

12:15~14:40

- P001 色素増感した $\text{KTaO}_3$ 系触媒による水の光完全分解(9)色素の酸化還元準位と光触媒能(九州大)○萩原英久・松本広重・石原達己
- P002 層状タンタル酸塩の構造変化によって誘発される水分解光触媒活性の飛躍的向上(熊本大)○堤阿紀子・荒山恵志・光山知宏・池上啓太・町田正人
- P003 種々の光触媒に対するナノ粒子担持の効果(東京大\*1・筑波大\*2)○坂本尚之\*1・大塚一\*2・前田和彦\*1・金原正幸\*2・寺西利治\*2・堂免一成\*1
- P004 光触媒による水の分解速度の反応温度依存性に影響を与える要因の検討(東京大\*1・山口大\*2)○久富隆史\*1・宮崎和雄\*1・前田和彦\*1・久保田純\*1・酒多喜久\*2・堂免一成\*1
- P005  $\text{La}_5\text{Ti}_2\text{AgS}_5\text{O}_7$ の光触媒活性向上の検討(東京大)○尾崎由隆・石川明生・高田剛・堂免一成
- P006 La-Ga系化合物のバンド位置の決定(東京大)○荻巢清徳・石川明生・高田剛・堂免一成
- P007 新規複合硫化物系水分解光触媒の合成と可視応答性(熊本大)○椎葉智司・堤阿紀子・光山知宏・池上啓太・町田正人
- P008 種々の方法で調製したZn添加酸化ガリウムの光触媒特性(山口大\*1・京都大\*2)○松田雄太\*1・酒多喜久\*1・今村速夫\*1・寺村謙太郎\*2
- P009 水分解反応の活性向上を目的とした $(\text{Zn}_{1-x}\text{Ge})(\text{N}_2\text{O}_x)$ への後処理効果の検討(東京理大\*1・東京大\*2)○鶴澤努\*1・WANG, Xincheng\*2・LEE, Yungi\*2・前田和彦\*2・工藤昭彦\*1・堂免一成\*2
- P010 水分解光触媒に有効なRh/Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>コア/シェル型助触媒の機能の解明(東京大)○吉田真明・前田和彦・石川明生・久保田純・堂免一成
- P011 白金添加酸化ガリウム光触媒への金属イオン添加効果(名古屋大)○志村勝也・吉田寿雄
- P012 高分散担持バナジウム酸化物における光触媒活性とJahn-Teller効果(京都大\*1・CREST\*2)○岩原直也\*1・徳永健\*1・佐藤徹\*1・田中庸裕\*1・田中一義\*1,\*2
- P013 ヨウ素レドックス系Zスキームの酸素生成系への適応を目的としたTaONの表面修飾(東京大\*1・北海道大\*2)○東正信\*1・阿部竜\*2・石川明生\*1・高田剛\*1・大谷文章\*2・堂免一成\*1
- P014 中空シリカ内包光触媒の構造制御(大阪大)○池田茂・生駒善光・小林秀行・原田隆史・松村道雄
- P015 ポリマーを用いた水熱合成による二酸化チタン光触媒の形状制御(九州工大)○栗原悠・村上直也・横野照尚
- P016 シングルサイト光触媒を利用する金属ナノ粒子担持法の開発(大阪大)○白仁田沙代子・三浦祐生・大道徹太郎・森浩亮・山下弘巳
- P017 分光法を用いた光触媒におけるトラップ準位の検出(神戸大)○丸山規司・大西洋
- P018 窒素イオン注入チタニア光触媒における活性種化学状態解析(名古屋大)○吉田朋子・武藤俊介・若林淳
- P019 TiO<sub>2</sub>含有メソポーラスシリカの疎水基修飾による光触媒反応の制御(大阪大)○森下雅嗣・白石康浩・平井隆之
- P020 二酸化チタン表面にカーボンナノチューブを修飾したハイブリット光触媒の開発(九州工大)○小野麻実・村上直也・坪田敏樹・横野照尚
- P021 ゲル-ゾル法によるBaTiO<sub>3</sub>およびSrTiO<sub>3</sub>ナノ粒子の合成と部分硫化による新規光触媒材料の開発(東北大)○蟹江澄志・DAVAASUREN, Bambar・JHON, Cuya・高橋英志・佐藤修彰・村松淳司
- P022 Ni担持TiO<sub>2</sub>光触媒の表面状態と反応性(宇都宮大)○三塚聖・岩井秀和・江川千佳司
- P023 CVRD(Chemical Vapor Reductive Deposition)法による酸化チタン薄膜へのニッケルナノ粒子の析出(東北大\*1・北九州市大\*2・豊田中研\*3)○吉永勝己\*1・山本勝俊\*2・佐藤修彰\*1・青木恒勇\*3・森川健志\*3・村松淳司\*1
- P024 光触媒担持マイクロリアクターを用いた二酸化炭素の還元と水の分解(東京工大)○松下慶寿・岩澤茉莉子・佐藤有理子・鈴木正・市村慎二郎
- P025 可視光応答型酸化チタン薄膜光触媒による光エネルギー変換と変換効率に及ぼすHF処理の影響(大阪府大)○飯屋谷和志・福本章平・竹内雅人・松岡雅也・安反正一
- P026 超高速化量子分子動力学法に基づくマルチスケール表面電子放出シミュレータの開発(東北大)○坪井秀行・芹澤和実・菊地宏美・鈴木愛・SAHNOUN, Riadh・古山通久・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P027 Ultraaccelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Electrical Properties of Silicon-related Materials(Tohoku Univ.)○ZHU, Zhigang・CHUTIA, Arunabhiram・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDO, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira
- P028 クラスタリングとマルチプロセスによる並列化分子動力学計算プログラムの開発と応用(東北大)○三浦隆治・鈴木愛・SAHNOUN, Riadh・古山通久・坪井秀行・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P029 量子分子動力学法による鉄表面の化学反応ダイナミクスの解析(東北大)○小野寺拓・森田祐輔・奈良紗綾香・鈴木愛・SAHNOUN, Riadh・古山通久・坪井秀行・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P030 量子分子動力学法に基づいた金属酸化物エレクトロニクス材料のダイナミクス解析(東北大)○大沼宏彰・芹澤和実・鈴木愛・SAHNOUN, Riadh・古山通久・坪井秀行・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明

- P031 超高速化量子分子動力学法の開発とダイヤモンドライクカーボンの生成プロセスへの応用(東北大)○教敦 其木格・森田祐輔・鈴木愛・SAHNOUN, Riyadh・古山通久・坪井秀行・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P032 貴金属表面におけるNO分解反応の超高速化量子分子動力学法による解析(東北大)○石橋世子・鄭善鎬・鈴木愛・SAHNOUN, Riyadh・古山通久・坪井秀行・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P033 Mn/MFIゼオライト,Mn系ペロブスカイト触媒上でのNO<sub>x</sub>の炭化水素による選択接触還元(信州大)岡田満克・○桜井教広・小野一輝・小野武彦
- P034 ガロシリケートを基盤としたNO<sub>x</sub>-SCR触媒の高活性条件の検討(埼玉工大)○長島孝治・岡田圭介・有谷博文
- P035 Ir/WO<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub>触媒上でのCOによるNO選択還元反応における共存水蒸気の影響(産総研\*1・東京理大\*2)○羽田政明\*1・青木直也\*2・浜田秀昭\*1
- P036 Ga/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, In/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>を用いたジメチルエーテルによるNO選択的還元(北海道大)金子勘太郎・○下川部雅英・荒井正彦
- P037 炭化水素を還元剤に用いたNO選択接触還元反応—酸化セリウム系触媒の活性—(北見工大)安間篤志・出口大佑・○岡崎文保・多田旭男
- P038 Catalytic NO-H<sub>2</sub>-CO-O<sub>2</sub> reaction over Pt-supported mesoporous Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(Kumamoto Univ.)SAMED, Armed Jalal・TANAKA, Takayuki・IKEUE, Keita・○MACHIDA, Masato
- P039 排ガス浄化用酸化物担持金属触媒の開発(3)(大分大)○萱田佑斗・河野崇・久保政和・永岡勝俊・西口宏泰・瀧田祐作
- P040 Pt/Ba/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>系触媒上でのNO<sub>x</sub>吸蔵-還元過程における速度論的検討(名古屋大\*1・トヨタ自動車\*2)○齊藤良典\*1・清水研一\*1・信川健\*2・薩摩篤\*1
- P041 BaOを担持した酸化物触媒におけるNOの直接分解(2)反応条件の影響(九州大)○後藤和也・松本広重・石原達己
- P042 イソオクタン排出に対するHC reformer trapとPt触媒の複合効果(東京大\*1・東京理大\*2)○小倉賢\*1・新部裕佳子\*2・駒場慎一\*2
- P043 炭素粒子燃焼におけるペロブスカイト型複合酸化物触媒の三次元規則的マクロ多孔化の効果(北海道大)○堀内俊孝・加藤信泰・定金正洋・上田渉
- P044 酸素イオン伝導特性によりPM燃焼を促進するメカニズムに関する検討(マツダ)○山田啓司・鈴木研二・藤田弘輝・岡本謙治・原田浩一郎・高見明秀
- P045 PrとLaを添加したCe系複合酸化物におけるパティキュレート酸化特性と格子酸素の拡散性(九州大\*1・マツダ\*2)○大石哲也\*1・松本広重\*1・高見明秀\*2・山田啓司\*2・石原達己\*1
- P046 Ag/CeO<sub>2</sub>触媒上におけるPM燃焼反応(名古屋大)○川地浩史・清水研一・薩摩篤
- P047 CeO<sub>2</sub>系複合酸化物のDPM燃焼触媒特性(3)(熊本大)○村田祐一郎・岸川幸司・池上啓太・町田正人
- P048 貴金属微粒子含有高性能触媒(第2報)(マツダ)○岩国秀治・葦島浩二・三好誠治・住田弘祐・高見明秀
- P049 担体および貴金属の粒成長を考慮可能なシタリングシミュレータの開発と応用(東北大)○鈴木愛・佐藤亮・大串巧太郎・SAHNOUN, Riyadh・古山通久・坪井秀行・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P050 超高速化量子分子動力学法の開発と担持金属触媒への応用(東北大)○遠藤明・石橋世子・鄭善鎬・小野寺拓・鈴木愛・古山通久・坪井秀行・畠山望・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P051 超高速化量子分子動力学法に基づく触媒担体の強度物性予測手法の開発(東北大)○畠山望・鈴木愛・SAHNOUN, Riyadh・古山通久・坪井秀行・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P052 Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Metal Oxides for catalyst support(Tohoku Univ.)○MD.KHORSHEH, Alam・CHUTIA, Arunabhiram・ZHU, Zigang・LV, Chen・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riyadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDO, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira
- P053 金超微粒子と高分子モデル分子のヘテロ接合に関する理論的研究(大阪大\*1・首都大\*2)○奥村光隆\*1・木下昌典\*1・藪下広高\*1・北河康隆\*1・川上貴資\*1・春田正毅\*2
- P054 金属酸化物表面へのAuクラスターのヘテロ接合に関する理論的研究(大阪大\*1・首都大\*2)○木下昌典\*1・藪下広高\*1・奥村光隆\*1・北河康隆\*1・川上貴資\*1・春田正毅\*2・山口兆\*1
- P055 時間発展加速化分子動力学による貴金属触媒表面上でのCO酸化反応速度解析(東北大)○鄭善鎬・石橋世子・鈴木愛・SAHNOUN, Riyadh・古山通久・坪井秀行・畠山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A.・宮本明
- P056 Dynamics of H<sup>+</sup> transport in hydrated proton exchange membrane for PEMFC by ultra accelerated quantum chemical molecular dynamics method(Tohoku Univ.)○SOUISSI, Maaouia・AHMED, Farouq・HATTORI, Tatsuya・KIM, Boyeong・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riyadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDO, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira
- P057 Ultra-accelerated quantum chemical molecular dynamics simulation for Li-ion battery electrode surface and interfaces(Tohoku Univ.)○YACAPIN, John Paul・KIM, Boyeong・HATTORI, Tatsuya・SOUISSI, Maaouia・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riyadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDO, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira

- P058 Investigation of the dissociative adsorption of hydrogen at Pt surface using ultra accelerated quantum chemical molecular dynamics.(Tohoku Univ.)○AHMED, Farouq·KIM, Beyeong·SUNHO, Jung·HATTORI, Tatsui·SOUISSI, Maaouia·CHUTIA, Arunabhiram·SUZUKI, Ai·SAHNOUN, Riadh·KOYAMA, Michihisa·TSUBOI, Hideyuki·HATAKEYAMA, Nozumo·ENDOU, Akira·TAKABA, Hiromitsu·KUBO, Momoji·DEL CARPIO, Carlos A.·MIYAMOTO, Akira
- P059 硝酸イオン還元反応への電気化学メンブレンリアクタの適用(5)(熊本大\*1・菱彩テクニカ\*2)○安居院綾子\*1・HASNAT, Mohammad\*1・山口剛\*2・日隈聡\*1・池上啓太\*1・町田正人\*1
- P060 電場印加反応場中での触媒反応によるエタノールの分解(早稲田大)関根泰○富岡真彦・松方正彦・菊地英一
- P061 CO選択酸化触媒の開発—反応シミュレータ構築と寿命予測—(新日本石油)○岩佐泰之・松本隆也・加藤恵美・和久俊雄
- P062 K添加Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>触媒におけるCO優先酸化反応機構とKの役割(筑波大)○石田洋一・田中久教・伊藤伸一・富重圭一・国森公夫
- P063 Au表面上でのO<sub>2</sub>、O<sub>3</sub>およびCOの吸着特性と反応性(産総研\*1・JST\*2)○藤谷忠博\*1・平野貴嗣\*2・伊達正和\*1・中村功\*1
- P064 遷移金属添加Pt系PROX触媒によるCO酸化活性(日産自動車)○赤間弘・星野真樹・小林智明
- P065 偏光全反射蛍光XAFS法による単結晶TiO<sub>2</sub>(110)表面上のAu種の表面立体構造解析(国際基督教大\*1・CREST\*2・北海道大\*3・高エネ研\*4・花王\*5・山梨大\*6・東京大\*7)○田旺帝\*1\*2・宮崎晃太郎\*3・渡辺直樹\*3・小池祐一郎\*4・荻関英典\*2・原賢二\*3・館野剛介\*5・居島薫\*6・野村昌治\*4・岩澤康裕\*7・朝倉清高\*3
- P066 Preparation of ordered mesoporous CuO/CeO<sub>2</sub> and their catalytic behavior in CO preferential oxidation and water gas shift reaction(Kanagawa Univ.)○SHEN, Weihua·MIYAO, Toshihiro·NAITO, Shuichi
- P067 赤外線化学発光法を用いたPd(111), Pt(111), Rh(111)上のCO酸化反応(筑波大)○渡辺整・中尾憲治・伊藤伸一・富重圭一・国森公夫
- P068 種々の担持Au触媒上でのCO選択酸化反応における担体効果(神奈川大)○山本亮介・長谷川稔・高根沢豪紀・宮尾敏広・内藤周次
- P069 Pretreatment: a crucial factor for low-temperature CO oxidation over Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(Tokyo Metropolitan Univ.)○YU, Yunbo·TAKEI, Takashi·HARUTA, Masatake
- P070 有機金属シアノ錯体より調製したペロブスカイト型酸化物の表面吸着種のIRによる検討(愛媛大\*1・中国科学院\*2)○浅本麻紀子\*1・八尋秀典\*1・定岡芳彦\*1・賀泓\*2
- P071 Rh-Mn/CeO<sub>2</sub>触媒を用いたエタノール酸化的水蒸気改質反応に関する研究(宇都宮大)○渡邊寛子・樋山頭太郎・岩井秀和・江川千佳司
- P072 Pt/Ce-M-O<sub>x</sub>複合酸化物系触媒によるCOシフト反応特性(日産自動車)○小林智明・赤間弘
- P073 ペロブスカイト型酸化物担持ニッケル触媒による加圧下でのメタン水蒸気改質(早稲田大)関根泰○土井あずさ・松方正彦・菊地英一
- P074 Cu-Al-Ox触媒のDSS水蒸気処理に対する耐久性に関する検討(東京学芸大\*1・京都大\*2)○西村俊\*1・吉永裕介\*1・小川治雄\*1・宍戸哲也\*2
- P075 自己再生能を有するメタンのDSS水蒸気改質用PtドープNi/Mg(Al)O触媒(広島大\*1・京都大\*2)○李ダ林\*1・西田和史\*1・宍戸哲也\*2・近江靖則\*1・佐野庸治\*1・竹平勝臣\*1
- P076 MgドープCu/Zn/Al触媒によるCOシフト反応(広島大\*1・京都大\*2)○西田和史\*1・李ダ林\*1・宍戸哲也\*2・近江靖則\*1・佐野庸治\*1・竹平勝臣\*1
- P077 メタン水蒸気改質におけるペロブスカイト担持貴金属触媒の格子酸素の役割(早稲田大)関根泰○井筒義行・松方正彦・菊地英一
- P078 水性ガスシフト反応におけるペロブスカイト型酸化物触媒の挙動(早稲田大)関根泰○高松遥・高田光子・松方正彦・菊地英一
- P079 種々のPt-Re/ZrO<sub>2</sub>系触媒上での低温水性ガスシフト反応(工学院大)○印出諒一・原啓一郎・飯田肇・五十嵐哲
- P080 市販Cu-Zn-Al系シフト触媒の燃料電池起動停止条件下での劣化挙動のin-situ解析(出光興産\*1・鳥取大\*2)○梅木孝\*1・河島義実\*1・高津幸三\*1・奥村和\*2
- P081 Pt/セリア触媒のPtシンタリング抑制機構の解明(3)(豊田中研)○畑中美穂・高橋直子・田辺稔貴・長井康貴・高橋直樹・須田明彦・新庄博文
- P082 Pt/CeO<sub>2</sub>系触媒によるバイオエタノールの水蒸気改質反応(石巻専修大\*1・徳島大\*2・三和澱粉\*3)○大井真\*1・山崎達也\*1・加藤雅裕\*2・菊池尚子\*1・吉川卓志\*3・和田守\*3
- P083 Ru系触媒を用いるFT反応-炭素及びアルミナ担体による比較(産総研)○村田和久・岡部清美・稲葉仁・高原功・劉彦勇
- P084 燃焼反応場を外側にもつマイクロチューブ状Pd-Zn系構造体触媒によるメタノール改質(八戸工大\*1・静岡大\*2)○鎌田佳之\*1・福原長寿\*2
- P085 内外両管壁を触媒反応場とするメタノールの水蒸気改質反応—メタノール燃焼熱の高効率利用法—(関西大)○中尾文彦・池永直樹・三宅孝典・鈴木俊光
- P086 液相還元法によるCu系担持触媒のマイクロリアクターへの担持(東北大\*1・大日本印刷\*2)○澁谷薫\*1・蟹江澄志\*1・村松淳司\*1・木原健\*2・竹内明彦\*2
- P087 ジメチルエーテル水蒸気改質反応におけるCuスピネル複合触媒の熱処理効果(京大\*1・JST\*2・出光興産\*3)○霜田直宏\*1・KAJORNNAK, Faungnawakij\*2・菊地隆司\*1・河島俊一郎\*2・福永哲也\*3・江口浩一\*1
- P088 メタノール水蒸気改質用Cu-MOx/ZrTiO<sub>4</sub>(M=Cr,Mn,Zn,Si,Fe)触媒の研究(京セラ)○佐郷文昭・越谷直樹・笠井修一

- P089 ペロブスカイト型酸化物担持ニッケル触媒を用いたトルエンの水蒸気改質(早稲田大)関根泰・○新井博久・松方正彦・菊地英一
- P090 キレート剤を用いて調製したPt/ZrO<sub>2</sub>系触媒のCH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>改質反応(石巻専修大)○高橋芳恵・山崎達也
- P091 ペロブスカイト触媒を用いたメタンの酸化カップリング(早稲田大)関根泰・○田中啓介・松方正彦・菊地英一
- P092 Ni/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>触媒上でのメタンの酸化的改質反応におけるPd修飾効果(筑波大)○吉田香織・向中野侑哉・国森公夫・富重圭一
- P093 GTLプロセスのための高圧メタン改質反応用MgO担持卑金属触媒の開発(3)(大分大\*<sup>1</sup>・石油資源開発\*<sup>2</sup>)○橋本祐作\*<sup>1</sup>・佐藤勝俊\*<sup>1</sup>・若月俊也\*<sup>2</sup>・永岡勝俊\*<sup>1</sup>・西口宏泰\*<sup>1</sup>・瀧田祐作\*<sup>1</sup>
- P094 Mo/H-MFIメタン脱水素芳香族化触媒の高活性化における前処理効果の検討(埼玉工大\*<sup>1</sup>・大阪府大\*<sup>2</sup>)○有谷博文\*<sup>1</sup>・柴崎裕弓\*<sup>1</sup>・内城信明\*<sup>1</sup>・高梨一星\*<sup>1</sup>・中平敦\*<sup>2</sup>
- P095 エタノールからのC<sub>3+</sub>オレフィン類製造におけるFe/H-ZSM-5触媒への第2成分添加効果(産総研)○稲葉仁・村田和久・高原功
- P096 Bi<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>9</sub>/Bi<sub>2</sub>MoO<sub>6</sub>系およびBi<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>12</sub>/CoMoO<sub>4</sub>系の相互作用とC<sub>3</sub>H<sub>6</sub>部分酸化選択性(信州大)○星野栄樹・大林輝圭・塚本聡・小野武彦
- P097 各種水酸アパタイト担持バナデート触媒によるプロパンの酸化脱水素反応(徳島大)○杉山茂・杉本直登・平田祐規・中川敬三・外輪健一郎
- P098 Cu/Cr触媒に対するオゾン添加あるいはプラズマ励起によるVOC分解促進効果(産総研\*<sup>1</sup>・埼玉工大\*<sup>2</sup>・九州大\*<sup>3</sup>)○齋藤圭市\*<sup>1,2</sup>・尾形敦\*<sup>1</sup>・金賢夏\*<sup>1</sup>・有谷博文\*<sup>2</sup>・永長久寛\*<sup>3</sup>
- P099 Pt/CeO<sub>2</sub>-ZrO<sub>2</sub>-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>触媒による低温でのエチレン完全燃焼(大阪大)○増井敏行・今津隼人・今中信人
- P100 ペロブスカイト型酸化物を触媒に用いたエチルベンゼンの脱水素(早稲田大)関根泰・○渡部綾・長川健人・松方正彦・菊地英一
- P101 メタノール部分酸化反応におけるCu-Mn薄膜の触媒活性に関する研究(宇都宮大)○崔協力・高橋和幸・岩井秀和・江川千佳司
- P102 n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>の酸化的改質反応の常温駆動(3)希土類酸化物担持Ni触媒に関する検討(大分大)○福田渉・佐藤勝俊・永岡勝俊・西口宏泰・瀧田祐作
- P103 Gas-phase epoxidation of propylene using H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> over Au/mesoporous TS-1(Tokyo Metropolitan Univ.)○HUANG, Jiahui・TAKEI, Takashi・KAWAHARA, Jun・HARUTA, Masatake
- P104 ポリマー保護金クラスターによるアルコールの空気酸化—活性のサイズ特異性と電子状態の相関—(分子研\*<sup>1</sup>・千葉大\*<sup>2</sup>・北海道大\*<sup>3</sup>・CREST\*<sup>4</sup>)角山寛規\*<sup>1</sup>・CHAKI, Nirmalya K.\*<sup>1</sup>・一國伸之\*<sup>2</sup>・櫻井英博\*<sup>1</sup>・○佃達哉\*<sup>3,4</sup>
- P105 Feビピリジン錯体内包ゼオライト触媒による選択酸化反応(大阪大)○森浩亮・楢原絢人・山下弘巳
- P106 Mo-ジペルオキシ錯体によるオレフィンとアルコールの選択酸化における添加アミンの効果に関する軌道相互作用解析(ルモックス技研\*<sup>1</sup>・上智大\*<sup>2</sup>)○志賀昭信\*<sup>1</sup>・栗栖安彦\*<sup>2</sup>
- P107 リンモリブデン酸によるメタクロレインよりメタクリル酸生成反応機構に関する密度汎関数法による理論的検討(2)—触媒還元種の酸化と触媒再生—(東北大\*<sup>1</sup>・三菱レイヨン\*<sup>2</sup>)○宗像弘明\*<sup>1</sup>・宮本明\*<sup>1</sup>・栗本恵子\*<sup>1</sup>・近藤正英\*<sup>2</sup>・渡部洋子\*<sup>2</sup>
- P108 Calculation on Electronic Properties and Excitation Spectra of Organic Dye Compounds Using An Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Method(Tohoku Univ.)○LV, Chen・OGIYA, Kei・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDOU, Akira・TAKABA, Hiromitsu・MOMOJI, Kubo・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira
- P109 Applying Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics techniques for the evaluation of ligand protein interactions(Tohoku Univ.)○SAHU, Kamlesh Kumar・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDOU, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira
- P110 Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Studies on Carbon Nanomaterials as Catalyst Support(Tohoku Univ.)○CHUTIA, Arunabhiram・ZHU, Zhigang・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDOU, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira・YACAPIN, John Paul・AODOU, Qimuge
- P111 Investigate the Catalytic Function of the CYP Mutants Using Quantum Molecular Dynamics(Tohoku Univ.)○ISMAEL, Mohamed・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDOU, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira
- P112 Study the restoration mechanism of the tumor suppressor function of mutant p53 using ultra accelerated quantum chemical molecular dynamics program(Tohoku Univ.)○RAUF, Shah・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDOU, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・DEL CARPIO, Carlos A.・MIYAMOTO, Akira
- P113 Tight-binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Ethylene Polymerization Reaction Using CpSiH<sub>2</sub>NHTiCl<sub>2</sub>-Constrained Geometry Catalyst(Tohoku Univ.\*<sup>1</sup>・Hayashi office\*<sup>2</sup>)○MALANI, Hema\*<sup>1</sup>・HAYASHI, Shigekazu\*<sup>2</sup>・ZHONG, Huifeng\*<sup>1</sup>・SAHNOUN, Riadh\*<sup>1</sup>・KOYAMA, Michihisa\*<sup>1</sup>・TSUBOI, Hideyuki\*<sup>1</sup>・HATAKEYAMA, Nozomu\*<sup>1</sup>・ENDOU, Akira\*<sup>1</sup>・TAKABA, Hiromitsu\*<sup>1</sup>・KUBO, Momoji\*<sup>1</sup>・DEL CARPIO, Carlos A.\*<sup>1</sup>・MIYAMOTO, Akira\*<sup>1</sup>
- P114 Applying Quantum Chemical Molecular Methods to Bio-Polymer Regulation and Design(Tohoku Univ.)○DEL CARPIO, Carlos A.・SUZUKI, Ai・SAHNOUN, Riadh・KOYAMA, Michihisa・TSUBOI, Hideyuki・HATAKEYAMA, Nozomu・ENDOU, Akira・TAKABA, Hiromitsu・KUBO, Momoji・MIYAMOTO, Akira

- P115 超高速化量子分子動力学法に基づく大規模触媒反応シミュレーション技術の開発と高分子重合反応への応用(東北大\*1・林事務所\*2)○高羽洋充\*1・林繁和\*1\*2・HEMA, Malani\*1・鈴木愛\*1・サヌーンリアド\*1・坪井秀行\*1・古山通久\*1・遠藤明\*1・島山望\*1・久保百司\*1・DEL CARPIO, Carlos A. \*1・宮本明\*1
- P116 超高速化量子分子動力学法に基づく不規則性多孔質触媒マルチスケールシミュレーションの新展開(東北大)○古山通久・石橋世子・高橋溪・扇谷恵・鄭善鎬・服部達哉・SOUISSI, Maouia・JOHN PAUL, Yacapin・CHUTIA, Arunabhiram・鈴木愛・SAHNOUN, Riadh・坪井秀行・島山望・遠藤明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO, Carlos A. ・宮本明
- P117 カチオン交換粘土鉱物に含浸担持したビス(イミノ)ピリジン鉄(II)錯体によるエチレン重合(埼玉大\*1・日本ポリケム\*2)○檜山優斗\*1・川田雄介\*1・石濱由之\*2・櫻木努\*2・大嶋正明\*1・黒川秀樹\*1・三浦弘\*1
- P118 グアニジニウムトリフルオロメタンスルフォネートを開始剤とするビニルモノマーの重合(東北生活文化大)○菅野修一
- P119 ゼオライト担持CaO触媒を用いたトリオレインのエステル化反応の検討(愛媛大\*1・太陽石油\*2)川人聡美\*1・浅本麻紀子\*1・山浦弘之\*1・〇八尋秀典\*1・三重野裕大\*2・幾島賢治\*2
- P120 Ni-BEA触媒によるバイオエタノールからのオレフィン合成反応(徳島大\*1・石巻専修大\*2・三和澱粉\*3)○加藤雅裕\*1・岡田佳枝\*2・菊池尚子\*2・山崎達也\*2・吉川卓志\*3・和田守\*3
- P121 穏和な加熱温度で有機ハイドライドから水素を出す触媒(東京理大)○荒巻潔・河口進・程島真哉・齋藤守弘・桑野潤・斉藤泰和
- P122 木質バイオマスを原料とするバイオディーゼル燃料製造用固体塩基触媒の開発(日本大)○古川茂樹・岡田昌樹
- P123 バイオマスからの化学品合成—高選択的水素化分解触媒の開発—(筑波大)○高祖修一・島尾彰・植田直幸・国森公夫・冨重圭一
- P124 タングステン酸化物触媒によるセルロース分解反応(名古屋大)○清水研一・林強・古川容竹・薩摩篤
- P125 超高活性サイトをもつCo-Mo水素化脱硫触媒の調製とキャラクターゼーション(島根大)日岡一也・吉岡裕裕・〇久保田岳志・岡本康昭
- P126 Post-treatment of Co-Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> with citric acid to prepare highly active HDS catalysts(Shimane Univ.)○RINALDI, Nino・KUBOTA, Takeshi・OKAMOTO, Yasuaki
- P127 燃料電池用脱硫剤の開発—寿命予測シミュレータ構築—(新日本石油)○永易圭行・小堀良浩・橋本康嗣・和久俊雄
- P128 灯油燃料対応ATR反応用水素製造触媒の開発(帝国石油\*1・日揮ユニバーサル\*2)○鈴木陽介\*1・伊藤孝\*1・原田亮\*1・後藤貴史\*2・小笠原睦\*2・秋山一矢\*2
- P129 Rh担持ハイドロタルサイト触媒の物性測定(日揮ユニバーサル\*1・帝国石油\*2)○後藤貴史\*1・小笠原睦\*1・秋山一矢\*1・鈴木陽介\*2・伊藤孝\*2・原田亮\*2
- P130 PtやRhを内包した酸化物ナノ複合体の形成機構とその触媒特性(神奈川大)○風早由比子・宮尾敏広・内藤周弼
- P131 イリジウム内包中空シリカナノ粒子の特異的な水素吸蔵機構の解明(神奈川大)○山田祐泰・宮尾敏広・内藤周弼
- P132 ロジウムナノ粒子内包中空カーボンの水溶液中での芳香環の水素化反応(大阪大\*1・名古屋大\*2)○原田隆史\*1・鳥本司\*2・池田茂\*1・松村道雄\*1
- P133 液相還元法によるPd<sub>20</sub>Te<sub>7</sub>合金ナノ粒子の合成と生成機構(東北大\*1・北海道大\*2・三菱化学\*3・高エネ研\*4)○小西範和\*1・高橋英志\*1・村松淳司\*1・朝倉清高\*2・大野博信\*3・高橋和成\*3・小池祐一郎\*4
- P134 担持Pt触媒の含浸過程におけるPt種の担体上への吸着挙動(工学院大)○荒関亮・五十嵐哲
- P135 アルミナ多層体によるPt粒子のシンタリング抑制効果(京都市大\*1・トヨタ自動車\*2)○三津井知宏\*1・松井敏明\*1・宮田将\*2・金沢孝明\*2・蜂須賀一郎\*2・菊地隆司\*1・江口浩一\*1
- P136 酸素還元用AuPt触媒の合成(日立マクセル)○黒部友紀子・大門英夫
- P137 酸化還元処理によるRu/SnO<sub>2</sub>の微細構造変化の解析(京都市大)○神内直人・松井敏明・菊地隆司・江口浩一
- P138 白金ルテニウム複核錯体を用いた合金微粒子触媒の作製(北海道大)○上原広充・丹内秀典・柘植清志・佐々木陽一・加藤昌子・魚崎浩平
- P139 Pt-Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>を用いたナフタレン水素化反応におけるPt-Ruバイメタリック効果(埼玉大)○関晴日・荒川毅志・大嶋正明・黒川秀樹・三浦弘
- P140 CO存在下ナフタレン水素化反応におけるPd/TiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の担体効果(埼玉大)○伊野庸介・江塚幸司・大嶋正明・黒川秀樹・三浦弘
- P141 活性炭担持Cu-Pd触媒による硝酸イオン汚染地下水の還元浄化(北海道大)○王毅・神谷裕一・奥原敏夫
- P142 高出力超音波を用いた酸化鉄担持Pd触媒の調製と活性(長崎大\*1・東北大\*2)○田辺秀二\*1・鶴泰裕\*1・水越克彰\*2・首藤達也\*1・中越修\*1
- P143 H<sub>2</sub>の気相酸素を用いた接触酸化による過酸化水素合成(14)ナノコロイド調製条件の影響(九州大)○野村要素平・畑佑以子・松本広重・石原達己
- P144 金ナノ粒子触媒を用いてのエタノールの選択酸化(首都大)○末永隼也・武井孝・石田玉青・春田正毅
- P145 Au/Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> catalyst for the hydroformylation of olefins(Kyushu Univ.\*1・Tokyo Metropolitan Univ.\*2)○LIU, Xiaohao\*1・HARUTA, Masatake\*2・TOKUNAGA, Makoto\*1
- P146 金触媒を用いたグルコース酸化活性における担体と調製法の影響(首都大)○木下直人・大勝裕子・石田玉青・武井孝・春田正毅
- P147 Auゼオライト触媒による1,3-ジカルボニル化合物のアルケンへの付加反応(名古屋大)○山本拓実・清水研一・薩摩篤

- P148 高表面積珪酸カルシウムに担持したRhの表面特性(山口大)○田邊悦子・酒多喜久・今村速夫
- P149 SiO<sub>2</sub>からの気相法によるウィスカー状SiCの合成と水素吸蔵特性(九州大)○市丸慎一郎・松本広重・石原達己
- P150 酸化物担持NbC微粒子表面の炭素除去と構造解析(千葉大\*<sup>1</sup>・産総研\*<sup>2</sup>)○一國伸之\*<sup>1</sup>・児玉瞬\*<sup>1</sup>・原孝佳\*<sup>1</sup>・阪東恭子\*<sup>2</sup>・島津省吾\*<sup>1</sup>
- P151 リン酸アルミニウム系触媒の劣化機構の解明(大分大)○佐藤大悟・廣瀬寛・稲尾恭敬・柏木大心・西口宏泰・永岡勝俊・滝田祐作
- P152 塩基性酸化物を含有したシリカメソ多孔体の合成と触媒特性(熊本大)○池上啓太・三芳奈央・田中孝幸・町田正人
- P153 ドデカンジアミンが形成するラメラ相を利用した酸化チタンナノシートの調製とその触媒特性(徳島大)○中川敬三・尾方敏匡・杉山茂・外輪健一郎
- P154 ヘテロポリ酸触媒を用いたピルビン酸エステルのアシル化による $\alpha$ -アセトキシアクリル酸エステルの合成(三菱レイヨン\*<sup>1</sup>・北海道大\*<sup>2</sup>)○二宮航\*<sup>1,2</sup>・内藤啓幸\*<sup>1</sup>・定金正洋\*<sup>2</sup>・上田渉\*<sup>2</sup>
- P155 スズ-タングステン複酸化物によるシトロネラル類の環化反応(東京大)○小笠原義之・山口和也・水野哲孝
- P156 WO<sub>3</sub>添加によるSiO<sub>2</sub>-ZrO<sub>2</sub>の酸触媒機能の向上についての検討(東京学芸大)○小俣香織・小川治雄・吉永裕介
- P157 HMM'O<sub>6</sub>(M=Nb,Ta M'=Mo,W)層状金属酸化物及びナノシート凝集体による各種酸触媒反応(東京大\*<sup>1</sup>・産総研\*<sup>2</sup>)○田草川カイオ\*<sup>1</sup>・高垣敦\*<sup>1</sup>・林繁信\*<sup>2</sup>・堂免一成\*<sup>1</sup>
- P158 SBA-15担持タングステン酸ジルコニアの合成とn-heptaneの骨格異性化(早稲田大)松方正彦・○田中勇希・矢代優一・関根泰・菊地英一
- P159 SBA-15担持硫酸化ジルコニアの調製とFriedel-Crafts反応への応用(早稲田大)松方正彦・○茅沼雄介・矢代優一・関根泰・菊地英一
- P160 The role of water in the skeletal isomerization of n-butene over heteropolyacid catalyst(Hokkaido Univ.\*<sup>1</sup>・JST\*<sup>2</sup>)○ZHANG, Jin\*<sup>1</sup>・OHNISHI, Ryuichiro\*<sup>2</sup>・KAMIYA, Yuichi\*<sup>1</sup>・OKUHARA, Toshio\*<sup>1</sup>
- P161 マグネシウムアルコキシドを用いた微結晶マグネシアの合成とその塩基触媒特性(東京大)○青木裕人・關祐威・増井洋一・尾中篤
- P162 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>で修飾したMgOの塩基触媒特性(北海道教大)○松橋博美
- P163 混合アルコールを用いたハイドロキシアパタイト触媒上での交差Guerbet反応(サンギ\*<sup>1</sup>・北海道大\*<sup>2</sup>)○土田敬之\*<sup>1</sup>・久保純\*<sup>1</sup>・吉岡徹也\*<sup>1</sup>・佐久間周治\*<sup>1</sup>・竹口竜弥\*<sup>2</sup>・上田渉\*<sup>2</sup>
- P164 ヒドロシリル化反応を用いたMCM-41へのアミノ基の導入(帝京科大)○飯島樹一・釘田強志
- P165 赤外分光法によるゼオライトへのピロールの吸着状態の検討(山梨大)○依田英介・村山康・内藤洋・小宮山政晴
- P166 BDF合成のための固体塩基触媒の開発(大分大\*<sup>1</sup>・ニューライム\*<sup>2</sup>)○金子允昭\*<sup>1</sup>・黒田歩\*<sup>1</sup>・杉原久夫\*<sup>2</sup>・西口宏泰\*<sup>1</sup>・永岡勝俊\*<sup>1</sup>・滝田祐作\*<sup>1</sup>
- P167 Ti-MCM-68の合成と酸触媒性能(横浜国大)○山田拓・小山啓人・稲垣怜史・窪田好浩
- P168 多孔質シリカ,モレキュラーシーブ5A,13Xに吸着したXeの超偏極<sup>129</sup>Xe NMRによるポア評価技術(産総研)○服部峰之・早水紀久子・平賀隆・山本典孝・秦信宏・高田省三
- P169 近赤外吸収分光法によるゼオライト細孔内で形成される水分子凝集クラスターの水素結合ネットワーク解析(大阪府大\*<sup>1</sup>・トリノ大\*<sup>2</sup>)○竹内雅人\*<sup>1</sup>・MARTRA, Gianmario\*<sup>2</sup>・COLUCCIA, Salvatore\*<sup>2</sup>・安保正一\*<sup>1</sup>
- P170 B-BEAを前駆体とした各種メタロシリケートの合成(早稲田大)松方正彦・○寺井健太・海老原亮人・関根泰・菊地英一
- P171 Post-treatment法によるV-BEAの合成と過酸化水素による酸化への応用(早稲田大)松方正彦・○小笠原康清・鈴木紘二・関根泰・菊地英一
- P172 Post-treatment法によるSn-BEAの調製とBaeyer-Villiger酸化への応用(早稲田大)松方正彦・○津村大志・関根泰・菊地英一
- P173 YNU-2ゼオライト前駆体のポスト処理(横浜国大\*<sup>1</sup>・産総研\*<sup>2</sup>・東京工大\*<sup>3</sup>)○小山啓人\*<sup>1</sup>・池田卓史\*<sup>2</sup>・稲垣怜史\*<sup>1</sup>・横井俊之\*<sup>3</sup>・辰巳敬\*<sup>3</sup>・窪田好浩\*<sup>1</sup>
- P174 新規規則性シリカ粒子のカーボンレプリカを用いたメソポーラス遷移金属酸化物の調製(東京工大)太田誠吾・○横井俊之・渡邊亮太・野村淳子・辰巳敬
- P175 多孔性炭酸カルシウムの合成(大分大\*<sup>1</sup>・ニューライム\*<sup>2</sup>)○中山真衣子\*<sup>1</sup>・井上浩太郎\*<sup>1</sup>・杉原久夫\*<sup>2</sup>・西口宏泰\*<sup>1</sup>・永岡勝俊\*<sup>1</sup>・滝田祐作\*<sup>1</sup>
- P176 各種有機金属錯体を固定化したメソポーラス材料の触媒特性(大阪府大)○松岡雅也・亀川孝・近藤始基・酒井崇弘・安保正一
- P177 ブテンの水和酸化反応触媒の開発Ⅱ—メソポーラスシリカアルミナ系触媒—(大分大)○河村智志・大塚健太郎・西口宏泰・永岡勝俊・滝田祐作
- P178 チタノシリケート型ゼオライトの粒子径制御(東北大\*<sup>1</sup>・北九州市大\*<sup>2</sup>)東海林香代\*<sup>1</sup>・山本勝俊\*<sup>2</sup>・○村松淳司\*<sup>1</sup>
- P179 ゼオライト細孔空間におけるプロパルギルアルデヒドの収着挙動と1,3-双極子付加環化反応の加速効果(東京大)○伊倉悠太・小林慶二郎・増井洋一・尾中篤
- P180 塩化亜鉛修飾メソポーラスアルミナに担持した有機レニウム触媒の構造とメタセシス反応活性(東京大\*<sup>1</sup>・京都大\*<sup>2</sup>)○増井洋一\*<sup>1</sup>・田中庸裕\*<sup>2</sup>・寺村謙太郎\*<sup>2</sup>・尾中篤\*<sup>1</sup>