが大きく減少し、比較的低温で反応が進行する。Ru によるアンモニア合成反応には、直流電場中に半導体触媒を置くことにより律速段階が変化すること、活性化エネルギーが減少することが示唆された。

中井 G では、電場印加の効果を金属ナノクラスター上への電荷誘起としてモデル化することで電場印加されたアンモニア合成反応を理論的に取り扱った。電場印加により固体表面でプロトンホッピングが起きること、誘起された正電荷によって反応エネルギーが変化し、 N_2H^+ を経由する反応機構が変化することを明らかにした (図 11-1)。

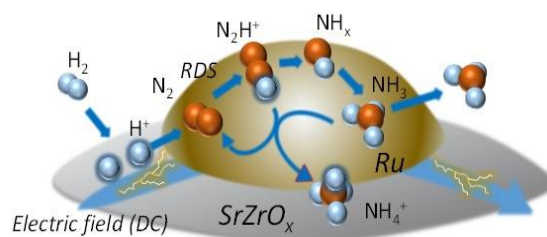


図 11-1. 電場印加触媒によるアンモニア合成反応経路

11.2 有機ホウ素化合物のりん光に関する理論評価

福島 G により、アリールボロン酸エステルの結晶が室温燐光を示すことが発見された。りん光の寿命は数秒オーダーと非常に長い。中井 G の量子化学計算によって、無置換ベンゼンでは発光性を有する T_1 状態の平衡構造は最安定でないのに対し、アリールボロン酸エステルでは最安定となることがわかった (図 11-2)。また、

S_0 - T_1 間のスピン-軌道相互作用の増加も明らかとなった。本成果は、軽元素のみからなる物質でも相対論効果が重要な役割を担う点で興味深く、メタルフリー、重元素フリー燐光材料の開発につながると期待される。

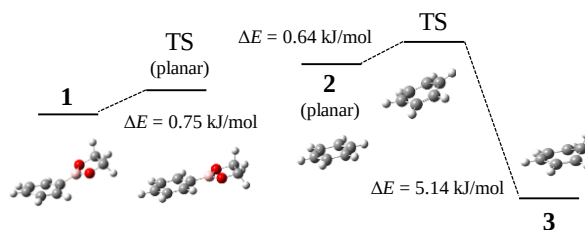


図 11-2. アリールボロン酸と無置換ベンゼンの T_1 状態におけるエネルギーダイアグラム

§ 4 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌13 件、国際 (欧文) 誌 190 件)

国内(和文)誌

(中井グループ)

1. 清野 淳司, 中井 浩巳, “大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発: 元素戦略の理論基盤確立を目指して”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **13** (1), pp. 1-17 (2014) (特集号: 相対論的量子化学-高精度予測と新化学領域の探求) (DOI: 10.2477/jccj.2013-0010).
 2. 高田 雄太, 大越 昌樹, 星野 稔, 石川 敦之, 石川 誠, 中井 浩巳, “Marcus 理論に基づいた DNA の過剰電子輸送に関する理論的研究”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **13** (4), pp. 242-249 (2014) (DOI: 10.2477/jccj.2014-0011).
 3. 大越 昌樹, 中井 浩巳, “キャリアイオンの脱溶媒和過程の理論的解析”, *Electrochem.* **82** (12), pp. 1098-1101 (2014) (DOI: 10.5796/electrochemistry.82.1098).
 4. 西村 好史, 海寶 丈彰, 中井 浩巳, “分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD)法の最近の展開”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **14** (3), pp. 43-46 (2015) (DOI: 10.2477/jccj.2015-0031).
 5. 西川 聖也, 殿井 將史, 吉川 武司, 平井 直志, 中井 浩巳, 大木 義路, “多くの有機高分子に現れる蛍光の電子遷移過程”, *電気学会論文誌A (基礎・材料・共通部門誌)* **136** (4), pp. 205-211 (2016) (DOI: 10.1541/ieejfms.136.205).
 6. 西村 好史, 中井 浩巳, “分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD) 法によるナノスケール系化学反応シミュレーション”, *分子シミュレーション研究会会誌“アンサンブル”*, **18** (2), pp. 95-101 (2016) (DOI: 10.11436/mssj.18.95).
 7. 寺西 慶, 石川 敦之, 中井 浩巳, “CO₂ 化学吸収法に対する計算化学研究: エネルギー・環境問題への挑戦”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15** (2), pp. A15-A29 (2016) (DOI: 10.2477/jccj.2016-0010).
 8. 五十幡 康弘, 中井 浩巳, “核・電子軌道法における原子核軌道エネルギーとプロトン束縛エネルギー計算”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15** (5), pp. 148-154 (2016) (特集号: 量子水素の科学) (DOI: 10.2477/jccj.2016-0011).
 9. 藤波 美起登, 清野 淳司, 中井 浩巳, “量子化学計算情報を記述子とした機械学習に基づく反応予測手法の開発”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15** (3), pp. 63-65 (2016) (DOI: 10.2477/jccj.2016-0040).
 10. 中井 浩巳, “調和溶媒和モデル(HSM)を用いた凝縮系の自由エネルギー計算”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **16** (4), pp. 83-88 (2017).
- (波田グループ)
11. Yuji Imafuku, Minori Abe, Michael W. Schmidt, and Masahiko Hada, “Diagonal Born-Oppenheimer Correction Based on Spin-Free Relativistic Hamiltonians”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **13** (4), pp. 229-232, (2014) (DOI: 10.2477/jccj.2014-0007).
 12. Minori Abe, Tatsuya Suzuki, Yasuhiko Fujii, Masahiko Hada, and Kimihiko Hirao, “Theoretical

Study of Isotope Enrichment Caused by Nuclear Volume Effect”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **13** (1) pp. 92–104 (2014) (特集号: 相対論的量子化学-高精度予測と新化学領域の探求) (DOI: 10.2477/jccj.2013-0015).

13. 菅野 翔平, 今村 穰, 波田 雅彦, “N3 系色素の近赤外線光吸収の理論的設計: スピン禁制励起”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15** (3), pp. 77–78, (2016) (DOI: 10.2477/jccj.2016-0031).

国際(欧文)誌

(中井グループ)

1. Masato Kobayashi and Hiromi Nakai, “An effective energy gradient expression for divide-and-conquer second-order Møller–Plesset perturbation theory”, *J. Chem. Phys.* **138** (4), 044102, pp. 1–11 (2013) (DOI: 10.1063/1.4776228).
2. Yasuhiro Ikabata and Hiromi Nakai, “Assessment of local response dispersion method for open-shell systems”, *Chem. Phys. Lett.* **556**, pp. 386–392 (2013) (DOI: 10.1016/j.cplett.2012.11.088).
3. Takeshi Yoshikawa, Masato Kobayashi, Atsuhiko Fujii, and Hiromi Nakai, “Novel approach to excited-state calculations of large molecules based on divide-and-conquer method: Application to photoactive yellow protein”, *J. Phys. Chem. B* **117** (18), pp. 5565–5573 (2013) (DOI: 10.1021/jp401819d).
4. Yutaka Imamura, Rie Kobayashi, and Hiromi Nakai, “Linearity condition for orbital energies in density functional theory (III): Benchmark of total energies”, *J. Comput. Chem.* **34** (14), pp. 1218–1225 (2013) (DOI: 10.1002/jcc.23243).
5. Yusuke Yamauchi and Hiromi Nakai, “Theoretical study on stability of lithium ion battery in charging process: Analysis based on partial charge and partial energy”, *J. Electrochem. Soc.* **160** (9), pp. A1364–A1368 (2013) (DOI: 10.1149/2.015309jes).
6. Junji Seino and Hiromi Nakai, “Local unitary transformation method toward practical electron correlation calculations with scalar relativistic effect in large-scale molecules”, *J. Chem. Phys.* **139** (3), 034109, pp. 1–15 (2013) (DOI: 10.1063/1.4813595).
7. Masaki Okoshi, Yuki Yamada, Atsuo Yamada, and Hiromi Nakai, “Theoretical analysis on de-solvation of lithium, sodium, and magnesium cations to organic electrolyte solvents”, *J. Electrochem. Soc.* **160** (11), pp. A2160–A2165 (2013) (DOI: 10.1149/2.074311jes).
8. Yasuhiro Ikabata, Kin-ya Akiba, and Hiromi Nakai, “Superphenalenyl: Theoretical design of a π -conjugated planar hydrocarbon radical”, *Chem. Lett.* **42** (11), pp. 1386–1387 (2013) (DOI: 10.1246/cl.130679).
9. Yutaka Imamura, Jun Suzuki, and Hiromi Nakai, “Kinetic energy decomposition scheme based on information theory”, *J. Comput. Chem.* **34** (32), pp. 2787–2795 (2013) (DOI: 10.1002/jcc.23457).
10. Yuya Nakajima, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Analytical energy gradient based on spin-free infinite-order Douglas–Kroll–Hess method with local unitary transformation”, *J. Chem. Phys.* **139** (24), 244107, pp. 1–13 (2013) (DOI: 10.1063/1.4850638).
11. Jonathan Romero, Jorge A. Charry, Hiromi Nakai, and Andres Reyes, “Improving quasiparticle second order electron propagator calculations with the spin-component-scaled technique”, *Chem. Phys. Lett.* **591**, pp. 82–87 (2014) (DOI: 10.1016/j.cplett.2014.05.011).

10.1016/j.cplett.2013.11.013).

12. Junji Seino, Moto Tarumi, and Hiromi Nakai, "Frozen core potential scheme with a relativistic electronic Hamiltonian: Theoretical connection between the model potential and all-electron treatments", *Chem. Phys. Lett.* **592**, pp. 341–348 (2014) (DOI: 10.1016/j.cplett.2013.12.060).
13. Masaki Okoshi, Patchreenart Saparpakorn, Yuta Takada, Supa Hannongbua, and Hiromi Nakai, "Theoretical study on the selective fluorescence of PicoGreen: Binding models and photophysical properties", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87** (2), pp. 267–273 (2014) (DOI: 10.1246/bcsj.20130260).
14. Masaki Okoshi and Hiromi Nakai, "Acceleration of self-consistent field convergence in *ab initio* molecular dynamics simulation with multiconfigurational wave function", *J. Comput. Chem.* **35** (20), pp. 1473–1480 (2014) (DOI: 10.1002/jcc.23617).
15. Masao Hayami, Junji Seino, and Hiromi Nakai, "Extension of accompanying coordinate expansion and recurrence relation method for general-contraction basis sets", *J. Comput. Chem.* **35** (20), pp. 1517–1527 (2014) (DOI: 10.1002/jcc.23646).
16. Hiromi Nakai and Atsushi Ishikawa, "Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry: Proposal of a harmonic solvation model", *J. Chem. Phys.* **141** (17), 174106, pp. 1–9 (2014) (DOI: 10.1063/1.4900629).
17. Yutaka Imamura, Kensei Suzuki, Takeshi Iizuka, and Hiromi Nakai, "Linearity condition for orbital energies in density functional theory (V): Extension to excited state calculations", *Chem. Phys. Lett.* **618**, pp. 30–36 (2015) (DOI: 10.1016/j.cplett.2014.10.065).
18. Daeheum Cho, Kyoung Chul Ko, Yasuhiro Ikabata, Kazufumi Wakayama, Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai, and Jin Yong Lee, "Effect of Hartree–Fock exact exchange on intramolecular magnetic coupling constants of organic diradicals", *J. Chem. Phys.* **142** (2), 024318, pp. 1–7 (2015) (DOI: 10.1063/1.4905561).
19. Takeshi Yoshikawa and Hiromi Nakai, "Linear-scaling self-consistent field calculations based on divide-and-conquer method using resolution-of-identity approximation on graphical processing units", *J. Comput. Chem.* **36** (3), pp. 164–170 (2015) (DOI: 10.1002/jcc.23782).
20. Yasuhiro Ikabata, Yusuke Tsukamoto, Yutaka Imamura, and Hiromi Nakai, "Local response dispersion method in periodic systems: Implementation and assessment", *J. Comput. Chem.* **36** (5), pp. 303–311 (2015) (DOI: 10.1002/jcc.23807).
21. Junji Seino and Hiromi Nakai, "Large-scale two-component relativistic quantum-chemical theory: Combination of the infinite-order Douglas–Kroll–Hess method with the local unitary transformation scheme and the divide-and-conquer method", *Int. J. Quantum Chem.* **115** (5), pp. 253–257 (2015) (DOI: 10.1002/qua.24758).
22. Yasuhiro Ikabata and Hiromi Nakai, "Local response dispersion method: A density-dependent dispersion correction for density functional theory", *Int. J. Quantum Chem.* **115** (5), pp. 309–324 (2015) (DOI: 10.1002/qua.24786).
23. Atsushi Ishikawa and Hiromi Nakai, "Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry (II): Applications to formation and combustion reactions of liquid

- organic molecules”, *Chem. Phys. Lett.* **624**, pp. 6–11 (2015) (DOI: 10.1016/j.cplett.2015.01.054).
24. Takeshi Yoshikawa and Hiromi Nakai, “A divide-and-conquer method with approximate Fermi levels for parallel computations”, *Theor. Chem. Acc.* **134** (5), 53, pp. 1–11 (2015) (DOI: 10.1007/s00214-015-1650-6).
 25. Masao Hayami, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Accompanying coordinate expansion and recurrence relation method using a transfer relation scheme for electron repulsion integrals with high angular momenta and long contractions”, *J. Chem. Phys.* **142** (20), 204110, pp. 1–13 (2015) (DOI: 10.1063/1.4921541).
 26. Masaki Okoshi, Teruo Atsumi, and Hiromi Nakai, “Revisiting the extrapolation of correlation energies to complete basis set limit”, *J. Comput. Chem.* **36** (14), pp. 1075–1082 (2015) (DOI: 10.1002/jcc.23896).
 27. Masaki Okoshi, Atsushi Ishikawa, Yoshiumi Kawamura, and Hiromi Nakai, “Theoretical analysis of the oxidation potentials of organic electrolyte solvents”, *ECS Electrochem. Lett.* **4** (9), pp. A103–A105 (2015) (DOI: 10.1149/2.0051509eel).
 28. Daeheum Cho, Yasuhiro Iwabata, Yoshikawa Yoshikawa, JinYong Lee, and Hiromi Nakai, “Theoretical study of extremely long yet stable carbon-carbon bonds: Effect of attractive C··H interactions and small radical stabilization of diamondoids”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **88** (10), pp. 1636–1641 (2015) (DOI: 10.1246/bcsj.20150264).
 29. Hiromi Nakai, Aditya Wibawa Sakti, and Yoshifumi Nishimura, “Divide-and-conquer-type density-functional tight-binding simulations of proton diffusion in a bulk water system”, *J. Phys. Chem. B* **120** (1), pp. 217–221 (2016) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b12439).
 30. Hiromi Nakai, Yoshifumi Nishimura, Takeaki Kaiho, Takahito Kubota, and Hiroshi Sato, “Contrasting mechanisms for CO₂ absorption and regeneration processes in aqueous amine solutions: Insights from density-functional tight-binding molecular dynamics simulations”, *Chem. Phys. Lett.* **647**, pp. 127–131 (2016) (DOI: 10.1016/j.cplett.2016.01.059).
 31. Atsushi Ishikawa and Hiromi Nakai, “Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry (III): Accurate evaluation of proton hydration energy and standard hydrogen electrode”, *Chem. Phys. Lett.* **650**, pp. 159–164 (2016) (DOI: 10.1016/j.cplett.2016.03.004).
 32. Yuya Nakajima, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Implementation of analytical energy gradient of spin-dependent relativistic scheme based on infinite-order Douglas-Kroll-Hess Hamiltonian with local unitary transformation”, *J. Chem. Theory Comput.* **12** (5), pp. 2181–2190 (2016) (DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00928).
 33. Yuya Nakajima, Junji Seino, Michael W. Schmidt, and Hiromi Nakai, “Implementation of efficient two-component relativistic method using local unitary transformation to GAMESS program”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15** (3), pp. 68–70 (2016) (DOI: 10.2477/jccj.2016-0029).
 34. Libor Veis, Jakub Višňák, Hiroaki Nishizawa, Hiromi Nakai, and Jiří Pittner, “Quantum chemistry beyond Born-Oppenheimer approximation on a quantum computer: a simulated phase estimation study”, *Int. J. Quantum Chem.* **116** (18), pp. 1328–1336 (2016) (DOI: 10.1002/qua.25176).

35. Hiroaki Nishizawa, Yoshifumi Nishimura, Masato Kobayashi, Stephan Irle, and Hiromi Nakai, “Three pillars for achieving quantum mechanical molecular dynamics simulations of huge systems: Divide-and-conquer, density functional tight-binding, and massively parallel computation”, *J. Comput. Chem.* **37** (21), pp. 1983–1992 (2016) (DOI: 10.1002/jcc.24419).
36. Atsushi Ishikawa, Masahiro Kamata, and Hiromi Nakai, “Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry (IV): Solubility of gaseous molecules”, *Chem. Phys. Lett.* **655–656**, pp. 103–109 (2016) (DOI: 10.1016/j.cplett.2016.05.041).
37. Masahiko Nakano, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Assessment of self-consistent field convergence in spin-dependent relativistic calculations”, *Chem. Phys. Lett.* **657**, pp. 65–71 (2016) (DOI: 10.1016/j.cplett.2016.05.047).
38. Junji Seino and Hiromi Nakai, “Informatics-based energy fitting scheme for correlation energy at complete basis set limit”, *J. Comput. Chem.* **37** (25), pp. 2304–2315 (2016) (DOI: 10.1002/jcc.24455).
39. Yusuke Tsukamoto, Yasuhiro Ikabata, Jonathan Romero, Andres Reyes, and Hiromi Nakai, “The divide-and-conquer second-order proton propagator method based on nuclear orbital plus molecular orbital theory for the efficient computation of proton binding energies”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** (39), pp. 27422–27431 (2016) (DOI: 10.1039/C6CP03786K).
40. Hiromi Nakai, Takeshi Yoshikawa, and Yutaro Nonaka, “Efficient pole-search algorithm for dynamic polarizability: Towards alternative excited-state calculation for large systems”, *J. Comput. Chem.* **38** (1), pp. 7–14 (2017) (DOI: 10.1002/10.1002/jcc.24507).
41. Yuya Nakajima, Junji Seino, Masao Hayami, and Hiromi Nakai, “Relativistic frozen core potential scheme with relaxation of core electrons”, *Chem. Phys. Lett.* **663**, pp. 97–103 (2016) (DOI: 10.1016/j.cplett.2016.09.069).
42. Masaki Okoshi, Yuki Yamada, Shinichi Komaba, Atsuo Yamada, and Hiromi Nakai, “Theoretical analysis of interactions between potassium ions and organic electrolyte solvents: A comparison with lithium, sodium, and magnesium ions”, *J. Electrochem. Soc.* **164** (2), pp. A54–A60 (2017) (DOI: 10.1149/2.0211702jes).
43. Masahiko Nakano, Junji Seino, and Hiromi Nakai “Development of spin-dependent relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry (I): The unrestricted approach”, *Int. J. Quantum Chem.* **117** (10), e25356 pp. 1–9 (2017) (DOI: 10.1002/qua.25356).
44. Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, and Hiromi Nakai, “Divide-and-conquer-type density-functional tight-binding simulations of hydroxide ion diffusion in bulk water”, *J. Phys. Chem. B* **121** (6), pp. 1362–1371 (2017) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b10659).
45. Kei Teranishi, Atsushi Ishikawa, Hiroshi Sato, and Hiromi Nakai, “Systematic investigation of thermodynamic properties of amine solvents for CO₂ chemical absorption Using the cluster-continuum model”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **90** (4), pp. 451–460 (2017) (DOI: 10.1246/bcsj.20160375).
46. Yoshiaki Shoji, Yasuhiro Ikabata, Qi Wang, Daisuke Nemoto, Atsushi Sakamoto, Naoki Tanaka, Junji Seino, Hiromi Nakai, and Takanori Fukushima, “Unveiling a new aspect

- of simple aryboronic esters: Long-lived room-temperature phosphorescence from the heavy atom-free molecules”, *J. Am. Chem. Soc.* **139** (7), pp. 2728–2733 (2017) (DOI: 10.1021/jacs.6b11984).
47. Yuya Nakajima, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Relativistic effect on enthalpy of formation for transition-metal complexes”, *Chem. Phys. Lett.* **673**, pp. 24–29 (2017) (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.01.072).
 48. Masahiko Nakano, Ryota Nakamura, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Development of spin-dependent relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry (II): The restricted open-shell approach”, *Int. J. Quantum Chem.* **117** (10), e25366 pp. 1–12 (2017) (DOI: 10.1002/qua.25366).
 49. Masahiko Nakano, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Universal formulation of second-order generalized Møller-Plesset perturbation theory for a spin-dependent two-component relativistic many-electron Hamiltonian”, *Chem. Phys. Lett.* **675**, pp. 137–144 (2017) (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.03.027).
 50. Hiromi Nakai and Takeshi Yoshikawa, “Development of an excited-state calculation method for large systems using dynamical polarizability: A divide-and-conquer approach at the time-dependent density functional level”, *J. Chem. Phys.* **146** (12), pp. 124123, pp. 1–12 (2017) (DOI: 10.1063/1.4978952).
 51. Yasuhiro Ikabata and Hiromi Nakai, “Decomposition of effective exchange integrals of radical dimers using bond energy density analysis”, *Chem. Lett.* **46** (6), pp. 879–882 (2017) (DOI: 10.1246/cl.170208).
 52. Takuro Oyama, Yasuhiro Ikabata, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Relativistic density functional theory with picture-change corrected electron density based on infinite-order Douglas-Kroll-Hess method”, *Chem. Phys. Lett.* **680**, pp. 37–43 (2017) (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.05.023).
 53. Yasuhiro Ikabata, Qi Wang, Takeshi Yoshikawa, Akira Ueda, Tsuyoshi Murata, Kazuki Kariyazono, Miki Moriguchi, Hiroshi Okamoto, Yasushi Morita, and Hiromi Nakai, “Near-infrared absorption of π -stacking columns composed of trioxotriangulene neutral radicals”, *npj Quantum Materials* **2**, 27, pp. 1–7 (2017) (DOI: 10.1038/s41535-017-0033-8).
 54. Ryo Manabe, Hideaki Nakatsubo, Ami Gondo, Kota Murakami, Shuhei Ogo, Hideaki Tsuneki, Masatoshi Ikeda, Atsushi Ishikawa, Hiromi Nakai, and Yasushi Sekine, “Electrocatalytic synthesis of ammonia by surface proton hopping”, *Chem. Sci.* **8**, pp. 5434–5439 (2017) (DOI: 10.1039/c7sc00840f).
 55. Fumiko Deushi, Atsushi Ishikawa, and Hiromi Nakai, “Density functional theory analysis of elementary reactions in NO_x reduction on Rh surface and Rh clusters”, *J. Phys. Chem. C* **121** (28), pp. 15272–15281 (2017) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b04526).
 56. Masahiko Nakano, Takeshi Yoshikawa, So Hirata, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Computerized implementation of higher-order electron-correlation methods and their linear-scaling divide-and-conquer extensions”, *J. Comput. Chem.* **38**, pp. 2520–2527 (2017) (DOI: 10.1002/jcc.24912).
 57. Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Hiroshi Sato, and Hiromi Nakai, “Divide-and-conquer density-functional tight-binding molecular dynamics study on the formation of carbamate ions during CO₂ chemical absorption in amine solutions”, *A.*

- Sakti, Y. Nishimura, H. Sato, H. Nakai, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **90**, pp. 1230–1235 (2017) (DOI:10.1246/bcsj.20170142).
58. Yoshifumi Nishimura and Hiromi Nakai, “Parallel implementation of efficient charge–charge interaction evaluation scheme in periodic divide-and-conquer density-functional tight-binding calculations”, *J. Comput. Chem.* **39**, pp. 105–116 (2017) (DOI: 10.1002/jcc.25086).
 59. Atsushi Ishikawa, Toshiki Doi, and Hiromi Nakai, “Catalytic performance of Ru, Os, and Rh nanoparticles for ammonia synthesis: A density functional theory analysis”, *J. Catal.* **357**, pp. 213–222 (2018) (DOI: 10.1016/j.jcat.2017.11.018).
 60. Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, and Hiromi Nakai, “Rigorous pKa Estimation of Amine Species Using Density-Functional Tight-Binding-Based Metadynamics Simulations”, *J. Chem. Theory Comput.* **14**, 351–356 (2018) (DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00855).
 61. Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Chien-Pin Chou, and Hiromi Nakai, “Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations of Excess Proton Diffusion in Ice Ih, Ice Ic, Ice III, and Melted Ice VI Phases”, *J. Phys. Chem. A* **122** (1), pp. 33–40 (2018) (DOI: 10.1021/acs.jpca.7b10664).
 62. Shuhei Ogo, Hideaki Nakatsubo, Kousei Iwasaki, Ayaka Sato, Kota Murakami, Tomohiro Yabe, Atsushi Ishikawa, Hiromi Nakai, and Yasushi Sekine, “Electron-hopping brings lattice strain and high catalytic activity in low temperature oxidative coupling of methane in an electric field”, *J. Phys. Chem. C* **122** (4), pp. 2089–2096 (2018) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b08994).
 63. Junji Seino, Ryo Kageyama, Mikito Fujinami, Yasuhiro Ikabata, and Hiromi Nakai, “Semi-local machine-learned kinetic energy density functional with third-order gradients of electron density”, *J. Chem. Phys.* **148**, 241705, pp. 1–13 (2018) (DOI: 10.1063/1.5007230).
 64. Masaki Okoshi, Chien-Pin Chou, and Hiromi Nakai, “Theoretical Analysis of Carrier Ion Diffusion in Superconcentrated Electrolyte Solutions for Sodium-Ion Batteries”, *J. Phys. Chem. B* **122** (9), pp. 2600–2609 (2018) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b10589).
 65. Masao Hayami, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Gauge-origin independent formalism of two-component relativistic framework based on unitary transformation in nuclear magnetic shielding constant”, *J. Chem. Phys.* **148**, 114109 pp. 1–8 (2018).
- (波田グループ)
66. Akihiro Takahashi, Daisuke Yamaki, Kenichiro Ikemura, Takuya Kurahashi, Takashi Ogura, Masahiko Hada, and Hiroshi Fujii, “Effect of the axial ligand on the reactivity of the oxoiron(IV) porphyrin π -cation radical complex: Higher stabilization of the product state relative to the reactant state”, *Inorg. Chem.* **51** (13), pp.7296–7305 (2012) (DOI: 10.1021/ic3006597).
 67. Masatoshi Kajita, Geetha Gopakumar, Minori Abe, and Masahiko Hada, “Accuracy estimations of overtone vibrational transition frequencies of optically trapped $^{174}\text{Yb}^6\text{Li}$ molecules”, *Phys. Rev. A* **85** (6), 062519 pp. 1–8 (2012) (DOI: 10.1103/PhysRevA.85.062519).
 68. Terutaka Yoshizawa and Masahiko Hada, “The Douglas-Kroll-Hess method based on vector-potential-including Foldy-Wouthuysen transformation: Application to NMR

- shielding tensor”, *Chem. Phys. Lett.* **580**, pp. 145–151 (2013) (DOI: 10.1016/j.cplett.2013.06.036).
69. Masatoshi Kajita, Geetha Gopakumar, Minoru Abe, and Masahiko Hada, “Sensitivity of vibrational spectroscopy of optically trapped SrLi and CaLi molecules to variations in m_p/m_e ”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **46**, 025001, pp. 1–5 (2013) (DOI: 10.1088/0953-4075/46/2/025001).
 70. Chunlan Wang, Takuya Kurahashi, Kensuke Inomata, Masahiko Hada, and Hiroshi Fujii, “Oxygen-Atom Transfer from Iodosylarene Adducts of a Manganese(IV) Salen Complex: Effect of Arenes and Anions on I(III) of the Coordinated Iodosylarene”, *Inorg. Chem.* **52** (16), pp. 9557–9566 (2013) (DOI: 10.1021/ic401270j).
 71. Masaichi Saito, Tomoki Akiba, Misumi Kaneko, Toshiaki Kawamura, Minoru Abe, Masahiko Hada, and Mao Minoura, “Synthesis, Structure, and Reactivity of Lewis Base Stabilized Plumbacyclopentadienylidenes”, *Chem. A Euro. J.* **19**, pp. 16946–16953 (2013) (DOI: 10.1002/chem.201303672).
 72. Geetha Gopakumar, Minoru Abe, Masahiko Hada, and Masatoshi Kajita, “Ab initio study of ground and excited states of ${}^6\text{Li}^{40}\text{Ca}$ and ${}^6\text{Li}^{88}\text{Sr}$ molecules”, *J. Chem. Phys.* **138** (19), 194307, pp. 1–14, (2013) (DOI: 10.1063/1.4804622).
 73. Toshiyuki Fujii, Frédéric Moynier, Arnaud Agranier, Emmanuel Ponzevera, Minoru Abe, Akihiro Uehara, and Hajimu Yamana, “Nuclear field shift effect in isotope fractionation of thallium”, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* **296** (1), pp. 261–265 (2013) (DOI: 10.1007/s10967-012-2181-4).
 74. Toshiyuki Fujii, Frédéric Moynier, Minoru Abe, Keisuke Nemoto, and Francis Albarède, “Copper isotope fractionation between aqueous compounds relevant to low temperature geochemistry and biology”, *Geochim. Cosmochim. Acta* **110**, pp. 29–44 (2013) (DOI: 10.1016/j.gca.2013.02.007).
 75. Takuya Kurahashi, Masahiko Hada, and Hiroshi Fujii, “Di- μ -oxo Dimetal Core of MnIV and TiIV as a Linker Between Two Chiral Salen Complexes Leading to the Stereoselective Formation of Different M- and P- Helical Structures”, *Inorg. Chem.* **53** (2), pp. 1070–1079 (2014) (DOI: 10.1021/ic402572h).
 76. Masatoshi Kajita and Geetha Gopakumar, “Test of m_p/m_e changes using vibrational transitions in N_2^+ ”, *Phys. Rev. A* **89** (3), 032509 pp. 1–6 (2014) (DOI: 10.1103/PhysRevA.89.032509).
 77. Toshiaki Kawamura, Minoru Abe, Masaichi Saito, and Masahiko Hada, “Quantum-Chemical Analyses of Aromaticity, UV Spectra, and NMR Chemical Shifts in Plumbacyclopentadienylidenes Stabilized by Lewis Bases”, *J. Comput. Chem.* **35** (11), pp. 847–853 (2014) (DOI: 10.1016/j.jms.2014.03.009).
 78. Masatoshi Kajita, Geetha Gopakumar, Minoru Abe, and Masahiko Hada, “Characterizing the variation in the proton-to-electron mass ratio via precise measurement of molecular vibrational transition frequencies”, *J. Mol. Spectroscopy* **300**, pp. 99–107 (2014) (DOI: 10.1016/j.jms.2014.03.009).
 79. Keisuke Nemoto, Minoru Abe, Junji Seino, and Masahiko Hada, “Ab Initio Study of Nuclear Volume Effects for Isotope Fractionations Using Two-Component Relativistic Methods”, *J. Comput. Chem.* **36** (11), pp. 816–820 (2015) (DOI: 10.1002/jcc23858).

80. Geetha Gopakumar, Minoru Abe, Masahiko Hada, and Masatoshi Kajita, “Dipole polarizability of alkali-metal (Na, K, Rb)–alkaline-earth-metal (Ca, Sr) polar molecules: Prospects for alignment”, *J. Chem. Phys.* **140**, 224303, pp. 1–8 (2014) (DOI: 10.1063/1.4881396).
81. V. S. Prasanna, Minoru Abe, and Bhanu Pratap Das, “Permanent electric dipole moment of strontium monofluoride as a test of the accuracy of a relativistic coupled-cluster method”, *Phys. Rev. A* **90**, 052507, pp. 1–5 (2014) (DOI: 10.1103/PhysRevA.90.052507).
82. Minoru Abe, Geetha Gopakumar, Masahiko Hada, Bhanu Pratap Das, Hiroshi Tatewaki, and Devashis Mukherjee, “Application of a Relativistic Coupled-Cluster Theory to the Effective Electric Field in YbF”, *Phys. Rev. A* **90**, 022501, pp. 1–5 (2014) (DOI: 10.1103/PhysRevA.90.022501).
83. Terutaka Yoshizawa and Masahiko Hada, “Gauge-origin dependence of NMR shielding constants in the Douglas-Kroll-Hess method”, *Chem. Phys. Lett.* **618**, pp. 132–141 (2015) (DOI: 10.1016/j.cplett.2014.10.066).
84. Srinivasa V. Prasanna, Amar. C. Vutha, Minoru Abe, and Bhanu Pratap Das, “Mercury Monohalides: Suitability for Electron Electric Dipole Moment Searches”, *Phys. Rev. Lett.* **114** (18), 183001, pp. 1–6 (2015) (DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.183001).
85. Radhika Narayanan, Kensuke Inomata, Geetha Gopakumar, Bhalamurugan Sivaraman, Yasunari Zempo, and Masahiko Hada, “Theoretical study of the infrared frequencies of crystalline methyl acetate under interstellar medium condition”, *Spectrochim. Acta Mol. Biomol. Spectrosc.* **153** (11), pp. 415–421 (2016) (DOI: 10.1016/j.saa.2015.08.049).
86. Hiroshi Fujii, Daisuke Yamaki, Takashi Ogura, and Masahiko Hada, “The functional role of the structure of the dioxo-isobacteriochlorin in the catalytic site of cytochrome cd1 for the reduction of nitrite”, *Chem. Sci.* **7** (4), pp. 2896–2906 (2016) (DOI: 10.1039/c5sc04825g).
87. Ayaki Sunaga, Minoru Abe, Masahiko Hada, and Bhanu Pratap Das, “Relativistic coupled-cluster calculation of the electron-nucleus scalar-pseudoscalar interaction constant W_s in YbF”, *Phys. Rev. A* **93** (4), 042507 pp. 1–7 (2016) (DOI: 10.1103/PhysRevA.93.042507).
88. V. S. Prasanna, S. Sreerekha, Minoru Abe, Vishnu Mayya Bannur, and Bhanu Pratap Das, “Permanent electric dipole moments of alkaline-earth-metal monofluorides: Interplay of relativistic and correlation effects”, *Phys. Rev. A* **93** (4), 042504 pp. 1–7 (2016) (DOI: 10.1103/PhysRevA.93.042504).
89. Shohei Kanno, Yutaka Imamura, and Masahiko Hada, “Design of Spin-Forbidden Transitions for Polypyridyl Metal Complexes by Time-dependent Density Functional Theory Including Spin-orbit Interaction”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, pp. 14466–14478 (2016) (DOI: 10.1039/C6CP01461E).
90. Miyako Hada, Nobutaka Shioya, Takafumi Shimoaka, Kazuo Eda, Masahiko Hada, and Takeshi Hasegawa, “Comprehensive Understanding of Structure-Controlling Factors of a Zinc Tetraphenylporphyrin Thin Film Using pMAIR and GIXD Techniques”, *Chem. Eur. J. A* **22**, pp.16539–16546 (2016) (DOI: 10.1002/chem.201603291).
91. Yuji Imafuku, Minoru Abe, Michael W. Schmidt, and Masahiko Hada, “Heavy Element Effects in the Diagonal Born-Oppenheimer Correction within a Relativistic Spin-free

- Hamiltonian”, *J. Phys. Chem. A*, **120** (13), pp. 2150–2159 (2016) (DOI: 10.1021/acs.jpca.6b01507).
92. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Hiroshi Sakiyama, and Masahiko Hada, “Correlating magnetic exchange in dinuclear bis(phenolate)-bridged complexes: A computational perspective”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **89** (6), pp. 657–665 (2016) (DOI: 10.1246/bcsj.20160077).
 93. Radhika Narayanan, Archana Velloth, Takuya Kurahashi, Hiroshi Fujii, and Masahiko Hada, “The Origin of Relative Stability of Di- μ -oxo M-M Chiral Salen Complexes (M-M = Ti (IV)-Ti(IV), V(IV)-V(IV), Cr(IV)-Cr(IV) and Mn(IV)-Mn(IV)): A Quantum-Chemical Analysis”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **89** (4), pp. 447–454 (2016) (DOI: 10.1246/bcsj.20150393).
 94. Ayaki Sunaga, Minori Abe, Masahiko Hada, and Bhanu Pratap Das, “Analysis of large effective electric fields of weakly polar molecules for electron electric-dipole-moment searches”, *Phys. Rev. A* **95** (1), 012502, pp. 1–6 (2017) (DOI: 10.1103/PhysRevA.95.012502).
 95. Marisa Nakada, Takuya Kuwabara, Shunsuke Furukawa, Masahiko Hada, Mao Minoura, and Masaichi Saito, “Synthesis and Reactivity of a Ruthenocene-type Complex Bearing an Aromatic π -Ligand with the Heaviest Group 14 Element”, *Chem. Sci.* **8**, pp. 3092–3097 (DOI: 10.1039/C6SC04843A).
 96. V. S. Prasanna, Minori Abe, and Bhanu Pratap Das, “The role of molecular electric dipole moments of mercury monohalides in the search for the electron electric dipole moment”, *Asian J. of Phys.* **25** (10), pp.1259–1266 (2016).
 97. V. S. Prasanna, M. Abe, V. M. Bannur, and Bhanu Pratap Das, “Theoretical analysis of effective electric fields in mercury monohalides”, *Phys. Rev. A* **95** (4), 042513, pp. 1–6 (2017) (DOI: 10.1103/PhysRevA.95.042513).
 98. Shohei Kanno, Yutaka Imamura, Akinori Saeki, and Masahiko Hada, “Rotational Energy Barriers and Relaxation Times of the Organic Cation in Cubic Methylammonium Lead/Tin Halide Perovskites from First Principles”, *J. Phys. Chem. C* **121** (26), pp. 14051–14059 (2017) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b04589l).
 99. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Takeshi Kodama, and Masahiko Hada, “Theoretical Insights into the Electronic Structures and Stability of Dimetallofullerenes $M_2@Ih-C_{80}$ ”, *J. Phys. Chem. C* **121** (33), pp. 18169–18177 (2017) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b03533).
 100. Yutaka Imamura, Motomichi Tashiro, Michio Katouda, Masahiko Hada, “Automatic High-Throughput Screening Scheme for Organic Photovoltaics: Estimating the Orbital Energies of Polymers from Oligomers and Evaluating the Photovoltaic Characteristics”, *J. Phys. Chem. C* **121** (51), pp. 28275–28286 (2017) (DOI:10.1021/acs.jpcc.7b08446).
- (中嶋グループ)
101. Kazuhiro Uehara, Takuya Miyachi, Takahito Nakajima, and Noritaka Mizuno, “Effects of heteroatoms on electronic states of divanadium-substituted γ -Keggin-type polyoxometalates”, *Inorg. Chem.* **53** (7), pp. 3907–3918 (2014) (DOI: 10.1021/ic5005209).
 102. Kosei Sugahara, Naoto Satake, Keigo Kamata, Takahito Nakajima, and Noritaka Mizuno, “A basic germanodecatungstate with a -7 charge: Efficient chemoselective acylation of primary alcohols”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (48), pp. 13248–13252 (2014) (DOI: 10.1002/anie.201405212).

103. Yutaka Imamura, Muneaki Kamiya, and Takahito Nakajima, “Two-component relativistic time-dependent density functional theory study on spin-forbidden transitions for metal polypyridyl complexes”, *Chem. Phys. Lett.* **635**, pp. 152–156 (2015) (DOI: 10.1016/j.cplett.2015.06.057).
 104. Tomomi Shimazaki and Takahito Nakajima, “Theoretical study of exciton dissociation through hot states at donor-acceptor interface in organic photocell”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 12538, pp. 1–27 (2015) (DOI: 10.1039/C5CP00740B).
 105. Yutaka Imamura, Muneaki Kamiya, and Takahito Nakajima, “Two-component relativistic time-dependent density functional theory study on spin-forbidden transitions for metal polypyridyl complexes”, *Chem. Phys. Lett.* **635**, pp. 152–156 (2015) (DOI: 10.1016/j.cplett.2015.06.057).
 106. Yutaka Imamura, Muneaki Kamiya, and Takahito Nakajima, “Theoretical study on spin-forbidden transitions of osmium complexes by two-component relativistic time-dependent density functional theory”, *Chem. Phys. Lett.* **648**, pp. 60–65 (2016) (DOI: 10.1016/j.cplett.2016.01.018).
 107. Tomomi Shimazaki and Takahito Nakajima, “Theoretical study on the cooperative exciton dissociation process based on dimensional and hot charge-transfer state effects in an organic photocell”, *J. Chem. Phys.* **144**, 234906, pp. 1–8 (2016) (DOI: 10.1063/1.4953905).
 108. Tomomi Shimazaki and Takahito Nakajima, “Application of the dielectric-dependent screened exchange potential approach to organic photocell materials”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, pp. 27554–27563 (2016) (DOI: 10.1039/C6CP04863C).
 109. Takahito Nakajima, “An extrapolation scheme for solid-state NMR chemical shift calculations”, *Chem. Phys. Lett.* **677**, pp. 99–106 (2017) (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.04.013).
 110. Tomomi Shimazaki and Takahito Nakajima, “A theoretical study on hot charge-transfer states and dimensional effects of organic photocells based on the ideal diode model”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, pp. 12517–12526 (2017) (DOI: 10.1039/C7CP01455D).
 111. Takehiro Yonehara and Takahito Nakajima, “A quantum dynamics method for excited electrons in molecular aggregate system using a group diabatic Fock matrix”, *J. Chem. Phys.* **147**, 074110, pp. 1–14 (2017) (DOI: 10.1063/1.4998746).
 112. Shinsuke Sano, Takashi Kawakami, Shohei Yoshimura, Mitsuo Shoji, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, Takahito Nakajima, and Kizashi Yamaguchi, “Ab initio computations of zero-field splitting parameters and effective exchange integrals for single-molecule magnets (Mn_{12}^- and Mn_{11}Cr -acetate clusters)”, *Polyhedron* **136**, pp. 159–169 (2017) (DOI: 10.1016/j.poly.2017.03.047).
- (長谷川グループ)
113. Jun-ya Hasegawa, “Fragment-based configuration interaction wave function to calculate environmental effect on excited states in proteins and solutions”, *Chem. Phys. Lett.* **571**, pp. 77–81 (2013) (DOI: 10.1016/j.cplett.2013.03.082).
 114. Fu-Quan Bai, Naoki Nakatani, Akira Nakayama, and Jun-ya Hasegawa, “Excited states of a significantly ruffled porphyrin: Computational study on structure-induced rapid decay mechanism via intersystem crossing”, *J. Phys. Chem. A* **118** (23), pp. 4184–4194 (2014) (DOI: 10.1021/jp502349h).

115. Jun-ya Hasegawa, Kazuma Yanai, and Kazuya Ishimura, "Quantum mechanical molecular interactions for calculating the excitation energy in molecular environments: A first-order interacting space approach", *ChemPhysChem* **16** (2), pp. 305–311 (2015) (DOI: 10.1002/cphc.201402635).
116. Sundaram Arulmozhiraja, Naoki Nakatani, Akira Nakayama, and Jun-ya Hasegawa, "Energy dissipative photoprotective mechanism of carotenoid spheroidene from the photoreaction center of purple bacteria *Rhodobacter sphaeroides*", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (36), pp. 23468–23480 (2015) (DOI: 10.1039/C5CP03089G).
117. Naoki Nakatani, Jun-ya Hasegawa, Yusuke Sunada, and Hideo Nagashima, "Platinum-catalyzed reduction of amides with hydrosilanes bearing dual Si–H groups: a theoretical study of the reaction mechanism", *Dalton Trans.* **44**, pp. 19344–19356 (2015) (DOI: 10.1039/C5DT02767E).
118. Roberto Olivares-Amaya, Weifeng Hu, Naoki Nakatani, Sandeep Sharma, Jun Yang, and Garnet Kin-Lic Chan, "The ab-initio density matrix renormalization group in practice", *J. Chem. Phys.* **142** (3), 034102, pp. 1–13 (2015) (DOI: 10.1063/1.4905329).
119. Yuya Kitagawa, Yue Chen, Naoki Nakatani, Akira Nakayama, and Jun-ya. Hasegawa, "A DFT and multi-configurational perturbation theory study on O₂ binding to a model heme compound via the spin-change barrier", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** (27), pp. 18137–18144 (2016) (DOI: 10.1039/C6CP02329K).
120. K-jiro Watanabe, Naoki Nakatani, Akira Nakayama, Masahiro Higashi, and Jun-ya Hasegawa, "Spin-Blocking Effect in CO and H₂ Binding Reactions to Molybdenocene and Tungstenocene: A Theoretical Study on the Reaction Mechanism via the Minimum Energy Intersystem Crossing Point", *Inorg. Chem.* **55** (16), pp. 8082–8090 (2016) (DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b01187).
121. Garnet Kin-Lic Chan, Anna Keselman, Naoki Nakatani, Zhendong Li, and Steven R. White, "Matrix product operators, matrix product states, and ab initio density matrix renormalization group algorithms", *J. Chem. Phys.* **145** (1), 014102, pp. 1–15 (2016) (DOI: 10.1063/1.4955108).
122. Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, Akira Nakayama, Michael W. Schmidt, Mark S. Gordon, and Jun-ya Hasegawa, "Electronic Polarization Effect of the Water Environment in Charge-Separated Donor-Acceptor Systems: An Effective Fragment Potential Model Study", *J. Phys. Chem. A* **120** (51), pp. 10273–10280 (2016) (DOI: 10.1021/acs.jpca.6b10552).
123. Yue Chen, Jun-ya Hasegawa, Kazuya Yamaguchi, and Shigeyoshi Sakaki, "A Coordination Strategy to Realize a Sextuply Bonded Complex", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19** (23), pp. 14947–14954 (2017) (DOI: 10.1039/C7CP00871F).
124. Viktor Kovalskii, Alexander Shubin, Yue Chen, Dmitrii Ovchinnikov, Sergey Ruzankin, Jun-ya Hasegawa, Igor Zilberberg, Valentin N. Parmon, "Hidden radical reactivity of the [FeO]²⁺ group in the H-abstraction from methane: DFT and CASPT2 supported mechanism by the example of model iron (hydro) oxide species", *Chem. Phys. Lett.* **679**, pp. 193–199 (2017) (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.05.002).
125. Hassan Nageh, Liming Zhao, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa, Yue Wang, and Tamaki Nakano, "Photo-induced β -Elimination of 9-Fluorenylmethanol Leading to Dibenzofulvene", *Chem. Commun.* **53** (60), pp. 8431–8434 (2017) (DOI: 10.1039/C7CC00871F).

10.1039/C7CC03297H).

126. Naoki Nakatani and Sheng Guo, “Density matrix renormalization group (DMRG) method as a common tool for large active-space CASSCF/CASPT2 calculations”, *J. Chem. Phys.* **146** (9), 094102, pp. 1–11, (2017) (DOI: 10.1063/1.4976644).
127. Akihiro Kimura, Haruka Hayama, Jun-ya Hasegawa, Hassan Nageh, Yue Wang, Naofumi Naga, Mayumi Nishida, and Tamaki Nakano, “Recyclable and Efficient Polyurethane-Ir Catalysts for Direct Borylation of Aromatic Compounds”, *Polym. Chem.* **8** (47), pp. 7406–7415 (2017) (DOI: 10.1039/C7PY01509G).
128. K. Oohora, H. Meichin, L. Zhao, M. Wolf, A. Nakayama, J. Hasegawa, N. Lehnert, and T. Hayashi, “Catalytic Cyclopropanation by Myoglobin Reconstituted with Iron Porphycene: Acceleration of Catalysis due to Rapid Formation of the Carbene Species”, *J. Am. Chem. Soc.* **139** (48), pp. 17265–17268 (2017) (DOI: 10.1021/jacs.7b10154).
129. S. Tanaka, T. Nakashima, T. Maeda, M. Ratanasak, J. Hasegawa, Y. Kon, M. Tamura, K. Sato, “Quaternary Alkyl Ammonium Salt-Catalyzed Transformation of Glycidol to Glycidyl Esters by Transesterification of Methyl Esters”, *ACS Catal.* **8** (2), pp. 1097–1103 (2018) (DOI: 10.1021/acscatal.7b03303).
- (平田グループ)
130. Soohaeng Yoo Willow, Kwang S. Kim, and So Hirata, “Stochastic evaluation of second-order Dyson self-energies”, *J. Chem. Phys.* **138** (16), 164111, pp. 1–5 (2013) (DOI: 10.1063/1.4801862).
131. So Hirata and Xiao He, “On the Kohn–Luttinger conundrum”, *J. Chem. Phys.* **138** (20), 204112, pp. 1–13 (2013) (DOI: 10.1063/1.4807496).
132. Matthew R. Hermes and So Hirata, “Second-order many-body perturbation expansions of vibrational Dyson self-energies”, *J. Chem. Phys.* **139** (3), 034111, pp. 1–21 (2013) (DOI: 10.1063/1.4813123).
133. Matthew R. Hermes and So Hirata, “First-order Dyson coordinates and geometry”, *J. Phys. Chem. A* **117** (32), pp. 7179–7189 (2013) (DOI: 10.1021/jp4008834).
134. Soohaeng Yoo Willow, Matthew R. Hermes, Kwang S. Kim, and So Hirata, “Convergence acceleration of parallel Monte Carlo second-order many-body perturbation calculations using redundant walkers”, *J. Chem. Theory Comput.* **9** (10), pp. 4396–4402 (2013) (DOI: 10.1021/ct400557z).
135. Jinjin Li, Olaseni Sode, Gregory A. Voth, and So Hirata, “A solid–solid phase transition in carbon dioxide at high pressures and intermediate temperatures”, *Nature Comm.* **4**, 2647, pp. 1–7 (2013) (DOI: 10.1038/ncomms3647).
136. Tomonori Yamada, Ryan P. Brewster, and So Hirata, “Asymptotic expansion of two-electron integrals and its application to Coulomb and exchange lattice sums in metallic, semimetallic, and nonmetallic crystals”, *J. Chem. Phys.* **139** (18), 184107, pp. 1–13 (2013) (DOI: 10.1063/1.4828796).
137. Soohaeng Yoo Willow and So Hirata, “Stochastic, real-space, imaginary-time evaluation of third-order Feynman–Goldstone diagrams”, *J. Chem. Phys.* **140** (2), 024111, pp. 1–7 (2014) (DOI: 10.1063/1.4861561).
138. Xiao He, Shinsei Ryu, and So Hirata, “Finite-temperature second-order many-body perturbation and Hartree–Fock theories for one-dimensional solids: An application to

- Peierls and charge-density-wave transitions in conjugated polymers”, *J. Chem. Phys.* **140** (2), 024702, pp. 1–7 (2014) (DOI: 10.1063/1.4859257).
139. Soohaeng Yoo Willow, Jinmei Zhang, Edward F. Valeev, and So Hirata, “Communication: Stochastic evaluation of explicitly correlated second-order many-body perturbation energy”, *J. Chem. Phys.* **140** (3), 031101, pp. 1–4 (2014) (DOI: 10.1063/1.4862255).
 140. So Hirata, Xiao He, Matthew R. Hermes, and Soohaeng Y. Willow, “Second-order many-body perturbation theory: An eternal frontier”, *J. Phys. Chem. A* **118** (4), pp. 655–672 (2014) (DOI: 10.1021/jp410587b).
 141. So Hirata and Ireneusz Grabowski, “On the mutual exclusion of variationality and size consistency”, *Theor. Chem. Acc.* **133** (3), 1440, pp. 1–9 (2014) (DOI: 10.1007/s00214-013-1440-y).
 142. Kandis Gilliard, Olaseni Sode, and So Hirata, “Second-order many-body perturbation and coupled-cluster singles and doubles study of ice VIII”, *J. Chem. Phys.* **140** (17), 174507, pp. 1–9 (2014) (DOI: 10.1063/1.4873919).
 143. So Hirata, Olaseni Sode, Murat Keçeli, Kiyoshi Yagi, and Jinjin Li, “Response to ‘Comment on ‘Fermi resonance in solid CO₂ under pressure’” [*J. Chem. Phys.* **140**, 177101 (2014)]”, *J. Chem. Phys.* **140** (17), 177102, pp. 1–2 (2014) (DOI: 10.1063/1.4873692).
 144. Zhuangfei Kou and So Hirata, “Finite-temperature full configuration interaction”, *Theor. Chem. Acc.* **133** (6), 1487, pp. 1–9 (2014) (DOI: 10.1007/s00214-014-1487-4).
 145. Matthew R. Hermes and So Hirata, “Stochastic many-body perturbation theory for anharmonic molecular vibrations”, *J. Chem. Phys.* **141** (8), 084105, pp. 1–17 (2014) (DOI: 10.1063/1.4892614).
 146. So Hirata, Kandis Gilliard, Xiao He, Jinjin Li, and Olaseni Sode, “Ab initio molecular crystal structures, spectra, and phase diagrams”, *Acc. Chem. Res.* **47** (9), pp. 2721–2730 (2014) (DOI: 10.1021/ar500041m).
 147. So Hirata and Matthew R. Hermes, “Normal-ordered second-quantized Hamiltonian for molecular vibrations”, *J. Chem. Phys.* **141** (18), 184111, pp. 1–7 (2014) (DOI: 10.1063/1.4901061).
 148. Soohaeng Yoo Willow, Kwang S. Kim, and So Hirata, “Brueckner-Goldstone quantum Monte Carlo for correlation energies and quasiparticle energy bands of one-dimensional solids”, *Phys. Rev. B* **90** (20), 201110, pp. 1–5 (2014) (DOI: 10.1103/PhysRevB.90.201110).
 149. Matthew R. Hermes and So Hirata, “Stochastic algorithm for size-extensive vibrational self-consistent field methods on fully anharmonic potential energy surfaces”, *J. Chem. Phys.* **141** (24), 244111, pp. 1–11 (2014) (DOI: 10.1063/1.4904220).
 150. Jinjin Li, Olaseni Sode, and So Hirata, “Second-order many-body perturbation study on thermal expansion of solid carbon dioxide”, *J. Chem. Theory Comput.* **11** (1), pp. 224–229 (2015) (DOI: 10.1021/ct500983k).
 151. Matthew R. Hermes and So Hirata, “Diagrammatic theories of anharmonic molecular vibrations”, *Int. Rev. Phys. Chem.* **34** (1), pp. 71–97 (2015) (DOI: 10.1080/10407179.2015.1055555).

10.1080/0144235X.2014.1001220).

152. So Hirata, Matthew R. Hermes, Jack Simons, and J. V. Ortiz, “General-order many-body Green’s function method”, *J. Chem. Theory Comput.* **11** (4), pp. 1595–1606 (2015) (DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00005).
153. Matthew R. Hermes and So Hirata, “Finite-temperature coupled-cluster, many-body perturbation, and restricted and unrestricted Hartree–Fock study on one-dimensional solids: Luttinger liquids, Peierls transitions, and spin- and charge-density waves”, *J. Chem. Phys.* **143** (10), 102818, pp. 1–11 (2015) (DOI: 10.1063/1.4930024).
154. Tomonori Yamada and So Hirata, “Singlet and triplet instability theorems”, *J. Chem. Phys.* **143** (11), 114112, pp. 1–7 (2015) (DOI: 10.1063/1.4929354).
155. Soohaeng Y. Willow, Michael A. Salim, Kwang S. Kim, and So Hirata, “Ab initio molecular dynamics of liquid water using embedded-fragment second-order many-body perturbation theory towards its accurate property prediction”, *Sci. Rep.* **5**, 14358, pp. 1–14 (2015) (DOI: 10.1038/srep14358).
156. Jacob A. Fauchaux and So Hirata, “Higher-order diagrammatic vibrational coupled-cluster theory”, *J. Chem. Phys.* **143** (13), 134105, pp. 1–21 (2015) (DOI: 10.1063/1.4931472).
157. Soohaeng Yoo Willow, Xiao Cheng Zeng, Sotiris S. Xantheas, Kwang S. Kim, and So Hirata, “Why Is MP2-Water “Cooler” and “Denser” than DFT-Water?”, *J. Phys. Chem. Lett.* **7** (4), pp. 680–684 (2016) (DOI: 10.1021/acs.jpclett.5b02430).
158. Michael A. Salim, Soohaeng Y. Willow, and So Hirata, “Ice Ih anomalies: Thermal contraction, anomalous volume isotope effect, and pressure-induced amorphization”, *J. Chem. Phys.* **144** (20), 204503, pp. 1–12 (2016) (DOI: 10.1063/1.4951687).
159. So Hirata, Toru Shiozaki, Cole M. Johnson, and James D. Talman, “Numerical solution of the Sinanoğlu equation using a multicentre radial-angular grid”, *Mol. Phys.*, **115** (5), pp. 510–525 (2017) (DOI: 10.1080/00268976.2016.1199822).
160. Alexander E. Doran and So Hirata, “Monte Carlo MP2 on many graphical processing units.”, *J. Chem. Theory Comput.* **12** (10), pp. 4821–4832 (2016) (DOI: 10.1021/acs.jctc.6b00588).
161. Cole M. Johnson, Alexander E. Doran, Jinmei Zhang, Edward F. Valeev, and So Hirata, “Monte Carlo explicitly correlated second-order many-body perturbation theory”, *J. Chem. Phys.* **145** (15), 154115, pp. 1–19 (2016) (DOI: 10.1063/1.4964854).
162. Cole M. Johnson, So Hirata, and Sei-ichiro Ten-no, “Explicit correlation factors”, *Chem. Phys. Lett.* **683**, pp. 247–252 (2017) (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.02.072).
163. So Hirata, Alexander E. Doran, Peter J. Knowles, and J. V. Ortiz, “One-particle many-body Green’s function theory: Algebraic recursive definitions, linked-diagram theorem, irreducible-diagram theorem, and general-order algorithms”, *J. Chem. Phys.* **147**, 044108, pp. 1–31 (2017) (DOI: 10.1063/1.4994837).
164. Masahiko Nakano, Takeshi Yoshikawa, So Hirata, Junji Seino, and Hiromi Nakai, “Computerized implementation of higher-order electron-correlation methods and their linear-scaling divide-and-conquer extensions”, *J. Comput. Chem.*, **38**, pp. 2520–2527 (2017) (DOI: 10.1002/jcc.24912).

165. Jacob A. Fauchaux, Marcel Nooijen, and So Hirata, "Similarity-transformed equation-of-motion vibrational coupled-cluster theory.", *J. Chem. Phys.* **148**, 054104, pp. 1–24 (2018) (DOI: 10.1063/1.5004151).
- (青木グループ)
166. Kai Liu, Yun-an Yan, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, "A modified localization scheme for the three-dimensional elongation method applied to large systems", *Chem. Phys. Lett.* **565**, pp. 143–147 (2013) (DOI: 10.1016/j.cplett.2013.02.039).
167. Lizhi Jiang, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki, "Substituent effects on Menshutkin-type reactions in the gas phase and solutions: Theoretical approach from the orbital interaction view", *J. Chem. Theory Comput.* **9** (9), pp. 4035–4045 (2013) (DOI: 10.1021/ct4006163).
168. Lizhi Jiang, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki, "Stereoelectronic effects in Menshutkin-type S_N2 reactions: theoretical study based on through-space/bond orbital interaction analysis", *J. Phys. Org. Chem.* **26** (11), pp. 885–891 (2013) (DOI: 10.1002/poc.3186).
169. Akira Imamura and Yuriko Aoki, "Helical molecular orbitals around straight-chain polyyne oligomers as models for molecular devices", *Chem. Phys. Lett.* **590**, pp. 136–140 (2013) (DOI: 10.1016/j.cplett.2013.10.064).
170. Peng Xie, Hiroyuki Teramae, Kai Liu, and Yuriko Aoki, "Reply to the comment of J. Ladik on "electronic states of mixed base pairs systems of DNA and the effect of base composition and sequences on the band structures using screw axis translational symmetry"", *Int. J. Quantum Chem.* **114** (4), pp. 303 (2014) (DOI: 10.1002/qua.24543).
171. Piotr Kuźniarowicz, Kai Liu, Yuriko Aoki, Feng Long Gu, Anna Stachowicz, and Jacek Korchowiec, "Intermediate electrostatic field for the elongation method", *J. Mol. Model.* **20** (6), 2277, pp. 1–8 (2014) (DOI: 10.1007/s00894-014-2277-6).
172. Kai Liu, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki, "Theoretical investigation of the pressure-induced insulator-to-metal-to-insulator transitions in one-dimensional bis(dimethylglyoximate) platinum(II), $Pt(dmg)_2$ ", *Polyhedron* **87**, pp. 141–146 (2015) (DOI: 10.1016/j.poly.2014.11.013).
173. Yuuichi Orimoto, Ryohei Yamamoto, Peng Xie, Kai Liu, Akira Imamura, and Yuriko Aoki, "Ab initio $O(N)$ elongation-counterpoise method for BSSE-corrected interaction energy analyses in biosystems", *J. Chem. Phys.* **142** (10), 104111, pp. 1–11 (2015) (DOI: 10.1063/1.4913931).
174. Kai Liu, Jacek Korchowiec, and Yuriko Aoki, "Intermediate electrostatic field for the generalized elongation method", *ChemPhysChem* **16** (7), pp. 1551–1556 (2015) (DOI: 10.1002/cphc.201402901).
175. Lin Jin, Kai Liu, and Yuriko Aoki, "Interaction of OH^- with xylan and its hydrated complexes: Structures and molecular dynamics study using elongation method", *J. Mol. Model.* **21** (5), 117, pp. 1–10 (2015) (DOI: 10.1007/s00894-015-2666-5).
176. Xun Zhu and Yuriko Aoki, "Development of minimized mixing molecular orbital method for designing organic ferromagnets", *J. Comput. Chem.* **36** (16), pp. 1232–1239 (2015) (DOI: 10.1002/jcc.23915).
177. Xun Zhu and Yuriko Aoki, "Efficient prediction of high spin ground state stability in

- organic polyradicals under solvent effects”, *Chem. Phys. Lett.* **637**, pp. 143–147 (2015) (DOI: 10.1016/j.cplett.2015.07.060).
178. Yuuichi Orimoto, Kai Liu, and Yuriko Aoki, “Elongation method for electronic structure calculations of random DNA sequences”, *J. Comput. Chem.* **36** (28), pp. 2103–2113 (2015) (DOI: 10.1002/jcc.24047).
 179. Xun Zhu, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki, “An efficient unrestricted PCM-elongation method for large high-spin polymer/dendrimer systems”, *Z. Phys. Chem.* **230** (5-7), pp. 667–680 (2016) (DOI: 10.1515/zpch-2015-0722).
 180. Xun Zhu and Yuriko Aoki, “Development of molecular fragment interaction method for designing organic ferromagnets”, *J. Math. Chem.* **54** (8), pp. 1585–1595 (2016) (DOI: 10.1007/s10910-016-0638-3).
 181. Yuuichi Orimoto and Yuriko Aoki, “Automated property optimization via ab initio O(N) elongation method: application to (hyper-)polarizability in DNA”, *J. Chem. Phys.* **145** (2), 024107, pp. 1–10 (2016) (DOI:10.1063/1.4956456).
 182. Yuuichi Orimoto and Yuriko Aoki, “Computational study of Cu-containing artificial DNA: twist angle dependence of magnetism”, *ChemistrySelect* **1** (17), pp. 5521–5529 (2016) (DOI: 10.1002/slct.201600940).
 183. Lin Jin, Yun-an Yan, and Yuriko Aoki, “Computational scheme to determine local vibrations of large systems using elongation method”, *Theor. Chem. Acc.* **136** (1), 11, pp. 1–10 (2016) (DOI: 10.1007/s00214-016-2030-6).
 184. Hiroyuki Teramae, and Yuriko Aoki, “An Attempt at Theoretical Calculation of Electronic Structure of model-DNA”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15** (6), pp. 219–220 (2017) (DOI: 10.2477/jccj.2016-0057).
 185. Yuuichi Orimoto, Kohei Otsuka, Kazuma Yagyu, Hiroshi Tochihara, Takayuki Suzuki, and Yuriko Aoki, “Theoretical Study of Cu Intercalation through a Defect in Zero-Layer Graphene on SiC Surface”, *J. Phys. Chem. C* **121** (13), pp. 7294–7302 (2017) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b00314).
 186. Hiroyuki Teramae and Yuriko Aoki, “An Attempt at Ab Initio Crystal Orbital Calculation of Electronic Structure of B-type Model-DNA”, *AIP Conference Proceedings*, **1906**, 030023 pp. 1–3 (2017) (DOI: 10.1063/1.5012302).
 187. Yuuichi Orimoto, Kohei Kato, and Yuriko Aoki, “Importance of Through-Space Interaction of [2,2’]-Paracyclophane-oligo(p-phenylenevinylene) Molecular Wires for Photovoltaic Application and Effective Wire Design by Chemical Substitution”, *J. Phys. Chem. C* **121** (33), pp. 17703–17711 (2017) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b05730).
 188. Yuuichi Orimoto, Kosuke Ishimoto, and Yuriko Aoki, “Role of Pyridinium Groups and Iodide Ions in Photoelectrochromism in Viologen-Based Ion-Pair Charge-Transfer Complexes: Molecular Orbital Analysis”, *J. Phys. Chem. C* **122** (8), pp. 4546–4556 (2018) (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b10281).
- (森グループ)
189. Aya Matsuda and Hirotohi Mori, “Theoretical study on crystal-facet dependency of hydrogen storage rate for shape controlled Pd nano particles”, *Chem. Phys. Lett.* **644**, pp. 255–260 (2016) (DOI: 10.1016/j.cplett.2015.12.021).
 190. Kasumi Miyazaki and Hirotohi Mori, “Origin of high oxygen reduction reaction

activity of Pt₁₂ and strategy to obtain better catalyst using subnanosized Pt-alloy clusters”, *Sci. Rep.*, **7**, 45381, pp. 1–9 (2017) (DOI: 10.1038/srep45381).

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

(中井グループ)

1. Junji Seino and Hiromi Nakai, “Large-scale relativistic quantum-chemical theory: Combination of the infinite-order Douglas-Kroll-Hess method with the local unitary transformation scheme and the divide-and-conquer method”, *Int. J. Quantum Chem. (Perspective)* **115** (5), pp. 253–257 (2015) (**Special Issue of Theoretical Chemistry in Japan**) (DOI: 10.1002/qua.24758).
2. Yasuhiro Iwabata and Hiromi Nakai, “Local response dispersion method: a density-dependent dispersion correction for density functional theory”, *Int. J. Quantum Chem. (Tutorial Review)* **115** (5), pp. 309–324 (2015) (**Special Issue of Theoretical Chemistry in Japan**) (DOI: 10.1002/qua.24786).
3. Masahiko Morinaga, Hiroshi Yukawa, and Hiromi Nakai, “Energy expression of the chemical bond between atoms in hydrides and oxides and its application to materials design”, pp. 183–213 in *‘The DV-Xα Molecular-Orbital Calculation Method’* edited by T. Ishii, H. Wakita, K. Ogasawara, and Y. Kim (Springer, 2015) (DOI: 10.1007/978-3-319-11185-8_7).
4. 中井 浩巳, “相対論的量子化学”, 金属錯体の量子・計算化学 (錯体化学会選書), 三共出版, pp. 70–94 (2014) (ISBN: 978-4-7827-0709-8).
5. 藤波 美起登, 清野 淳司, 中井 浩巳, “インフォマティクスによる反応の設計と予測—コンピュータを用いた化学反応の予言を目指して”, *化学* **71** (11), pp. 68–69 (2016).
6. 藤波 美起登, 清野 淳司, 中井 浩巳, “人工知能を用いた化学反応の予測—新材料開発のスピードアップに向けて”, *マテリアルステージ* **16** (11), pp. 70–75 (2017).
7. 清野 淳司, 中井 浩巳, “インフォマティクスとの融合による理論化学研究の推進”, *ペトロテック* **40** (5), pp. 353–358 (2017).
8. Takeshi Yoshikawa and Hiromi Nakai, “A linear-scaling divide-and-conquer quantum chemical method for open-shell systems and excited states”, pp. 299–323 in *‘Fragmentation: Toward Accurate Calculations on Complex Molecular Systems’* edited by Mark S. Gordon (Wiley, 2017) (ISBN: 978-1-119-12924-0).
9. 中井 浩巳, “量子化学計算のコツ(基礎編)”, *応用物理* **86** (8), pp. 720–724 (2017).
10. 中井 浩巳, “量子化学計算のコツ(実用編)”, *応用物理* **86** (9), pp. 802–807 (2017).
11. 中井 浩巳, “基礎研究と応用研究—理論化学の社会実装に向けて”, *化学と工業*, **70** (10), pp. 928–930 (2017).
12. 清野淳司, 中井浩巳, “インフォマティクスとの融合による理論化学研究”, *化学工業* **69** (1), pp. 53–58 (2018).
13. 西村 好史, 中井 浩巳, “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”, *分子シミュレーション研究会会誌“アンサンブル”*, in press.
14. Chien-Pin Chou, Hiromi Nakai, “A perspective on density-functional tight-binding parameterization towards transition metals”, *分子シミュレーション研究会会誌“アンサンブル”*, in press.

(中嶋グループ)

15. 中嶋 隆人, “Douglas–Kroll 法”, *J. Comput. Chem. Jpn.* **13**, 50–70 (2014) (特集号: 相対論的量子化学 – 高精度予測と新化学領域の探求) (DOI: 10.2477/jccj.2013-0014).
16. Muneaki Kamiya and Takahito Nakajima, “Relativistic time-dependent density-functional theory for molecular properties”, in ‘*Frontiers of Quantum Chemistry*’ edited by M. Wójcik, H. Nakatsuji, B. Kirtman, and Y. Ozaki (Springer, 2017) (ISBN: 978-981-10-5650-5).

(長谷川グループ)

17. 長谷川 淳也, “マルチスケール・モデルによる複雑分子系の計算化学”, *化学* **68**, pp. 12–16 (2013).
18. 長谷川 淳也, “キャタリストインフォマティクス”, *CICSJ Bulletin* **34**(4), pp. 109–111 (2016) (DOI: 10.11546/cicsj.34.109).
19. 長谷川 淳也, “触媒計算科学概観: 理論計算はいかに活用できるか”, *触媒* **59** (4), pp. 176–180 (2017).

(平田グループ)

20. So Hirata, Kandis Gilliard, Xiao He, Murat Keceli, Jinjin Li, Michael A. Salim, Olaseni Sode, and Kiyoshi Yagi, “Ab initio ice, dry ice, and liquid water”, pp. 245–296 in ‘*Fragmentation: Toward Accurate Calculations on Complex Molecular Systems*’ edited by Mark S. Gordon (Wiley, 2017) (ISBN: 978-1-119-12924-0).

(青木グループ)

21. 青木 百合子, “Elongation 法による巨大系の効率的電子状態・構造シミュレーション”, *シミュレーション* **32** (2), pp. 125–135 (2013).
22. 青木 百合子, 今村 詮, 高分子ナノテクノロジーハンドブック～最新ポリマーABC 技術を中心として～, エヌ・ティー・エス, pp. 752–761, (2014) (ISBN: 978-4-86043-410-6).
23. Feng Long Gu, Yuriko Aoki, Michael Springborg, and Bernard Kirtman, “Calculations on nonlinear optical properties for large systems — The elongation method”, pp. 1–93 in ‘*SpringerBriefs in Electrical and Magnetic Properties of Atoms, Molecules, and Clusters*’ edited by Maroulis George (Springer, 2015) (ISBN: 978-3-319-11068-4).
24. 青木 百合子, “機能性材料・創薬設計のための超効率的計算科学ソフトの開発”, *化学工業* **62** (2), pp. 13–21 (2016).
25. Yuriko Aoki, Yuuichi Orimoto, and Akira Imamura “Quantum chemical approach for organic ferromagnetic material design”, pp. 1–138 in ‘*SpringerBriefs in Electrical and Magnetic Properties of Atoms, Molecules, and Clusters*’ edited by Maroulis George, (Springer, 2017) (ISBN: 978-3-319-49827-0).
- 26.

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 47 件、国際会議 143 件)

国内会議

(中井グループ)

1. 中井 浩巳(早稲田大学)、「化学的理解のための電子状態理論」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、2013 年 9 月 24 日

-27 日

2. 石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「凝縮系のエンタルピー・エントロピーの量子化学計算:調和溶媒和モデル(HSM)」、シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2014」、広島大学 学士会館、2014 年 9 月 20 日
3. 清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「Large-scale relativistic quantum-chemical theory」、原子衝突学会第 39 回年会、東北大学 片平キャンパス、2014 年 10 月 4 日-6 日
4. 中井 浩巳(早稲田大学)、「ナノスケール反応系のダイナミクスと制御の計算化学基盤の確立」、計算分子科学研究拠点 第 5 回研究会、自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター、2014 年 10 月 17 日-18 日
5. 中井 浩巳(早稲田大学)、「凝縮系の熱力学量の高精度量子化学計算」、第 37 回情報化学討論会 2014 豊橋、豊橋商工会議所、2014 年 11 月 27 日-28 日
6. 中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学における第 2 量子化の手法」、第 4 回量子化学ウィンタースクール〜大規模系を目指した基礎理論〜、自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター、2014 年 12 月 15 日-16 日
7. 中井 浩巳(早稲田大学)、「二酸化炭素分離回収に関する理論化学シミュレーション:「京」の成果とポスト「京」の計画」、文部科学省「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 回公開シンポジウム、自然科学研究機構 職員会館(岡崎)、2015 年 3 月 10 日
8. 清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発:元素戦略の理論基盤確立を目指して」、日本コンピュータ化学会 2015 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 5 月 28 日-29 日
9. 石川 敦之(早稲田大学)、「理論計算は触媒設計にどのように役立つか?:原理とケーススタディ」、石油学会JPIJS関東地方討論会、早稲田大学、東京、2015 年 11 月 26 日
10. 中井 浩巳(早稲田大学)、「周期表を網羅する線形スケーリングな相対論的量子化学の構築」日本化学会第 96 春季年会(2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
11. 大越 昌樹(早稲田大学)、「理論化学シミュレーションによる二次電池用電解液の物性評価」、次世代 ESICB セミナー2016-1、京都大学桂キャンパス、京都、2016 年 4 月 25 日
12. 中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治(DC)法の理論と応用」、近畿化学協会コンピュータ化学部会例会(講演会)、大阪産業創造館、大阪、2016 年 6 月 13 日
13. 西村 好史(早稲田大学)、「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーションの開発・応用と展望」、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 回連携推進ワークショップ、北海道大学工学部フロンティア応用科学研究棟、北海道、2016 年 11 月 29 日-30 日
14. 中井 浩巳(早稲田大学)、「ナノスケール化学反応系に対する分割統治型密度汎

関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーション」、第30回分子シミュレーション討論会、大阪大学 基礎工学国際棟 シグマホール(大阪大学豊中キャンパス)、大阪、2016年11月30日-12月2日

15. 吉川 武司(早稲田大学)、「大規模量子化学計算の新展開」、六花会例会、日本工業倶楽部、東京、2016年12月7日
 16. 藤波美起登(早稲田大学)、「ELN に蓄積した反応データと機械学習を用いた反応設計 AI 構築の可能性」、2017年9月15日
 17. 中井 浩巳(早稲田大学)、「インフォマティクスとの融合による理論化学研究の推進」、日本化学会関東支部主催講演会「マテリアルズ・インフォマティクスと AI を用いたものづくり」、化学会館、東京、2017年9月29日
 18. 中井 浩巳(早稲田大学)、「データ科学は理論化学に何をもたらすか」、日本コンピュータ化学会 2017 秋季年会プレシンポジウム、熊本大学黒髪キャンパス、熊本、2017年10月20日-22日
 19. 大越 昌樹(早稲田大学)、「Na イオン二次電池用高濃度電解液におけるイオン拡散に関する理論的研究」、分子研研究会「電池の分子科学:理論と実験のインタープレイ最前線」、分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンター、愛知、2018年1月26日-27日
 20. 中井 浩巳(早稲田大学)、「電子実験ノートと AI の連携で生まれるもの」、日本化学会第 98 春季年会 (2018)、日本大学理工学部船橋キャンパス、千葉、2018年3月20日-23日
 21. 清野 淳司(早稲田大学)、「次世代相対論的量子化学プログラム RAQET の紹介と理論化学研究の情報学との融合」、新化学技術推進協会 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、新化学技術推進協会 JACI 会議室、東京、2018年3月2日
- (波田グループ)
22. 阿部 穰里(首都大学東京)、「CP対称性破れ検出のための相対論的分子理論の開発」、原子衝突学会第 40 回年会、首都大学東京国際交流会館、八王子、2015年9月28日-30日
 23. 今村 穰(首都大学東京)、「次世代有機系太陽電池に関する理論的研究」、第 3 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2016年11月5日
 24. 波田 雅彦(首都大学東京)、「相対論を用いた量子化学計算」、第 30 期CAMM フォーラム、表参道アイビーホール、東京、2017年1月13日
 25. 阿部 穰里(首都大学東京)、「Relativistic quantum chemistry and recent applications to physics and chemistry」、E3 project seminar、理化学研究所、和光、2017年4月4日
 26. 阿部 穰里(首都大学東京)、「相対論的量子化学の理論開発と応用」、エネルギー

一・環境・資源問題の解決に繋がる革新的材料創出に向けた光・量子ビーム応用
技術調査専門委員会第1回研究会、東京理科大学、東京、2017年4月24日

27. 波田 雅彦(首都大学東京)、「高次相対論補正を含めた電子状態理論と種々の
応用計算」、新化学技術推進協会(JACI)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、新化学技術推進協会会議室、東京、2017年8月18日

(中嶋グループ)

28. 中嶋 隆人(理化学研究所)、「NTChemと相対論的分子理論」、分子研研究会 理
論計算分子科学ワークショップ:計算法とシミュレーションの新展開、岡崎、2015年
10月22日
29. 中嶋 隆人(理化学研究所)、「相対論的量子化学」、第5回量子化学ウインタース
クール～基礎理論～、岡崎、2015年11月17日
30. 中嶋 隆人(理化学研究所)、「京コンピュータと理論分子科学」、第4回 CUTE シ
ンポジウム・コンピュータ化学「京コンピュータと理論化学」、津、2016年6月16日

(長谷川グループ)

31. 長谷川 淳也(北海道大学)、「複雑分子系への理論化学によるアプローチ」、第
53回オーロラセミナー、ホテル花神楽、東神楽、2013年7月21日-22日
32. 長谷川 淳也(北海道大学)、「凝集系における分子の励起状態」、第36回溶液化
学シンポジウム プレシンポジウム、北海道大学学術交流会館、札幌、2013年10
月8日
33. 中谷 直輝(北海道大学)、「DMRG 線形応答理論と強相関係の励起状態計算」、
基礎物理学研究所 研究会「量子多体系研究の新しい潮流」、京都大学 基礎物
理学研究所、京都、2014年12月15日-17日
34. 長谷川 淳也(北海道大学)、「凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用」、
第四回 神楽坂 凝縮系理論勉強会、東京理科大学 神楽坂キャンパス、東
京、2014年1月25日
35. 長谷川 淳也(北海道大学)、「凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用」、
理研シンポジウム「生体分子系量子化学計算の最前線」、理化学研究所 和
光地区、和光、2015年1月22日-23日
36. 長谷川 淳也(北海道大学)、「拘束条件を付したポテンシャル面上の最適化問
題」、第3回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学、東京、2016年11月5日
37. 中谷 直輝(北海道大学)、「量子化学における多体相関問題と密度行列繰込み
群」、トポロジカル物性と計算物質科学が創出する新物質科学に関する研究会、
東京大学物性研究所、柏、2016年3月8日
38. 長谷川 淳也(北海道大学)、「拘束条件を付したポテンシャル面上の最適化問
題」、スーパーコンピューターワークショップ「これまでの理論・計算科学を振り返り
今後を展望する」、自然科学研究機構計算科学研究センター、岡崎、2017年2月
1日
39. 長谷川淳也 (北海道大学)、「系間交差を含む触媒反応経路に関する理論的研

究」、触媒・電池元素戦略研究拠点 第 11 回公開シンポジウム、京都大学、京都、2017 年 10 月 4 日

(平田グループ)

40. 平田 聡(イリノイ大学アーバナ・シャンペン校)、「Advances in MBPT and MBGF」、Seminar、分子科学研究所、岡崎、2016 年 11 月 17 日
41. 平田 聡(イリノイ大学アーバナ・シャンペン校)、「Advances in MBPT and MBGF」、Seminar、化学生命化学科、早稲田大学、東京、2016 年 11 月 21 日
42. 平田 聡(イリノイ大学アーバナ・シャンペン校)、「Advances in MBPT and MBGF」、Seminar、大学院理学研究科、神戸大学、神戸、2016 年 11 月 29 日
43. 平田 聡(イリノイ大学アーバナ・シャンペン校)、「Advances in MBPT and MBGF」、Seminar、理工学研究科、慶応大学、日吉、2016 年 12 月 22 日

(青木グループ)

44. 青木 百合子(九州大学)、「Elongation 法の原理と機能設計への展開」、第 4 回量子化学ウインタースクール〜大規模系を目指した基礎理論〜、自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター、岡崎、2014 年 12 月 15 日-16 日
45. 青木 百合子(九州大学)、「大規模原子分子系の機能設計のための高速高精度量子化学計算法-Elongation 法-の開発」、第 12 回稲盛フロンティア研究講演会「実践的課題への応用に向けた大規模計算技術の可能性」、九州大学 伊都キャンパス、福岡、2015 年 1 月 23 日

(森グループ)

46. 森 寛敏(お茶の水女子大学)、「分子軌道計算に基づくエネルギー分割解析によるハロゲン結合相互作用の基礎特性解明」、九重分子科学セミナー2015、九州地区国立大学九重共同研修所、九重、2015 年 7 月 24 日-25 日
47. 森 寛敏(お茶の水女子大学)、「相対論的分子軌道法に基づく第一原理分子シミュレーションによる揺らぎを考慮した分子機能解析:理論に根ざした元素戦略に向けて」、東京工業大学化学生命科学研究所講演会、東京工業大学すずかけ台キャンパス、横浜、2016 年 7 月 13 日

国際会議

(中井グループ)

1. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Expansion and deepening of quantum chemical methods toward real science”, 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17), Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailand, March 27-29, 2013 (Keynote).
2. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Linear-scaling excited-state calculations for large systems”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, July 10-13, 2013.
3. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Linear-scaling electron-correlation theory for two-component relativistic Hamiltonian”, The VIIIth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VIII), Budapest Congress Center, Budapest, Hungary, August 25-31, 2013.

4. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Density functional study for weakly interacting systems: Recent development of local response dispersion method”, The First International Workshop on Computational Science and Engineering (IWCSE 2013), National Taiwan University, Taipei, Taiwan, October 14–17, 2013.
5. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “New directions of divide-and-conquer electronic-structure calculations”, Third International Symposium on Computational Sciences (ISCS2013), Tian Lin Hotel, Shanghai, China, November 18–20, 2013 (Keynote).
6. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Novel applications of nuclear orbital plus molecular orbital (NOMO) method”, XVIIIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XVIII), Paraty, Rio de Janeiro, Brazil, December 1–7, 2013.
7. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of efficient two-component relativistic method for large systems”, 11th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (REHE-2014), Smolenice Castle, Slovak Republic, September 20–24, 2014.
8. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Harmonic solvation model (HSM) for quantum chemical calculation of condensed-phase free energy”, XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Tamkang University, Taipei, Taiwan, November 11–17, 2014.
9. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Efficient two-component relativistic method for large systems”, 11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2015), Metropolitan Hotel, Athens, Greece, March 20–23, 2015.
10. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Novel approach for condensed-phase thermochemistry: Proposal and applications of harmonic solvation model (HSM)”, Mini-symposium at Sungkyunkwan University (SKKU), Sungkyunkwan University, Suwon, Korea, April 21–23, 2015.
11. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry: Harmonic solvation model (HSM)”, Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Dong Yuan Hotel, Nanjing, China, June 1–6, 2015.
12. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of linear-scaling two-component relativistic method with a small prefactor”, New Frontiers of Relativistic Quantum Chemistry — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Peking University, Beijing, China, June 13–16, 2015.
13. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Novel quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry: Proposal and applications of harmonic solvation model (HSM)”, Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes, Haeundae Tivoli Hotel, Busan, Korea, July 12–16, 2015.
14. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of linear-scaling divide-and-conquer DFTB method”, Development of next generation accurate approximate DFT/B methods – Flagship workshop and tutorial, University of Bremen, Bremen, Germany,

October 11–15, 2015.

15. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of linear-scaling excited-state calculations: divide-and-conquer approaches”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
16. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Computational study on CO₂ chemical absorption process: thermodynamic and dynamic analyses”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
17. Yasuhiro Ikabata (Waseda Uni.), “Density-dependent dispersion correction for density functional theory: local response dispersion approach”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
18. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of linear-scaling divide-and-conquer based density-functional tight-binding (DC-DFTB) method suitable for massively parallel computation”, Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7) Kaohsiung, Taiwan, January 25–28, 2016.
19. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Computational Study on CO₂ Chemical Absorption Process”, 2016 International Congress for Innovation in Chemistry (PERCH-CIC Congress IX), Pattaya, Thailand, June 26–29, 2016.
20. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Chemical Reaction Simulations of Large Systems”, VISTEC Symposium on Novel Chemistry and Engineering, Rayong, Thailand, June 30, 2016.
21. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Nuclear Orbital plus Molecular Orbital (NOMO) Theory: Overview and Recent Progress”, 9th Workshop on Mathematical Methods for Ab Initio Quantum, Chemistry, Nice, France, July 4–5, 2016.
22. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Harmonic Solvation Model (HSM) to Evaluate Condensed-Phase Thermochemistry by Quantum Chemical Calculation”, 2016 Canadian Symposium on Theoretical and Computational Chemistry (CSTCC2016), Regina, Canada, July 10–15, 2016.
23. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Linear-Scaling Method for Nonlocal Excited States by Dynamical Polarizability Computations”, 9th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-IX), Grand Forks, North Dakota, USA, July 17–22, 2016.
24. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of Divide-and-Conquer type Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method and its Applications to Chemical Reaction Simulations of Large Systems”, Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2016), University of Washington in Seattle, USA, August 28–September 2, 2016.
25. Masahiko Nakano, Ryota Nakamura, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Relativistic spin-dependent open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry: Unrestricted and restricted approaches”, Workshop on Current Trends and Future Directions in Relativistic Many Electron Theories (RMET2016), Tokyo, Japan, September 26–28, 2016.

26. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Divide-and-conquer density-functional tight-binding molecular-dynamics (DC-DFTB-MD) simulations for nano-scale chemical reaction systems”, Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Fukui institute for fundamental chemistry, Kyoto, Japan, October 26–28, 2016.
27. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Recent Advances of DC-DFTB-K Program”, International CECAM-Workshop & Tutorial on Approximate quantum methods in the ab initio world, Beijing, China, November 6–13, 2016.
28. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Theoretical Study on CO₂ Chemical Absorption Process”, Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai University, Chiang Mai, Thailand, November 14–16, 2016.
29. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Chemical Reaction Simulations treated by Linear-Scaling Divide-and-Conquer type Density-Functional based Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method”, 253rd ACS National Meeting & Exposition, San Francisco, California, USA, April 2–7, 2017.
30. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Large-Scale Chemical Reaction Simulations by Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Method”, 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium ‘Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes’, Haeundae Tivoli Hotel, Busan, Korea, July 10–12, 2017.
31. Yoshifumi Nishimura, Aditya Wibawa Sakti, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of large-scale quantum mechanical molecular dynamics simulation: Divide-and-conquer density-functional tight-binding approach”, First International Workshop on Advanced Methods for Nano Materials Design (Satellite session of NANO KOREA 2017), KINTEX, Gyeonggi-do, Korea, July 14, 2017.
32. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Relativistic density functional theory with picture-change corrected electron density based on infinite-order Douglas-Kroll-Hess method”, 17th International Conference on Density-Functional Theory and its Applications (DFT 2017), Tällberg, Dalarna, Sweden, August 21–25, 2017.
33. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Chemical Reaction Simulations on CO₂ Chemical Absorption Process”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Gasteig, Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
34. Junji Seino, Masao Hayami, Yuya Nakajima, Masahiko Nakano, Yasuhiro Ikabata, Takeshi Yoshikawa, Takuro Oyama, Kenta Hiraga, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “RAQET: Large-Scale Two-Component Relativistic Quantum Chemistry Program Package”, International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory”, Tokyo Metropolitan University, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
35. Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Quantum Chemistry Meets Artificial Intelligence”, The Eighth Asia Pacific Conference in Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8), Indian Institute of Technology Bombay, Mumbai, India, December 15–17, 2017.

(波田グループ)

36. Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), Toshiaki Kawamura, and Minoru Abe,

- “Relativistic quantum–chemical calculations of heavy–metal NMR chemical shifts and nuclear spin–spin coupling”, 1st International Conference on Emerging Advanced Nanomaterials (ICEAN), Brisbane, Australia, October 22–25, 2012.
37. Minori Abe (Tokyo Metropolitan Uni.), “Molecular orbital based calculations for the search of the electron EDM using the coupled–cluster method in the Dirac–Coulomb approximation”, Program on CP violation (PCPV2013), Fountain Hotel, Mahabaleshwar, India, February 7–23, 2013.
 38. Geetha Gopakumar (Tokyo Metropolitan Uni.), “Role of chemistry in fundamental physics”, Program on CP violation (PCPV2013), Fountain Hotel, Mahabaleshwar, India, February 7–23, 2013.
 39. Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Nuclear Volume Effect in Equilibrium Constant of Isotope Exchange Reaction”, Asian Consortium on Computational Materials Science, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan, June 5–7, 2014.
 40. Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Relativistic Quantum-Chemical Calculations of Equilibrium Constants in Isotope Exchange Reaction of Metal Complexes”, First Symposium for the Promotion of Applied Research Collaboration in Asia (APARCA2015), Taipei, Taiwan, February 8–11, 2015.
 41. Minori Abe, Geetha Gopakumar, Bhanu Pratap Das, Hiroshi Tatewaki, Devashis Mukherjee, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Contribution of Relativistic Quantum Chemistry to Electron’s Electric Dipole moment for CP violation”, 11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2015), Metropolitan Hotel, Athens, Greece, March 20–23, 2015.
 42. Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Nuclear Volume Effect in Equilibrium Constant of Isotope Exchange Reaction”, 6th Japan-Czech-Slovak International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS-2015), Smolenice castle, Bratislava, Slovakia, October 11–15, 2015.
 43. Yutaka Imamura (Tokyo Metropolitan Uni.), “Theoretical Study on Organic Materials for Next Generation Solar Cells”, 6th Japan-Czech-Slovak International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS-2015), Smolenice castle, Bratislava, Slovakia, October 11–15, 2015.
 44. Minori Abe (Tokyo Metropolitan Uni.), “Relativistic molecular orbital theory for CP violation”, 8th International Workshop on "Fundamental Physics Using Atoms" (FPUA2015), RIKEN, Wako, Japan, November 30–December 1, 2015
 45. Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.) and Minori Abe, “Nuclear Volume Effect in Equilibrium Constants of Isotope Exchange Reactions”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016), BITEC, Bangkok, Thailand, February. 9–11, 2016.
 46. Yutaka Imamura (Tokyo Metropolitan Uni.), “Theoretical Study on π Materials for Solar Cells”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016), BITEC, Bangkok, Thailand, February 9–11, 2016.
 47. Minori Abe (Tokyo Metropolitan Uni.), “Relativistic molecular structure calculations for the detection of CP violation”, Symposium: New Generation

Quantum Theory -Particle Physics, Cosmology, and Chemistry-”, Kyoto, Japan, March 7–9, 2016.

48. Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.) and Minoru Abe, “Nuclear Volume and Mass Terms in Equilibrium Constants of Isotope Exchange Reactions: A Relativistic Quantum-Chemical Study”, 16th Asian Chemical Congress (16ACC), Dhaka, Bangladesh, March 16–19, 2016.
49. Minoru Abe, V. S. Prasanna, Ayaki Sunaga, T. Tsutui, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), Bhanu Pratap Das, “Relativistic molecular structure calculations for electron EDM searches”, Current Trends and Future Directions in Relativistic Many Electron Theories (RMET), Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan, September 26–28, 2016.
50. Minoru Abe, V. S. Prasanna, Ayaki Sunaga, T. Tsutui, Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), and Bhanu Pratap Das, “Search of electric dipole moment of an electron as a probe of CP violation: Role of theoretical chemistry”, Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan, October 26–28, 2016.
51. Yutaka Imamura (Tokyo Metropolitan Uni.), “Material Design for Organic Photovoltaics using Computational Science”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Hotel Continental Saigon, Ho Chi Minh, Vietnam, June 8–10, 2017.
52. Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Quantum-Chemical Analysis of Pb-NMR”, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2017, International Convention Center, Jeju, South Korea, June 26–30, 2017.

(中嶋グループ)

53. Muneaki Kamiya, Takahito Nakajima (RIKEN), Development of Two-component Relativistic Time-dependent Density Functional Theory with Spin-orbit Interaction, Second China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-II), Kobe (Japan), January 23, 2015.
54. Takahito Nakajima (RIKEN), “Recent Progress in NTChem”, 7th Asia-Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry, Taiwan, January 26, 2016.
55. Takahito Nakajima (RIKEN), “NTChem: Quantum Chemistry on K Computer”, 12th ICCMSE 2016, Athens, March 19, 2016.
56. Takahito Nakajima (RIKEN), “NTChem: and Relativistic Molecular Theory”, Workshop on Current Trends and Future Directions in Relativistic Many Electron Theories (RMET 2016), Tokyo, September 26, 2016.
57. Takahito Nakajima (RIKEN), “NTChem: A High-Performance Software Package for Quantum Chemistry Simulation”, The PASC17 Conference, Lugano, June 28, 2017.

(長谷川グループ)

58. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical study on the color tuning mechanism of photo-functional proteins: Excited states and molecular interactions”, 2012 HU–NU–SNU–NIMS/MANA Joint Symposium “Challenges in Advanced Chemistry of Asia”, Hokkaido University, Sapporo, Japan, December 6–8, 2012.

59. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Computational chemistry for complex systems: Environmental effect in proteins and solutions”, The Fourth Joint Symposium of PCOSS-CRC, Hokkaido University, Sapporo, Japan, May 9, 2013.
60. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Electrostatic and quantum mechanical molecular interactions controlling excitation energies of chromophore in proteins and solutions”, 15th Asian Chemical Congress (15 ACC), Resort World Sentosa, Singapore, August 19–23, 2013.
61. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Molecular excited states in proteins and solutions”, 5th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Todai-ji Culture Center, Nara, Japan, December 2–6, 2013.
62. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Excited states of molecules in proteins and solutions”, CRC-EC Joint International Symposium on Chemical Theory for Complex Systems, Emory University, Atlanta, USA, January 9–10, 2014.
63. Naoki Nakatani (Hokkaido Uni.), “Tensor network perspectives in quantum chemistry”, CMSI International Workshop 2014: Tensor Network Algorithms in Materials Science, RIKEN AICS, Kobe, Japan, October 20, 2014.
64. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Excited states and molecular interactions in proteins and solutions”, XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Tamkang University, Taipei, Taiwan, November 11–17, 2014.
65. Naoki Nakatani (Hokkaido Uni.), “Tensor network in chemistry: Recent DMRG/TTNS studies and perspectives for catalysis research”, Tensor Network States: Algorithms and Applications, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China, December 1–5, 2014.
66. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Excited states and molecular interactions in proteins and solutions”, Second China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-II), RIKEN AICS, Kobe, Japan, January 20–23, 2015.
67. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Transition state of spin-state crossing reactions”, 19th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE19), Ubon Ratchathani University, Thailand, June 17–19, 2015 (Plenary).
68. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study of CO₂ Fixation by a Bifunctional Porphyrin Catalyst”, ICIQ-FIFC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems, Tarragona, Spain, November 25–27, 2015.
69. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Excited states and molecular interactions in photofunctional proteins”, Computational Approaches for the Study of Chemical and Biological Systems, Madrid, Spain, November 23, 2015.
70. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “CO₂ fixation mechanism of bifunctional porphyrin catalyst: a theoretical study”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.

71. Naoki Nakatani (Hokkaido Uni.), “DMRG and Matrix Product States”, Asian Winter School in Quantum Chemistry, Hong Kong, China, December 7–11, 2015.
72. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Constraint Structure Optimization on Potential Energy Surface”, Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai University, Chiang Mai, Thailand, November 15, 2016.
73. Yue Chen (Hokkaido Uni.), “Coordination Strategy to Realize Sextuply Bonded Complex. Theoretical Prediction”, International Symposium on Multi-Scale Simulation of Condensed-Phase Reacting Systems (MSCRS2016), Nagoya University, Nagoya, Japan, October 10–13, 2016.
74. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Transition states of spin-crossing reactions”, EMN Meeting on Computation and Theory, Las Vegas, USA, October 10–14, 2016.
75. Naoki Nakatani, “Ab initio Quantum Chemistry for Iron Complexes”, Base Metal Catalysis Symposium, Princeton, NJ, USA, September 2–3, 2016.
76. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Transition states of spin-crossing reactions”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016 “Recent Advances in Pure & Applied Chemistry”, Borneo Convention Centre Kuching, Kuching, Malaysia, August 15–18, 2016.
77. Naoki Nakatani (Hokkaido Uni.), “Matrix Product Multi-Linear Algebra Library”, International Workshop on Tensor Networks and Quantum Many-Body Problems, ISSP, Kashiwa, Japan, June 27, 2016.
78. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study of Excited States of Photosynthetic Reaction Center: Photoabsorption, electron transfer, and photoprotection”, The 2016 Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2016), Bangkok, Thailand, February 9–12, 2016.
79. Naoki Nakatani (Hokkaido Uni.), “QC-DMRG Algorithm on the Tree Tensor Network States”, The 75th Okazaki Conference Tensor Network States: Algorithms and Applications, Okazaki Conference Center, Okazaki, Japan, January 11–14, 2016.
80. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach”, 3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017, Yokohama City University, Yokohama, Japan, July 14–15, 2017.
81. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Constraint Structure Optimization for a Particular Energy Minimum”, 2017 Summer Symposium of KCS-Physical Chemistry Division and 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium, Haeundae Tivoli Hotel, Busan, Korea, July 10–12, 2017.
82. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, “Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Ho Chi Minh City, Vietnam, June 8–9, 2017.
83. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), Masaki Ohbo, Yoichi Hoshimoto, and Sensuke Ogoshi “Theoretical Study of Frustrated Lewis Pair for Activation of Stable Chemical Bonds”, National Nanotechnology Center (NANOTEC), Thailand, August

3–4, 2017.

84. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Constraint Structure Optimization for Minimum Energy Intersystem Crossing Point”, The XXII-th Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (QSCP), Changsha, China, October. 16–21, 2017.
85. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Constraint Structure Optimization for Minimum Energy Intersystem Crossing Point”, International symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory”, Tokyo Metropolitan University, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
86. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Constraint Structure Optimization for Minimum Energy Intersystem Crossing Point”, The eighth Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC8), Indian Institute of Technology Bombay, Mumbai, India, December 15–17, 2017.
87. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study on Reaction Mechanisms Involving Intersystem Crossing”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2018 (PACCON 2018), ICC Hat Yai, Thailand, February 7–9, 2018.

(平田グループ)

88. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Computational chemistry of crystals”, Department of Chemistry, University of Washington, Seattle, Washington, USA, February 13, 2013.
89. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Computational chemistry of crystals”, Department of Chemistry, The Ohio State University, Columbus, Ohio, USA, February 25, 2013.
90. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Second-order many-body perturbation theory”, 245th American Chemical Society (ACS) National Meeting & Exposition, New Orleans, Louisiana, USA, April 7–11, 2013.
91. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Second-order many-body perturbation theory: An eternal frontier”, 7th | Molecular Quantum Mechanics (MQM 2013), Palazzo dei Congressi Lugano, Lugano, Switzerland, June 2–7, 2013.
92. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “First-principles prediction of crystal structures, spectra, and phase diagrams”, Very Accurate and Large Computations and Applications 2013 (VALCA 2013), Strand Hotel Fevik, Kristiansand, Norway, June 9–12, 2013.
93. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “MBPT(2): An eternal frontier”, Institute of Physics, Nicolaus Copernicus University, Torun, Poland, July 3, 2013.
94. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Predictive computing for condensed matter”, 2013 Scientific Discovery through Advanced Computing (SciDAC-3) Principal Investigator Meeting, Rockville Hotel & Executive Meeting Center, Rockville, Maryland, USA, July 24–26, 2013.
95. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “First-principles prediction of the structures, spectra, and phase diagrams of molecular crystals”, The VIIIth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VIII), Budapest Congress Center, Budapest, Hungary, August 25–31, 2013.

96. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Second-order many-body perturbation study of ices and dry ices”, 246th American Chemical Society (ACS) National Meeting & Exposition, Indianapolis, Indiana, USA, September 8–12, 2013.
97. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Quantum chemistry of crystals”, Department of Chemistry, University of North Texas, Dallas, Texas, USA, October 3, 2013.
98. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Quantum chemistry of crystals”, Department of Chemistry, Texas Christian University, Fort Worth, Texas, October 4, 2013.
99. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Computational quantum chemistry: Two extremes”, Department of Chemistry, Indiana University, Bloomington, Indiana, USA, November 6, 2013.
100. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Computational quantum chemistry: Two extremes”, Department of Chemistry, Virginia Tech, Blacksburg, Virginia, USA, February 7, 2014.
101. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Computational quantum chemistry: Two extremes”, Department of Chemistry and Biochemistry, University of Arkansas, Fayetteville, Arkansas, USA, March 11, 2014.
102. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Second-order many-body perturbation theory: An eternal frontier”, 2nd International Symposium of Theoretical Chemistry Center, Tsinghua University (TCC-THU) “Quantum Chemistry for Extended Systems”, Tsinghua University, Beijing, China, March 31–April 1, 2014.
103. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Predictive computing of advanced materials and ices”, NCSA Blue Waters Symposium for Petascale Science and Beyond, The iHotel and Conference Center, Champaign, Illinois, USA, May 12–15, 2014.
104. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “A few potentially controversial issues in many-body theory”, Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques Conference (LUEST) 2014, Ah Haa School for the Arts, Telluride, Colorado, USA, June 1–5, 2014.
105. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Ab initio solid-state chemistry”, American Conference on Theoretical Chemistry (ACTC) 2014, Palm Theatre, Telluride, Colorado, USA, July 20–25, 2014.
106. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Advances in MBPT and MBGF”, The 55th Sanibel Symposium, St. Simons Island, Georgia, USA, February 15–21, 2015.
107. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Brueckner–Goldstone quantum Monte Carlo”, CECAM Workshop: Stochastic Wavefunction Methods in Quantum Chemistry, Electronic Structure Theory and Condensed Matter Physics, Lausanne, Switzerland, April 19–24, 2015.
108. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Ice and water on Blue Waters”, Blue Waters Symposium 2015, Sunriver, Oregon, USA, May 10–13, 2015.

109. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Brueckner–Goldstone quantum Monte Carlo”, Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Dong Yuan Hotel, Nanjing, China, June 1–6, 2015.
110. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “There seem only two truly scalable algorithms for electron correlation in large systems”, 250th American Chemical Society (ACS) National Meeting & Exposition, Boston, Massachusetts, USA, August 16–18, 2015.
111. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Ab initio molecular crystal and liquid structure, spectra, and phase diagram”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
112. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Brueckner–Goldstone quantum Monte Carlo”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
113. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Effective potentials: Collaborative studies with James D. Talman”, 56th Sanibel Symposium, St. Simon’s Island, Georgia, February 17, 2016.
114. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Brueckner–Goldstone quantum Monte Carlo”, Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques Conference 2016, Telluride, CO, June 2, 2016.
115. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Ab initio condensed-phase chemistry”, MQM 2016 (Molecular Quantum Mechanics): Celebration of the Swedish School, Uppsala, Sweden, June 28, 2016. (2013 Löwdin Lecturer).
116. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Brueckner–Goldstone quantum Monte Carlo”, Ninth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-IX) Grand Forks, ND, July 22, 2016.
117. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “General-order many-body Green’s function theory”, Molecular Electronic Structure Buenos Aires (MESBA), Buenos Aires, Argentina, September 20, 2016.
118. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Ab initio condensed-phase chemistry”, SERMACS (ACS Southeastern Regional Meeting 2016), Columbia, SC, October 25, 2016.
119. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Size-consistency versus variationality”, 57th Sanibel Symposium, St. Simon’s Island, GA, February 24, 2017.
120. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Scalable electron-correlation methods: A legacy of Peter Pulay”, 253rd National American Chemical Society Meeting, San Francisco, CA, April 2–6, 2017.
121. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Finite-temperature ab initio many-body perturbation and coupled-cluster calculations of condensed matter”, 253rd National American Chemical Society Meeting, San Francisco, CA, April 2–6, 2017.

122. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Ab initio ice, dry ice, and liquid water”, Molecular Science of Ice, Saitama, Japan, May 13, 2017.
123. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “One-particle many-body Green’s function theory: Algebraic recursions, linked-diagram theorem, irreducible-diagram theorem, and general-order algorithms”, Department of Energy Computational and Theoretical Chemistry Principal Investigator Meeting, Gaithersburg, MD, May 15–18, 2017.
124. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “One-particle many-body Green’s function theory: Algebraic recursive definitions, linked-diagram theorem, irreducible-diagram theorem, and general-order algorithms”, 100th Canadian Chemistry Conference, Toronto, Canada, May 27–31, 2017.
125. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Quantum field theory in chemistry”, Greater Boston Area Theoretical Chemistry Lecture Series, Boston University, Harvard University, and MIT, Cambridge, MA, April 19, 2017.
126. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “One-particle many-body Green’s function theory: Algebraic recursions, linked-diagram and irreducible-diagram theorems, and general-order algorithms”, 254th National American Chemical Society Meeting, Washington, DC, August 20–23, 2017.
127. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Many-body Green’s function theory: Algebraic recursions, linked- and irreducible-diagram theorems, and general-order algorithms”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), (Munich, Germany), August 27–September 1, 2017.
128. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Many-body Green’s function theory”, 33rd Symposium of Chemical Physics at University of Waterloo, (Waterloo, Canada), November 2–5, 2017.
129. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Many-body Green’s function theory”, XVI Reunion Mexicana de Fisicoquímica Teórica, (Puebla, Mexico), November 15–19, 2017.
130. So Hirata (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Many-body Green’s function theory”, Robert S. Mulliken Lecture, University of Georgia (Athens, GA), February 2, 2018.

(青木グループ)

131. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Highly accurate and efficient quantum chemical method for nano-bio functional designs”, The 2nd International Symposium on Large-scale Computational Science and Engineering, Science Council of Japan Auditorium, Tokyo, Japan, November 8, 2012.
132. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Elongation method for efficient and accurate calculations of large systems and applications to DNA, proteins, and nanotubes towards material design”, Current Trends in Theoretical Chemistry VI (CTTC VI), Kraków, Poland, September 1–5, 2013.
133. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Recent development of highly accurate linear scaling elongation method and its applications to large systems”, 2014 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC'14), Quzhou, Zhejiang, China, August 21–24, 2014.

134. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Elongation method for efficient quantum chemical calculations of large systems towards material design”, The First Joint Symposium of Kyushu University and Yonsei University on Materials Science and Chemical Engineering (SKY-1), Kasuga, Japan, February 6, 2015.
135. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Efficient NLO calculations by elongation method”, Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Dong Yuan Hotel, Nanjing, China, June 1–6, 2015.
136. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Elongation method for functional design of nano-bio systems”, The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Tsinghua University, Beijing, China, June 8–13, 2015.
137. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “An efficient quantum chemical approach for material design”, 2015 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR 2015), Sun Moon Lake Teachers' Hostel Taiwan, August 16–20, 2015.
138. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Linear Scaling Method for Large Systems and its Applications to Nano-Bio Systems”, The 6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS-2015), Bratislava, Slovak Republic, October 11–15, 2015.
139. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “HPC approaches in Materials Science”, International HPC Summer School 2016, University of Ljubljana, Slovenia, June 26–July 1, 2016.
140. Yuriko Aoki and Yuuichi Orimoto (Kyushu Uni.), “Linear-scaling elongation method for efficient search of the best functional polymers-applications to DNA”, Current Trends in Theoretical Chemistry VII, Kraków, Poland, September 4–8, 2016.
141. Yuriko Aoki and Yuuichi Orimoto (Kyushu Uni.), “An efficient NLO functional optimization by elongation method for nanotubes and DNA”, Stereodynamics 2016, Taipei, Taiwan, November 6–11, 2016.
142. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Efficient quantum chemical method for functional material design”, The 10th International Conference on Computational Physics (ICCP10), Holiday Inn Macao, China, January 16–20, 2017.

(森グループ)

143. Hiroto Mori (Ochanomizu Uni.), “Is d-Hole Really Informative for Predicting Hydrogen Absorbing Character of Nano Metal/Alloy Materials?: Beyond d-Hole Theory”, Nano S&T 2016, Holiday Inn Atrium, Singapore, October 26–28, 2016.

② 口頭発表（国内会議 142 件、国際会議 28 件）

国内会議

(中井グループ)

1. 清野 淳司、中井 浩巳（早稲田大学）、「大規模分子系のための線形スケーリング 相対論的量子化学理論の開発」、日本化学会第 93 春季年会(2013)、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013 年 3 月 22 日–25 日
2. 中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳（早稲田大学）、「スピン依存 2 成分相対論的

ハミルトニアンに対応した分割統治型電子相関理論の開発」、日本化学会第 93 春季年会(2013)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、2013 年 3 月 22 日-25 日

3. 五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「局所応答分散力法を用いた時間依存密度汎関数理論の確立」、日本化学会第 93 春季年会(2013)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、2013 年 3 月 22 日-25 日
4. 塚本 祐介、五十幡 康弘、今村 穰、中井 浩巳(早稲田大学)、「局所応答分散力法の実装:平面波基底への拡張」、日本化学会第 93 春季年会(2013)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、2013 年 3 月 22 日-25 日
5. 高田 雄太、Patchreenart Saparpakorn、大越 昌樹、吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、「PicoGreen の蛍光増強メカニズムに関する理論的研究」、日本化学会第 93 春季年会(2013)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、2013 年 3 月 22 日-25 日
6. 吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、「GPU を用いた分割統治型電子状態計算の高速化」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、2013 年 9 月 24 日-27 日
7. 清野 淳司、樽見 望都、中井 浩巳(早稲田大学)、「大規模・高精度相対論的量子化学理論の開発(4):内殻固定ポテンシャル法の開発」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、2013 年 9 月 24 日-27 日
8. 石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「凝縮系エンタルピー・エントロピーの量子化学計算法」、日本化学会第 94 春季年会(2014)、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 3 月 27 日-30 日
9. 市川 滉貴、石川 敦之、菊池 那明、中井 浩巳(早稲田大学)、「白金クラスターに対するグラフェン担持効果:理論的研究」、日本化学会第 94 春季年会(2014)、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 3 月 27 日-30 日
10. 出牛 史子、石川 敦之、菊池 那明、中井 浩巳(早稲田大学)、「MgO 表面および金属クラスター担持 MgO 表面に対するエネルギー密度解析」、日本化学会第 94 春季年会(2014)、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 3 月 27 日-30 日
11. 中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的電子相関計算における picture change 効果」、日本化学会第 94 春季年会(2014)、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 3 月 27 日-30 日
12. 石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学的手法による凝縮系の熱力学:実践的応用」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 5 月 22 日-24 日
13. 速水 雅生、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「高周期元素を含む化合物に対する電子反撥積分の高速化」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 5 月 22 日-24 日
14. 石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算による凝縮系のエンタルピー・エントロピー」、日本コンピュータ化学会 2014 春季年会、東京工業大学 大岡

山キャンパス、2014 年 5 月 29 日-30 日

15. 中井 浩巳(早稲田大学)、石川 敦之、「Quantum chemical calculation for condensed-phase free energy: theory and numerical assessments」、第 30 回化学反応討論会、イーグレ姫路、2014 年 6 月 4 日-6 日
16. 塚本 祐介、五十幡 康弘、Jonathan Romero、Andres Reyes、中井 浩巳(早稲田大学)、「NOMO/Propagator 法によるプロトン結合エネルギーの算出」、第 8 回分子科学討論会 2014 東広島、広島大学 東広島キャンパス、2014 年 9 月 21 日-24 日
17. 清野 淳司、中嶋 裕也、中井 浩巳(早稲田大学)、「高精度相対論的量子化学法による遷移金属錯体の生成エンタルピー計算」、第 8 回分子科学討論会 2014 東広島、広島大学 東広島キャンパス、2014 年 9 月 21 日-24 日
18. 中井 浩巳(早稲田大学)、西村 好史、「理論計算先導による CO₂ の分離回収再生システムの構築」、第 2 回 TCCI インフォーマルミーティング、名古屋大学 東山キャンパス ES 総合館、2014 年 9 月 27 日
19. 海寶 丈彰(早稲田大学)、「大規模量子化学分子動力学法を用いた CO₂ 化学吸収法に関する理論的研究」、第 1 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学 西早稲田キャンパス、2014 年 11 月 8 日
20. 清野 淳司(早稲田大学)、「相対論的量子化学へのパラダイムシフトの実現に向けた理論開発」、第 1 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学 西早稲田キャンパス、2014 年 11 月 8 日
21. 塚本 祐介(早稲田大学)、「NOMO/DC-PP2 法による効率的なプロトン親和力の計算」、第 1 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学 西早稲田キャンパス、2014 年 11 月 8 日
22. 石川 敦之(早稲田大学)、「凝縮系のエンタルピー・エントロピーの量子化学計算:調和溶媒和モデル」、第 1 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学 西早稲田キャンパス、2014 年 11 月 8 日
23. 速水 雅生(早稲田大学)、「量子化学計算における基底関数・分子積分・モデルポテンシャル」、元素戦略 CREST 合同研究会「物性理論と量子化学の接点～相対論の視点を中心として」、メープル有馬、2014 年 12 月 25 日-26 日
24. 中野 匡彦(早稲田大学)、「相対論的量子化学の概要 (1)」、元素戦略 CREST 合同研究会「物性理論と量子化学の接点～相対論の視点を中心として」、メープル有馬、2014 年 12 月 25 日-26 日
25. 清野 淳司(早稲田大学)、「相対論的量子化学の概要 (2)」、元素戦略 CREST 合同研究会「物性理論と量子化学の接点～相対論の視点を中心として」、メープル有馬、2014 年 12 月 25 日-26 日
26. 中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「時間反転対称性を利用した新規相対論的開殻 Hartree-Fock 法の開発:KUHF 法」、日本化学会 第 95 春季年会 (2015)、日本大学 理工学部船橋キャンパス、2015 年 3 月 26 日-29 日

27. 中野 匡彦、中村 亮太、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「Kramers 制限を課した相対論的開殻 Hartree-Fock 法の開発」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、2015 年 5 月 20 日-22 日
28. 西村 好史、海寶 丈彰、中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法の最近の展開」、日本コンピュータ化学会 2015 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 5 月 28 日-29 日
29. 石川 敦之、鎌田 将宏、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算による気体分子の溶解度:調和溶媒モデルによる検討」、日本コンピュータ化学会 2015 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 5 月 28 日-29 日
30. 中村 亮太、中野 匡彦、清野 淳司、中井浩巳(早稲田大学)、「Koopmans の定理と時間反転対称性を同時に考慮した相対論的開殻 Hartree-Fock 法」、日本コンピュータ化学会 2015 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 5 月 28 日-29 日
31. 清野 淳司、大越 昌樹、中井 浩巳(早稲田大学)、「機械学習による完全基底関数極限における電子相関エネルギーの推定」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
32. 西村 好史、Sakti Aditya Wibawa、中井 浩巳(早稲田大学)、「ナノスケール化学反応系に対する分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーション」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
33. 中嶋 裕也、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「凍結内殻ポテンシャル法の拡張:内殻軌道緩和の考慮」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
34. 清野 淳司、大越 昌樹、中井 浩巳(早稲田大学)、「インフォーマティクス技術を用いた完全基底関数極限における電子相関エネルギーの評価」、第 38 回ケモインフォーマティクス討論会(旧情報化学討論会)、東京大学 本郷キャンパス、2015 年 10 月 8 日-9 日
35. 中井 浩巳(早稲田大学)、「化学反応シミュレーションによる CO₂ 分離回収のためのアミン溶液の探索」、第 2 回 HPCI 利用研究課題成果報告会、日本科学未来館、東京、2015 年 10 月 26 日
36. 西村 好史、「ナノスケール化学反応系に対する分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)シミュレーション」、第 2 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学、東京、2015 年 11 月 7 日
37. 中嶋 裕也(早稲田大学)、「周期表を網羅する効率的な相対論的量子化学計算」、第 2 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学、東京、2015 年 11 月 7 日
38. 中井 浩巳(早稲田大学)、「理論開発とプログラム開発」、第 2 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学、東京、2015 年 11 月 7 日
39. 中井 浩巳(早稲田大学)、Stephan Irle、武次徹也、吉澤一成、小林正人、西村好

史、「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」、第 6 回 CMSI 研究会(戦プロ最終成果報告会)、東京大学本郷キャンパス小柴ボール、東京、2015 年 12 月 7 日-8 日

40. 中井 浩巳(早稲田大学)、「材料機能設計への電子論計算の適用～電子論でどこまでわかるのか～」、第 2 回元素戦略プロジェクト大型研究施設連携シンポジウム、東京、2016 年 1 月 21 日-22 日
41. 中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、元素戦略/希少金属代替材料開発、第 10 回合同シンポジウム、東京国際フォーラム B5、東京、2016 年 2 月 23 日
42. 中井 浩巳(早稲田大学)、「産業・実験との共同研究から理論へのフィードバック～CO₂ 分離・回収の研究を例に～」、産応協, CMSI, ポスト京重点課 5・6・7 合同産学官連携シンポジウム、ステーションコンファレンス東京、東京、2016 年 2 月 24 日
43. 中井 浩巳(早稲田大学)、「計算科学による触媒設計の可能性調査研究」、JX 日鉱日石 FS 研究報告会、春光会館、東京、2016 年 3 月 4 日
44. 中井 浩巳(早稲田大学)、石川 敦之、「金属ナノ粒子による CO 酸化反応に関する理論的研究:CO 被覆率及び担体効果の検討」、分子研研究会「触媒の分子科学:理論と実験のインタープレイ最前線」、自然科学研究機構、岡崎コンファレンスセンター、愛知、2016 年 3 月 9 日-10 日
45. 中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、理工学研究所、第1種行事「若手研究者研究成果報告会、理工研シンポジウム」、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2016 年 3 月 11 日
46. 中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、理工学研究所、第1種行事「若手研究者研究成果報告会、理工研シンポジウム」、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2016 年 3 月 11 日
47. 中井 浩巳(早稲田大学)、「ナノ・生態系の反応制御と化学反応ダイナミクス:分割統治密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB)シミュレーションの開発と応用」、TCCI 第 6 回研究会、自然科学研究機構、岡崎コンファレンスセンター、愛知、2016 年 3 月 14 日-15 日
48. 西川 聖也、七尾 洋介、宮本 真希、吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、大木 義路、「ポリエチレンテレフタレート劣化に伴う可視・紫外光吸収の変化と計算による検証」、平成 28 年電気学会全国大会、東北大学川内北キャンパス・宮城・2016 年 3 月 16 日-18 日
49. 森永 正彦、吉野 正人、湯川 宏、本間 智之、鎌土 重晴、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「チタン中の合金元素近傍の局所格子歪と化学結合」、日本金属学会 2016 年春季(第 158 回)講演大会、大阪府立大学・東京・2016 年 3 月 23 日-25 日
50. 石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「Entropy barrier in potential energy curve: a quantum chemical study」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学京田

辺キャンパス・京都・2016 年 3 月 24 日-27 日

51. 大山 拓郎、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的密度汎関数理論のための交換相関汎関数」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
52. 清野 淳司、速水 雅生、中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的量子化学計算の高精度化・高効率化を目指した群知能によるパラメータ自動最適化手法の開発」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
53. 吉川 武司、吉原 詢也、中井 浩巳(早稲田大学)、「動的分極率を用いた高速な分割統治型非局所励起状態計算手法の開発」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
54. 藤波 美起登、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算と機械学習を利用した有機化学反応予測手法の開発」、日本化学会第96春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
55. 今井 みの莉、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「調和溶媒モデルへの非調和性の導入」、日本化学会第96春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス・京都・2016 年 3 月 24 日-27 日
56. 中井 浩巳(早稲田大学)、「Theoretical Development of Divide-and-Conquer based Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method and its Applications」、名古屋大学講演会、名古屋大学、愛知、2016 年 4 月 6 日
57. 清野 淳司、速水 雅生、中嶋 裕也、中井 浩巳(早稲田大学)、「群知能による凍結内殻ポテンシャル法を参照としたモデルポテンシャル自動決定手法の開発」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス 63 号館、東京、2016 年 5 月 23 日-25 日
58. 中嶋 裕也、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「局所ユニタリー変換を用いた効率的な 2 成分相対論法の GAMESS への実装」、日本コンピュータ化学会 2016 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2016 年 6 月 2 日-3 日
59. 小野 純一、西村 好史、安藤 耕司、中井 浩巳(早稲田大学)、「核の量子効果を考慮した密度汎関数強束縛分子動力学法の開発とプロトンダイナミクスへの応用」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
60. 吉原 詢也、吉川 武司、安藤 耕司、中井 浩巳(早稲田大学)、「結合クラスター線形応答理論を用いた分割統治型非局所励起状態計算法の開発」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
61. 藤波 美起登、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算とインフォマティクス技術を用いた反応予測システムの開発」、第 39 回ケモインフォマティク

ス討論会、静岡大学浜松キャンパス、静岡、2016 年 9 月 29 日–30 日

62. 西村 好史(早稲田大学)、「高並列化学反応シミュレーションプログラム DC-DFTB-K の高機能化と CO₂ 分離回収過程への適用」、PCoMS シンポジウム & 計算物質科学スパコン共用事業報告会、東北大学片平キャンパス、宮城、2016 年 10 月 17 日–18 日
63. 五十幡 康弘(早稲田大学)、「局所応答近似に基づく分散力補正法と分極型力場の開発」、第 3 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2016 年 10 月 5 日
64. 中井 浩巳(早稲田大学)、「理論化学の最近の発展～個人的な視点から」、一般雑誌会講演会、東北大学、青葉山北キャンパス、宮城、2016 年 11 月 25 日
65. 中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
66. 中井 浩巳(早稲田大学)、「CO₂ の低コスト分離・回収のためのシミュレーション技術の開発」、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 3 回公開シンポジウム、東京大学武田先端知ビル 5 階 武田ホール、東京、2016 年 12 月 15 日–16 日
67. 大山 拓郎、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「2 成分相対論的密度汎関数理論の開発: Picture change に関する検討」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日–19 日
68. 平賀 健太、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「2 成分相対論的密度汎関数理論の開発: 非共線性に関する検討」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日–19 日
69. 影山 椋、藤波 美起登、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「機械学習による運動エネルギー汎関数の開発」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日–19 日
70. 岩撫 徹、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「凍結内殻ポテンシャル法に基づく金属カチオンの束縛エネルギー計算手法」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日–19 日
71. 西村 好史、Sakti Aditya Wibawa、中井 浩巳(早稲田大学)、「Linear-scaling quantum mechanical molecular dynamics simulations with divide-and-conquer density-functional tight-binding method」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日–19 日
72. 中井 浩巳(早稲田大学)、「調和溶媒和モデル(HSM)を用いた凝縮系の自由エネルギー計算」、日本コンピュータ化学会 2017 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2017 年 6 月 8 日–9 日
73. Aditya Wibawa Sakti、Yoshifumi Nishimura、Hiromi Nakai(早稲田大学)、

「Accurate pKa Estimation by Metadynamics Simulation at DFTB Level」、日本コンピュータ化学会 2017 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2017 年 6 月 8 日-9 日

74. 大山 拓郎、速水 雅生、五十幡 康弘、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「局所ユニタリー変換を用いた効率的な 2 成分相対論的密度汎関数理論の開発」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日
75. 吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治法に基づく有限温度結合クラスター理論の開発」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日
76. 小野 純一、今井 みの莉、西村 好史、中井浩巳(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD 法によるバクテリオロドプシンのプロトンダイナミクスに関する理論的研究」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日
77. 小野 純一(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD 法によるバクテリオロドプシンのプロトン移動機構の解析」、第 4 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2017 年 11 月 11 日
78. 清野 淳司(早稲田大学)、「次世代汎用相対論的量子化学計算プログラム“RAQET”の開発」、第 4 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2017 年 11 月 11 日
79. 藤波 美起登(早稲田大学)、「量子化学計算とインフォマティクスを用いた化学反応の予測と解析」、第 4 回電子状態理論シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2017 年 11 月 11 日
80. 清野 淳司(早稲田大学)、「量子化学と情報学との融合による次世代密度汎関数理論と均一系触媒における反応予測システムの開発」、さきがけ「マテリアルズインフォマティクス」第 5 回領域会議、沼津プラザヴェルデ、静岡、2017 年 11 月 23 日-25 日
81. 小野 純一、今井 みの莉、西村 好史、中井浩巳(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD 法によるバクテリオロドプシンのプロトン移動反応機構に関する理論的研究」、第 31 回分子シミュレーション討論会、金沢商工会議所、石川、2017 年 11 月 29 日-12 月 1 日
82. 西村 好史(早稲田大学)、「CO₂ 吸収シミュレーションのための超並列電子状態計算法: DC-DFTB-K の機能拡張と CO₂ 吸収反応の速度論解析」、ポスト京第 4 回公開シンポジウム、神戸大学ポートアイランドセンター、兵庫、2017 年 12 月 11 日-12 日
83. 遠藤 滉士、香西 拓哉、吉川 武司、中井 浩巳、大木 義路(早稲田大学)、「ジブチルヒドロキシトルエンにおける遠赤外吸収 ～測定と量子化学計算によるスペクトル同定～」、2017 年度電気学会誘電・絶縁材料研究会(空間電荷・コンポジット・量子化学計算)、東京体育館内会議室、東京、2017 年 12 月 19 日

84. 中井 浩巳 (早稲田大学)、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、MEXT-JST 元素戦略合同シンポジウム ～元素戦略研究の歩みと今後～、JP タワーホール・東京・2018 年 2 月 20 日
85. 田中 茉莉奈、平井 貴裕、大越 昌樹、中井 浩巳 (早稲田大学)、「Pt 触媒によるトルエンの可逆的水素化反応における Sn 添加効果に関する理論的研究」、日本化学会第 98 春季年会 (2018)、日本大学理工学部船橋キャンパス、千葉、2018 年 3 月 20 日-23 日
86. 小河 脩平、佐藤 綾香、村上 洸太、中坪 秀彰、岩崎 晃聖、矢部 智宏、石川 敦之、中井 浩巳、関根 泰 (早稲田大学)、「電場触媒反応によるメタン酸化カップリングの低温駆動とその学理」、日本化学会第 98 春季年会 (2018)、日本大学理工学部船橋キャンパス、千葉、2018 年 3 月 20 日-23 日
87. 平賀 健太、五十幡 康弘、中井 浩巳 (早稲田大学)、「非共線的なスピン密度に依存した 2 成分相対論的時間依存密度汎関数理論」、日本化学会第 98 春季年会 (2018)、日本大学理工学部船橋キャンパス、千葉、2018 年 3 月 20 日-23 日
88. 田中 直樹、庄子 良晃、酒井 隼人、羽曾部 卓、五十幡 康弘、王 祺、中井 浩巳、福島 孝典 (早稲田大学)、「テトラアリアルジボラン(4)誘導体の溶液および固体状態における二重蛍光発光」、日本化学会第 98 春季年会 (2018)、日本大学理工学部船橋キャンパス、千葉、2018 年 3 月 20 日-23 日
89. 小河 脩平、佐藤 綾香、石川 敦之、村上 洸太、中坪 秀彰、岩崎 晃聖、矢部 智宏、中井 浩巳、関根 泰 (早稲田大学)、「 $\text{Ce}_2(\text{WO}_4)_3$ 触媒を用いた低温電場触媒反応によるメタン酸化カップリングの反応メカニズム」、第 121 回触媒討論会、東京大学駒場キャンパス、東京、2018 年 3 月 22 日-23 日

(波田グループ)

90. 阿部 穰里、Geetha Gopakumar、波田 雅彦 (首都大学東京)、Bhanu Pratap Das、舘脇 洋、Devashis Mukherjee、「Application of a Relativistic Coupled-Cluster Theory to the Effective Electric Field in YbF 」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 ES 総合館、愛知、2014 年 5 月 22-24 日
91. 波田 雅彦 (首都大学東京)、「相対論的量子化学を基礎にした化学現象の精密解析」、第 5 回 CMSI 研究会、東北大学、宮城、2014 年 12 月 8-10 日
92. 砂賀 彩光、阿部 穰里、Bhanu Pratap Das、波田 雅彦 (首都大学東京)、「異核 2 原子分子における scalar-pseudoscalar 相互作用の量子化学的研究」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2015 年 9 月 16-19 日
93. Radhika Narayanan、Kensuke Inomata、Geetha Gopakumar、Bharamurugan Sivaraman、Yasunari Zempo、Masahiko Hada (首都大学東京)、「Theoretical study of infrared frequencies of solid phase methyl acetate under interstellar medium conditions」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2015 年 9 月 16-19 日
94. 浅井 久瑠美、阿部 穰里、Frederic Moynier、善甫 康成、波田 雅彦 (首都大学東京)、「マントル・コア間での亜鉛同位体分別に関する理論的予測」、第 16 回大つくば物理化学セミナー、群馬大学草津セミナーハウス、群馬、2015 年 11 月 6-7

日

95. 菅野 翔平、今村 穰、波田 雅彦（首都大学東京）、「スピン禁制励起を用いた色素増感太陽電池材料の設計」、第 16 回大つくば物理化学セミナー、群馬大学草津セミナーハウス、群馬、2015 年 11 月 6-7 日
96. 浅井 久瑠美、阿部 穰里、Frederic Moynier、善甫 康成、波田 雅彦（首都大学東京）、「マントル-コア間における亜鉛同位体分別の理論的研究」、第 14 回同位体科学研究会、産業技術総合研究所 臨海副都心センター、東京、2016 年 3 月 11 日
97. 菅野 翔平、今村 穰、波田 雅彦（首都大学東京）、「スピン禁制励起を用いた増感色素の理論的設計」、日本化学会第 96 春季年会(2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24-27 日
98. 砂賀 彩光、阿部 穰里、Bhanu Pratap Das、波田 雅彦（首都大学東京）、「電子 EDM 探査のための相対論的量子化学計算による有効電場の解析」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2016 年 5 月 23-25 日
99. 砂賀 彩光、阿部 穰里、Bhanu Pratap Das、波田 雅彦（首都大学東京）、「電子 EDM 探査のための有効電場解析: XH 分子と XF 分子の比較」、日本コンピュータ化学会 2016 年春季年会、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2016 年 6 月 2-3 日
100. 菅野 翔平、今村 穰、波田 雅彦（首都大学東京）、「スピン禁制励起を用いた色素増感太陽電池材料の理論的設計」、日本コンピュータ化学会 2016 年春季年会、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2016 年 6 月 2-3 日
101. 阿部 穰里、今福 裕史、Mike W. Schmidt、波田 雅彦（首都大学東京）、「重原子分子における対角ボルン-オッペンハイマー近似補正 / Diagonal Born-Oppenheimer approximation in heavy element molecules」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13-15 日
102. 砂賀 彩光、阿部 穰里、Bhanu Pratap Das、波田 雅彦（首都大学東京）、「電子 EDM 探査に向けた重原子分子の電子状態解析と有効電場計算」、第 17 回大つくば物理化学セミナー、城西大学鋸南セミナーハウス、千葉、2016 年 11 月 26-27 日
103. 小野 克真、浅井 久瑠美、阿部 穰里、今村 穰、善甫 康成、Frederic Moynier、波田 雅彦（首都大学東京）、「地球内部での亜鉛同位体分別に関する第一原理計算」、第 17 回大つくば物理化学セミナー、城西大学鋸南セミナーハウス、千葉、2016 年 11 月 26-27 日
104. 筒井 隆史、阿部 穰里、Bhanu Pratap Das、波田 雅彦（首都大学東京）、「電子 EDM 探査に向けた相対論的多配置電子相関理論: BiO 分子への応用」、第 17 回大つくば物理化学セミナー、城西大学鋸南セミナーハウス、千葉、2016 年 11 月 26-27 日
105. Velloth Archana、今村 穰、兒玉 健、波田 雅彦（首都大学東京）、「Electronic structures and stability of metal encapsulated C₈₀ fullerenes: Ab initio DFT study」、

第 52 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン 総合シンポジウム、東京大学本郷キャンパス、東京、2017 年 3 月 1-3 日

106. 菅野 翔平、今村 穰、佐伯 昭紀、波田 雅彦（首都大学東京）、「有機無機ハイブリッドペロブスカイトにおける振動及び回転運動に関する理論的検討」、第 64 回応用物理学会春季学術講演会、パシフィコ横浜、神奈川県、2017 年 3 月 14-17 日

107. 今村 穰、田代 基慶、河東田 道夫、波田 雅彦（首都大学東京）、「有機薄膜太陽電池における新規ドナー材料の理論的探索」、第 64 回応用物理学会春季学術講演会、パシフィコ横浜、神奈川県、2017 年 3 月 14-17 日

108. Velloth Archana、今村 穰、兒玉 健、波田 雅彦（首都大学東京）、「Theoretical study on the electronic structures and stability of metal encapsulated C₈₀ fullerenes」、日本化学会第 97 春季年会(2017)、慶応大学日吉キャンパス、神奈川県、2017 年 3 月 16-19 日

109. 今村 穰、田代 基慶、河東田 道夫、波田 雅彦（首都大学東京）、「計算科学を用いた有機薄膜太陽電池の新規材料の探索」、日本化学会第 97 春季年会(2017)、慶応大学日吉キャンパス、神奈川県、2017 年 3 月 16-19 日

110. 菅野 翔平、今村 穰、佐伯 昭紀、波田 雅彦（首都大学東京）、「ペロブスカイト太陽電池における有機カチオンの回転運動に関する理論的研究」、日本化学会第 97 春季年会(2017)、慶応大学日吉キャンパス、神奈川県、2017 年 3 月 16-19 日

111. 今村 穰、田代 基慶、河東田 道夫、波田 雅彦（首都大学東京）、「計算科学による高効率な有機薄膜太陽電池材料の探索と設計」、第 20 回理論化学討論会、京都大学 100 周年時計台記念館、京都、2017 年 5 月 16-18 日

(中嶋グループ)

112. 今村 穰、神谷 宗明、中嶋 隆人（理化学研究所）、「光機能材料に対する 2 成分相対論的時間依存密度汎関数理論の応用」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学、愛知、2014 年 5 月 23 日

113. 今村 穰、神谷 宗明、中嶋 隆人（理化学研究所）、「高効率な色素増感太陽電池材料の設計に向けた理論的研究」、第 7 回分子科学討論会 2014 広島、広島大学、広島、2014 年 9 月 23 日

114. 中嶋 隆人（理化学研究所）、澤田 啓介、「京コンピュータを利用した非鉛化ペロブスカイト太陽電池の探索」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日

(長谷川グループ)

115. 北川 裕也（北海道大学）、「量子化学の現状と相対論的量子化学に対する期待」、元素戦略 CREST 合同研究会「物性理論と量子化学の接点～相対論の視点を中心として」、メーブル有馬、兵庫、2014 年 12 月 25 日-26 日

116. 屋内 一馬、長谷川 淳也（北海道大学）、「凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用の理論的解析」、化学系学協会北海道支部 2015 年冬季研究発表会、北海道大学 札幌キャンパス、北海道、2015 年 1 月 27 日-28 日

117. 大保 政貴、中山 哲、依馬 正、長谷川 淳也(北海道大学)、「第四級アンモニウムヒドロキシド触媒による CO₂ 固定化反応の理論的解析」、日本化学会 第 95 春季年会 (2015)、日本大学 理工学部船橋キャンパス、千葉、2015 年 3 月 26 日-29 日
118. 渡邊恵二郎、中谷直輝、中山哲、東雅大、長谷川淳也(北海道大学)、「系間交差を経由する反応経路の理論的研究:モリブデノセンの配位子結合反応」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
119. 屋内一馬、石村和也、Mike Schmidt、Mark Gordon、長谷川淳也(北海道大学)、「凝縮系の電荷分離状態における分子間相互作用に関する理論的研究」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
120. 渡邊恵二郎、東雅大、中谷直輝、中山哲、長谷川淳也(北海道大学)、「系間交差を経由する反応経路の理論的研究:モリブドセンにおける CO と H₂ の吸着」、化学系学協会北海道支部 2016 年冬季研究発表会、北海道大学、北海道、2016 年 1 月 19 日-20 日
121. Liming Zhao, Naoki Nakatani, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study of Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of Ketones: A New Insight into a Classical Problem」、化学系学協会北海道支部 2017 年冬季研究発表会、北海道大学、北海道、2017 年 1 月 17 日-18 日
122. 長谷川淳也、中山哲(北海道大学)、「系間交差の計算化学」、統合物質創製化学研究推進機構 第三回国内シンポジウム、京都大学、京都、2017 年 10 月 30-31 日
- (平田グループ)
123. 山田 朋範、Ryan Brewster、平田 聡(イリノイ大学アーバナ・シャンペン校)、「漸近展開法による二電子積分の高速計算」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、京都、2013 年 9 月 24 日-27 日
- (青木グループ)
124. 青木 百合子(九州大学)、Liu Kai、Xie Peng、折本 裕一、「An efficient searching of optimized geometries for proteins and DNA by ELG-OPT method」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、京都、2013 年 9 月 24 日-27 日
125. 筒井 亮太、Liu Kai、折本 裕一、青木 百合子(九州大学)、「含金属ヘテロナノチューブの電子状態と機能解析に向けた Elongation 法の応用」、第 14 回高分子計算機科学討論会、東京工業大学 蔵前会館、東京、2014 年 3 月 13 日
126. 青木 百合子(九州大学)、阿部 真一、筒井 亮太、Liu Kai、Gu Feng Long、「Elongation 法による高分子の効率的構造最適化と NLO 材料設計」、第 14 回高分子計算機科学討論会、東京工業大学 蔵前会館、東京、2014 年 3 月 13 日
127. 折本 裕一、河村 祐希、Liu Kai、青木 百合子(九州大学)、「超効率的電子状態計算と軌道間相互作用解析による人工 DNA の理論的機能設計」、第 8 回分

子科学討論会 2014 東広島、広島大学 東広島キャンパス、広島、2014 年 9 月 21 日-24 日

128. 折本 裕一、河村 祐希、Kai Liu、青木 百合子(九州大学)、「 π 電子集積体としての天然・人工 DNA の超効率的 $O(N)$ 電子状態計算とその特性解析」、第 63 回高分子討論会、長崎大学 文教キャンパス、長崎、2014 年 9 月 24 日-26 日
129. 折本 裕一、青木 百合子(九州大学)、「機能性人工核酸の理論的分子設計～導電性・強磁性・非線形光学特性～」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2015 年 9 月 16 日-19 日
130. 山本 瞳、水上 渉、木村 加奈、北條 元、青木 百合子(九州大学)、永長 久寛、「第一原理計算による Pt-Rh バイメタリックナノ粒子触媒の物性評価」、第 120 回触媒討論会、愛媛大学城北キャンパス、愛媛、2017 年 9 月 12 日-14 日
131. 坂上 弘樹、水上 渉、青木 百合子(九州大学)、「Zr,Hf を導入した不均一系 Ziegler-Natta 触媒の理論化学的研究」、第 120 回触媒討論会、愛媛大学城北キャンパス、愛媛、2017 年 9 月 12 日-14 日
132. 青木 百合子(九州大学)、水上 渉、伊藤 雅浩、折本 裕一、「Elongation 法による生体高分子の効率的構造最適化および反応解析法」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日
133. 折本 裕一、汐見 彩花、青木 百合子(九州大学)、「生体分子の反応機構解明と機能設計を目指した量子化学的手法開発とその応用」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日
134. 寺前 裕之、青木 百合子(九州大学)、「モデル DNA の Hartree-Fock 計算」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日

(森グループ)

135. 黒木 菜保子、川島 愛咲、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「有効フラグメントポテンシャル法による分子間相互作用の記述精度：ハロゲン結合の場合」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、大阪、2015 年 5 月 20 日-22 日
136. 海崎 純男、城谷 大、Jamie L. Lunkley、Gilles Muller、佐藤 久子、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「 Δ -SAPR-8-M[Ln^{III}((+)-hfbc)₄](M⁺=Na,K,Rb,Cs): hfbc=heptafluorobutyrylcamphorato) 錯体のキラル分光：円二色性・円偏光ルミネセンス・振動円二色性」、第 32 回希土類討論会、かごしま県民交流センター、鹿児島、2015 年 5 月 21 日-22 日
137. 宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「相対論的第一原理計算に基づくサブナノサイズ遷移金属クラスターの大域的構造探索および物性解析」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学 京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
138. 森 寛敏、松田 彩(お茶の水女子大学)、「Pd・Pt を成分としたナノ粒子の電子構造と水素吸蔵特性の相関：相対論的電子論に基づく考察」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学 京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日

139. 黒木 菜保子、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「有効フラグメントポテンシャル法を用いた分子動力学計算によるイオン液体の溶液構造調査」、日本化学会第96 春季年会 (2016)、同志社大学 京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
140. 黒木 菜保子、谷中 あゆみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「特異な分子構造特性を基盤とした創薬のための量子化学計算:カルコゲン相互作用の場合」、日本薬学会第 136 年会 (横浜)、パシフィコ横浜、神奈川、2016 年 3 月 26 日-29 日
141. 黒木 菜保子、鈴木 祐里絵、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「特異な分子構造特性を基盤とした創薬のための量子化学計算(2):ハロゲン結合相互作用の場合」、日本薬学会第 136 年会 (横浜)、パシフィコ横浜、神奈川、2016 年 3 月 26 日-29 日
142. 宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「相対論的第一原理計算に基づくサブナノサイズ金属クラスターの触媒活性に関する理論的考察」、第 14 回ナノ学会、北九州国際会議場、福岡、2016 年 6 月 14 日-16 日

国際会議

(中井グループ)

1. Masaki Okoshi, Yuta Takada, Takeshi Yoshikawa, Patchreenart Saparpakorn, and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Theoretical study on the mechanism of fluorescence enhancement of PicoGreen”, 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17), Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailand, March 27-29, 2013.
2. Junji Seino and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Overall linear-scaling relativistic scheme based on local unitary transformation and divide-and-conquer method”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, July 10-13, 2013.
3. Takeshi Yoshikawa and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Acceleration of large-scale calculation with GPGPU: hybrid of divide-and-conquer method and resolution-of-identity approximation”, Third International Symposium on Computational Sciences (ISCS2013), Tian Lin Hotel, Shanghai, China, November 18-20, 2013.
4. Junji Seino, Yuya Nakajima, and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Efficient relativistic quantum theory and its analytical energy gradient scheme for large molecule”, XVIIIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XVIII), Paraty, Rio de Janeiro, Brazil, December 1-7, 2013.
5. Yoshifumi Nishimura, “Development of linear-scaling divide-and-conquer density-functional tight-binding program: massively parallel DC-DFTB calculations on the K computer”, 5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward exascale computing, Tokyo, Japan, November 26-27, 2015.
6. Masahiko Nakano, Ryota Nakamura, Junji Seino, and Hiromi Nakai (早稲田大学),

“Relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.

7. Masaki Okoshi, Patchreenart Saparpakorn, Yuta Takada, Supa Hannongbua, and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Theoretical Study on the Mechanisms of the Selective Fluorescence of PicoGreen”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
8. Junji Seino, Yuya Nakajima, and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Accurate two-component relativistic theory based on local unitary transformation and frozen potential schemes for large molecules including heavy elements”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
9. Yoshifumi Nishimura, Hiroaki Nishizawa, Masato Kobayashi, Stephan Irle, and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Development of massive parallel code for quantum mechanical molecular dynamics simulations: DC-DFTB-K program”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
10. Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Application of divide-and-conquer type density-functional tight-binding simulation for proton diffusion in bulk water system”, Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan, January 25–28, 2016.
11. Yuya Nakajima, Junji Seino, Mike Schmidt, and Hiromi Nakai (早稲田大学), “Implementation of efficient infinite-order two-component relativistic scheme into GAMESS”, Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan, January 25–28, 2016.
12. Takeshi Yoshikawa, “Excited-state calculation method using dynamical polarizabilities for large systems based on divide-and-conquer method”, Third China-Japan-Korea tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-III) - Theory for Excited State Phenomena, KAIST, Daejeon, Korea, January 10–13, 2017.

(波田グループ)

13. Minori Abe, Geetha Gopakumar, Masahiko Hada (首都大学東京), Bhanu Pratap Das, Hiroshi Tatewaki, and Devashis Mukherjee, “Application of a Relativistic Coupled-Cluster Theory to the Effective Electric Field in YbF”, 11th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (REHE-2014), Smolenice castle, Bratislava, Slovakia, September 20–24, 2014
14. Masahiko Hada (首都大学東京), Narayanan Radhika, and Masaichi Saito, “Electronic Structure and ^{13}C - and ^{207}Pb -NMR chemical shifts of dirhodium and dilithioplumbolene complexes: a quantum chemical analysis”, The Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL2016), Radisson Victoria Plaza, Montevideo, Uruguay, November 20–25, 2016.
15. Minori Abe, Geetha Gopakumar, Bhanu Pratap Das, Hiroshi Tatewaki, Devashis Mukherjee, and Masahiko Hada (首都大学東京), “Molecular four-component relativistic coupled cluster method for the determination of the electron’s EDM”,

Exploring Fundamental Physics using Atomic Systems (EFPAS2015), Physical Research laboratory, Ahmedabad, India, May 7–10, 2015.

16. Ayaki Sunaga, Minori Abe, Bhanu Pratap Das, and Masahiko Hada (首都大学東京), “Why HgF has Larger W_s than other XF molecules”, 8th International Workshop on "Fundamental Physics Using Atoms" (FPUA2015) RIKEN, Wako, Japan, November 30–December 1, 2015
17. Archana Velloth, Hiroshi Sakiyama, and Masahiko Hada (首都大学東京), “Correlating magnetic exchange in dinuclear bis(phenolate)-bridged complexes: A computational perspective”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
18. Radhika Narayanan, Masaichi Saito, and Masahiko Hada (首都大学東京), “ ^{13}C - and ^{207}Pb -NMR chemical shifts of dirhodium and dilithioplumbale complexes: A quantum chemical assessment”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016), BITEC, Bangkok, Thailand, February. 9–11, 2016.
19. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Hiroshi Sakiyama, and Masahiko Hada (首都大学東京), “Origin of magnetic anisotropy in high spin Co(II) complexes: A Theoretical Perspective”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016), BITEC, Bangkok, Thailand, February 9–11, 2016.
20. Ayaki Sunaga, Minori Abe, Bhanu Pratap Das, and Masahiko Hada (首都大学東京), “Analysis of large effective electric fields of weakly polar molecules for eEDM searches”, The 9th International Workshop on Fundamental Physics Using Atoms (FPUA), Katsura Campus, Kyoto University, Tokyo, January 9–10, 2017.

(中嶋グループ)

21. Yutaka Imamura, Muneaki Kamiya, Takahito Nakajima (理化学研究所), Theoretical Study on Solar Cell Sensitizers by Two-component Relativistic Time-dependent Density Functional Theory, the 19th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XIX), Taipei (Taiwan), November 13, 2014.

(長谷川グループ)

22. Jun-ya Hasegawa (北海道大学), “Excited States and Molecular Interactions in Proteins and Solutions”, Catalysis Research Center (CRC)-Fritz Haber Institute (FHI) Mini Symposium, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin, Germany, October 28, 2014.
23. Jun-ya Hasegawa (北海道大学), “Transition states of spin-crossing reactions”, BIC-ICAT Workshop, Hokkaido University, Sapporo, August 25, 2016.

(平田グループ)

24. So Hirata (イリノイ大学アーバナ・シャンペン校), “Stochastic evaluation of second-order many-body perturbation corrections to energies and Dyson self-energies”, 246th American Chemical Society (ACS) National Meeting & Exposition, Indianapolis, Indiana, USA, September 8–12, 2013.

(青木グループ)

25. Yuki Furutani, and Yuriko Aoki (九州大学), “A quantum chemical study on cathode active materials of organic radical-molecules in secondary battery”, 16th Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology (16th

- CSS-EEST), Shineville Luxury Resort, Jeju, Korea, November 13–15, 2014.
26. Hiroyuki Teramae and Yuriko Aoki (九州大学), “An Attempt at Ab Initio Crystal Orbital Calculation of Electronic Structure of B-type model-DNA”, ICCMSE 2017, The Met Hotel, Thessaloniki, Greece, April 21–25, 2017.
 27. Hiroyuki Teramae and Yuriko Aoki (九州大学), “Ab Initio Electronic Structure Calculation of Polymononucleotide, a Model of B-type DNA”, ICCMSE 2018, The Met Hotel, Thessaloniki, Greece, March 14–18, 2018.

(森グループ)

28. Hirotoshi Mori, Aya Matsuda, Mariusz Klobukowski (お茶の水女子大学), “Structure and vibrations of lanthanide trifluoride (LnF_3) embedded in noble gas matrix: Application of large-scale ab initio relativistic molecular orbital theory”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.

③ ポスター発表 (国内会議 211 件、国際会議 123 件)

国内会議

(中井グループ)

1. 大越 昌樹、中井 浩巳(早稲田大学)、「リチウムイオン電気デバイスに用いられる有機電解質溶媒の分解特性および輸送特性に関する理論的研究」、第 35 回溶液化学シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、2012 年 11 月 12 日–14 日
2. 窪田 崇人、西澤 宏晃、中井 浩巳(早稲田大学)、Stephan Irle、「密度汎関数強束縛型分子動力学(DFTB-MD)法による二酸化炭素回収・貯蔵(CCS)技術の理論的研究」、第 35 回溶液化学シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、2012 年 11 月 12 日–14 日
3. 海寶 丈彰、大越 昌樹、西澤 宏晃、中井 浩巳(早稲田大学)、Stephan Irle、「分割統治型密度汎関数強束縛(DC-DFTB)法によるリチウムイオンデバイスの電気化学特性に関する理論的研究」、第 35 回溶液化学シンポジウム、早稲田大学西早稲田キャンパス、2012 年 11 月 12 日–14 日
4. 小林 正人、Patchreenart Saparpakorn、中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治 MP2 法:エネルギー勾配法の開発と抗ウィルス薬への適用」、RCCS スーパーコンピュータワークショップ 2013「理論と計算科学による新たな展開と可能性を探る」、岡崎コンファレンスセンター、2013 年 1 月 22 日–23 日
5. 中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「一般化スピン軌道に対応した分割統治法に基づく大規模電子相関計算手法の開発」、第 16 回理論化学討論会、福岡市健康づくりサポートセンター(あいれふ)、2013 年 5 月 15 日–17 日
6. 速水 雅生、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「随伴座標展開-漸化関係式法に基づく一般縮約ガウス関数に対応した電子反発積分手法の開発」、第 16 回理論化学討論会、福岡市健康づくりサポートセンター(あいれふ)、2013 年 5 月 15 日–17 日
7. 吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、「CUDA/OpenACC を用いた GPU による分割統治法の高速度化」、日本コンピュータ化学会 2013 春季年会、東京工業大学

大岡山キャンパス、2013 年 5 月 30 日–31 日

8. 野中 佑太郎、吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、「動的分極率計算に基づく励起状態計算法: 汎用アルゴリズムの開発」、日本コンピュータ化学会 2013 春季年会、東京工業大学大岡山キャンパス、2013 年 5 月 30 日–31 日
9. 中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「スピン依存 2 成分相対論法に基づく分割統治型電子相関理論の開発」、日本コンピュータ化学会 2013 春季年会、東京工業大学大岡山キャンパス、2013 年 5 月 30 日–31 日
10. 速水 雅生、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「一般縮約基底関数に対応した電子反発積分手法の開発:GC-ACE-RR 法」、日本コンピュータ化学会 2013 春季年会、東京工業大学大岡山キャンパス、2013 年 5 月 30 日–31 日
11. 塚本 祐介、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「金属表面における飽和炭化水素の物理吸着に関する理論的研究」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、2013 年 9 月 24 日–27 日
12. 中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論効果と電子相関効果を同時に取り込んだ大規模計算法の開発」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、2013 年 9 月 24 日–27 日
13. 中嶋 裕也、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「重元素化合物に対する相対論的構造最適化計算」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、2013 年 9 月 24 日–27 日
14. 五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「局所応答分散力法の改良と汎関数依存性の検証」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、2013 年 9 月 24 日–27 日
15. 石川 敦之、市川 滉貴、出牛 史子、菊池 那明、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算による金属クラスター触媒反応に対する担体効果の研究」、第 113 回触媒討論会、ロワジールホテル豊橋、2014 年 3 月 26 日–27 日
16. 五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「結合エネルギー密度解析を用いた非局所スピン間相互作用の解析」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 5 月 22 日–24 日
17. 王 祺、五十幡 康弘、森田 靖、中井 浩巳(早稲田大学)、「Photo-absorption properties of pi-stacking structures of trioxotriangulene derivatives」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 5 月 22 日–24 日
18. 中嶋 裕也、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「重元素化合物に対する相対論的構造最適化計算(2)」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 東山キャンパス、2014 年 5 月 22 日–24 日
19. 中井 浩巳(早稲田大学)、饗庭 理沙、西澤 宏晃、五十幡 康弘、Feng Wang、「核・電子軌道(NOMO)理論を用いた電子-陽電子消滅 γ 線スペクトルの理論研究」、日本コンピュータ化学会 2014 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2014 年 5 月 29 日–30 日
20. 五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「結合エネルギー密度解析による分子

間磁氣的相互作用の解析」、日本コンピュータ化学会 2014 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2014 年 5 月 29 日-30 日

21. 速水 雅生、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「重原子化合物の電子反発積分に適した新たな随伴座標展開-漸化関係式法の開発」、日本コンピュータ化学会 2014 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2014 年 5 月 29 日-30 日
22. 石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「Quantum chemistry calculation for condensed-phase free energy: application to chemical reactions in solution」、第 30 回化学反応討論会、イーグレ姫路、2014 年 6 月 4 日-6 日
23. 中野 匡彦(早稲田大学)、「高精度・高効率な相対論的電子相関計算法の開発」、第 54 回 分子科学若手の会 夏の学校、石川県志賀町 いこいの村能登半島、2014 年 8 月 18 日-22 日
24. 寺西 慶、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「調和溶媒和モデル(HSM)による CO₂ 化学吸収法の熱力学計算」、第 8 回分子科学討論会 2014 東広島、広島大学 東広島キャンパス、2014 年 9 月 21 日-24 日
25. 石川 敦之、出牛 史子、中井 浩巳(早稲田大学)、「酸化物表面の原子欠陥と金属クラスターの吸着エネルギー:エネルギー密度解析法による理論的研究」、第 8 回分子科学討論会 2014 東広島、広島大学 東広島キャンパス、2014 年 9 月 21 日-24 日
26. 大越 昌樹、渥美 照夫、中井 浩巳(早稲田大学)、「電子相関エネルギーの外挿法: CBS(sDT)」、第 8 回分子科学討論会 2014 東広島、広島大学 東広島キャンパス、2014 年 9 月 21 日-24 日
27. 寺西 慶、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「調和溶媒和モデル(HSM)による CO₂ 化学吸収法の熱力学計算」、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日-16 日
28. 大越 昌樹、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「Li イオン二次電池における溶媒・キャリアイオンとその相互作用に関する理論的研究」、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日-16 日
29. 海寶 丈彰、窪田 崇人、西村 好史、中井 浩巳(早稲田大学)、「密度汎関数強束縛分子動力学(DFTB-MD)法による二酸化炭素化学吸収法に関する理論的研究」、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日-16 日
30. 中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「スピナー軌道相互作用を露わに考慮した大規模・高精度な相対論的量子化学計算法の開発」、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日-16 日
31. 中嶋 裕也、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「遷移金属錯体の生成エンタルピー計算に対する相対論効果」、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日-16 日

32. 塚本 祐介、五十幡 康弘、Jonathan Romero、Andres Reyes、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算による効率的なプロトン親和力の計算手法」、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日-16 日
33. 西村 好史(早稲田大学)、「CO₂分離回収過程の DC-DFTB シミュレーション」、計算分子科学研究拠点 第 5 回研究会、自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター、2014 年 10 月 17 日-18 日
34. 寺西 慶、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「CO₂ 分離回収過程に関する自由エネルギー計算」、計算分子科学研究拠点 第 5 回研究会、自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター、2014 年 10 月 17 日-18 日
35. 中井 浩巳(早稲田大学)、中嶋 隆人、今村 穰、神谷 宗明、清野 淳司、菊池 那明、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、元素戦略/希少金属代替材料開発 第 9 回合同シンポジウム、東京国際フォーラム、2015 年 2 月 24 日
36. 中村 亮太、中野 匡彦、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「時間反転対称性を利用した新規相対論的開殻 Hartree-Fock 法の開発 : KROHF 法」、日本化学会 第 95 春季年会 (2015)、日本大学 理工学部船橋キャンパス、2015 年 3 月 26 日-29 日
37. 岩撫 徹、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「陽電子消滅 γ 線スペクトルに関する理論的研究:環状化合物への応用」、日本化学会 第 95 春季年会 (2015)、日本大学 理工学部船橋キャンパス、2015 年 3 月 26 日-29 日
38. 五十幡 康弘、塚本 祐介、中井 浩巳(早稲田大学)、「大規模系に対するプロトン束縛エネルギー計算手法の開発とその応用」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、2015 年 5 月 20 日-22 日
39. 岩撫 徹、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「核・電子軌道法による陽電子消滅 γ 線スペクトルの系統的解析」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、2015 年 5 月 20 日-22 日
40. 速水 雅生、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「重原子化合物の構造最適化計算のための高速な電子反撥積分の微分計算アルゴリズムの開発」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、2015 年 5 月 20 日-22 日
41. 野中 佑太郎、吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治型自己無撞着場計算における収束性の改善」、日本コンピュータ化学会 2015 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 5 月 28 日-29 日
42. 岩撫 徹、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「陽電子消滅に関する理論的研究: γ 線スペクトル半値幅の系統的解析」、日本コンピュータ化学会 2015 春季年会、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 5 月 28 日-29 日
43. 石川 敦之、鎌田 将宏、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算による気体の溶解度:調和溶媒和モデルによる検討」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
44. 吉川 武司、王 祺、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「動的分極率を用いた非局所励起状態計算手法の開発:密度汎関数理論によるアプローチ」、第 9

回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日

45. 吉原 詢也、吉川 武司、中井 浩巳(早稲田大学)、「動的分配率を用いた非局所励起状態計算手法の開発:波動関数理論によるアプローチ」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
46. 出牛 史子、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「金属ナノ粒子上での吸着活性化への担体効果に関する理論的研究」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
47. Aditya Wibawa Sakti、Yoshifumi Nishimura、Hiromi Nakai(早稲田大学)、「Divide and Conquer type Density Functional based Tight Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Simulation of Proton Transfer in Bulk Water System」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
48. 若山 和史、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「局所応答分散力(LRD)法に基づく分極型力場の開発」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
49. 寺西 慶、石川 敦之、佐藤 裕、中井 浩巳(早稲田大学)、「CO₂ 分離・回収に用いるアミンの熱力学計算:高精度量子化学計算による検討」、第 5 回 CSJ 化学フェスタ 2015、タワーホール船堀、東京、2015 年 10 月 13 日-15 日
50. 西村 好史、「化学反応シミュレーションによる CO₂ 分離回収のためのアミン溶液の探索」、第 2 回 HPCI 利用研究課題成果報告会、日本科学未来館、東京、2015 年 10 月 26 日
51. 西村 好史、Sakti Aditya Wibawa、中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法によるプロトン拡散シミュレーション」、第 6 回 CMSI 研究会(戦プロ最終成果報告会)、東京大学本郷キャンパス小柴ボール、東京、2015 年 12 月 7 日-8 日
52. 中野 匡彦、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、理工学研究所、第 1 種行事「若手研究者研究成果報告会、理工研シンポジウム」、早稲田大学西早稲田キャンパス、東京、2016 年 3 月 11 日
53. 西村 好史、「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB)法によるプロトン拡散シミュレーション」、TCCI 第 6 回研究会、自然科学研究機構、岡崎コンファレンスセンター、愛知、2016 年 3 月 14 日-15 日
54. 石川 敦之、出牛 史子、中井 浩巳(早稲田大学)、「金属ナノ粒子による CO 酸化反応に関する理論的研究: CO 被覆率及び担体効果に関する検討」、第 117 回触媒討論会、大阪府立大学、東京、2016 年 3 月 21 日-22 日
55. 平井 貴裕、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「周期的境界条件を取り込んだ埋め込みクラスターモデルの開発」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日

56. 平賀 健太、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「2 成分相対論に基づく励起状態計算のプログラム実装と応用計算」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
57. 出牛 史子、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「NO 還元反応における Rh 触媒のサイズ効果に関する理論的研究」、日本化学会第 96 春季年会 (2016)、同志社大学京田辺キャンパス、京都、2016 年 3 月 24 日-27 日
58. 石川 敦之、出牛 史子、中井 浩巳(早稲田大学)、「金属ナノ粒子による CO 酸化反応に関する理論的研究 : CO 被覆率及び担体効果の検討」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス 63 号館、東京、2016 年 5 月 23 日-25 日
59. 今井 みの莉、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「調和近似を超えた液相の比熱の量子化学計算」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス 63 号館、東京、2016 年 5 月 23 日-25 日
60. 大山 拓郎、五十幡 康弘、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「Picture change 補正による電子密度を用いた 2 成分相対論的密度汎関数理論の開発」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス 63 号館、東京、2016 年 5 月 23 日-25 日
61. 平賀 健太、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「2 成分相対論的時間依存密度汎関数理論による内殻励起計算」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス 63 号館、東京、2016 年 5 月 23 日-25 日
62. 藤波 美起登、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算と機械学習を用いた化学反応予測システムの開発」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス 63 号館、東京、2016 年 5 月 23 日-25 日
63. 藤波 美起登、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算情報を記述子とした機械学習に基づく反応予測手法の開発」、日本コンピュータ化学会 2016 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2016 年 6 月 2 日-3 日
64. 若山 和史、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「局所応答分散力(LRD)法に基づく非経験的分極型力場の開発」、日本コンピュータ化学会 2016 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2016 年 6 月 2 日-3 日
65. 吉川 武司、中野 匡彦、平田 聡、中井 浩巳(早稲田大学)、「スカラー相対論法に基づく分割統治型電子相関プログラムの自動実装」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
66. 五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「ラジカル1次元鎖の励起状態と光吸収に関する理論的研究」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
67. 王 祺、中井 浩巳(早稲田大学)、「有機ラジカル結晶における電荷キャリア移動度に関する理論的研究」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日

68. 長門 澄香、寺西 慶、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「アミンへのCO₂吸収反応に対する反応シミュレータの開発」、第10回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016年9月13日-15日
69. 土井 俊輝、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「不均一触媒系の反応活性に対する理論的研究:様々な金属種におけるアンモニア合成の解析」、第10回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016年9月13日-15日
70. 出牛 史子、平井 貴裕、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「NO還元反応におけるRhナノクラスターのサイズ効果に関する理論的研究」、第10回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016年9月13日-15日
71. 長門 澄香、寺西 慶、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算と群知能を用いたアミン-CO₂系反応に対する反応シミュレータの開発」、第39回ケモインフォマティクス討論会、静岡大学浜松キャンパス、静岡、2016年9月29日-30日
72. 平井 貴裕、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「Rh表面上でのNO還元反応に対する温度及び圧力効果に関する理論的研究」、第6回CSJ化学フェスタ2016、タワーホール船堀、東京、2016年11月14日-16日
73. 長門 澄香、寺西 慶、清野 淳司、佐藤 裕、古川 行夫、中井 浩巳(早稲田大学)、「アミン-CO₂系反応におけるローディング依存性を予測する反応シミュレータの開発」、第6回CSJ化学フェスタ2016、タワーホール船堀、東京、2016年11月14日-16日
74. 藤波 美起登、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算と機械学習を用いた反応予測システムの開発(2):量子化学計算条件に対する依存性」、第6回CSJ化学フェスタ2016、タワーホール船堀、東京、2016年11月14日-16日
75. 黄 毅聰、西村 好史、小野 純一、鹿又 宣弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学法のシクロファン類の異性化反応への応用」、第30回分子シミュレーション討論会、大阪大学、基礎工学国際棟シグマホール(大阪大学豊中キャンパス)、大阪、2016年11月30日-12月2日
76. 菊池 那明、「白金触媒を用いたトルエンの水素化反応に関する理論的研究」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展:元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟5F、大会議室、北海道、2016年12月13日
77. 清野 淳司、「インフォマティクス技術と量子化学を活用した化学反応予測システムの開発」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展:元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟5F、大会議室、北海道、2016年12月13日
78. 石川 敦之、「RhクラスターによるNO還元反応におけるサイズ効果に関する理論的研究」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展:元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創

成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日

79. 西村 好史、「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学法の開発と応用」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
80. 王 祺、「有機ラジカル結晶における電荷キャリア移動度と分子間振動に関する理論的研究」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
81. 速水 雅生、「次世代汎用相対論的量子化学計算パッケージ RAQET の現状」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
82. 中村 亮太、「カチオン性イリジウム触媒を用いた C-H 活性化反応の理論的研究」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
83. 大山 拓郎、「2 成分相対論的密度汎関数理論における Picture change 効果」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
84. 平井 貴裕、「Rh(111)における NO の吸着・解離に関する理論的研究: 温度および表面構造の効果」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
85. 平賀 健太、「無限次 Douglas-Kroll-Hess 法に基づく相対論的スピン依存密度汎関数理論」、JST-CREST「元素戦略」領域公開シンポジウム、相対論的量子化学の新しい発展: 元素戦略の基盤理論の構築と革新的機能材料設計、北海道大学創成科学研究棟 5F、大会議室、北海道、2016 年 12 月 13 日
86. 西村 好史、「Acceleration of divide-and-conquer DFTB calculation for huge periodic systems」、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 3 回公開シンポジウム、東京大学武田先端知ビル 5 階 武田ホール、東京、2016 年 12 月 15 日-16 日
87. 周 建斌、「Automatized DFTB Parameterization for Transition Metals」、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 3 回公開シンポジウム、東京大学武田先端知ビル 5 階 武田ホール、東京、2016 年 12 月 15 日-16 日
88. Masaki Okoshi, Chien-pin Chou, Hiromi Nakai (早稲田大学)、「凍結内殻ポテンシャル法に基づく金属カチオンの束縛エネルギー計算手法」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日-19 日

89. 赤平 大典、大越 昌樹、菊池 那明、中井 浩巳(早稲田大学)、「Pt 触媒によるトルエンの可逆的水素化における脱メチル化反応機構に関する理論的研究」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日-19 日
90. 黄 毅聰、西村 好史、小野 純一、宮下 裕輔、鹿又 宣弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「凍結内殻ポテンシャル法に基づく金属カチオンの束縛エネルギー計算手法」、日本化学会第 97 春季年会 (2017)、慶應義塾大学日吉キャンパス、神奈川、2017 年 3 月 16 日-19 日
91. 石川 敦之、出牛 史子、中井 浩巳(早稲田大学)、「Rh による NO+CO 反応:密度汎関数法による活性およびそのサイズ効果に関する理論的研究」、第 119 回触媒討論会、首都大学東京八王子キャンパス、東京、2017 年 3 月 21 日-22 日
92. 土井 俊輝、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「アンモニア合成反応の触媒活性に対する理論的研究—第一原理計算による金属種および粒径依存性の検討—」、第 119 回触媒討論会、首都大学東京八王子キャンパス、東京、2017 年 3 月 21 日-22 日
93. 平井 貴裕、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「Rh(111)表面における NO 還元反応に関する理論的研究—温度および表面構造の効果—」、第 119 回触媒討論会、首都大学東京八王子キャンパス、東京、2017 年 3 月 21 日-22 日
94. 中井 浩巳(早稲田大学)、中村 亮太、中嶋 裕也、柴田 高範、高野 秀明、「カチオン性イリジウム触媒を用いた C-H 活性化反応における相対論効果」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
95. 黄 毅聰、西村 好史、小野 純一、鹿又 宣弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「シクロファン異性化反応の密度汎関数強束縛メタダイナミクスシミュレーション」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
96. 小野 純一、今井 みの莉、中井 浩巳(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD 法によるバクテリオロドプシンのプロトン放出基における振動ダイナミクスの解析」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
97. 周 建斌、中井 浩巳(早稲田大学)、「Automatized DFTB Parameterization for Transition Metals」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
98. Qi Wang, Yasuhiro Iwabata, Junji Seino, Hiromi Nakai(早稲田大学)、Yoshiaki Shoji, and Takanori Fukushima, 「Room-Temperature Phosphorescence in Heavy-Metal-Free Molecules」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
99. 大越 昌樹、周 建斌、中井 浩巳(早稲田大学)、「高濃度電解液におけるイオン拡散に関する理論的研究」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)

ス) 時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日

100. 速水 雅生、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「ユニタリー変換を用いた二成分相対論法におけるゲージ原点非依存な核磁気遮蔽定数計算手法の開発」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
101. 影山 棕、藤波 美起登、清野 淳司、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「インフォマティクスを用いた運動エネルギー汎関数の開発」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
102. 櫛嶋 拓朗、五十幡 康弘、清野 淳司、影山 棕、中井 浩巳(早稲田大学)、「インフォマティクスを用いた交換相関汎関数の開発」、第 20 回理論化学討論会、京都大学(吉田キャンパス)時計台国際交流ホール、京都、2017 年 5 月 16 日-18 日
103. 黄 毅聰、西村 好史、小野 純一、鹿又 宣弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「密度汎関数強束縛法を用いたメタダイナミクスに基づくシクロファン異性化反応の自由エネルギー地形解析」、日本コンピュータ化学会 2017 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2017 年 6 月 8 日-9 日
104. Qi Wang, Yasuhiro Iwabata, Junji Seino, Hiromi Nakai(早稲田大学)、Yoshiaki Shoji, and Takanori Fukushima、「Theoretical Investigations on Room-Temperature Phosphorescence of Arylboronic Esters」、日本コンピュータ化学会 2017 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2017 年 6 月 8 日-9 日
105. 影山 棕、藤波 美起登、清野 淳司、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「軌道非依存密度汎関数理論のための運動エネルギー汎関数の開発:機械学習によるアプローチ」、日本コンピュータ化学会 2017 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2017 年 6 月 8 日-9 日
106. 櫛嶋 拓朗、五十幡 康弘、清野 淳司、影山 棕、中井 浩巳(早稲田大学)、「インフォマティクスの交換相関汎関数開発への応用」、日本コンピュータ化学会 2017 春季年会、東京工業大学大学院社会理工学研究科棟、東京、2017 年 6 月 8 日-9 日
107. 櫛嶋 拓朗、五十幡 康弘、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「ABC アルゴリズムを用いた密度汎関数理論におけるパラメータ最適化」、第 13 回進化計算学会研究会、立命館大学びわこ、くさつキャンパス、滋賀、2017 年 9 月 1 日-2 日
108. 長門 澄香、五十幡 康弘、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「人工蜂コロニーアルゴリズムを用いたアミン - CO₂ 吸収反応に関する化学種濃度の予測」、第 13 回進化計算学会研究会、立命館大学びわこ、くさつキャンパス、滋賀、2017 年 9 月 1 日-2 日
109. 平賀 健太、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「非共線的な交換相関項を用いた 2 成分時間依存密度汎関数理論の開発」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日

110. 長門澄香、清野淳司、佐藤裕、中井浩巳(早稲田大学)、「群知能を用いたアミン-CO₂系吸収反応に対する反応シミュレータの開発」、第11回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017年9月15日-18日
111. Chien-Pin Chou、Hiromi Nakai(早稲田大学)、「Refinement of DFTB Parameterization for Metal-Organic Frameworks」、第11回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017年9月15日-18日
112. 河本 奈々、吉川 武司、小野 純一、中井 浩巳(早稲田大学)、「大規模励起状態ダイナミクスのための分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の開発とその応用」、第11回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017年9月15日-18日
113. 樽見 望都、中井 浩巳(早稲田大学)、「剛体近似を用いた調和溶媒和モデル(HSM)法の開発」、第11回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017年9月15日-18日
114. 平井 貴裕、石川 敦之、大越 昌樹、中井 浩巳(早稲田大学)、「剛体近似を用いた調和溶媒和モデル(HSM)法の開発」、第11回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017年9月15日-18日
115. 今井 みの莉、小野 純一、西村 好史、中井 浩巳(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD simulations of bacteriorhodopsin: Proton dynamics along the photocycle」、第55回日本生物物理学会年会、熊本大学黒髪北地区、熊本、2017年9月19日-21日
116. 小野 純一、今井 みの莉、西村 好史、中井 浩巳(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD simulations of bacteriorhodopsin: Delocalization dynamics of an excess proton in proton releasing group」、第55回日本生物物理学会年会、熊本大学黒髪北地区、熊本、2017年9月19日-21日
117. 影山 棕、藤波 美起登、清野 淳司、五十幡 康弘、中井 浩巳(早稲田大学)、「Orbital-free 密度汎関数理論のための機械学習を用いた運動エネルギー汎関数の開発」、第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17日-19日
118. 礪嶋 拓朗、五十幡 康弘、清野 淳司、中井 浩巳(早稲田大学)、「インフォマティクスによる交換相関汎関数の開発」、第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17日-19日
119. 長門 澄香、清野 淳司、佐藤 裕、中井 浩巳(早稲田大学)、「群知能によるアミン-CO₂吸収反応シミュレータの開発と熱力学量の算出」、第7回 CSJ 化学フェスタ 2017、タワーホール船堀、東京、2017年10月17日-19日
120. 周 建斌、中井 浩巳(早稲田大学)、「Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Metal-Organic Frameworks」、PCoMS シンポジウム&計算物質科学スパコン共用事業報告会 2017、東北大学片平キャンパス、宮城、2017年11月9日-10日
121. 大越 昌樹、周 建斌、中井 浩巳(早稲田大学)、「Na イオン二次電池用高濃度電解液におけるイオン伝導に関する理論的研究」、北大理論化学研究会:実践

理論化学の最前線、北海道大学、北海道、2017 年 11 月 16 日-17 日

122. 西村 好史、Aditya Wibawa Sakti、周 建斌、中井 浩巳(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD simulations of excess proton diffusion in ordered/disordered water configurations」、第 31 回分子シミュレーション討論会、金沢商工会議所、石川、2017 年 11 月 29 日-12 月 1 日
123. 河本 奈々、吉川 武司、小野 純一、中井 浩巳(早稲田大学)、「DC-DFTB-MD simulations of excess proton diffusion in ordered/disordered water configurations」、第 31 回分子シミュレーション討論会、金沢商工会議所、石川、2017 年 11 月 29 日-12 月 1 日
124. 河本 奈々、吉川 武司、小野 純一、中井 浩巳(早稲田大学)、「分割統治型理論に基づく大規模励起状態ダイナミクス手法の開発: DC-TDDFTB-MD 法」、ポスト京第4回公開シンポジウム、神戸大学ポートアイランドセンター、兵庫、2017 年 12 月 11 日-12 日
125. 周 建斌(早稲田大学)、「Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Metal-Organic Frameworks」、ポスト京第4回公開シンポジウム、神戸大学ポートアイランドセンター、兵庫、2017 年 12 月 11 日-12 日
126. 中井 浩巳(早稲田大学)、「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」、元素戦略・大型研究施設連携シンポジウム、東京体育館内会議室、東京、2018 年 2 月 5 日-6 日
127. 西田 秀之、西村 好史、周 建斌、大越 昌樹、Aditya Wibawa Sakti、中井 浩巳(早稲田大学)、「Li イオン電池用電解液のための密度汎関数強束縛法の Li に対するパラメータ構築とキャリアイオンダイナミクスへの応用」、日本化学会第 98 春季年会 (2018)、日本大学理工学部船橋キャンパス、千葉、2018 年 3 月 20 日-23 日
128. 稲森 真由、五十幡 康弘、王 祺、中井 浩巳(早稲田大学)、「量子化学計算を用いた円錐交差に関する化学特性の探索」、日本化学会第 98 春季年会 (2018)、日本大学理工学部船橋キャンパス、千葉、2018 年 3 月 20 日-23 日
129. 田中 茉莉奈、平井 貴裕、大越 昌樹、中井 浩巳(早稲田大学)、「トルエンの可逆的水素化における Pt 触媒への Sn 添加効果に関する理論的研究」、第 121 回触媒討論会、東京大学駒場キャンパス、東京、2018 年 3 月 22 日-23 日
130. 平井 貴裕、大越 昌樹、石川 敦之、中井 浩巳(早稲田大学)、「Rh 表面での NO-CO 反応の温度・圧力依存性に関する理論的検討」、第 121 回触媒討論会、東京大学駒場キャンパス、東京、2018 年 3 月 22 日-23 日

(波田グループ)

131. 豊田 泰全、干場 興志郎、阿部 穰里、崎山 博史、波田 雅彦(首都大学東京)、「反強磁性二核コバルト(II)錯体の電子状態に関する理論的研究」、日本コンピュータ化学会 2012 年秋季年会、山形大学、2012 年 10 月 13-14 日
132. 浅井 久瑠美、阿部 穰里、波田 雅彦(首都大学東京)、藤井 靖彦、「エチレンジアミン四酢酸(EDTA)錯体を用いた鉛同位体交換反応」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 ES 総合館、2014 年 5 月 22-24 日

133. 宇梶 かすみ、阿部 穰里、波田 雅彦（首都大学東京）、「高スピン Fe(IV)オキソポルフィリン錯体によるオレフィンのエポキシ化反応」、第 17 回理論化学討論会、名古屋大学 ES 総合館、2014 年 5 月 22-24 日
134. 浅井 久瑠美、阿部 穰里、波田 雅彦（首都大学東京）、藤井 靖彦、「エチレンジアミン四酢酸(EDTA)錯体を用いた鉛同位体交換反応」、日本コンピュータ化学会 2014 春季年会、東京工業大学、2014 年 5 月 29-30 日
135. 宇梶 かすみ、阿部 穰里、波田 雅彦（首都大学東京）、「高スピン Fe(IV)ポルフィリン錯体によるオレフィンのエポキシ化反応:CASPT2 の理論研究」、日本コンピュータ化学会 2014 春季年会、東京工業大学、2014 年 5 月 29-30 日
136. 吉澤 輝高、波田 雅彦（首都大学東京）、「Douglas-Kroll-Hess 法による磁気的物性値計算法の開発:gauge 原点依存性について」、第 8 回分子科学討論会 2014 東広島、広島大学、2014 年 9 月 21-24 日
137. 今福 裕史、「Born-Oppenheimer 近似を補正した理論、及びプログラム開発」、第 15 回大つくば物理化学セミナー、城西大学 鋸南セミナーハウス、2014 年 11 月 29-30 日
138. 浅井 久瑠美、加藤 千図、阿部 穰里、波田 雅彦（首都大学東京）、藤井 靖彦、「重原子金属錯体における同位体分別平衡の理論的研究」、日本化学会第 95 春季年会(2015)、日本大学理工学部船橋キャンパス、2015 年 3 月 26-29 日
139. 宇梶 かすみ、阿部 穰里、藤井 浩、波田 雅彦（首都大学東京）、「鉄オキソポルフィリンによるオレフィンのエポキシ化反応:四重項から六重項への系間交差」、日本化学会第 95 春季年会(2015)、日本大学理工学部船橋キャンパス、2015 年 3 月 26-29 日
140. 渡邊 紗希、阿部 穰里、Geetha Gopakumar、波田 雅彦（首都大学東京）、「BaO 分子の電子状態に関する理論的研究」、日本化学会第 95 春季年会(2015)、日本大学理工学部船橋キャンパス、2015 年 3 月 26-29 日
141. 今村 穰、松井 亨、神谷 宗明、菅野 翔平、尾坂 格、瀧宮 和男、中嶋 隆人、波田 雅彦（首都大学東京）、「次世代有機太陽電池に関する理論的研究」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16-19 日
142. 菅野 翔平、今村 穰、波田 雅彦（首都大学東京）、「高効率光増感色素の設計に向けたスピン禁制遷移に関する理論的検討」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス、2016 年 5 月 23-25 日
143. 今福 裕史、阿部 穰里、Mike W. Schmidt、波田 雅彦（首都大学東京）、「スカラー相対論を考慮した対角ボルン-オッペンハイマー近似補正:重原子系分子への応用」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス、2016 年 5 月 23-25 日
144. 砂賀 彩光、阿部 穰里、Bhanu Pratap Das、波田 雅彦（首都大学東京）、「電子 EDM 探査を目指した二原子分子内の有効電場の方向に関する考察/Study of the direction of effective electric field in diatomic molecules for electron electric

dipole moment searches」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、2016 年 9 月 13-15 日

145. 小野 克真、浅井 久瑠美、阿部 穰里、今村 穰、善甫 康成、Frederic Moynier、波田 雅彦（首都大学東京）、「マントル-コア間における亜鉛同位体分別：結晶計算による理論的研究」、2016 年度日本地球化学会年会、大阪市立大学杉本キャンパス、2016 年 9 月 14-16 日
 146. 菅野 翔平、今村 穰、佐伯 昭紀、波田 雅彦（首都大学東京）、「ペロブスカイト太陽電池における有機カチオンの回転運動に関する理論的研究」、第一回フロンティア太陽電池セミナー、京都大学宇治キャンパス、2016 年 11 月 17-18 日
 147. 砂賀 彩光、阿部 穰里、波田 雅彦（首都大学東京）、「4 成分相対論にも適用可能な超微細結合定数の演算子に関する検討」、第 20 回理論化学討論会、京都大学 100 周年時計台記念館、2017 年 5 月 16-18 日
 148. 村田 レオ、今村 穰、波田 雅彦（首都大学東京）、「PbS 量子ドットにおけるパッシベーションに関する理論的検討」、第 20 回理論化学討論会、京都大学 100 周年時計台記念館、2017 年 5 月 16-18 日
 149. 菅野 翔平、今村 穰、佐伯 昭紀、波田 雅彦（首都大学東京）、「ペロブスカイト太陽電池における有機カチオンの回転と無機骨格の振動に関する理論的解析」、第 20 回理論化学討論会、京都大学 100 周年時計台記念館、2017 年 5 月 16-18 日
 150. 砂賀 彩光、阿部 穰里、波田 雅彦（首都大学東京）、「4 成分相対論における超微細結合定数の定式化に関する考察」、日本コンピュータ化学会 2017 年春季年会、東京工業大学、2017 年 6 月 8-9 日
 151. 宮本 優弥、波田 雅彦（首都大学東京）、「外部磁場によって誘起される閉殻重原子分子の電子スピン密度の解析」、日本コンピュータ化学会 2017 年春季年会、東京工業大学、2017 年 6 月 8-9 日
- (中嶋グループ)
152. 神谷 宗明、中嶋 隆人（理化学研究所）、「2 成分相対論的時間依存密度汎関数法の解析的エネルギー勾配の開発」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都、2013 年 9 月 16 日
 153. 今村 穰、神谷 宗明、中嶋 隆人（理化学研究所）、「2 成分相対論的時間依存密度汎関数法による解析的励起エネルギー勾配の開発」、2015 年電気化学秋季大会、埼玉、2015 年 9 月 11 日
 154. 神谷 宗明、中嶋 隆人（理化学研究所）、「2 成分相対論的時間依存密度汎関数法による解析的励起エネルギー勾配の開発」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学大岡山キャンパス、東京、2015 年 9 月 19 日
 155. 中嶋 隆人（理化学研究所）、「分子計算ソフトウェア NTCheM の開発と巨大分子への応用」、第 2 回元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>/大型研究施設連携シンポジウム、東京、2016 年 1 月 21 日
 156. 神谷 宗明、中嶋 隆人（理化学研究所）、「相対論的時間依存密度汎関数法

による物性量計算」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸、2016 年 9 月 15 日

157. 中嶋 隆人 (理化学研究所)、澤田 啓介、「Discovery of Novel Perovskite Solar Cells and Photocatalysts via High-Throughput Simulation on K Computer」、
“TIA かけはし”ポスター交流会 2017、柏、2017 年 9 月 12 日

(長谷川グループ)

158. 長谷川 淳也 (北海道大学)、「凝集系における分子の励起状態に関する理論的研究」、第 16 回理論化学討論会、福岡市健康づくりサポートセンター(あいれふ)、福岡、2013 年 5 月 15 日-17 日
159. 長谷川 淳也、石村 和也 (北海道大学)、「凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用」、第 7 回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ (京都府民総合交流プラザ)、京都、2013 年 9 月 24 日-27 日
160. 大保 政貴、中山 哲、依馬 正、長谷川 淳也 (北海道大学)、「第四級アンモニウムヒドロキンド触媒による CO₂ 固定化反応の理論的解析」、化学系学協会北海道支部 2015 年冬季研究発表会、北海道大学 札幌キャンパス、北海道、2015 年 1 月 27 日-28 日
161. 屋内 一馬、長谷川 淳也 (北海道大学)、「凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用の理論的解析」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、大阪、2015 年 5 月 20 日-22 日
162. 渡邊恵二郎、東雅大、中谷直輝、中山哲、長谷川淳也 (北海道大学)、「系間交差を経由する反応経路の理論的研究: モリブドセンにおける CO と H₂ の吸着」、錯体化学会第 65 回討論会、奈良女子大学、奈良、2015 年 9 月 21 日-23 日
163. 屋内一馬、長谷川淳也 (北海道大学)、「凝縮系における励起状態の溶媒効果に関する理論的研究」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学、東京、2015 年 9 月 16 日-19 日
164. 中谷直輝、長谷川淳也 (北海道大学)、「密度行列繰込み群の MOLCAS パッケージへの実装と応用計算」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学、東京、2015 年 9 月 16 日-19 日
165. Naoki Nakatani, Yusuke Sunada, Hideo Nagashima, Jun-ya Hasegawa (北海道大学)、「Theoretical Study on the Platinum-Catalyzed Amide Reduction via Hydrosilylation」、第 62 回有機金属化学討論会、関西大学、2015 年 9 月 7 日-9 日
166. Naoki Nakatani, Jun-ya Hasegawa (北海道大学)、「On the Geometry and Electronic Structures of Iron-Sulfur Clusters: A Density Matrix Renormalization Group Study」、錯体化学会第 65 回討論会、奈良女子大学、奈良、2015 年 9 月 21 日-23 日.
167. 大保 政貴、依馬 正、長谷川 淳也 (北海道大学)、「第四級アンモニウムヒドロキンド触媒による CO₂ 固定化反応の理論的解析」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学、東京、2015 年 9 月 16 日

168. 中谷 直輝、長谷川 淳也(北海道大学)、「密度行列繰込み群による鉄—硫黄クラスターの構造およびスピン状態に関する理論的研究」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学、大阪、2015 年 5 月 20 日
169. 大保 政貴、中山 哲、依馬 正、長谷川 淳也(北海道大学)、「第四級アンモニウムヒドロキシド触媒による CO₂ 固定のメカニズム: 自由エネルギープロファイルに基づく解析」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学、大阪、2015 年 5 月 20 日
170. Yue Chen, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study on Magnetic Properties of Lanthanide and Transition Metal Complexes」、CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」領域 平成 28 年度領域全体会議、トヨタ自動車株式会社 三ヶ日研修所、静岡、2016 年 9 月 20–21 日
171. Zhao Liming, Naoki Nakatani, Hideo Nagashima, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study of Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of Ketones: Chalk-Harrod vs Modified Chalk-Harrod Mechanism」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日–15 日
172. Manadada Ratanasak, Michinori Sugimoto, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study on Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinoxaline-2,3-diyl)」、第 2 回統合物質機構シンポジウム、北海道大学、北海道、2017 年 1 月 26–27 日
173. Liming Zhao, Naoki Nakatani, Yusuke Sunada, Hideo Nagashima, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study on Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds」、第 11 回分子科学討論会、東北大学、宮城、2017 年 9 月 15–18 日
174. Liming Zhao, Naoki Nakatani, Hideo Nagashima, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study on Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds」、統合物質創製化学研究推進機構 第三回国内シンポジウム、京都大学、京都、2017 年 10 月 30–31 日
175. Manadada Ratanasak, Michinori Sugimoto, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study of Palladium-Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinoxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand」、北大理論化学研究会: 実践理論化学の最前線、北海道大学、北海道、2017 年 11 月 16–17 日
176. 原田伊織、中山哲、長谷川淳也(北海道大学)、「物性値に拘束条件を課した構造最適化手法の開発」、北大理論化学研究会: 実践理論化学の最前線、北海道大学、北海道、2017 年 11 月 16–17 日
177. Danjo De Chavez, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Directional Dependence of Ea Changes in Mechanochemical Activation」、北大理論化学研究会: 実践理論化学の最前線、北海道大学、北海道、2017 年 11 月 16–17 日
178. Liming Zhao, Naoki Nakatani, Hideo Nagashima, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Theoretical Study on Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds」、北大理論化学研究会: 実践理論化学の最前線、北海道大学、北海道、2017 年 11 月 16–17 日

179. Ray Miyazaki, Naoki Nakatani, Takuro Yokoya, Kiyotaka Nakajima, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa(北海道大学)、「Mechanism of ethylene oxidation by Pt catalyst supported on mesoporous silica: a theoretical study」、第7回量子化学スクール～基礎理論と高精度理論の発展～、岡崎コンファレンスセンター、愛知、2017年11月20-21日

(青木グループ)

180. Liu Kai, 折本 裕一、青木 百合子(九州大学)、「Highly efficient analyses of I-M-I transition in quasi-1D metal complexes by elongation method」、第7回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、京都、2013年9月24日-27日
181. 筒井 亮太、Liu Kai, 折本 裕一、本田 宏明、青木 百合子(九州大学)、「ELG法による含金属 BN/C ヘテロナノチューブの電子状態と機能解析」、第7回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、京都、2013年9月24日-27日
182. Zhu Xun, Liu Kai, 折本 裕一、青木 百合子(九州大学)、「Development of open-shell elongation method and its application to ferromagnetic material design」、第7回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、京都、2013年9月24日-27日
183. Jiang Lizhi, 折本 裕一、青木 百合子(九州大学)、「Through-space/bond interaction analysis on NLO properties enhancement of molecular switches」、第7回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、京都、2013年9月24日-27日
184. 折本 裕一、Liu Kai, 青木 百合子(九州大学)、「Elongation法による天然・人工核酸の超効率的電子状態計算とその機能設計」、第7回分子科学討論会 2013 京都、京都テルサ(京都府民総合交流プラザ)、京都、2013年9月24日-27日
185. 古谷 優樹、Zhu Xun, 青木 百合子(九州大学)、「Elongation法による磁性高分子設計と二次電池正極材料設計への応用」、第14回高分子計算機科学討論会、東京工業大学 蔵前会館、東京、2014年3月13日
186. 青木 百合子(九州大学)、Liu Kai, Zhu Xun, 筒井 亮太、折本 裕一、「大規模系のための高精度機能設計システム-ELG法-の開発と応用」、第8回分子科学討論会 2014 東広島、広島大学 東広島キャンパス、広島、2014年9月21日-24日
187. Xun Zhu, Yuriko Aoki(九州大学)、「開殻分安定スピン状態予測のための結合性最 Mixing(NB-MM)MO-ELG法」、第9回分子科学討論会、東京工業大学 大岡山キャンパス、東京、2015年9月16日-19日
188. Ken Matsubara, Wataru Mizukami, Yuriko Aoki(九州大学)、「相互作用解析によるハロゲン結合をベースとした共結晶成過程の理解」、第9回分子科学討論会、東京工業大学 大岡山キャンパス、東京、2015年9月16日-19日
189. Yuriko Aoki(九州大学)、Kai Liu, Wataru Mizukami, Yuuichi Orimoto、「大規模原子分子系に向けた効率的 Elongation 法の展開と応用」、第9回分子科学討

論会、東京工業大学 大岡山キャンパス、東京、2015 年 9 月 16 日-19 日

190. Kouhei Kato, Yuuichi Orimoto, Yuriko Aoki (九州大学)、「光電変換ワイヤの効率的理論設計法と応用」、第9回分子科学討論会、東京工業大学 大岡山キャンパス、東京、2015 年 9 月 16 日-19 日
191. Wataru Mizukami, Yuriko Aoki (九州大学)、「スピン制約を導入した Elongation 法の開発」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
192. Yuuichi Orimoto, Yuriko Aoki (九州大学)、「酵素反応機構解明のための軌道相互作用解析法の開発と応用」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、兵庫、2016 年 9 月 13 日-15 日
193. Yuriko Aoki (九州大学)、Wataru Mizukami, Yuuichi Orimoto, Kai Liu (九州大学)、「閉殻系および開殻系 Elongation 法の展開と機能性ナノワイヤへの応用」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、神戸、2016 年 9 月 13 日-15 日
194. Wataru Mizukami, Yuriko Aoki (九州大学)、「表面化反応に対する第一原理遷移状態計算のガウス過程を用いた高速化」、第 120 回触媒討論会、愛媛大学 城北キャンパス、愛媛、2017 年 9 月 12 日-14 日
195. Satoru Shirane, Yuuichi Orimoto, Yuriko Aoki (九州大学)、「メタロセン触媒重合の構造制御機構の解明と超効率的計算手法によるポリマー特性の解析」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日
196. Wataru Mizukami, Yuriko Aoki (九州大学)、「4P100Elongation 法を用いた化学反応計算とポテンシャル面の on the fly 構築によるその高速化」、第 11 回分子科学討論会 2017 仙台、東北大学川内北キャンパス、宮城、2017 年 9 月 15 日-18 日
197. 青木 百合子、水上 渉、大川 育子、折本 裕一 (九州大学)、「Elongation method for efficient quantum chemistry calculations toward functional designs of bio/nano materials」、第 1 回 九州大学女性研究者ダイバーシティシンポジウム — 理工系分野一、九州大学 伊都キャンパス、福岡、2018 年 3 月 8 日
(森グループ)
198. 松田 彩、森 寛敏 (お茶の水女子大学)、「固溶体型 Pd/Pt 合金ナノクラスターの水素吸蔵特性に関する量子化学的考察」、ナノ学会第 13 回大会、東北大学 片平キャンパス、2015 年 5 月 11 日-13 日
199. 宮崎 かすみ、松田 彩、森 寛敏 (お茶の水女子大学)、「Ag-Rh 合金ナノ粒子の水素吸蔵特性を支配する表面および内部の電子構造」、ナノ学会第 13 回大会、東北大学 片平キャンパス、2015 年 5 月 11 日-13 日
200. 松田 彩, Mariusz Klobukowski, 森 寛敏 (お茶の水女子大学, University of Alberta)、「三フッ化ランタニドの幾何構造: 4f-in-core MCP 法を応用した大規模量子化学計算による検討」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、2015 年 5 月 20 日-22 日

201. 宮崎 かすみ、松田 彩、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「水素吸蔵特性を示す Ag-Rh 合金ナノ粒子の電子構造：Fermi-Dirac 統計を取り入れた密度汎関数計算による解析」、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 豊中キャンパス、2015 年 5 月 20 日-22 日
202. 宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「相対論的量子化学・分子動力学計算によるサブナノサイズクラスターの電子構造調査」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
203. 松田 彩、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「立方体および八面体型 Pd ナノ粒子の水素吸蔵特性の違いに関する理論的検討」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
204. 谷中 あゆみ、黒木 菜保子、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「量子化学計算に基づくエネルギー分割解析によるカルコゲン相互作用の物理的起源の解明」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
205. 黒木 菜保子、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「結晶構造制御に利用されるハロゲン結合に関する量子化学的検討：多体効果および相対論効果」、第 9 回分子科学討論会 2015 東京、東京工業大学 大岡山キャンパス、2015 年 9 月 16 日-19 日
206. 黒木 菜保子、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「ab initio 有効フラグメント力場を用いた分子動力学計算によるイオン液体の溶液構造評価」、第 5 回 CSJ 化学フェスタ 2015、タワーホール船堀、2015 年 10 月 13 日-15 日
207. 宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「相対論的量子化学・分子動力学計算によるサブナノサイズクラスターの電子構造調査、第 5 回 CSJ 化学フェスタ 2015、タワーホール船堀、2015 年 10 月 13 日-15 日
208. 黒木 菜保子、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「有効フラグメントポテンシャル-分子動力学計算によるイオン液体の溶液構造評価の試み」、第 38 回溶液化学シンポジウム、高知市文化プラザかるぽーと、2015 年 10 月 21 日-23 日
209. 宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「第一原理分子シミュレーションによるサブナノサイズ合金クラスターの酸素還元反応触媒活性評価」、第 6 回 CSJ 化学フェスタ 2015、タワーホール船堀、2016 年 11 月 13 日-14 日
210. 宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「サブナノサイズ白金クラスターが示す触媒活性の元素戦略的向上を目指した合金化の理論的提案」、第 10 回分子科学討論会 2016 神戸、神戸ファッションマート、2016 年 9 月 13 日-15 日
211. 宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶の水女子大学)、「相対論的第一原理計算に基づくサブナノサイズ金属クラスターの大域的構造探索および物性解析：合金系の検討」、第 19 回理論化学討論会、早稲田大学西早稲田キャンパス、2016 年 5 月 23 日-25 日

国際会議

(中井グループ)

1. Junji Seino and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Linear-Scaling Two-Component Relativistic Scheme: Local Unitary Transformation and Divide-And-Conquer Method”, 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17), Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailand, March 27–29, 2013.
2. Yasuhiro Ikabata and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of Dispersion-Corrected Time-Dependent Density Functional Theory Based on Local Response Dispersion Method”, 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17), Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailand, March 27–29, 2013.
3. Takeshi Yoshikawa, Masato Kobayashi, Yutaro Nonaka, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Excited-state calculations based on divide-and-conquer method for large systems”, 17th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE17), Khon Kaen University, Khon Kaen, Thailand, March 27–29, 2013.
4. Yasuhiro Ikabata, Kazufumi Wakayama, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “DFT study for magnetic properties of organic compounds: Importance of long-range and dispersion corrections”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, July 10–13, 2013.
5. Yuya Nakajima, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Efficient analytical energy gradient based on infinite-order Douglas-Kroll-Hess method with local unitary transformation scheme”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, July 10–13, 2013.
6. Masahiko Nakano, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of electron correlation theory based on spin-dependent two-component Hamiltonian”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, July 10–13, 2013.
7. Yasuhiro Ikabata, Yusuke Tsukamoto, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Local response dispersion method in periodic systems: Implementation in the package based on a plane-wave basis set”, The VIIIth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VIII), Budapest Congress Center, Budapest, Hungary, August 25–31, 2013.
8. Takeshi Yoshikawa and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Acceleration of divide-and-conquer method on GPU”, The VIIIth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VIII), Budapest Congress Center, Budapest, Hungary, August 25–31, 2013.
9. Masahiko Nakano, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Large-scale MP2 calculation based on spin-dependent two-component Hamiltonian and divide-and-conquer approach”, 5th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Todai-ji Culture Center, Nara, Japan, December 2–6, 2013.

10. Atsushi Ishikawa and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Towards accurate calculation on free energy in gas-phase and solution by quantum chemistry”, 5th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Todai-ji Culture Center, Nara, Japan, December 2–6, 2013 (Invited).
11. Yuya Nakajima, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Efficient geometry optimization using accurate two-component relativistic Hamiltonian with local unitary transformation scheme”, 5th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Todai-ji Culture Center, Nara, Japan, December 2–6, 2013.
12. Takeshi Yoshikawa and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Acceleration of resolution-of-identity method based on divide-and-conquer method with GPGPU”, International Symposium on “Integration of Chemistry and Bioscience”, Waseda University, Tokyo, Japan, January 15–16, 2014.
13. Yuya Nakajima, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Analytical gradient for spin-dependent infinite-order Douglas-Kroll-Hess method with local unitary transformation”, 11th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (REHE-2014), Smolenice Castle, Slovak Republic, September 20–24, 2014.
14. Masao Hayami, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Rapid Electron Repulsion Integral Technique for Compounds Including Heavy Elements”, 11th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (REHE-2014), Smolenice Castle, Slovak Republic, September 20–24, 2014.
15. Yoshifumi Nishimura, Takeaki Kaiho, Hiroaki Nishizawa, Stephan Irle, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Method: Theory and Application to Nano-Sized Systems”, XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Tamkang University, Taipei, Taiwan, November 11–17, 2014.
16. Yasuhiro Iwabata and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Decomposition of molecular magnetic coupling constant based on bond-energy density analysis”, XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Tamkang University, Taipei, Taiwan, November 11–17, 2014.
17. Qi Wang, Yasuhiro Iwabata, Yasushi Morita, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Photo-absorption properties of trioxotriangulene derivatives with one-dimensional columnar structures”, XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Tamkang University, Taipei, Taiwan, November 11–17, 2014.
18. Masaki Okoshi, Atsushi Ishikawa, Yoshiumi Kawamura, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Evaluation of oxidation potentials of organic electrolyte solvents with highly accurate quantum chemical models for condensed-phase systems”, Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Dong Yuan Hotel, Nanjing, China, June 1–6, 2015.
19. Qi Wang, Yasuhiro Iwabata, Yoshikawa, Ueda, Murata, Kariyazono, Okamoto, Yasushi Morita, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Photo-absorption property investigation of π -stacked trioxotriangulene derivatives”, Recent Advances in Electronic Structure Theory (RAEST2015) — Satellite Meeting of The 15th

International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Dong Yuan Hotel, Nanjing, China, June 1–6, 2015.

20. Junji Seino, Yuya Nakajima, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Overall linear-scaling two-component relativistic scheme and its extension to molecular properties”, Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations — Satellite Symposium of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Kobe University, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Kobe, Japan, June 16–20, 2015.
21. Atsushi Ishikawa and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Quantum chemical approach for condensed-phase thermochemistry: a harmonic solvation model”, Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations — Satellite Symposium of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Kobe University, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Kobe, Japan, June 16–20, 2015.
22. Yasuhiro Ikabata, Yusuke Tsukamoto, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of an efficient computational method for proton binding energies”, Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations — Satellite Symposium of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Kobe University, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Kobe, Japan, June 16–20, 2015.
23. Yoshifumi Nishimura, Hiroaki Nishizawa, Masato Kobayashi, Stephan Irle, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Recent advances in divide-and-conquer density-functional tight-binding molecular dynamics simulations”, Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations — Satellite Symposium of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Kobe University, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Kobe, Japan, June 16–20, 2015.
24. Takeshi Yoshikawa and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “A divide-and-conquer method with approximate Fermi levels for parallel computations”, Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations — Satellite Symposium of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Kobe University, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Kobe, Japan, June 16–20, 2015.
25. Masao Hayami, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Rapid algorithms of electron repulsion integral for heavy-element systems”, Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations — Satellite Symposium of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Kobe University, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Kobe, Japan, June 16–20, 2015.
26. Yoshifumi Nishimura, Hiroaki Nishizawa, Masato Kobayashi, Stephan Irle, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of linear-scaling divide-and-conquer DFTB method: Massively parallel DC-DFTB calculations on the K computer”, Development of next generation accurate approximate DFT/B methods - Flagship workshop and tutorial, Bremen, Germany, October 11–15, 2015.
27. Yoshifumi Nishimura (Waseda Uni.), “Development of linear-scaling divide-and-conquer density-functional tight-binding program: massively parallel DC-DFTB calculations on the K computer”, 5th International Workshop on

Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward exascale computing, Tokyo, Japan, November 26–27, 2015.

28. Yuya Nakajima, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Geometries and molecular properties of heavy main-group molecules based on two-component relativistic scheme”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
29. Qi Wang, Yasuhiro Ikabata, Takeshi Yoshikawa, Akira Ueda, Tsuyoshi Murata, Kazuki Kariyazono, Hiroshi Okamoto, Yasushi Morita, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Theoretical and experimental investigations on near-infrared absorption of trioxotriangulene derivatives with pi-stacked columnar structures”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
30. Atsushi Ishikawa and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Quantum chemistry calculation for condensed-phase free energy: application to chemical reactions in solution”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
31. Masao Hayami, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Efficient Evaluation of Electron Repulsion Integral and its Derivative for Molecules Including Heavy Elements”, Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan, January 25–28, 2016.
32. Yoshifumi Nishimura (Waseda Uni.), “Acceleration of divide-and-conquer DFTB calculation for huge periodic systems”, International CECAM-Workshop & Tutorial on Approximate quantum methods in the ab initio world, Beijing, China, November 6–13, 2016.
33. Qi Wang (Waseda Uni.), “DFTB application on interlayer vibrations in pi-stacked organic crystals”, International CECAM-Workshop & Tutorial on Approximate quantum methods in the ab initio world, Beijing, China, November 6–13, 2016.
34. Aditya Wibawa Sakti (Waseda Uni.), “Divide-and-Conquer Type DFTB Application for Hydronium and Hydroxide Ions Diffusion in the Bulk Water System”, International CECAM-Workshop & Tutorial on Approximate quantum methods in the ab initio world, Beijing, China, November 6–13, 2016.
35. Chien-Pin Chou (Waseda Uni.), “DFTB Benchmarking and Parameterization for Metal Ions in Metal-Organic Frameworks”, International CECAM-Workshop & Tutorial on Approximate quantum methods in the ab initio world, Beijing, China, November 6–13, 2016.
36. Yoshifumi Nishimura, Aditya Wibawa Sakti, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “A linear-scaling approximate DFT method for quantum mechanical molecular dynamics simulations of large systems”, 17th International Conference on Density-Functional Theory and its Applications (DFT2017), August 21–25, 2017.
37. Chien-Pin Chou and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Metal-Organic Frameworks”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
38. Masaki Okoshi, Chien-Pin Chou, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Theoretical

Analysis on Ion Conduction in Superconcentrated Electrolyte Solution for Na-ion Battery”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.

39. Yoshifumi Nishimura and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Implementation of divide-and-conquer density-functional tight-binding method for large-scale quantum mechanical molecular dynamics simulations”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
40. Yasuhiro Iwabata, Takuro Oyama, Kenta Hiraga, Masao Hayami, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Two-component relativistic density functional theory based on infinite-order Douglas-Kroll-Hess method”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
41. Qi Wang, Yasuhiro Iwabata, Junji Seino, Yoshiaki Shoji, Takanori Fukushima, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Phosphorescent mechanism of arylboronic esters at room temperature”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
42. Mikito Fujinami, Junji Seino, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Reaction-prediction scheme based on quantum chemical information and machine learning”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
43. Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Chien-Pin Chou, and Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations of Proton Diffusion in the Bulk Ices and Liquid Water”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
44. Mikito Fujinami, Junji Seino, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Chemical Reaction Prediction and Analysis Based on Informatics with Quantum Chemical Descriptors”, International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
45. Kenta Hiraga, Yasuhiro Iwabata, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Development of Spin-Dependent Relativistic Time-Dependent Density Functional Theory Based on Infinite-Order Douglas-Kroll-Hess Method”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
46. Takahiro Hirai, Masaki Okoshi, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Theoretical study of temperature and pressure dependences of NO-CO reactions on Rh(111) surface”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
47. Yasuhiro Iwabata, Qi Wang, Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Time-Dependent Density Functional Study on Near-Infrared Absorption of Trioxotriangulene Derivatives”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
48. Minori Imai, Junichi Ono, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Theoretical research of primary proton transfer in bacteriorhodopsin using

DC-DFTB-metadynamics”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.

49. Ryo Kageyama, Mikito Fujinami, Yasuhiro Iwabata, Junji Seino, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Semi-local machine learned kinetic energy functional for orbital-free DFT”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
50. Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “DC-DFTB-K: A Massively Parallel Chemical Reaction Dynamics Simulator for Huge Systems”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
51. Junichi Ono, Minori Imai, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Proton delocalization in proton releasing group of bacteriorhodopsin revealed by DC-DFTB-MD simulations”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
52. Takuro Oyama, Masao Hayami, Yasuhiro Iwabata, Junji Seino, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Two-Component Relativistic Density Functional Theory with Picture-Change Corrected Electron Density”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
53. Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai (Waseda Uni.), “Computerized implementation of divide-and-conquer-based higher-order electron-correlation methods”, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.
54. Mikito Fujinami, Junji Seino, Hiromi Nakai, “Machine Learned Reaction-Prediction System Based on Quantum Chemical Descriptors”, The Eighth Asia Pacific Conference in Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8), Indian Institute of Technology Bombay, Mumbai, India, December 15–17, 2017.
55. Minori Imai, Junichi Ono, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai, “DC-DFTB-metadynamics simulations for the primary proton transfer of bacteriorhodopsin”, The Eighth Asia Pacific Conference in Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8), Indian Institute of Technology Bombay, Mumbai, India, December 15–17, 2017.
56. Takuro Oyama, Masao Hayami, Yasuhiro Iwabata, Junji Seino, Hiromi Nakai, “Picture Change Correction for Two-component Relativistic Density Functional Theory”, The Eighth Asia Pacific Conference in Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8), Indian Institute of Technology Bombay, Mumbai, India, December 15–17, 2017.

(波田グループ)

57. Ayaki Sunaga, Minori Abe, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Quantum-Chemical calculations of the scalar-pseudoscalar interaction in heteronuclear diatomic molecules”, Exploring Fundamental Physics using Atomic Systems (EFPAS2015), Physical Research laboratory, Ahmedabad, India, May 7–10, 2015.
58. Velloth Archana, Hiroshi Sakiyama, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Correlating magnetic exchange in dinuclear bis(phenolate)-bridged complexes: A computational perspective”, 5th European Conference on Molecular Magnetism (ECMM), Zaragoza, Spain, September 6–10, 2015.
59. Minori Abe, Yuji Imafuku, Michael W. Schmidt, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Diagonal correction of Born-Oppenheimer approximation for heavy-element main-group molecules with scalar- relativistic Hamiltonians”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.

60. Radhika Narayanan, Marisa Nakada, Masaichi Saito, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “¹³C- and ²⁰⁷Pb-NMR Chemical Shifts of Dirhodium and Dilithioplumbolene Complexes: A Quantum-Chemical Assessment”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
61. Kurumi Asai, Minoru Abe, Frederic Moynier, Yasunari Zempo, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Theoretical estimation of zinc isotope fractionation between mantle and core”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
62. Kasumi Ukaji, Minoru Abe, Hiroshi Fujii, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Epoxidation reactions of alkenes using iron(IV)-oxo porphyrin π -cation species: A SO-CASPT2 study”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
63. Ayaki Sunaga, Minoru Abe, Bhanu Pratap Das, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Quantum-Chemical calculations of the scalar-pseudoscalar interaction in heteronuclear diatomic molecules”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
64. Ayaki Sunaga, Minoru Abe, Bhanu Pratap Das, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Quantum-Chemical calculations of the scalar-pseudoscalar interaction in heteronuclear diatomic molecules”, Symposium: New Generation Quantum Theory -Particle Physics, Cosmology, and Chemistry-, Kyoto, Japan, March 7–9, 2016.
65. Velloth Archana, Yutaka Imamura, Hiroshi Sakiyama, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Theoretical Study on Co Mononuclear and Dinuclear Complexes toward Exploring Single Molecular Magnets”, Conference on Modern Trends in Molecular Magnets, Bombay, India, May 19–21, 2016.
66. Ayaki Sunaga, Minoru Abe, Bhanu Pratap Das, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Analysis of effective electric fields of heavy molecules for search of the electron EDM”, The 25th International Conference on Atomic Physics (ICAP2016), Auditorium, COEX, Seoul, South Korea, July 24–29, 2016.
67. Velloth Archana, Yutaka Imamura, Hiroshi Sakiyama, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Theoretical Study on Co Mononuclear and Dinuclear Complexes toward Exploring Single Molecular Magnets”, International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM2016), Sendai International Center, Sendai, Japan, September 4–8, 2016.
68. Takashi Tsutsui, Minoru Abe, Bhanu Pratap Das, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Effective electric field calculations of BiO molecule for the search of electron’s electric dipole moment”, The 9th International Workshop on Fundamental Physics Using Atoms (FPUA), Katsura Campus, Kyoto University, Tokyo, Japan, January 9–10, 2017.
69. Shohei Kanno, Yutaka Imamura, Akinori Saeki, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Quantum Chemical Studies on Dye-sensitized and Perovskite Solar Cells”, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR) 2017, International Convention Center, Jeju, South Korea, June 26–30, 2017.

70. Minori Abe, Frederic Moynier, Kurumi Asai, Katsuma Ono, Paolo Sossi, Yasunari Zempo, Yutaka Imamura, and Masahiko Hada (Tokyo Metropolitan Uni.), “Theoretical Study of Reduced Partitioning Function Ratios of Zn-Bearing Minerals and Metals”, Goldschmidt2017, Le Palais des Congrès de Paris, Paris, France, August 13–18, 2017

(中嶋グループ)

71. Yutaka Nakatsuka and Takahito Nakajima (RIKEN), “Development of spin-orbit ZORA quantum Monte Carlo method for atoms and molecules”, 3rd AICS International Symposium, Kobe, February 28, 2013.
72. Yoshunobu Akinaga and Takahito Nakajima (RIKEN), “Two-component relativistic general-order coupled-cluster methods for excitation energy and ionization potential”, 3rd AICS International Symposium, Kobe, February 28, 2013.
73. Yutaka Imamura, Muneaki Kamiya, and Takahito Nakajima (RIKEN), Two-component Relativistic Time-dependent Density Functional Theory: Development and Applications, Nara, December 4, 2013.
74. Yutaka Imamura, Muneaki Kamiya, and Takahito Nakajima (RIKEN), Theoretical Study on Spin Forbidden Transition of Solar Cell Sensitizers: Two-component Relativistic Time-dependent Density Functional Theory Study, The 5th AICS international Symposium, Kobe (Japan), December 8, 2014.

(長谷川グループ)

75. Akira Nakayama and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Computational study of relaxation dynamics of pyrimidine bases in the gas and solution phases”, CRC-SU Joint International Symposium on Chemical Theory for Complex Systems “Interplay between Theory and Experiments: New Trends in Catalysis”, Stockholm University, Stockholm, Sweden, October 30–31, 2014.
76. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), Masaki Ohbo, Akira Nakayama, and Tadashi Ema, “Theoretical study on the CO₂ fixation by bifunctional porphyrin catalyst”, CRC-SU Joint International Symposium on Chemical Theory for Complex Systems “Interplay between Theory and Experiments: New Trends in Catalysis”, Stockholm University, Stockholm, Sweden, October 30–31, 2014.
77. Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Quantum mechanical molecular interactions for calculating excitation energy in environments: A first-order interacting space approach”, 249th ACS National Meeting, The Colorado Convention Center, Denver, March 22–25, 2015.
78. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), Kazuma Yanai, and Kazuya Ishimura, “Excited states and molecular interactions in proteins and solutions”, The 15th International Congress of Quantum Chemistry, Tsinghua University, China, June 7–13, 2015.
79. Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), Kazuma Yanai, and Kazuya Ishimura, “Excited States and Molecular Interactions in Proteins and Solutions”, The 15th International Congress of Quantum Chemistry, Tsinghua University, China, June 7–13 2015.
80. Naoki Nakatani, Yusuke Sunada, Hideo Nagashima, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study on the Platinum-Catalyzed Reduction of Carboxyamides with Hydrosilanes: Effects of Dual Si-H Groups”, 31st symposium on chemical kinetics and dynamics, Hokkaido University, June 3–5, 2015.
81. Kazuma Yanai and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Quantum Mechanical

- Molecular Interactions for Calculating Excitation Energy in Environments: A First-Order Interacting Space Approach”, 31st symposium on chemical kinetics and dynamics, Hokkaido University, June 3–5, 2015.
82. Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Quantum Mechanical Molecular Interactions for Calculating Excitation Energy in Environments: A First-Order Interacting Space Approach”, 249th ACS National Meeting, The Colorado Convention Center, Denver, March 22–25, 2015.
 83. K-jiro. Watanabe, Naoki Nakatani, Akira Nakayama, Masahiro Hihashi, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical study of the reaction pathway via intersystem crossing: Ligand binding reaction to molybdenocene”, Pre-symposium of 16th International Congress on Catalysis (16th ICC-Pre) & 2nd International Symposium of Institute for Catalysis “Novel Catalysts for Energy and Environmental Issues”, Hokkaido University, Japan, June 30–July 1, 2016.
 84. Yue Chen, Shigeyoshi Sakaki, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical study on Magnetic Susceptibility and Hysteresis of Dilanthanide Single Molecule Magnet”, The 15th International Conference on Molecule-Based Magnets, Aobayama, Aoba-ku, Sendai, Japan, September 4–8, 2016.
 85. Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, Mark S. Gordon, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “On the Electric Effect in Solvatochromism: Wave function and Effective Fragment Potential Approaches”, The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry, Kaohsiung, Taiwan, June 25–28, 2016.
 86. Liming Zhao, Naoki Nakatani, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study of Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of Ketones: Chalk-Harrod vs Modified Chalk-Harrod Mechanism”, The 16th Korea-Japan Symposium on Catalysis, Kaderu 27, Hokkaido, Japan, May 15–17, 2017.
 87. Manasada Ratanasak, Michinori, Suginome, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study of Palladium-Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinioxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand”, The 2nd International Symposium on Precision Controlled Reaction Field, Osaka University, Osaka, Japan, May 12–13, 2017.
 88. Ray Miyazaki, Naoki Nakatani, Takuro Yokoya, Kiyotaka Nakajima, Atsushi Fukuoka, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Mechanism of ethylene oxidation by Pt catalyst supported on mesoporous silica: a theoretical study”, Hands-on Workshop Density-Functional Theory and Beyond: Accuracy, Efficiency and Reproducibility in Computational Materials Science, Humboldt University, Berlin, Germany, July 31–August 11, 2017.
 89. Danjo De Chavez and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Directional Dependence of Ea Changes in Mechanochemical Activation”, Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD2017 Workshop), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba, Japan, October 18–20, 2017.
 90. Liming Zhao, Naoki Nakatani, Yusuke Sunada, Hideo Nagashima, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study on Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds”, International symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory”, Tokyo Metropolitan University, Tokyo, Japan, December 8–9, 2017.

91. Liming Zhao, Naoki Nakatani, Yusuke Sunada, Hideo Nagashima, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study on Rh-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds”, IRCCS-JST CREST Joint Symposium, Kyushu University, Fukuoka, Japan, January 24–26, 2018.
92. Manasada Ratanasak, Michinori Suginome, and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical Study of Palladium-Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinoxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand”, Symposium on Nanomaterials for Environmental Purification and Energy Conversion, Hokkaido University, Sapporo, Japan, February 20–21, 2018.
93. Danjo De Chavez and Jun-ya Hasegawa (Hokkaido Uni.), “Theoretical study for selective mechanochemical activation in chitin hydrolysis”, Symposium on Nanomaterials for Environmental Purification and Energy Conversion, Hokkaido University, Sapporo, Japan, February 20–21, 2018.

(平田グループ)

94. Tomonori Yamada (Uni. of Illinois at Urbana-Champaign), “Multiple order asymptotic expansion for approximation of atomic orbital electron repulsion integral”, The 54th Sanibel Symposium, St. Simons Island, Georgia, USA, February 16–21, 2014.

(青木グループ)

95. Lizhi Jiang, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Insights into substituents and solvent effects on SN2 reaction by through space/bond interaction analysis”, 14th Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology (14th CSS-EEST), Kyushu University, Kasuga, Japan, February 18–19, 2013.
96. Yuki Furutani, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “A quantum chemical study on cathode active materials of organic radical-molecules in secondary battery”, 14th Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology (14th CSS-EEST), Kyushu University, Kasuga, Japan, February 18–19, 2013.
97. Ryota Tsutsui, Kai Liu, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Functional properties of BN nanotubes by highly efficient Geometry optimization method”, 14th Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology (14th CSS-EEST), Kyushu University, Kasuga, Japan, February 18–19, 2013.
98. Yuuichi Orimoto, Peng Xie, Kai Liu, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Highly efficient quantum chemistry calculations of DNA for designing biomaterials”, 14th Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology (14th CSS-EEST), Kyushu University, Kasuga, Japan, February 18–19, 2013.
99. Piotr Kuźniarowicz, Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), Anna Stachowicz, and Jacek Korchowiec, “Intermediate field for the elongation method”, Current Trends in Theoretical Chemistry VI (CTTC VI), Kraków, Poland, September 1–5, 2013.
100. Yuuichi Orimoto, Kai Liu, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Functional design of natural and artificial nucleic acids via ab initio order-N elongation method: computational approaches”, The 40th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, Kanagawa University, Yokohama, Japan, November 13–15, 2013.
101. Lin Jin and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Interaction of OH⁻ with Xylan and Its

Hydrated Complexes: Structures and Molecular Dynamics Study Using Elongation Method”, 2015 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR 2015), Sun Moon Lake, Taiwan, August 16–20, 2015.

102. Yuuichi Orimoto and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Highly efficient electronic structure calculations of biomaterials for their functional design”, 2015 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR 2015), Sun Moon Lake, Taiwan, August 16–20, 2015.
103. Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Theoretical design for NLO polymers”, 2015 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR 2015), Sun Moon Lake, Taiwan, August 16–20, 2015.
104. Wataru Mizukami, Ken Matsubara, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Analysis and modeling of molecular interactions in halogen-bonded cocrystal”, 51st Symposium on Theoretical Chemistry (STC2015), University of Potsdam, Germany, September 20–24, 2015.
105. Yuuichi Orimoto and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Computational functional design of artificial DNAs: application of elongation method and through-space/bond interaction analysis”, The 42th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, I-messae hall, Himeji, Japan, September 23–25, 2015.
106. Yuuichi Orimoto and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Theoretical approach to the property and reaction design of DNA/proteins by through-space/bond interaction analysis and elongation method”, The 43th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, 100th Anniversary Hall, Kumamoto University, Japan, September 27–29, 2016.
107. Wataru Mizukami and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Modeling Molecular Interactions in Halogen-bonding Cocrystal”, International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2016), Noyori Conference Hall, Nagoya University, Nagoya, Japan, October 10–13, 2016.
108. Hiroyuki Teramae and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Ab Initio Crystal Orbital Calculation of Electronic Structure of B-type model-DNA”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, GASTEIG Cultural Center, Munich, Germany, August 27–September 1, 2017.
109. Hiroyuki Teramae and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Ab Initio Calculations on Polymononucleotide and Polydinucleotides as Model of B-type DNA Polymers”, 11th European Conference on Theoretical and Computational Chemistry, Institute for Catalan Studies, Barcelona, Spain, September 4–7, 2017.
110. Yuuichi Orimoto and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Computational design of DNAs: property control via elongation method”, The 44th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, Katsushika Campus, Tokyo University of Science, Tokyo, Japan, November 14–16, 2017.
111. Satoru Shirane, Yuuichi Orimoto, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Selectivity of olefin polymerization with metallocene catalyst and the effects of produced polymers on its mechanism”, The 19th Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology (CSS-EEST19), Chikushi Campus, Kyushu University, Fukuoka, Japan, November 29–December 1, 2017.

112. Yuuichi Orimoto, Satoru Shirane, and Yuriko Aoki (Kyushu Uni.), “Mechanism of Highly Selective Olefin Polymerization by Metallocene Catalyst: Computational Approach”, IRCCS-JST CREST Joint Symposium, Chikushi Campus, Kyushu University, Fukuoka, Japan, January 24–26, 2018.

(森グループ)

113. Hirotoshi Mori and Nahoko Kuroki (Ochanomizu Uni.), “A trial on describing intermolecular interaction in ionic liquid by *ab initio* effective fragment potential method”, The Chemical Bonds at the 21th Century — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Xiamen University, Xiamen, China, June 14–18, 2015.
114. Nahoko Kuroki, Asaki Kawashima, and Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), “Is it possible to describe halogen bonding interaction with effective fragment potential?: Comparison between hydrogen bonds and halogen bonds”, The Chemical Bonds at the 21th Century — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), Xiamen University, Xiamen, China, June 14–18, 2015.
115. Aya Matsuda and Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), “Theoretical study on hydrogen storage properties of solid-solution type Pd-Pt alloy nano cluster: dependency on composition”, Advances in Modeling of Nano Materials (AMNM) — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), University of Science and Technology of China, Hefei, China, June 14–17, 2015.
116. Kasumi Miyazaki, Aya Matsuda, and Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), “Electronic structures of Ag-Rh alloy nano particles for hydrogen storage material”, Advances in Modeling of Nano Materials (AMNM) — Satellite Meeting of The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC 2015), University of Science and Technology of China, Hefei, China, June 14–17, 2015.
117. Sumio Kaizaki, Dai Shirotani, Gilles Muller, Hisako Sato, and Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), “Chiroptical Spectroscopy of Tetrakis((+)-heptafluorobutryl camphorato) lanthanide(III) Complexes with an Encapsulated Alkali Metal Ion Δ -SAPR-8- $M[LnIII((+)\text{-hfbc})_4]$ ”, 15th International Conference on Chiroptical Spectroscopy, Hokkaido University, Sapporo, Japan, August 30–September 3, 2015.
118. Ayumi Yanaka and Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), “A quantum chemical study on intramolecular chalcogen interactions applicable to novel drug design”, 6th Ewha-JWU-Ochanomizu Joint Symposium 2015, Seoul, Korea, December 10, 2015.
119. Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), Aya Matsuda, and Mariusz Klobukowski, “A quantum chemical study on structure of LnX_3 embedded in noble gas matrix: Are noble gases really inert?”, 6th Ewha-JWU-Ochanomizu Joint Symposium 2015, Seoul, Korea, December 10, 2015.
120. Kasumi Miyazaki, Aya Matsuda, and Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), “Electronic structures of Ag-Rh alloy nano particles: Size dependency and relation with hydrogen absorption”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.
121. Aya Matsuda and Hirotoshi Mori (Ochanomizu Uni.), “Theoretical study on hydrogen storage properties of Pd nano cluster: Consideration on cluster shape dependency”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.

122. Nahoko Kuroki, Asaki Kawashima, and Hirotoishi Mori (Ochanomizu Uni.), “Theoretical study on novel intermolecular interactions observed in gas-phase or liquid-phase conditions: Halogen bond, chalcogen bond, and their simple modeling by effective fragment potential”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2015), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2015.

123. Hirotoishi Mori (Ochanomizu Uni.), “Electron localization function as a physicochemical tool for predicting hydrogen absorption abilities of nano alloy materials”, Theory & Applications of Computational Chemistry (TACC) 2016, Washington State Univ., Seattle, USA, August 28–September 2, 2016.

(4)知財出願

①国内出願 (1 件)

1. 発明の名称:「多次元系用エロンゲーション法の分子軌道演算装置、該方法、該プログラムおよび記録媒体」、発明者: 青木 百合子、今村 詮、Liu Kai、出願人: 科学技術振興機構、出願日: 2014 年 5 月 20 日、出願番号: 2014-104592

②海外出願 (0 件)

該当なし

③その他の知的財産権

該当なし

(5)受賞・報道等

①受賞

(中井グループ)

- 平成 25 年度電気化学会論文賞, “Theoretical analysis of catalytic activity of metal surfaces on reaction of hypophosphite ion”, 電気化学会, 國本 雅宏, 中井 浩巳(中井 G), 本間 敬之, 2013 年 2 月
- Best Poster Award, “Development of electron correlation theory based on spin-dependent two-component Hamiltonian”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), 中野 匡彦(中井 G), 2013 年 7 月
- 優秀ポスター賞, “重元素化合物に対する相対論的構造最適化計算(2)”, 第 17 回理論化学討論会, 中嶋 裕也(中井 G), 2014 年 5 月
- 最優秀ポスター発表賞, “スピナー軌道相互作用を露わに考慮した大規模・高精度な相対論的量子化学計算法の開発”, 第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014, 中野 匡彦(中井 G), 2014 年 11 月
- * Fellow, Royal Society of Chemistry, 中井 浩巳(中井 G), 2015 年 1 月
- 日本コンピュータ化学会 2014 年度 吉田賞(論文賞), “大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発: 元素戦略の理論基盤確立を目指して”, 日本コンピュータ化学会, 清野 淳司(中井 G), 中井 浩巳(中井 G), 2015 年 5 月
- 日本化学会第 95 春季年会(2015)学生講演賞, “時間反転対称性を利用した新規相対論的開殻 Hartree-Fock 法の開発: KUHF 法”, 日本化学会, 中野 匡彦(中井 G), 2015 年 5 月
- 第 18 回理論化学研究会 優秀ポスター賞, “重原子化合物の構造最適化計算のための高速な電子反発積分の微分計算アルゴリズムの開発”, 第 18 回理論化学討論会, 速水 雅生(中井 G), 2015 年 6 月
- 優秀成果賞, “化学反応シミュレーションによる CO₂ 分離回収のためのアミン溶液の探索

- (hp140164)”, 高度情報科学技術研究機構(RIST), 中井 浩巳(中井 G), 2015 年 10 月
- Student Poster Competition Award, “Relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry”, Pacificchem 2015, 中野 匡彦(中井 G), 2015 年 12 月
 - Superior Oral Award, “Implementation of efficient infinite-order two-component relativistic scheme into GAMESS”, The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), 中嶋 裕也(中井 G), 2016 年 1 月
 - Superior Poster Award, “Efficient evaluation of electron repulsion integral and its derivative for molecules including heavy elements”, The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), 速水 雅生(中井 G), 2016 年 1 月
 - * 日本化学会第 33 回学術賞, “周期表を網羅する線形スケーリングな相対論的量子化学の構築”, 中井 浩巳(中井 G), 2016 年 3 月
 - * 平成 28 年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞, “元素戦略のための相対論的量子化学の研究”, 中井 浩巳(中井 G), 2016 年 4 月
 - 日本化学会第 96 春季年会(2016)優秀講演賞(学術), “相対論的量子化学計算の高精度化・高効率化を目指した群知能によるパラメータ自動最適化手法の開発”, 日本化学会, 清野 淳司(中井 G), 2016 年 5 月
 - 日本化学会第 96 春季年会(2016)優秀講演賞(学術), “動的分極率を用いた高速な分割統治型非局所励起状態計算手法の開発”, 日本化学会, 吉川 武司(中井 G), 2016 年 5 月
 - 最優秀講演賞(学生), “量子化学計算とインフォーマティクス技術を用いた反応予測システムの開発”, 第 39 回ケモインフォーマティクス討論会, 藤波 美起登(中井 G), 2016 年 9 月
 - ポスター賞, “量子化学計算と群知能を用いたアミン-CO₂ 系反応に対する反応シミュレータの開発”, 第 39 回ケモインフォーマティクス討論会, 長門 澄香(中井 G), 2016 年 9 月
 - 第 6 回 CSJ 化学フェスタ 2016 優秀ポスター発表賞, “Rh 表面上での NO 還元反応に対する温度及び圧力効果に関する理論的研究”, 日本化学会, 平井 貴裕(中井 G), 2016 年 12 月
 - 第 6 回 CSJ 化学フェスタ 2016 優秀ポスター発表賞, “量子化学計算と機械学習を用いた反応予測システムの開発(2): 量子化学計算条件に対する依存性”, 日本化学会, 藤波 美起登(中井 G), 2016 年 12 月
 - 日本化学会第 97 春季年会(2017)優秀講演賞(学術), “Linear-scaling quantum mechanical molecular dynamics simulations with divide-and-conquer density-functional tight-binding method”, 日本化学会, 西村 好史(中井 G), 2017 年 6 月
 - 日本コンピュータ化学会(SCCJ)奨学賞, “Accurate pKa Evaluation by Metadynamics Simulation at the Density-Functional Tight-Binding Level”, 日本コンピュータ化学会, Aditya Wibawa Sakti(中井 G), 2015 年 6 月
 - 分子科学会優秀講演賞, “局所ユニタリー変換を用いた効率的な 2 成分相対論的密度汎関数理論の開発”, 第 11 回分子科学討論会, 大山 拓郎(中井 G), 2017 年 9 月
 - 第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017 優秀ポスター発表賞, “Orbital-free 密度汎関数理論のための機械学習を用いた運動エネルギー汎関数の開発”, 日本化学会, 影山 棕(中井 G), 2017 年 11 月
 - 学生優秀発表賞, “分割統治型励起状態密度汎関数強束縛法を用いた光活性イエロータンパク質に関する理論的研究”, 第 31 回分子シミュレーション討論会ポスター賞, 河本 奈々(中井 G), 2017 年 12 月
 - Best Poster Award, “DC-DFTB-metadynamics simulations for the primary proton transfer of bacteriorhodopsin”, The Eighth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8), 今井 みの莉(中井 G), 2017 年 12 月
- (波田グループ)
- 平成 28 年度日本化学会学生講演賞, “Theoretical study on the electronic structures and stability of metal encapsulated C₈₀ fullerenes”, 日本化学会, Velloth Archana(波田 G), 2017 年 3 月

(中嶋グループ)

- * 2013 Pople Medal, Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists, 中嶋 隆人(中嶋 G), 2013 年

(長谷川グループ)

- Asian Rising Star Award, 15th Asian Chemical Congress (15ACC), 長谷川 淳也(長谷川 G), 2013 年 8 月
- 2015 年冬季研究発表会・優秀講演賞(ポスター部門), 大保 政貴(長谷川 G), “第四級アンモニウムヒドロキシド触媒による CO₂ 固定化反応の理論的解析”, 化学系学協会北海道支部, 2015 年 1 月
- 第 18 回理論化学研究会優秀講演賞・優秀ポスター賞, 屋内 一馬(長谷川 G), “凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用の理論的解析”, 2015 年 5 月

(平田グループ)

- Fellow, American Association for the Advancement of Science, 平田 聡(平田 G), 2012 年 11 月
- 分子科学会優秀講演賞, “漸近展開法による二電子積分の高速計算”, 第 7 回分子科学討論会 2013 京都, 山田 朋範(平田 G), 2013 年 9 月
- List of teachers ranked as excellent by their students Fall 2013, University of Illinois at Urbana-Champaign, 平田 聡(平田 G), 2013 年秋
- Blue Waters 冠教授, University of Illinois at Urbana-Champaign, 平田 聡(平田 G), 2014 年 1 月
- * Member, International Academy of Quantum Molecular Science, 平田 聡(平田 G), 2014 年 7 月
- The 2013 Löwdin Lecturer, Uppsala University, 平田 聡(平田 G), 2014 年 11 月
- * Fellow, Royal Society of Chemistry, 平田 聡(平田 G), 2015 年 1 月
- List of teachers ranked as excellent by their students Spring 2015, University of Illinois at Urbana-Champaign, 平田 聡(平田 G), 2015 年春
- List of teachers ranked as excellent by their students Spring 2015, University of Illinois at Urbana-Champaign, 平田 聡(平田 G), 2016 年秋
- List of teachers ranked as excellent by their students Spring 2015, University of Illinois at Urbana-Champaign, 平田 聡(平田 G), 2017 年春
- Marvin T. Schmidt 冠教授, University of Illinois at Urbana-Champaign, 平田 聡(平田 G), 2017 年 8 月
- SCS (School of Chemical Sciences) Teaching Award, University of Illinois at Urbana-Champaign, 平田 聡(平田 G), 2017 年 8 月
- The 2018 Robert S. Mulliken Lecturer, University of Georgia, 平田 聡(平田 G), 2018 年 2 月

(森グループ)

- 優秀ポスター賞, “固溶体型 Pd/Pt 合金ナノクラスターの水素吸蔵特性に関する量子化学的考察”, ナノ学会第 13 回大会, 松田 彩(森 G), 2015 年 5 月
- 優秀ポスター賞, “*ab initio* 有効フラグメント力場を用いた分子動力学計算によるイオン液体の溶液構造評価”, 第 5 回 CSJ 化学フェスタ 2015, 黒木 菜保子(森 G), 2015 年 10 月
- 優秀ポスター賞, “第一原理分子シミュレーションによるサブナノサイズ合金クラスターの酸素還元反応触媒活性評価”, 第 6 回 CSJ 化学フェスタ 2016, 宮崎 かすみ(森 G), 2016 年 12 月

②マスコミ(新聞・TV等)報道(プレス発表をした場合にはその概要もお書き下さい。)

- プレスリリース「低温小型でオンデマンドに駆動するアンモニア合成プロセスを開発」
早稲田大学, 2017 年 6 月 7 日.
概要: 早稲田大学理工学術院の関根泰教授、中井浩巳教授らの研究グループは、株式会社日本触媒と共同で、電場印加した触媒上で低温かつ世界最高レベルの速度でアンモニアを合成できることを明らかにしました。
- プレスリリース「有機分子集合体による近赤外光吸収を実現 太陽電池やセンサー、医療分野における検査技術の開発への貢献に期待」
早稲田大学, 2017 年 6 月 9 日.
概要: 早稲田大学理工学術院の中井浩巳教授、愛知工業大学工学部の森田靖教授の研究グループは、有機分子集合体であるトリオキソトリアンギュレン(TOT)の結晶が、近赤外光を強く吸収することを発見しました。また、独自の手法に基づく量子化学計算を実行し、光吸収のメカニズムを解明しました。
- 新聞報道
 “早大、有機分子の化学反応性を予測するAIシステムを開発”
日刊工業新聞, 2016 年 7 月 26 日, 朝刊 29 面.
 “早大ー日本触媒 アンモニア 低温で迅速合成 触媒に電力印加”
化学工業日報, 2017 年 6 月 9 日, 朝刊 6 面 3 段.
 “アンモニア高速合成、早大など、触媒に電圧かけ”
日経産業新聞, 2017 年 6 月 19 日, 8 面.
 “早大、アンモニア合成で日本触媒と新手法”
日本経済新聞, 2017 年 6 月 19 日, 朝刊 9 面.
 “早大 愛工大 有機分子TOT 近赤外光 強く吸収 センサーなど応用へ”
化学工業日報, 2017 年 6 月 12 日, 朝刊 1 面 2 段.
 “太陽電池、効率化に道、有機分子、近赤外光も吸収、愛工大など”
日経産業新聞, 2017 年 7 月 17 日, 6 面.

③その他

該当なし

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

- ・ 本研究課題で開発した相対論的量子化学計算プログラム RAQET は、平成 29 年度末に公開される予定である。RAQET は、中井 T で開発された理論が実装されており、周期表のすべての元素に対して高精度かつ高効率な計算が可能である。
- ・ 世界で標準的に使われている汎用量子化学計算プログラム GAMESS に、開発した相対論的量子化学理論、LUT-IODK 法およびその解析的微分法を実装。マニュアルにおいて、「最も正確で、最も速く計算できる相対論的量子化学計算手法であり、LUT-IODK の使用が推奨される」と記載された。

②社会還元的な展開活動

- ・ 本研究課題および成果をインターネット(<http://www.chem.waseda.ac.jp/nakai/crest/>)で公開し、一般に情報提供している。
- ・ 青木百合子(青木 G)は、「Elongation 法の開発と分子設計への応用性」について、「技術シーズプレゼンテーション、JST 新技術説明会(2014 年 11 月 28 日)」にて口頭発表およびポスター展示を行い、聴講者約 30 名を集めた。
- ・ 森寛敏(森 G)は、「相対論的 MCP に基づく第一原理分子動力学計算によるレアメタル大環状キレート間相互作用の解明」について、「イノベーションジャパン 2015－大学見本市(2015 年 9 月、東京ビッグサイト)」に出展し、聴講者約 40 名を集めた。
- ・

§ 5 研究期間中の活動

5. 1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 24 年 11 月 1 日	中井チーム内キックオフ ミーティング(非公開)	早稲田大学 西早稲田キ ャンパス	30 人	中井 T の CREST 研究キック オフのためのミーティングを 開催した。玉尾皓平研究総 括ほか、射場英紀・高尾正 敏・中山智弘領域アドバイザー にも参加いただいた。
平成 25 年 5 月 18 日	第 1 回チームミーティン グ(非公開)	福岡ガーデ ンパレス	19 人	中井 T の研究進捗報告のため のミーティングを開催し た。高尾正敏・三澤弘明領 域アドバイザーおよび JST の宮下哲領域担当にも参加 いただいた。
平成 25 年 9 月 28 日	第 2 回チームミーティン グ(非公開)	メルパルク 京都	15 人	中井 T の研究進捗報告のため のミーティングを開催し た。
平成 25 年 10 月 1 日	相対論的電子論 NEWS 創刊号		300 部	本研究課題の広報のための ニュースレターを作成し、関 連する研究機関および研究 者に送付した。
平成 25 年 10 月 25 日	2013 年度『理工学特論』 「相対性理論＋量子力 学＋化学＝？」	早稲田大学 高等学院	≈ 50 人	中井浩巳(中井 G)が高校生 に対して模擬講義を行っ た。
平成 26 年 3 月 1 日	相対論的電子論 NEWS vol.2		300 部	本研究課題の広報のための ニュースレターを作成し、関 連する研究機関および研究 者に送付した。
平成 26 年 3 月 21 日	<i>J. Comput. Chem., Jpn.</i> 13 (1), (2014). 特集号: 相対論的量子 化学 - 高精度予測と 新化学領域の探求			波田雅彦(波田 G)が編集長 として、日本コンピュータ化 学会学術誌に、「相対論的 量子化学」を主題とする特 集号を企画・発刊した。

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 26 年 5 月 24 日	第 3 回チームミーティング(非公開)	名鉄グランドホテル	20 人	中井 T の研究進捗報告のためのミーティングを開催した。
平成 26 年 8 月 1 日	相対論的電子論 NEWS vol.3		300 部	本研究課題の広報のためのニュースレターを作成し、関連する研究機関および研究者に送付した。
平成 26 年 12 月 7 日	豊中市男女共同参画推進すてっぷ中学生・高校生対象リケジョプロジェクト第一弾「のぞいてみよう、科学の世界」	とよなか男女共同参画推進センターすてっぷ	≈ 30 人	青木百合子(青木 G)らが講師を務めた。
平成 26 年 12 月 25 日 -26 日	元素戦略 CREST 合同研究会「物性理論と量子化学の接点～相対論の視点を中心として」(非公開)	メープル有馬	21 人	中井 T と島川 T・小口 G との研究連携・情報交換を目的として、おもに若手研究者が発表を行った。
平成 27 年 1 月 20 日 -23 日	Second China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-II)	RIKEN AICS (理化学研究所 計算科学研究機構)	≈ 30 人	本ワークショップは、中井浩巳(中井 G)が Wenjian Liu 教授(中国・北京大学)、Jin Yong Lee 教授(韓国・成均館大学)と3年前に始めた中日韓の若手理論化学研究者の交流会である。今回は、中嶋隆人(中嶋 G)が組織委員長として、「元素戦略のための理論」を主題として第 2 回ワークショップを開催した。
平成 27 年 2 月 23 日	第 4 回チームミーティング(非公開)	早稲田大学 西早稲田キャンパス	21 人	中井 T の研究進捗報告のためのミーティングを開催した。
平成 27 年 3 月 5 日	<i>Int. J. Quantum Chem.</i> 115 (5), (2015). Special Issue: Theoretical Chemistry in Japan			中井浩巳(中井 G)らが編集長として、Wiley 社の学術誌に、「日本の理論化学」を主題とした特集号を企画・発刊した。
平成 27 年 3 月 15 日	相対論的電子論 NEWS vol.4		300 部	本研究課題の広報のためのニュースレターを作成し、関連する研究機関および研究者に送付した。
平成 27 年 5 月 22 日	第 5 回チームミーティング(非公開)	大阪大学豊中キャンパス大阪大学会館	10 人	中井 T の研究進捗報告のためのミーティングを開催した。

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 27 年 6 月 10 日	チーム間連携研究打ち 合わせ(非公開)	早稲田大学 西早稲田キ ャンパス	5 人	中井 G と森田 T による研究 の進捗報告のための打ち合 わせを行った。
平成 27 年 9 月 18 日	第 6 回チームミーティン グ(非公開)	東京工業大 学蔵前会館	9 人	中井 T の研究進捗報告のた めのミーティングを開催し た。
平成 27 年 10 月 25 日	相対論的電子論 NEWS vol.5		300 部	本研究課題の広報のための ニュースレターを作成し、関 連する研究機関および研究 者に送付した。
平成 28 年 4 月 15 日	相対論的電子論 NEWS vol.6		300 部	本研究課題の広報のための ニュースレターを作成し、関 連する研究機関および研究 者に送付した。
平成 28 年 5 月 25 日	第 7 回チームミーティン グ(非公開)	早稲田大学 西早稲田キ ャンパス	8 人	中井 T の研究進捗報告のた めのミーティングを開催し た。
平成 28 年 9 月 13 日	第 8 回チームミーティン グ(非公開)	神戸牛ステ ーキ海鮮料 理 わ田る	9 人	中井 T の研究進捗報告のた めのミーティングを開催し た。
平成 28 年 12 月 13 日	CREST 公開シンポジウ ム「相対論的量子化学 の新しい発展：元素戦 略の基盤理論の構築と 革新的機能材料設計」	北海道大学 創成科学研 究棟	60 人	中井 T の研究進捗報告と今 後の展開を議論するための ミーティングを開催した。玉 尾皓平研究総括ほか、高尾 正敏・徳永雅亮領域アドバ イザーにも参加いただいた。
平成 29 年 9 月 11 日	CREST 研究「相対論的 電子論が拓く革新的機 能材料設計」チームミー ティング	早稲田大学 西早稲田キ ャンパス	47 人	中井 T の CREST 研究終了 に向けての公開ミーティン グを開催した。玉尾皓平研 究総括ほか、高尾正敏・潮 田浩作領域アドバイザーに も参加いただいた。
平成 29 年 12 月 8 日 -9 日	国際シンポジウム「相対 論的電子論が拓く革新 的機能材料設計」	首都大学東 京国際交流 会館	100 人 (予定)	中井 T の研究活動を国際化 する一環として公開シンポ ジウムを開催。Trond Saue 教 授(フランス・トゥールーズ大 学)など 13 名の外国人研究 者による招待講演を予定。