

業績リスト (小泉健一)

1. 査読付き原著論文

1. K.Koizumi; H.Ohoyama; S.Okada, T.Kasai, Steric effect in the endothermic Penning ionization reaction of tert-butyl bromide with Kr(³P). The Journal of Chemical Physics, 118, 5395-5399, 2003

2. K.Koizumi; H.Ohoyama; T.Kasai, Collision-energy resolved steric effect on the Penning ionization reaction of tert-butyl bromide and Kr(³P). Chemical Physics letters, 378, 486-492, 2003

3. K.Koizumi; M.Shoji; Y.Nishiyama; Y.Maruno; Y.Kitagawa; K.Soda; S.Yamanaka; M.Okumura; K.Yamaguchi, The electronic structure and magnetic property of metal-oxo, porphyrin manganese-oxo, and μ -oxo-bridged manganese porphyrin dimer. International Journal of Quantum Chemistry, 100, 943-956, 2004

4. Y. Kitagawa, S. Yamanaka, R. Takeda, M. Shoji, K. Koizumi, Y. Nishiyama, Y. Maruno, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies on effective exchange integrals using spin correlation function analysis and magnetic effective density functional (MEDF) method. International Journal of Quantum Chemistry, 100, 927-936, 2004

5. M. Shoji, Y. Nishiyama, Y. Maruno, K. Koizumi, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theory of chemical bonds in Metalloenzymes I: Analytical and Hybrid-DFT Studies on Oxo and Hydroxo Diiron Cores. International Journal of Quantum Chemistry, 100, 887-906, 2004

6. K.Koizumi; M.Shoji; Y.Kitagawa; T.Taniguchi; T.Kawakami; M.Okumura; K.Yamaguchi, Theoretical studies on ferrimagnetic behavior of TCNE and manganese porphyrin dimer. Polyhedron, 24, 2720-2725, 2005

7. M. Shoji, K. Koizumi, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theory of chemical bonds in metalloenzymes II: Hybrid-DFT studies in iron-sulfur clusters. International Journal of Quantum Chemistry, 105, 628-644, 2005

8. S.Yamanaka, K.Koizumi, Y.Kitagawa, T.Kawakami, M.Okumura, K.Yamaguchi, A revisit to chemical bonding less screening rule and Hund rules. International Journal of Quantum Chemistry, 105, 687-700,

2005

9. S. Yamanaka, R. Takeda, M. Shoji, K. Koizumi, Y. Kitagawa, K. Yamaguchi, Ab initio GSO-DFT study of spin-frustrated transition metal systems. *Polyhedron*, 24, 2784-2788, 2005

10. M. Shoji, K. Koizumi, T. Hamamoto, T. Taniguchi, R. Takeda, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, S. Yamanaka, K. Yamaguchi, A theoretical study of zero-field splitting of organic biradicals. *Polyhedron*, 24, 2708-2715, 2005

11. M. Shoji, T. Hamamoto, K. Koizumi, H. Isobe, Y. Kitagawa, Y. Takano, S. Yamanaka, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical study on the magnetic interactions of active site in hemerythrin. *Polyhedron*, 24, 2701-2707, 2005

12. H. Isobe, M. Shoji, K. Koizumi, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, S. Kuramisu, K. Yamaguchi, Electronic and spin structures of manganese clusters in the photosynthesis II system. *Polyhedron*, 24, 2767-2777, 2005

13. Y. Kitagawa, M. Shoji, K. Koizumi, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies on magnetic interactions and charge-dope effects in one-dimensional Ni₅ and Ni₇ complexes. *Polyhedron*, 24, 2778-2783, 2005

14. Y. Maruno, M. Shoji, K. Koizumi, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies on magnetic interactions between Ni(II) ions in Urease. *Polyhedron*, 24, 2751-2757, 2005

15. Y. Nishiyama, M. Shoji, K. Koizumi, Y. Maruno, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies on dissociation of metal-carbon bond in Cobalamin; - formulation and calculation -. *Polyhedron*. 24, 2745-2750, 2005

16. K. Koizumi; M. Shoji; Y. Kitagawa; H. Ohoyama; T. Kasai; K. Yamaguchi, The electronic structure and magnetic property of μ -hydroxo bridged manganese porphyrin dimer. *The European Physical Journal D*, 38, 193-197, 2006

17. Mitsuo Shoji, Kenichi Koizumi, Tomohiro Hamamoto, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka,

Mitsuotaka Okumura, Kizashi Yamaguchi, Hybrid-density functional study of magnetism and ligand control in Ni9 complexes. *Chemical Physics Letters*, 421, 483-487, 2006

18. K.Koizumi, M.Shoji, Y.Kitagawa, R.Takeda, S.Yamanaka, T.Kawakami, M.Okumura, K.Yamaguchi, Theoretical studies on ferromagnetic behavior of [Cr(C5(CH3)5)][TCNE] and [Mn(C5(CH3)5)][TCNQ]. *Polyhedron*, 26, 2135-2141, 2007

19. R.Takeda, K.Koizumi, M.Shoji, H.Nitta, S.Yamanaka, M.Okumura, K.Yamaguchi, Ab initio studies on the zero-field splitting parameters of manganese porphyrin complexes. *Polyhedron*, 26, 2309-2312, 2007

20. Y. Kitagawa, T. Saito, M. Ito, M. Shoji, K. Koizumi, S. Yamanaka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Geometry optimization method based on approximate spin projection (AP) and its application to F2, CH2, CH2OO and active site of Urease. *International Journal of Quantum Chemistry*, 107, 3094-3102, 2007.

21. Y. Kitagawa, T. Saito, M. Ito, M. Shoji, K. Koizumi, S. Yamanaka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Approximately spin projected (AP) geometry optimization method and its application to di-chromium systems. *Chemical Physics Letters*, 442, 445-450, 2007.

22. Y. Kitagawa, M. Shoji, K. Koizumi, T. Kawakami, M. Okumura and K. Yamaguchi, Theoretical studies on relation among structures, electric structures and magnetic interactions in MMX complexes. *Polyhedron*, 26, 2154-2160, 2007.

23. M. Shoji, K. Koizumi, R. Takeda, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, M. Okumura, K. Yamaguchi, A GSO-HDFT study of noncollinear spin structures of [2Fe-2S] cluster. *Polyhedron*, 26, 2335-2341, 2007

24. M. Shoji, K. Koizumi, T. Taniguchi, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theory of Chemical Bonds in Metalloenzymes III: Full geometry optimization and vibration analysis of ferredoxin-type [2Fe-2S] cluster. *International Journal of Quantum Chemistry*, 107, 116-133, 2007.

25. M. Shoji, H. Isobe, T. Saito, H. Yabushita, K. Koizumi, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, T. Kawakami, M. Okumura, M. Hagiwara, K. Yamaguchi, Theory of chemical bond in metalloenzymes. VII.

Hybrid-density functional theory studies on the electronic structure of P450. *International Journal of Quantum Chemistry*, 108, 631-650, 2008

26. Y.Kitagawa, M.Shoji, T.Saito, Y.Nakanishi, K.Koizumi, T.Kawakami, M.Okumura, K.Yamaguchi, Theoretical Studies on Effect of Hydrogen Bonds Attaching to Cysteine Ligands on 4Fe-4S Clusters. *International Journal of Quantum Chemistry*, 108, 2881-2887, 2008.

27. K.Koizumi, K.Yamaguchi, H.Nakamura, Y.Takano, Hybrid-DFT Study on Electronic Structures of the Active Site of Sweet Potato Purple Acid Phosphatase -The Origin of Stronger Antiferromagnetic Couplings than Other Purple Acid Phosphatase-. *The Journal of Physical Chemistry A*, 113, 5059-5104, 2009

28. Y. Takano, K. Koizumi, H. Nakamura, Theoretical studies of the magnetic couplings and the chemical indices of the biomimetic models of oxyhemocyanin and oxytyrosinase. *Inorganica Chimica Acta*, 362, 4578-4584, 2009

29. Y. Kitagawa, T. Saito, Y. Nakanishi, Y. Kataoka, M. Shoji, K. Koizumi, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Approximately spin-projected Hessian for broken symmetry method and stretching frequencies of F₂ and singlet O₂. *International Journal of Quantum Chemistry*, 109, 3641-3648, 2009

30. Y. Kitagawa, Y. Nakanishi, T. Saito, K. Koizumi, M. Shoji, S. Yamada, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical study of magnetic interaction between C60 anion radicals. *Polyhedron*, 28, 1750-1753, 2009

31. K. Yamaguchi, M. Shoji, T. Saito, H. Isobe, S. Nishihara, K. Koizumi, S. Yamada, T. Kawakami, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, M. Okumura, Theory of chemical bonds in metalloenzymes. XV. Local singlet and triplet diradical mechanisms for radical coupling reactions in oxygen evolution complex. *International Journal of Quantum Chemistry*, 110, 3101-3128, 2010

32. K.Koizumi, M.Boero, Y.Shigeta, A.Oshiyama, Self-diffusion in crystalline silicon: A Car-Parrinello molecular dynamics study. *Physical Review B*, 84, 205203, 2011.

33. K.Koizumi, M.Shoji, K.Yamaguchi, H.Nakamura, Y.Takano, Theoretical Studies on Electronic

Structure and Magnetic Properties of Mixed-Valence Uteroferrin Active Site. International Journal of Quantum Chemistry, 111, 702-710, 2011.

34. K.Koizumi, M.Boero, Y.Shigeta, A.Oshiyama, Microscopic Mechanisms of Initial Oxidation of Si(100): Reaction Pathways and Free-Energy Barriers. Physical Review B, 85, 205314, 2012.

35. K.Koizumi, Y. Shigeta, O. Okuyama, H. Nakamura, Y. Takano, Coordination effects on the electronic structure of the Cu_A site of cytochrome c oxidase. Chemical Physics Letters, 531, 197-201, 2012.

36. Yu Takano, Yasuteru Shigeta, Kenichi Koizumi, Haruki Nakamura, Electronic structures of the Cu₂S₂ core of the Cu_A site in cytochrome c oxidase and nitrous oxide reductase. International Journal of Quantum Chemistry, 112, 208-218, 2012.

37. K.Koizumi, M.Boero, Y.Shigeta, A.Oshiyama, Atom-Scale Reaction Pathways and Free-Energy Landscapes in Oxygen Plasma Etching of Graphene. The Journal of Physical Chemistry Letters, 4, 1592-1596, 2013.

2. レビュー

無し

3. その他の発表論文リスト(査読の無い論文、会議録、紀要等)

1. K.Koizumi, M.Shoji, Y.Kitagawa, H. Isobe, R.Takeda, S.Yamanaka, K.Yamaguchi, Hybrid-DFT study on the high-valent metal-oxo bonds in manganese porphyrins and related species. Lecture Series on Computer and Computation Sciences (Recent progress in computational science and engineering), Vol. 7, 268-271, 2006 査読有り

2. Y. Kitagawa, T. Saito, Y. Nakanishi, M. Ito, M. Shoji, K. Koizumi, S. Yamanaka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Geometry Optimization without Spin Contamination Error - Approximately Spin Projected Optimization Method -. AIP conference proceedings, 963, Vol. 2, 334-337, 2007

3. K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, A. Oshiyama, Oxygen plasma etching of graphene: A first-principle dynamical inspection of the reaction mechanisms and related activation barriers. Bulletin of the American Physical Society, Volume 58, Number 1, 2013

4. 国際学会等の招待講演、科学研究費補助金獲得

無し

5. その他参考となる業績（学会、シンポジウムでの発表 ○印は発表者）

解説

“実空間密度汎関数法に基づいた Car-Parrinello 分子動力学法の開発”

CMSI 広報誌 Torrent No. 7

<http://www.cms-initiative.jp/ja/public/torrent/torrent7j/torrent7-koizumi>

国際会議における発表（12 件）

[口頭発表]

1. ○ K.Koizumi, M.Shoji, Y. Kitagawa, H. Isobe, R. Takeda, S. Yamanaka, K. Yamaguchi, Hybrid-DFT study on the high-valent metal-oxo bonds in manganese porphyrins and related species, ICCMSE 2006, Crete, Greece October 27 2006 査読有り

2. ○ K.Koizumi, M.Boero, Y.Shigeta, A.Oshiyama, Oxygen plasma etching of graphene: A first-principle dynamical inspection of the reaction mechanisms and related activation barriers, American Physical Society March Meeting, J5.00013, Baltimore, USA, March 19 2013

[ポスター発表]

1. ○ K. Koizumi, M. Shoji, Y. Nisiyama, Y. Maruno, Y. Kitagawa, K. Yamaguchi, Theoretical studies on interaction between manganese porphyrin and oxygen molecule, First Symposium of Fukui Institute for Fundamental Chemistry Kyoto University, 49, Kyoto, November 19, 2003

2. ○ K. Koizumi, M. Shoji, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies on magnetic property of manganese porphyrin dimer, The 4th international 21 Century COE Symposium on Integrated EcoChemistry, , 番号不明, Osaka, August, 30, 2004

3. ○ K. Koizumi, S. Okada, H. Ohoyama, T. Kasai, K. Yamaguchi, The steric effect on the Penning ionization of tert-butyl bromide and Kr*, International Symposium on Stereodynamics of Chemical Reactions 2004, PA20, Osaka November 28, 2004

4. ○K. Koizumi, M. Shoji, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies on ferrimagnetic behavior of manganese porphyrin dimer, International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM), PA-144 Tukuba, October 4, 2004

5. ○K. Koizumi, M. Shoji, Y. Nishiyama, Y. Maruno, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, The electronic structure and magnetic property of μ -oxo-bridged manganese porphyrin dimer, 44th Sanibel Symposium, Poster VI-9, Florida, Mar, 2004

6. ○K. Koizumi, M. Shoji, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Ferrimagnetic behavior of TCNE and manganese porphyrins, The 5th international 21 Century COE Symposium on Integrated EcoChemistry, 番号不明, Osaka, January 27, 2005

7. ○K. Koizumi, M. Shoji, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies of ferromagnetic behavior of decamethylferrocenium tetracyanoethenide, Pacificchem 2005, Hawaii, August 26, 2005 査読あり

8. ○K. Koizumi, S. Yamanaka, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, A revisit to chemical bonding less screening rule and Hund rules, 45th Sanibel Symposium, Poster VI-34, Florida, Mar 5, 2005

9. ○K. Koizumi, M. Shoji, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theoretical studies on the ferromagnetism of decamethyl ferrocenium, The international conference on science and technology of synthetic metals (ICSM), 119-TH, Dublin Ireland, 2006

10. ○K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, A. Oshiyama, Atomic processes of oxygen plasma etching of graphene surface: A Car-Parrinello molecular dynamics study, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), P-10, Osaka, 2012

国内学会・シンポジウム等における発表（査読なし、32件）

【口頭発表】

1. ○小泉健一、岡田正規、大山浩、笠井俊夫、 $(\text{CH}_3)_3\text{CBr} + \text{Kr}^*$ ペニングイオン化反応の速度選別立体選択性、日本化学会第81春期年会、4D4-27、早稲田大学西早稲田キャンパス、2002年3月

2. ○小泉健一、庄司光男、丸野裕介、西山祐輔、北河康隆、山口兆、酸素架橋マンガンポルフィリン二量体における磁氣的性質における理論的研究、日本化学会 84 春期年会、2B5-37、関西学院大学西宮上原キャンパス、2004 年 3 月
3. ○小泉健一、庄司光男、北河康隆、川上貴資、奥村光隆、山口兆、マンガンポルフィリン錯体の磁氣的相互作用に関する理論的研究、日本化学会第 85 春期年会、番号不明、神奈川大学、2005 年 3 月
4. ○小泉健一、庄司光男、北河康隆、川上貴資、奥村光隆、山口兆、デカメチルフェロセン-TCNE 系における磁氣的性質の理論的研究、日本化学会第 86 春季年会、4F1-29、日大理工学部船橋キャンパス、2006 年 3 月
5. ○小泉健一、庄司光男、伊藤正秀、齋藤徹、北河康隆、川上貴資、奥村光隆、山口兆、クロロテトラフェニルポルフィリン-N オキシ-N ターシャルブチルアミノピリジン錯体の磁性における構造依存性、日本化学会第 87 春季年会、1G2-34、関西大学千里山キャンパス、2007 年 3 月
6. ○小泉健一、鷹野優、山口兆、中村春木、サツマイモ由来パープルアシドホスファターゼ活性中心の電子状態計算、日本化学会第 89 春期年会、4A4-03、日本大学理工学部船橋キャンパス、2009 年 3 月
7. ○小泉健一、Mauro Boero、重田育照、押山淳、Car-Parrinello 分子動力学法によるシリコン結晶内欠陥の拡散現象の再評価、日本物理学会秋季大会、領域 1 0 26aWZ-8、大阪府立大中百舌鳥キャンパス、2010 年 9 月
8. ○小泉健一、Mauro Boero、重田育照、押山淳、Car-Parrinello 分子動力学法によるシリコン(100)表面における初期酸化過程の解析、日本物理学会第 67 回年次大会、領域 9、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス、26pBB-1、2012 年 3 月
9. ○小泉健一、Mauro Boero、重田育照、押山淳、Car-Parrinello 分子動力学法によるグラフェン表面の酸素プラズマエッチングの反応機構とその自由エネルギーバリアの解明、第 16 回理論化学討論会、福岡あいいれふ、1L15、2013 年 5 月

[ポスター発表]

1. ○小泉健一、庄司光男、西山祐輔、丸野裕介、北河康隆、山口兆、窒素及び酸素配位子を用いたマンガンモデル錯体の電子状態計算、分子構造総合討論会 2002、4P054、神戸、2002年10月
2. ○小泉健一、庄司光男、西山祐輔、丸野裕介、北河康隆、山口兆、マンガンポルフィリンと酸素の相互作用における理論的研究、分子構造総合討論会 2003、4Pa142 京都、2003年9月
3. ○小泉健一、庄司光男、北河康隆、山口兆、マンガンポルフィリンの磁性及び反応性における理論的研究、第54回錯体化学討論会、番号不明、熊本、2004年9月
4. ○小泉健一、庄司光男、北河康隆、山口兆、マンガンポルフィリン・TCNE 一次元錯体の磁気的相互作用に関する理論的研究、分子構造総合討論会 2004、1P024、広島、2004年9月
5. ○小泉健一、庄司光男、北河康隆、川上貴資、奥村光隆、山口兆、酸素架橋マンガンポルフィリンダイマーの反応性と磁性、第21回化学反応討論会、1P06、大阪、2005年6月
6. ○小泉健一、庄司光男、北河康隆、山口兆、寺寄亨、登野健介、近藤保、マンガンダイマー及び酸素架橋型マンガングラスターの磁気的性質における理論的研究、分子構造総合討論会 2005、2P088、東京、2005年9月
7. ○小泉健一、北河康隆、庄司光男、川上貴資、奥村光隆、山口兆、デカメチルフェロセンとTCNEの磁性における理論的研究、第55回錯体化学討論会、PB-068、新潟、2005年9月
8. ○小泉健一、庄司光男、北河康隆、川上貴資、奥村光隆、山口兆、ドナー、アクセプター型遷移金属錯体の磁性における理論的研究、分子構造総合討論会 2006、3P008、静岡、2006年9月
9. ○小泉健一、鷹野優、山口兆、中村春木、酵素 purple acid phosphatase 活性中心の電子状態計算、分子科学討論会、1p059、福岡、2008年9月
10. ○小泉健一・鷹野優・山口兆・中村春木、酵素 Purple acid phosphatase 活性中心における電子状態計算、錯体化学討論会、2PB-009、金沢、2008年9月

11. ○小泉健一, 鷹野優, 山口兆, 中村春木, サツマイモ由来 purple acid phosphatase 活性中心のハイブリッド DFT による電子状態解析、第 46 回日本生物物理学会年会、3P-034、福岡、2008 年 12 月
12. ○小泉健一, 鷹野優, 重田育照, 神谷克政, 中村春木, 押山淳、シトクロム c 酸化酵素 CuA サイトの酸化還元電位に及ぼす周辺残基の効果についての理論的研究、分子科学討論会 2009 名古屋、2P096、名古屋、2009 年 9 月
13. ○小泉健一, 鷹野優, 中村春木, シトクロム c 酸化酵素 CuA サイトの電子状態解析、第 9 回日本蛋白質科学会年会、2P-099, 熊本、2009、5 月
14. ○小泉健一, Mauro Boero, 神谷克政, 重田育照, 押山淳、第一原理分子動力学法によるシリコン結晶内欠陥の自己拡散係数の評価、次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 第五回公開シンポジウム、P05、神戸、2011 年 2 月
15. ○小泉健一, Mauro Boero, 重田育照, 押山淳、Self-diffusion in crystalline silicon: A Car-Parrinello molecular dynamics study, 第 9 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム、14 (poster number), 京都、2012, 1 月
16. ○小泉健一, Mauro Boero, 重田育照, 押山淳、First-layer oxidation process of a Si (100) surface: A Car-Parrinello molecular dynamics investigation of the atomic-scale mechanism, 第 9 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム、15 (poster number), 京都、2012, 1 月
17. 重田育照, ○小泉健一, 古家真之介, 岩田潤一, Mauro Boero, 押山淳、実空間密度汎関数法に基づいた Car-Parrinello 分子動力学法の開発、第二回次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会、P03、東京、2012、1 月
18. ○小泉健一, Mauro Boero, 重田育照, 押山淳、Car-Parrinello 分子動力学法によるシリコン結晶内欠陥の拡散現象における自己拡散係数の決定、第二回計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 研究会、P-13、仙台、2012、1 月

19. ○小泉健一、Mauro Boero、重田育照、押山淳、第一原理分子動力学法によるシリコン(100)表面における初期酸化過程の解析、次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(ナノ)次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(ライフ)公開シンポジウム、P04、神戸、2012、3月

20. ○小泉健一、Mauro Boero、重田育照、押山淳、第一原理分子動力学法によるシリコン(100)表面における初期酸化過程の解析、「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」研究会、P06、東京、2012、3月

21. ○小泉健一、Mauro Boero、重田育照、押山淳、Car-Parrinello 分子動力学法によるグラフェンの酸素プラズマエッチングの反応機構とその自由エネルギー障壁の決定、第三回計算物質科学イニシアティブ(CMSI)研究会、P-8、分子科学研究所、岡崎、2012、12月

22. ○小泉健一、Mauro Boero、重田育照、押山淳、Car-Parrinello 分子動力学法によるグラフェン表面の酸素プラズマエッチングの反応機構とその自由エネルギーバリアの解明 コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス 研究会、P8、東京、2013、7月

23. ○小泉健一、重田育照、岩田潤一、Mauro Boero、押山淳、実空間密度汎関数法に基づいた Car-Parrinello 法の開発、コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス 研究会、P9、東京、2013、7月

その他

2005-2006 年度日本学術振興会特別研究員 DC2

(マンガンポルフィリン錯体の電子状態と機能発現に関する理論的研究)