

サブ課題B: 気液二相流及び電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化

サブ課題代表者: 鹿園直毅

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際の別	査読(有りの場合○を)
1	Reaction and Mass Transport Simulation of Polymer Electrolyte Fuel Cell for the Analysis of the Key Factors Affecting the Output Performance in the Catalyst Layer	Ryotaro Kotoi, Gen Inoue and Motoaki Kawase	ECS Trans. 2016 volume 75, issue 14, 385-392	2016年10月	国際	○
2	Understanding formation mechanism of heterogeneous porous structure of catalyst layer in polymer electrolyte fuel cell	G.Inoue and M.Kawase	International Journal of Hydrogen Energy, Vol.41 21352-21365 (2016)	2016年9月	国際	○
3	Charge-transfer interatomic potential for investigation of the thermal-oxidation growth process of silicon	S.Takamoto, T.Kumagai, T.Yamasaki, T.Ohno, C.Kaneta, A.Hatano, S.Izumi	J. Applied Physics, 120, 165109-1-10 (2016).	2016年10月	国際	○
4	フラグメント分子軌道(FMO)計算の結果の自動解析の試み	望月祐志、奥沢明	計算工学学会誌、 Vol. 22 pp3539-3542	2017年4月	国内	
5	散逸粒子動力学における界面付近の水の取扱	土居英男、奥脇弘次、望月祐志、小沢拓	J. Comp. Chem. Jpn., Vol. 16 pp28-31	2017年4月	国内	○
7	First-Principles Analysis on Pi-Bonded Chain Structure on Several Polytypes of SiC Surfaces: Importance of Stacking Sequence on Energetics and Electronic Structures	T. Kaneko, N. Tajima, T. Yamasaki, and T. Ohno	J. Phys. Soc. Jpn. 86, 094708	2017年4月	国際	○
8	計算科学ロードマップ白書 第三版, FMO&DPD関係部分	望月祐志	計算科学ロードマップ白書 第三版	2017年6月	国内	
9	Bond detached atom (BDA)を共有しているフラグメント間の相互作用エネルギーの補正に関する試み	中野達也、望月祐志、福澤薫、沖山佳生、渡邊千鶴	J. Comp. Aided Chem., 18 (2017) pp.143-148.	2017年8月	国内	○
10	Dissipative particle dynamics (DPD) simulations with fragment molecular orbital (FMO) based effective parameters for 1-Palmitoyl-2-oleoyl phosphatidyl choline (POPC) membrane	H. Doi, K. Okuwaki, Y. Mochizuki, T. Ozawa, K. Yasuoka	Chem. Phys. Lett., 684 (2017) pp.427-432	2017年9月	国際	○
11	Fragment Molecular Orbital-based Parameterization Procedure for Mesoscopic Structure Prediction of Polymeric Materials", K. Okuwaki, Y. Mochizuki	K. Okuwaki, Y. Mochizuki, H. Doi, T. Ozawa	J. Phys. Chem. B, 122 (2018) pp.338-347	2017年12月	国際	○
12	Effects of Pt and ionomer ratios on the structure of catalyst layer: A theoretical model for polymer electrolyte fuel cells	H. Ishikawa, Y. Sugawara, G. Inoue, M. Kawase	Journal of Power Sources 374 (2018) 196-204	2018年1月	国際	○
13	Hybrid Density Functional Analysis on Distribution of Carbon Related Defect Levels at 4H-SiC(0001)/SiO2 Interface	Tomoaki Kaneko, Nobuo Tajima, Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Tatsuo Schimizu,	Applied Physics Express 11, 011302-1-4	2018年1月	国際	○
14	FMOプログラムABINIT-MPの開発状況と機械学習との連携	望月祐志、坂倉耕太、秋永宜伸、加藤幸一郎、渡邊啓正、沖山佳生、中野達也、	J. Comp. Chem. Jpn., 16(2017) pp.119-122	2018年1月	国内	○
17	散逸粒子動力学(DPD)プログラムCAMUSの新規開発と性能評価	土居英男、齊藤天菜、奥脇弘次、内藤貴充、望月祐志	J. Comp. Chem. Jpn.,16(2017) pp.126-128	2018年2月	国内	○
18	フラグメント分子軌道(FMO)法を用いた散逸粒子動力学シミュレーションのための有効相互作用パラメータ算出の自動化フレームワーク	奥脇弘次、土居英男、望月祐志	J. Comp. Chem. Jpn., DOI: 10.2477/jccj.2017-	2018年2月	国内	○
15	Application of TensorFlow to recognition of visualized results of fragment molecular orbital (FMO) calculations Materials	S. Saitou, J. Iijima, M. Fujimoto, Y. Mochizuki, K. Okuwaki, H. Doi, Y. Komeiji	CBI-J, 18(2018) pp.58-69	2018年1月	国際	○
16	Prediction of Nickel Morphological Evolution in Composite Solid Oxide Fuel Cell Anode Using Modified Phase Field Model	Jiao, Z. and Shikazono, N.	J. Electrochem., Soc., 165(2), F55-F63 (2018)	2018年1月	国際	○
6	Development of the Fragment Molecular Orbital Method for Calculating Non-local Excitations in Large Molecular Systems	T. Fujita, and Y. Mochizuki	J. Phys. Chem. A, 122 (2018) pp.3886-3898	2018年3月	国際	○
19	First-Principles Study on C=C Defects Near SiC/SiO2 Interface: Defect Passivation by Double-Bond Saturation	Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Tatsuo Schimizu, Koichi Kato, and Takahisa Ohno	Jpn. J. Apply. Phys. 57, 04FR09-1-4	2018年3月	国際	○
20	Atomistic Mechanism of Graphene Growth on a SiC Substrate: Large-Scale Molecular Dynamics Simulations Based on a New Charge-Transfer Bond-Order Type Potential	So Takamoto, Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Takahisa Ohno, Chioko Kaneta, Asuka Hatano, and Satoshi Izumi	Physical Review B 97, 125411-1-8	2018年3月	国際	○
21	Electron Scattering in Graphene by Defects in Underlying h-BN Layer: First-principles transport calculations	Tomoaki Kaneko and Takahisa Ohno	J. Applied Physics, 123, 124304-1-6 (2018).	2018年3月	国際	○
22	Elucidation of the Atomic-Scale Mechanism of the Anisotropic Oxidation Rate of 4H-SiC Between the (0001) Si-Face and (000-1) C-Face by Using a New Si-O-C Interatomic Potential	So Takamoto, Takahiro Yamasaki, Takahisa Ohno, Chioko kaneta, Asuka Hatano, and Satoshi Izumi	J. Applied Physics, 123, 185303-1-6 (2018).	2018年5月	国際	○
23	A portable code for dissipative particle dynamics (DPD) simulation with additional specific interactions	H. Doi, S. Saitou, K. Okuwaki, T. Naitou, and Y. Mochizuki*	CBI-J., 18 (2018) pp.70-85	2018年6月	国際	○
24	AIを活用した流体解析シミュレーション技術の開発	小杉範仁、近藤修司、秋永宜伸、望月祐志	機械設計、2018年7月号、62 (2018) 42-46	2018年6月	国内	
25	RI-MP3 calculations of biomolecules based on the fragment molecular orbital method	T. Ishikawa, K. Sakakura, and Y. Mochizuki	J. Comp. Chem., 39 (2018) pp.1970-1978	2018年9月	国際	○
26	X線小角散乱と散逸粒子動力学法を用いた脂質膜およびベンシクル形成メカニズムの解明	新庄永治、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、古石誉之、福澤薫、米持悦生	J. Comp. Chem. Jpn., 17 (2018)pp. 172-179	2018年9月	国内	○
27	Theoretical Analyses on Water Cluster Structures in Polymer Electrolyte Membrane by Using Dissipative Particle Dynamics Simulations with Fragment Molecular Orbital Based Effective Parameters	K. Okuwaki, Y. Mochizuki*, H. Doi, S. Kawada, T. Ozawa, and K. Yasuoka	RSC Adv., 8 (2018) pp.34582-34595	2018年10月	国際	○

28	Accuracy of Dimer-ES Approximation on Fragment Molecular Orbital (FMO) Method	T. Nakano, K. Fukuzawa, Y. Okiyama, C. Watanabe, Y. Komeiji, and Y. Mochizuki	CBI-J, 18 (2018) pp.119-122	2018年10月	国際	○
29	FMO計算-粗視化シミュレーション連携手法の開発と応用	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	J. Comp. Chem. Jpn., 17 (2018) pp.144-146	2018年10月	国内	○
30	FMOプログラムABINIT-MPのOakForest-PACS上での多層並列化と性能評価	渡邊啓正、佐藤伸哉、坂倉耕太、齊藤天菜、望月祐志	J. Comp. Chem. Jpn., 17 (2018)pp. 147-149	2018年10月	国内	○
31	First principles modeling of defect free abrupt SiC/SiO2 interfaces on a- and m-face 4H-SiC	Tomoaki Kaneko, Nobuo Tajima, Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Tatsuo Schimizu, Koichi Kato, and Takahisa	APPLIED PHYSICS EXPRESS, 11 (10), 101304-1-4 (2018).	2018年10月	国際	○
32	Interface of Hydrated Perfluorosulfonic Acid Electrolyte and Platinum Catalyst: Dissipative Particle Dynamics Simulation Model	Nobuo Tajima, Jun Nara, Takahiro Yamasaki, Taku Ozawa, Hiroya Nitta, Kosuke Ohata, Takahisa Ohno	Material Processing - Theoretical and Experimental Approach "ECS Transactions" (ECST) Volume 88 (from the ECS Yonezawa meeting)	2018年12月	国際	○
33	Destabilization of DNA through interstrand crosslinking by UO_2^{2+}	André Rossberg, Takaya Abe, Koji Okuwaki, Astrid Barkleit, Kaori Fukuzawa, Tatsuya Nakano, Yuji Mochizuki, Satoru Tsushima	Chem. Comm. (DOI: 10.1039/C8CC09329F)	2019年1月	国際	○
34	FMO計算によるマルチスケールシミュレーション手法の開発と材料開発への応用	望月祐志*、奥脇弘次、土居英男、小沢拓	マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集、第5章第3節、技術情報協会	2019年1月	国内	
35	Bond detached atom (BDA)を共有しているフラグメント間の相互作用エネルギーの補正に関する試みII:ラジカル開裂補正	中野達也、望月祐志、福澤薫	J. Comp. Aided Chem. 20 (2019) pp.1-6	2019年2月	国内	○
36	Anomalous carbon clusters in 4H-SiC/SiO2 interfaces	Y. Kagoyama, M. Okamoto, T. Yamasaki, N. Tajima, J. Nara, T. Ohno, H. Yano, S. Harada, and T. Umeda	Journal of Applied Physics 125, 065302 (2019)	2019年2月	国際	○
37	Repeatable and reproducible formation/rupture of oxygen vacancy filaments in the vicinity of a polycrystalline HfO2 surface	Sota Hida, Takumi Morita, Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Takahisa Ohno, and Kentaro Kinoshita	AIP Advances 9, 035309 (2019)	2019年3月	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	FMO 計算を援用する高分子マルチスケールシミュレーション、ポスター	奥脇弘次、川田修太郎、望月祐志、大島広介、小沢拓	第19回理論化学討論会、早稲田大学、東京	2016年5月	国内	
2	ペプチド類のフラグメント分子軌道計算、ポスター	川田修太郎、坂口正貴、米倉伊吹、奥脇弘次、望月祐志、福澤薫	日本コンピュータ化学会2016年春季年会、東京工業大学、東京	2016年6月	国内	
3	電極構造と出力特性の相関解析技術および材料・プロセス開発への展開	井上 元	化学工学会第48秋季大会	2016年9月	国内	
4	フラグメント分子軌道計算に基づく粗視化シミュレーションの有効パラメータ算定の展開、口頭	奥脇弘次、望月祐志、小沢拓、大島広介、土居英男、石川雄太郎、川田修太郎、秦岡顕治	第77回応用物理学会秋季学術講演会、朱鷺メッセ、新潟	2016年9月	国内	
5	フラグメント分子軌道計算に基づく有効パラメータを用いる脂質膜の粗視化シミュレーション、口頭	土居英男、奥脇弘次、望月祐志、小沢拓、秦岡顕治	第77回応用物理学会秋季学術講演会、朱鷺メッセ、新潟	2016年9月	国内	
6	タイヤ素材に関する計算化学的研究の試み、ポスター	石川雄太郎、奥脇弘次、川田修太郎、土居英男、望月祐志	第77回応用物理学会秋季学術講演会、朱鷺メッセ、新潟	2016年9月	国内	
7	4H-SiC/SiO ₂ 界面O ₂ 酸化の第一原理シミュレーション～SiC(0001)Si面と(000-1)C面の違い～、ポスター	山崎隆浩、田島暢夫、金子智昭、奈良純、清水達雄、加藤弘一、大野隆央	第77回応用物理学会秋季学術講演会、朱鷺メッセ、新潟	2016年9月	国内	
8	Carbon concentration and carbon oxides desorption at interfaces of 4H-SiC(0001)Si/SiO ₂ and (000-1)C/SiO ₂ in oxidation processes、ポスター	T.Yamasaki, N.Tajima, T.Kaneko, J.Nara, T.Schimizu, K.Kato, T.Ohno	11th European Conference on Silicon Carbide and Related Materials, Thessaloniki, Greece	2016年9月	国際	
9	Numerical simulation of PEFC stack system for design of configuration and control of anode systems、口頭	高山務	230th ECS Meeting, Hawaii Convention Center, Hawaii, USA	2016年10月	国際	
10	Reaction and Mass Transport Simulation of Polymer Electrolyte Fuel Cell for the Analysis of the Key Factors Affecting the Output Performance in the Catalyst Layer	Ryotaro Kotoi, Gen Inoue and Motoaki Kawase	230th ECS Meeting, Hawaii Convention Center, Hawaii, USA	2016年10月	国際	
11	膜・電極複合体に関するマルチスケールシミュレーション、口頭	望月祐志	第1回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2016年10月	国内	
12	固体酸化物形燃料電池電極の大規模シミュレーション、口頭	鹿園直毅	第1回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2016年10月	国内	
13	燃料電池セル内の大規模二相流シミュレーション、口頭	米田雅一	第1回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2016年10月	国内	
14	直交格子法を用いた細管内気液二相流の数値解析	大西順也、齊藤正士、鹿園直毅	日本機械学会熱工学コンファレンス2016講演論文集、松山	2016年10月	国内	
15	フラグメント分子軌道計算に基づく粗視化シミュレーションの有効パラメータ算定の展開、口頭	奥脇弘次、望月祐志、小沢拓、土居英男、秦岡顕治	高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会、東京農業大学、東京	2016年12月	国内	
16	タイヤゴム素材に関するマルチスケールシミュレーションの試み、口頭	石川雄太郎、奥脇弘次、川田将司、川田修太郎、土居英男、望月祐志	高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会、東京農業大学、東京	2016年12月	国内	
17	固体高分子形燃料電池スタックの非定常挙動の数値解析、口頭	高山務	第57回電池討論会、幕張メッセ国際会議場、千葉	2016年12月	国内	
18	細管内二相流の数値計算における気泡形状の精度評価	齊藤正士、大西順也、鹿園直毅	第30回数値流体力学シンポジウム講演論文集、東京	2016年12月	国内	
19	Fragment molecular orbital-based parameterizing procedure for dissipative particle dynamics simulations、ポスター	K.Okuwaki, H.Do, Y.Mochizuki, T.Ozawa, K.Yasuoka	11th SPSJ International Polymer Conference (IPC2016), Fukuoka	2016年12月	国際	
20	Dissipative particle dynamics simulations for lipid membrane using fragment molecular orbital-based effective parameters、ポスター	H.Do, K.Okuwaki, Y.Mochizuki, T.Ozawa, K.Yasuoka	11th SPSJ International Polymer Conference (IPC2016), Fukuoka	2016年12月	国際	
21	ABINIT-MPによるフラグメント分子軌道計算の最近の応用事例のご紹介～粗視化シミュレーションとの連携、機械学習による解析など、口頭	望月祐志	健康“いきいき”羅針盤 人材育成セミナー、理研・兵庫県立大学、兵庫	2017年1月	国内	○
22	ABINIT-MPプログラムの整備状況、先導的な応用事例、解析の自動化の紹介、口頭	望月祐志、加藤幸一郎	第3回材料系ワークショップ、秋葉原UDX、東京	2017年2月	国内	○
23	第一原理計算プログラムPHASE/0による大規模シミュレーション、口頭	奈良純	第3回材料系ワークショップ、秋葉原UDX、東京	2017年2月	国内	
24	How do nano/micro structure technologies contribute to connect material science with device development beyond the “black-box”? ~Challenges and future visions~, 口頭	G.Inoue	化学工学会第82年会、芝浦工大、東京	2017年3月	国内	○

25	フラグメント分子軌道計算に基づくナノ・メソのマルチスケールシミュレーションの展開、口頭	奥脇弘次、土居英男、石川雄太郎、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治	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	国内	
26	電荷移動型分子動力学法による4H-SiCの熱酸化シミュレーション、口頭	高本聡、山崎隆浩、大野隆央、金田千穂子、泉聡志、酒井信介	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	国内	
27	4H-SiC/SiO ₂ 界面O ₂ 酸化の第一原理シミュレーション～界面における炭素関連欠陥の電子状態～、口頭	山崎隆浩、田島暢夫、金子智昭、奈良純、清水達夫、加藤弘一、大野隆央	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	国内	
28	フラグメント分子軌道計算に基づく高分子粗視化シミュレーションパラメータの算定、口頭	奥脇弘次、川田修太郎、望月祐志、小沢拓、土居英男、泰岡顕治	日本化学会第97春季年会2017、慶応大学、横浜	2017年3月	国内	
29	フラグメント分子軌道計算に基づく非経験的パラメータを用いた生体膜の粗視化シミュレーション、口頭	土居英男、奥脇弘次、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治	日本化学会第97春季年会2017、慶応大学、横浜	2017年3月	国内	
30	ABINIT-MPの整備状況と最近の応用事例、口頭	望月祐志	FMO-DDコンソーシアム全体会議、横浜	2017年3月	国内	○
31	A Cartesian grid method for numerical simulation of two-phase flow in a capillary tube with arbitrary geometry	J.Onishi, M.Saito, N.Shikazono	First Asian Conference on Thermal Sciences 2017, P00619, Jeju, Korea	2017年3月	国際	
32	微細構造に着目した各種電池の高出力化に向けた取組み、口頭	井上元	石油学会九州・沖縄支部 第37回支部講演会	2017年4月	国内	○
33	FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用、ポスター	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治	理論化学討論会、京都	2017年5月	国内	
34	タイヤゴム素材に関する計算化学的研究、口頭発表	石川雄太郎、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、佐藤弘一	日本ゴム協会2017年年次大会、名古屋	2017年5月	国内	
35	Xeon Phi KNL環境でのMO計算プログラムの性能評価、ポスター	齊藤天菜、望月祐志、石村和也、渡邊啓正、坂倉耕太、佐藤伸哉	日本コンピュータ化学会2017年春季年会、東京	2017年6月	国内	
36	Site-specific binding affinity of Eu(III) towards Ca-binding protein calmodulin: A combined spectroscopic and theoretical study、口頭発表	S. Tsushima, S. Samsonov, B. Drobot, J. Raff, Y. Komeiji, Y.	Actinides 2017 Conf., 仙台	2017年7月	国際	
37	First principles study on the interaction between hydrogen atoms and the graphene buffer layer grown on the SiC(0001) surface(ポスター)	J. Nara, T. Yamasaki, T. Ohno	33th European Conference on Surface Science 2017	2017年8月	国際	
38	FMO計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用、ポスター	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治	高分子材料のマルチスケールシミュレーションフロンティア、葉山	2017年9月	国内	
39	Ca(II)およびEu(III)が結合したカルモデュリンの動的挙動の理論的解析、口頭発表	津島悟、望月祐志、古明地勇人、阿部鷹也、奥脇弘次、森寛敏、田中成典	第78回応用物理学会秋季学術講演会、福岡	2017年9月	国内	
40	大規模電子状態計算とデータ科学による有機デバイス材料研究、口頭発表	星健夫、安部友樹也、大平健太郎、福島孝治、藤田貴敏、望月祐志	第78回応用物理学会秋季学術講演会、福岡	2017年9月	国内	
41	FMO-DPD連携シミュレーション手法の開発とベシクル形成への応用、口頭発表	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、新庄永治、福澤薫、米持悦生、小沢拓、泰岡顕治	第78回応用物理学会秋季学術講演会、福岡	2017年9月	国内	
42	OakForest-PACS上でのFMO計算プログラムABINIT-MPのパフォーマンス、依頼講演	望月祐志、渡邊啓正、坂倉耕太、佐藤伸哉	ポスト「京」重点課題6・8 HPCものづくり統合ワークショップ、東京	2017年9月	国内	○
43	Eu(III)とカルモデュリンの相互作用についての計算化学的研究、口頭発表	津島悟、望月祐志、古明地勇人、鷹尾康一郎	日本原子力学会2017秋の年会、札幌	2017年9月	国内	
44	FMO計算結果の機械学習による解析、口頭発表	望月祐志、古明地勇人、齊藤天菜、藤本真悠、飯島潤、阿部鷹也、奥脇弘次、土居英男、奥沢明、牧村健、中西貴哉、福澤薫、田中成典	分子科学討論会、仙台	2017年9月	国内	
45	FMO計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用、口頭発表	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治	分子科学討論会、仙台	2017年9月	国内	
46	電気化学分野における物質輸送現象とその技術動向、口頭	井上元	化学工学会・熱流体工学セミナー	2017年9月	国内	○
47	タイヤゴム素材に関する計算化学的研究、ポスター	石川雄太郎、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、佐藤弘一	高分子討論会、松山	2017年9月	国内	
48	多孔電極構造の理解と最適化に関する取組み、口頭	井上元	第387回電気化学会電池技術委員会	2017年9月	国内	○
49	A First Principles Study on the C=C Defects near SiC/SiO ₂ Interface : Defect Passivation by Double Bond Saturation(ポスター)	N. Tajima, T. Kaneko, T. Yamasaki, J. Nara, T. Schimizu, K. Kato, and T. Ohno	2017 Int. Conf. on Solid State Devices and Materials	2017年9月	国際	
50	4H-SiC/SiO ₂ 界面におけるNO酸化による炭素窒素置換反応(口頭)	山崎隆浩、田島暢夫、奈良純、清水達夫、加藤弘一、大野隆央	第78回応用物理学会秋季学術講演会	2017年9月	国内	
51	分子動力学法によるナノ秒オーダーのSiC表面上のグラフェン成長シミュレーション-6員環の形成(口頭)	高本聡、山崎隆浩、奈良純、大野隆央、金田千穂子、泉聡志	第78回応用物理学会秋季学術講演会	2017年9月	国内	

52	Development of Numerical Simulations of Transient Internal States of PEFC Stack System(口頭)	高山 務	Gaylord National Resort and Convention Center National Harbor, Maryland, USA (232nd ECS)	2017年10月	国際	
53	固体高分子形燃料電池の高性能化に向けた材料シミュレーションへの期待 ~燃料電池技術動向と材料開発課題を中心に~、口頭	米田 雅一	秋葉原UDX(第4回材料系ワークショップ)	2017年10月	国内	
54	計算化学と機械学習の連携に関する取り組み例、依頼講演	望月祐志	Vinasユーザー会議2017、東京	2017年10月	国内	○
55	ABINIT-MPプログラムのOFFでの性能評価、依頼講演	渡邊啓正、坂倉耕太、佐藤伸哉、望月祐志	JCAHPC(東京大学・筑波大学 最先端共同HPC基盤施設)セミナー、柏	2017年10月	国内	○
56	Effects of porous structure of electrode layer and its optimization, 口頭	Gen Inoue	The 8th China-Japan Symposium on Chemical Engineering	2017年10月	国際	○
57	FMOプログラムABINIT-MPの開発状況と機械学習との連携、口頭発表	望月祐志、坂倉耕太、秋永宜伸、加藤幸一郎、渡邊啓正、沖山佳生、中野達也、古明地勇人、奥沢明、福澤薫、田中成典	日本コンピュータ化学会2017年秋季年会、熊本	2017年10月	国内	
58	散逸粒子動力学(DPD)プログラムCAMUSの新規開発と性能評価、口頭発表	土居英男、齊藤天菜、奥脇弘次、内藤貴充、望月祐志	日本コンピュータ化学会2017年秋季年会、熊本	2017年10月	国内	
59	Xeon Phi KNL環境でのMO計算プログラムの性能評価-その2、ポスター	齊藤天菜、望月祐志、石村和也、渡邊啓正、坂倉耕太、佐藤伸哉、土居英男	日本コンピュータ化学会2017年秋季年会、熊本	2017年10月	国内	
33	固体酸化物形燃料電池電極の電極シミュレーション、口頭	鹿園直毅	第2回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2017年10月	国内	
33	固体高分子形燃料電池内大規模二相流シミュレーションと全体性能予測技術、口頭	米田雅一	第2回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2017年10月	国内	
33	膜・電極複合体のマルチスケール解析、口頭	大野隆央	第2回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2017年10月	国内	
60	第一原理計算と古典力学計算による材料表面反応の大規模解析-SiC表面を中心に-(招待、口頭)	大野隆央	日本材料学会マルチスケール材料力学部門・部門講演会	2017年10月	国内	○
61	ウラニルイオンとDNAの相互作用、ポスター	津島悟、望月祐志、Andre Rossberg、古明地勇人	極限環境生物学会、つくば	2017年11月	国内	
62	散逸粒子動力学(DPD)シミュレーションのためのプログラム開発と性能評価、ポスター	土居英男、齊藤天菜、奥脇弘次、内藤貴充、望月祐志	分子シミュレーション討論会2017、金沢	2017年11月	国内	
63	生体模倣高分子系でのエキシトン波束ダイナミクス、ポスター	安部友樹也、星健夫、藤田貴敏、望月祐志	分子シミュレーション討論会2017、金沢	2017年11月	国内	
64	Initial Process of Graphene Grown on [11-20] Stepped 4H-SiC(0001) Surface Revealed by First-Principles Molecular Dynamics Simulations(口頭)	T. Yamasaki, Y. Ono, J. Nara, and T. Ohno	International Symposium on Epitaxial Graphene 2017	2017年11月	国際	
65	Nano-Second Order Molecular Dynamics Simulations for Graphene Formation Process on SiC(口頭)	S. Takamoto, T. Yamasaki, J. Nara, T. Ohno, C. Kaneta, and S. Izumi	International Symposium on Epitaxial Graphene 2017	2017年11月	国際	
66	Theoretical Study on H Intercalation into Buffer Layer Grown on SiC(0001)(ポスター)	J. Nara, T. Yamasaki, and T. Ohno	International Symposium on Epitaxial Graphene 2017	2017年11月	国際	
67	FMO計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用、依頼講演	奥脇弘次、土居英男、望月祐志	第5回材料系ワークショップ、東京	2018年2月	国内	○
68	MD-FMO連携計算によるDNA-ウラニル系の相互作用解析、口頭発表	津島悟、阿部鷹也、奥脇弘次、望月祐志、古明地勇人、福澤薫、中野達也、沖山佳生、三好永作	応用物理学会春期年会2018、東京	2018年3月	国内	
69	FMO計算に基づくマルチスケールシミュレーションのナノバイオ系への応用、口頭発表	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	応用物理学会春期年会2018、東京	2018年3月	国内	
70	フラグメント分子軌道法(FMO法)による一本鎖DNAと結合タンパク質の相互作用解析、ポスター	古明地勇人、沖山佳生、望月祐志、福澤薫	応用物理学会春期年会2018、東京	2018年3月	国内	
71	FMO計算に基づくマルチスケールシミュレーション環境の構築、口頭発表	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会、東京	2018年3月	国内	
72	DPDシミュレーションによる脂質膜構成メカニズムの解明、口頭発表	新庄永治、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、郡司美穂子、古石誉之、福澤薫、米持悦生	日本薬学会、金沢	2018年3月	国内	
73	4H-SiC/SiO ₂ 界面O ₂ 酸化の第一原理シミュレーション~炭素クラスターの形成と拡散~(ポスター)	山崎隆浩、田島暁天、金子智昭、奈良純、清水達雄、加藤弘一、金田千穂子、大野隆央	第65回応用物理学会春季学術講演会	2018年3月	国内	
74	Hydrogen Atom Adsorption on Graphene Buffer Layer Grown on SiC(0001) Surface: First-Principles Study(ポスター)	J. Nara, T. Yamasaki, and T. Ohno	American Physics Society March Meeting 2018	2018年3月	国際	
75	FMO-DPD手法の開発と脂質・タンパク質への応用、口頭	望月祐志*、奥脇弘次、土居英男、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	応用物理学会春期年会2019、東京	2018年3月	国内	○
76	脂質ベシクル、タンパク質の非経験的粗視化シミュレーション、口頭	奥脇弘次、新庄英治、土居英男、望月祐志、福澤薫、米持悦生	応用物理学会春期年会2019、東京	2018年3月	国内	○

77	天然ゴム中タンパク質とイソプレン鎖末端部との相互作用解析、口頭	阿部鷹也、奥脇弘次、望月祐志、福澤薫、佐藤弘一	応用物理学会春期年会2019、東京	2018年3月	国内	
78	小角X線散乱測定とFMO-DPDシミュレーションによる脂質/Cholesterol混合二重膜における物性の解析、口頭	新庄永治、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、郡司美穂子、古石誉之、福澤薫、米持悦生	日本薬学会 第139年会、幕張	2018年3月	国内	
79	スタック高出力化に向けた触媒活性と物質移動特性の要求仕様の数値解析	米田雅一	第139回燃料電池研究会セミナー(電気化学学会主催)、東京	2018年4月	国内	
80	低炭素社会実現のための密度汎関数法に基づいた第一原理分子動力学シミュレーション技術の開発、口頭	大野隆央、奈良純、山崎隆浩、田島暢夫、甲賀淳一郎	平成29年度地球シミュレータ利用報告会、東京	2018年4月	国内	○
81	燃料電池多孔質部材内のメソスケール反応輸送シミュレーションとその応用、口頭	井上元	高分子学会 水素・燃料電池材料研究会、東京	2018年6月	国内	○
82	Carbon support effects on pefc performance analyzed by reaction and mass transport simulation in catalyst layer, poster	T. Ohnishi, G. Inoue, M. So, R. Kotoi, M. Kawase, Y. Tsuge	Grand Renewable Energy 2018 Conference、横浜	2018年6月	国際	
83	A discrete particle packing model of catalyst layer formation in polymer electrolyte fuel cells, poster	M. So, Y. Tsuge, T. Ohnishi, M. Ono, G. Inoue	Grand Renewable Energy 2018 Conference、横浜	2018年6月	国際	
84	二次元翼周り流れのCFD解析結果のTensorFlowによる自動解釈の試み、口頭	伊藤隆登、齊藤天菜、土居英男、望月祐志*、近藤修司	計算工学講演会、名古屋	2018年6月	国内	
85	DNA-ウラニル系のFMO計算に基づく相互作用解析、ポスター	津島悟、阿部鷹也、奥脇弘次、望月祐志、古明地勇人、福澤薫、中野達也、沖山佳生、三好永作	日本コンピュータ化学会2018年春季年会、東京	2018年6月	国内	
86	Kerasを使った転移学習の応用事例、ポスター	伊藤雅仁、伊藤隆登、齊藤天菜、土居英男、望月祐志	日本コンピュータ化学会2018年春季年会、東京	2018年6月	国内	
87	物性測定と粗視化シミュレーションによる脂質二重膜の構造説明、ポスター	新庄永治、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、古石誉之、福澤薫、米持悦生	日本コンピュータ化学会2018年春季年会、東京	2018年6月	国内	
88	FMOプログラムABINIT-MPのOakForest-PACS上での多層並列化と性能評価、口頭	渡邊啓正、佐藤伸哉、坂倉耕太、齊藤天菜、望月祐志	日本コンピュータ化学会2018年春季年会、東京	2018年6月	国内	
89	FMO計算-粗視化シミュレーション連携手法の開発と応用、口頭	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	日本コンピュータ化学会2018年春季年会、東京	2018年6月	国内	
90	Hydrated perfluorosulfonic acid electrolyte at platinum interface: Dissipative particle dynamics simulation、ポスター	田島暢夫、奈良純、山崎隆浩、小沢拓、新田浩也、大島広介、大野隆央	The 16th International Symposium on Polymer Electrolytes (ISPE-16)、横浜	2018年6月	国際	
91	散逸粒子動力学法シミュレーションを用いた脂質膜構成メカニズムの予測、口頭	新庄永治、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、古石誉之、福澤薫、米持悦生	第34回日本DDS学会学術集会、長崎	2018年6月	国内	
92	電池・電気化学システム設計のための化学工学アプローチ、口頭	井上元	スマートエンジニアリング東京2018	2018年7月	国内	○
93	Numerical Simulation of Solid Oxide Fuel Electrodes (Oral)	Shikazono, N., Jiao, Z. Yan, Z. and Hara, S.	12th International Conference on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications (CMCEE 2018),	2018年7月	国際	○
94	Development of a Fully Parallelized Code for Phase Field Simulation of Microstructure Evolution in Solid Oxide Fuel Cell Electrodes (Oral)	Onishi, J., Jiao, Z. and Shikazono, N.	13th World Congress in Computational Mechanics, New York, U.S.A.	2018年7月	国際	
95	Tomographic and Numerical Investigations of Composite Cathodes	Kim, Y., An, H., Sato, K., Okabe, T., Taniguchi, J. and Shikazono, N.	5th Asian SOFC Conference, Shanghai China	2018年8月	国際	○
96	An adjoint-based optimization method for SOFC electrodes (Oral)	Onishi, J. and Shikazono, N.	5th Asian SOFC Conference, Shanghai, China	2018年8月	国際	
97	Theoretical study on hydrogen atom behavior under graphene buffer layer grown on SiC substrate、ポスター	奈良純、山崎隆浩、大野隆央	34th European Conference on Surface Science organising committee, Danmark	2018年8月	国際	
98	Interface of Hydrated Perfluorosulfonic Acid Electrolyte and Platinum Catalyst: Dissipative Particle Dynamics Simulation Model、ポスター	田島暢夫、奈良純、山崎隆浩、小沢拓、新田浩也、大島広介、大野隆央	First International Conference on 4D materials and Systems (4DMS)、米沢	2018年8月	国際	
99	A Development of Self-Consistent Density Functional Program and Its Application to Electronic Structure Calculations of Semiconductors、ポスター	Tomoyuki Hamada, Takahiro Yamasaki, and Takahisa Ohno	International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM-2018)、東京	2018年9月	国際	
100	第一原理計算によるa-m面上の4H-SiC/SiO2 界面モデル構築の構築、ポスター	金子智昭、田島暢夫、山崎隆浩、奈良純、清水達雄、加藤弘一、大野隆央	第79回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋	2018年9月	国内	
101	Theoretical Study of Oxygen vacancies in Grain in Polycrystalline HfO2 Thin Film、口頭	肥田聡太、森田巧、山崎隆浩、奈良純、大野隆央、木下健太郎	第79回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋	2018年9月	国内	
102	First principles study on hydrogen intercalation into buffer layer grown on SiC(0001) surface、ポスター	奈良純、山崎隆浩、大野隆央	The Americas International Meeting on Electrochemistry and Solid State Science (AiMES 2018)、Mexico	2018年9月	国際	
103	電気化学システムにおける物質移動現象とその解析技術	井上元	化学工学会第50秋季大会	2018年9月	国内	○

104	フラグメント分子軌道(FMO)法のナノバイオ系への応用事例、口頭	望月祐志*、加藤幸一郎、福澤薫	日本生物工学会大会シンポジウム、大阪	2018年9月	国内	○
105	3Dプリント、および複合現実感(MR)による分子モデルの表現、ポスター	望月祐志*、中村昇太、牧村健、藤本賢志、奥脇弘次、福澤薫、工藤光子	応用物理学会秋期年会2018、名古屋	2018年9月	国内	
106	脂質ベシクル、タンパク質の非経験的粗視化シミュレーション、口頭	奥脇弘次、新庄英治、土居英男、望月祐志、福澤薫、米持悦生	応用物理学会秋期年会2018、名古屋	2018年9月	国内	
107	物性測定と非経験的粗視化シミュレーションによる脂質膜構成メカニズムの解明、口頭	新庄永治、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、古石誉之、福澤薫、米持悦生	第27回DDSカンファランス、静岡	2018年9月	国内	
108	FMO法を用いたカルサイト結晶表面とペプチドの相互作用解析、口頭	FMO法を用いたカルサイト結晶表面とペプチドの相互作用解析、口頭	2018年第79回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋	2018年9月	国内	
109	Macroscopic Modeling of Liquid Water Based on Detailed Two-Phase CFD and Application on Full-Cell Scale Multiphysics Simulation (口頭)	S. Tanaka, T. Takayama, H. Motegi, T. Tsukamoto, R. Takayama and M. Yoneda	AiMES 2018 ECS and SMEQ Joint International Meeting, Cancun, Mexico	2018年9月	国際	
110	Towards full-stack scale simulation of PEFC system transient control (口頭)	T. Takayama, H. Motegi, T. Tsukamoto, R. Takayama, S. Tanaka and M. Yoneda	AiMES 2018 ECS and SMEQ Joint International Meeting, Cancun, Mexico	2018年10月	国際	
111	Development status of ABINIT-MP program in 2018、ポスター	Y. Mochizuki*, K. Sakakura, Y. Akinaga, H. Watanabe, K. Kato, K. Fukuzawa, T. Nakano	CBI conference 2018, Tokyo	2018年10月	国内	
112	RI-MP3 calculations of biomolecules based on the fragment molecular orbital method with PAICS、ポスター	T. Ishikawa, K. Sakakura, Y. Mochizuki	CBI conference 2018, Tokyo	2018年10月	国内	
113	Non-empirical Coarse-grained Simulations for Lipid Bilayer and Protein、ポスター	K. Okuwaki, E. Shinsho, H. Doi, Y. Mochizuki, K. Fukuzawa, E. Yonemochi	CBI conference 2018, Tokyo	2018年10月	国内	
114	深層学習と転移学習の応用事例、口頭	望月祐志*、伊東雅仁、伊藤隆登、齊藤天菜、奥脇弘次、満野仁美、近藤修司	Vinasユーザー会議2018、東京	2018年10月	国内	○
115	FMO-DPD連携シミュレーション手法の整備と応用展開、口頭	望月祐志	第3回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2018年10月	国内	
116	固体酸化物形燃料電池の電極構造モデリング、口頭	鹿園直毅	第3回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2018年10月	国内	
117	膜電極接合体の構造モデリング - 触媒周りのアイオノマー構造 -、口頭	大野隆央	第3回ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム、東京大学、東京	2018年10月	国内	
118	固体酸化物形燃料電池(SOFC)の課題と展望(口頭)	鹿園直毅	日本機械学会第9回マイクロ・ナノ工学シンポジウム、札幌市民交流プラザ	2018年10月	国内	○
119	電極材料開発と電池デバイス設計の橋渡しとしての各種シミュレーション技術、口頭	井上元	第6回材料系ワークショップ~大規模シミュレーションと機械学習の新展開~、東京	2018年10月	国内	○
120	Computer aided technology for porous electrode science、口頭	Gen Inoue	2nd International Workshop on Phase Interfaces for Highly Efficient Energy Utilization, Baltimore Marriott Inner Harbor at	2018年11月	国際	○
121	Ni(110)-c(2x2)S表面におけるグラフェンの成長、口頭	鷲坂恵介、奈良純、藤田大介	2018年 日本表面真空学会学術講演会、神戸国際会議場	2018年11月	国内	
122	Theoretical Study on Oxygen Vacancies in Crystal Grains in Polycrystalline HfO2 Thin Film、ポスター	肥田聡太、森田巧、山崎隆浩、奈良純、大野隆央、木下健太郎	The 2018 MRS Fall Meeting, USA	2018年11月	国際	
123	FMO-DPDを連携したナノメゾ双方向解析手法の開発、ポスター	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	J-OCTAユーザー会議、東京	2018年11月	国内	
124	FMOとDPDを連携したマルチスケールシミュレーション手法(FMO-DPD)の開発と先導的応用、ポスター	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	分子シミュレーション討論会、つくば	2018年11月	国内	
125	2次元モデルのCFD結果の深層学習による解析の試み、口頭	伊藤雅仁、齊藤天菜、伊藤隆登、奥脇弘次、土居英男、満野仁美、望月祐志*、近藤修司、小杉範仁	第32回数値流体力学シンポジウム、東京	2018年12月	国内	
126	タイヤゴム素材に関する計算化学的研究の事例紹介、口頭	石川雄太郎、阿部鷹也、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、福澤薫、佐藤弘一	高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会、大阪	2018年12月	国内	
127	FMO-DPD連携シミュレーション手法の開発と応用、口頭	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	2018年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会、大阪	2018年12月	国内	
128	Interface Dipole Modulation in HfO2/SiO2 MOS Stack Structures、口頭	Noriyuki Miyata, Kyoko Sumita, Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Ryouzuke Sano,	2018 IEEE International Electron Devices Meeting, San Francisco, USA	2018年12月	国際	
129	第一原理計算によるSiC 界面酸化(窒化)反応機構の解明、口頭	大野隆央	応用物理学会先進パワー半導体分科会 第12回研究会「SiC MOS 界面の理解」、東京	2018年12月	国内	○
130	数値計算技術を用いた多孔電極構造の理解と最適化に関する取り組み、口頭	井上元	Nisshin Engineering Particle Technology International Seminar (NEPTIS-27)	2018年12月	国内	○
131	HfO2/SiO2 MOS積層構造中の界面ダイポール変調動作、口頭	宮田典幸、奈良純、山崎隆浩、住田杏子、佐野良介、野平博司	シリコンナノテクノロジー分科会 第213回研究集会-ULSIデバイス・プロセス技術(IEDM2018特集)一、東京	2019年1月	国内	○
132	物質輸送(招待講演)	井上元	最近の化学工学講習会67「進化する燃料電池・二次電池-反応・構造・製造技術の基礎と未来社会を支える電池技術-	2019年2月	国内	○

133	多結晶HfO ₂ における酸素欠陥の拡散・凝集箇所に関する理論的検討	肥田 聡太、森田 巧、山崎 隆浩、奈良 純、大野 隆央、木下 健太郎	2019年第66回応用物理学会春季学術講演会、東京	2019年3月	国内	
134	多結晶NiO薄膜における溶媒供給効果の理論的検討	肥田 聡太、酒井 貴弘、森田 巧、山崎 隆浩、奈良 純、大野 隆央、木下 健太郎	2019年第66回応用物理学会春季学術講演会、東京	2019年3月	国内	

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際の別	備考
1	化学工学会電池シンポ優秀ポスター賞「PEFC反応物質輸送解析による触媒層出力性能低下要因の検討」	殊井 亮太郎、井上元、河瀬元明	化学工学会	2016年9月	国内	研究室学生
2	電池技術委員会賞「PEFC実触媒層の空隙内酸素拡散抵抗の発生要因と反応場への影響」	井上元	電気化学会電池技術委員会	2016年11月	国内	
3	2016年度 日本混相流学会賞奨励賞「数値解析と直接観察による燃料電池流路及び多孔質電極内の混相流挙動の解明」	井上元	日本混相流学会	2017年8月	国内	
4	脂質ベシクル、タンパク質の非経験的粗視化シミュレーション	奥脇弘次* / 新庄英治、土居英男、望月祐志、福澤薫、米持悦生	応用物理学会2018秋期学術講演会 講演奨励賞	2018年12月	国内	
5	日本機械学会熱工学部門業績賞	鹿園直毅	日本機械学会	2018年10月	国内	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
M1	理学研究科化学専攻博士課程後期課程の奥脇弘次さん(望月祐志研究室)が応用物理学会「講演奨励賞」を受賞	2018年12月19日	立教大学ホームページに掲載	http://www.rikkyo.ac.jp/news/2018/12/mknpps000000gh9c.html
2				
3				

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1				
2				
3				