

## **平成 24 年(2012 年)**

### **【国際会議】**

#### **International Symposium on Development of Core Technologies for Green Nanoelectronics**

平成 24 年 3 月 14 日(水)

National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo, Japan

PP-1-3, “First Principles Calculations for Gas-Phase and Surface Reactions in CVD Process of GeSbTe”

Masato Senami, Kazuhide Ichikawa, Akitomo Tachibana (ポスター)(3/14)

#### **14<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry (ICQC)**

平成 24 年 6 月 25 日(月)～30(土)

Boulder, Colorado, USA

II.25 “Formulation and simulation of time evolution in rigged QED”,

Kazuhide Ichikawa, Masahiro Fukuda, and Akitomo Tachibana (poster) (6/26)

### **【国内発表】**

#### **§ 第17回ゲートスタック研究会**

平成 24 年 1 月 20 日(金)～21 日(土)

東レ総合研修センター (静岡県三島市末広町 21-9)

「不純物を含むシリコンナノワイヤの局所的な電気伝導率」

池田 裕治, 瀬波 大土, 立花 明知(ポスター)(1/20)

#### **§ 第 59 回応用物理学関係連合講演会**

平成 24 年 3 月 15 日(木)～3 月 18 日(日)

早稲田大学 早稲田キャンパス (東京都新宿区西早稲田 1-6-1)

早稲田中・高等学校 興風館(東京都新宿区馬場下町 62)

16a-GP2-1 「Rigged-QED 理論に基づく量子系の時間発展と局所物理量」

瀬波大土, 宮里敏秀, 池田裕治, 立花明知 (ポスター) (3/16)

#### **§ 第 67 回 日本物理学会 年次大会**

平成 24 年 3 月 24 日(土)～27 日(火)

関西学院大学 西宮上ヶ原キャンパス(兵庫県西宮市上ヶ原一番町 1 番 155 号)

25pAD-8 「量子電磁力学に基づくスピンドYNAMIXの数値シミュレーション」

福田将大, 市川和秀, 立花明知 (口頭)

26pCK-4 「シリコンナノワイヤの局所的な電気伝導特性に関する解析」

池田裕治, 瀬波大土, 立花明知 (口頭)

## **§ 第15回理論化学討論会**

平成 24 年 5 月 24 日(木)～26 日(土)

仙台市福祉プラザ (宮城県仙台市青葉区五橋 2 丁目 12 番 2 号)

2B3a 「Rigged QED に基づく原子核・電子の時間発展シミュレーション」

瀬波 大土, 宮里 敏秀, 高田 崇二郎, 池田 裕治, 立花 明知(口頭) (5/25)

2B4a 「Rigged QED による原子核運動の時間発展シミュレーション」

市川 和秀, 福田 将大, 立花 明知(口頭) (5/25)

3B3a 「一般相対性理論に基づく電子スピントルクの新しい描像」

立花 明知(口頭) (5/26)

1P13 「局所的な電気伝導特性の計算のための伝導状態の電子構造計算手法について」

池田 裕治, 瀬波 大土, 立花 明知(ポスター) (5/24)

1P14 「電子ストレステンソルによる金属結合の理論的研究」

埜崎 寛雄, 市川 和秀, 立花 明知(ポスター) (5/24)

2P15 「Rigged QED に基づくスピンドYNAMIKSの数値シミュレーション」

福田 将大, 市川 和秀, 立花 明知(ポスター) (5/25)

2P16 「Rigged QED に基づく原子・分子の誘電応答に関する数値シミュレーション」

宮里 敏秀, 瀬波 大土, 池田 裕治, 立花 明知(ポスター) (5/25)

2P17 「Rigged QED に基づく原子核場の挙動とその統計性に関する理論的研究」

高田 崇二郎, 宮里 敏秀, 池田 裕治, 瀬波 大土, 立花 明知 (ポスター) (5/25)

## **平成 23 年(2011 年)**

### **【国際会議】**

#### **2011 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES: SCIENCE AND TECHNOLOGY**

平成 23 年 1 月 20 日(木)～21 日(金)

Ookayama campus, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan

P-46, “Analysis of Silicon Nanowires by Local Electrical Conductivity based on the Rigged QED Theory”

Yuji Ikeda, Masato Senami, Akitomo Tachibana (ポスター)(1/20)

#### **WATOC 2011**

平成 23 年 7 月 17 日(日)～22 日(金)

University of Santiago, Santiago de Compostela, Spain

PIII-057, “Atomic shell structure study by kinetic energy density and stress tensor density”

Kazuhide Ichikawa, Hiroo Nozaki, Takaaki Hara, Akitomo Tachibana (poster)(7/22)

#### **THERMEC'2011**

平成 23 年 8 月 1 日(月)～5 日(金)

Quebec City Convention Center, Quebec City, Canada

MS-1-2, “Aluminum Hydride Clusters as Hydrogen Storage Materials and their Electronic Stress Tensor Analysis”

Kazuhide Ichikawa, Yuji Ikeda, Ryo Terashima, Akitomo Tachibana (Invited, Oral)(8/2)

#### **ISTCP-VII**

平成 23 年 9 月 2 日(金)～8 日(木)

Waseda University, Tokyo, Japan

8C2-1C, “Study of Simulation Method of Time Evolution in Rigged QED”

Kazuhide Ichikawa, Masahiro Fukuda, Akitomo Tachibana (Oral)(9/8)

4PP-28, “Description of time evolution and dielectric response based on Rigged QED”

Masato Senami, Akitomo Tachibana (Poster) (9/4)

#### **APCTCC 5**

平成 23 年 12 月 9 日(金)～13 日(火)

Novotel Royal Lakeside Rotorua, Rotorua, New Zealand

T-13.2, “Simulating time evolution in Rigged QED”

Kazuhide Ichikawa, Masahiro Fukuda, Akitomo Tachibana (Oral) (12/11)

**【国内発表】**

**§ 第16回ゲートスタック研究会**

平成 23 年 1 月 21 日(金)～23 日(日)

東京工業大学 (大岡山キャンパス) 西 9 号館

「ハフニウム酸化物内部の局所的効果の誘電特性への影響」

瀬波大土, 土田康志, 吉野文弥, 福島啓悟, 池田裕治, 立花明知(ポスター)(1/22)

**§ 第66回日本物理学会年次大会**

平成 23 年 3 月 25 日(金)～28 日(月)

新潟大学 五十嵐キャンパス(新潟市西区五十嵐 2 の町 8050 番地)

26pTE-13「局所誘電率による誘電体内の不純物の誘電特性への影響の解析」

瀬波大土, 土田康志, 立花明知(口頭)(3/26)

**§ 第14回理論化学討論会**

平成 23 年 5 月 12 日(木)～14 日(土)

岡山大学 創立五十周年記念館

2B2a「Rigged QED のシミュレーション方法の研究」

市川和秀, 立花明知 (口頭)(13 日)

2D4a「電子スピントルクダイナミクス」

立花明知 (口頭)(13 日)

3E2b「Rigged-QED に基づく電子状態の時間発展と誘電応答」

瀬波大土, 立花明知 (口頭)(14 日)

**§ 第 72 回応用物理学会学術講演会**

平成 23 年 8 月 29 日(月)～9 月 2 日(金)

山形大学小白川キャンパス(山形県山形市小白川町一丁目 4-12)

1p-J-5「電場に対する電子状態の局所線形応答に関する研究」

池田裕治, 吉野文弥, 瀬波大土, 立花明知 (口頭)

**§ 第 5 回分子科学討論会2011**

平成 23 年 9 月 20 日(火)～23 日(金)

札幌コンベンションセンター(札幌市白石区東札幌6条1丁目1-1)

2E02「Rigged QED のシミュレーション:原子核運動の寄与と近似法について」

市川和秀, 立花明知 (口頭)(21 日)

2E03 「QED の下での量子状態の時間発展と誘電応答」

瀬波大土、立花明知（口頭）（21 日）

2E04 「フェルミオンとボソンのスピントルクダイナミクス」

立花明知（口頭）（21 日）

2P120 「水素化アルミニウムクラスターの電子ストレステンソル密度解析および電流がおよぼす影響」

寺嶋 亮、池田裕治、市川和秀、立花明知（ポスター）（21 日）

2P127 「運動エネルギー密度による原子の殻構造の研究」

埜崎寛雄、市川和秀、立花明知（ポスター）（21 日）

2P128 「外部電場に対する電流密度の線形応答についての局所的解析」

池田裕治、吉野文弥、瀬波大土、立花明知（ポスター）（21 日）

3P126 「Rigged QED の数値シミュレーション方法の研究」

福田将大、市川和秀、立花明知（ポスター）（22 日）

3P127 「リチウムクラスターの電子ストレステンソルによる解析」

駒沢尚哉、市川和秀、立花明知（ポスター）（22 日）

## **§ PCOS(相変化記録研究会)2011**

平成 23 年 11 月 17 日(木)～18 日(金)

熱海後樂園ホテル

「GeSbTe の CVD プロセスの結晶成長条件に対する第一原理計算」(18 日)

立花 明知、瀬波 大土、新谷 俊通(口頭)

## **平成 22 年(2010 年)**

### **【国際会議】**

#### **International Symposium on "Molecular Theory for Real Systems"**

平成 22 年 1 月 7 日(木)～9 日(土)

Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Japan

63 "New Theory of Chemical Bonds in terms of Stress Tensor Energy Density"

K. Ichikawa, and A. Tachibana (poster) (1/7)

#### **The International Symposium on Advanced Nanomaterials and Nanosystems 2010**

平成 22 年 5 月 20 日(木)～21 日(金)

Meeting Room III, Clock Tower, Kyoto University, Japan

"Quantum chemical approaches to the electronic structures of nano electronics materials"

M. Senami and A. Tachibana (Oral) (5/20)

#### **International Symposium on Technology Evolution for Silicon Nano-Electronics**

平成 22 年 6 月 3 日(木)～5 日(土)

Tokyo Tech. Front (Kuramae Kaikan), Tokyo Institute of Technology, Japan

"Theoretical study of local dielectric property of high-k materials"

M. Senami, A. Fukushima, Y. Tsuchida, and A. Tachibana (Oral) (6/5)

#### **Modeling and Design of Molecular Materials 2010**

**平成 22 年 7 月 4 日～8 日**

Wroclaw, Poland

L2 "Energy density concept: a stress tensor approach"

A. Tachibana (Oral, plenary lecture) (7/5)

#### **International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology**

平成 22 年 11 月 1 日(月)～4 日(木)

InterContinental Hotel, Shanghai, China

"Quantum chemical approaches to the electronic structures of nano-electronics materials"

M. Senami, A. Tachibana (Invited, Oral) (11/3)

#### **Pacificchem 2010**

**平成 22 年 12 月 15 日～20 日**

Honolulu, Hawaii, USA

312 “Electronic stress tensor analysis of inverted sandwich type dinuclear transition metal complexes” (12/16)

K. Ichikawa, A. Wagatsuma, Y. I. Kurokawa, S. Sakaki and A. Tachibana (Oral)

## 【国内発表】

### § スーパーコンピューターワークショップ 2010

平成 22 年 1 月 13 日(水)～14 日(木)

自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

3 「Rigged QED 理論に基づくアルミニウムクラスターの理論的研究」(1/13)

平井浩介、David Henry, Pawel Szarek, 市川和秀、Irene Yarovsky、立花明知(ポスター)

### § 第15回ゲートスタック研究会

平成 22 年 1 月 22 日(金)～23 日(土)

東レ研修センター(三島市末広町 21-9)

P-21「高誘電率酸化物の誘電特性と化学結合状態に関する理論的研究」

瀬波大土、福島啓悟、土田康志、立花明知(ポスター)(1/22)

P-23「相対論的電子状態計算におけるスピントルクについての理論的研究」

瀬波大土、原誉明、西川潤、立花明知(ポスター)(1/22)

P-24「局所的な電気伝導を表現する第一原理計算」

瀬波大土、池田裕治、福島啓悟、立花明知(ポスター)(1/22)

P-32「局所的な電気伝導率を利用したシリコンナノワイヤーの電子輸送特性に関する解析」

池田裕治、福島啓悟、瀬波大土、立花明知(ポスター)(1/22)

### § 第56回応用物理学関係連合学術講演会

平成 22 年 3 月 17 日(水)～20 日(土)

東海大学 湘南キャンパス(神奈川県平塚市北金目 1117)

18a-TM-15 「ナノワイヤーモデル中を流れる電流を表現する電子状態計算」

瀬波大土、池田裕治、福島啓悟、立花明知(口頭, ポスター)(3/18)

20a-P16-17「局所誘電率を用いた誘電特性に関する理論的研究」

福島啓悟、土田康志、瀬波大土、立花明知(ポスター)(3/20)

### § 第65回日本物理学会年次大会

平成 22 年 3 月 20 日(土)～23 日(火)

岡山大学 津島キャンパス(岡山市北区津島中 1 丁目 1 番 1 号)

23aED-1「水素分子イオンの電子ストレステンソル」

市川和秀、立花明知(口頭) (3/23)

23pGL-1「局所的な電気伝導率を利用したシリコンナノワイヤーの電子輸送特性に関する解析」

池田裕治, 福島啓悟, 瀬波大土, 立花明知(口頭)(3/23)

### § 第13回理論化学討論会2010

平成 22 年 5 月 23 日(日)～25 日(火)

北海道大学 学術交流会館

2B1a「右巻き電子と左巻き電子の化学」

立花明知 (口頭)(24 日)

2B2b「光化学への QED 的アプローチ」

市川和秀、立花明知 (口頭)(24 日)

2P26「金属原子の電子スピンに対するトルクの理論的研究」

原誉明, 瀬波大土, 市川和秀, 立花明知 (ポスター) (24 日)

2P49「遷移金属錯体の電子ストレステンソル解析」

我妻歩, 市川和秀, 黒川悠素, 榊茂好, 立花明知 (ポスター) (24 日)

### § 化学工学会第42回秋季大会

平成 22 年 9 月 6 日(月)～8 日(水)

同志社大学 今出川キャンパス

N316「CVD プロセスの分子論的解明に向けて量子化学の果たす役割」

立花明知 (口頭,展望講演)(8 日)

### § 第 71 回応用物理学会学術講演会

平成 22 年 9 月 14 日(火)～17 日(金)

長崎大学文教キャンパス(長崎県長崎市文教町 1-14)

14a-J-28「金属原子の電子スピンに対するトルクの理論的研究」

瀬波大土, 原 誉明, 立花明知 (口頭,ポスター)

17a-ZS-3「シリコンナノワイヤーの伝導状態についての電子構造計算」

池田裕治、瀬波大土、福島啓悟、立花明知 (口頭)

### § 第4回分子科学討論会2010

平成 22 年 9 月 14 日(火)～17 日(金)

大阪大学豊中キャンパス(豊中市待兼山町)

2E13「右巻き電子と左巻き電子のダイナミクスの厳密解」

立花明知 (口頭)(15 日)

2E11「運動エネルギー密度ゼロ面による分子境界面の表現について」



市川和秀、立花明知（口頭）（15 日）

3P064「水素化パラジウムクラスターにおける化学結合のストレステンソルに基づく研究」

我妻 歩、市川和秀、立花明知（ポスター）（16 日）

2P098「ストレステンソルによるリチウムクラスターの理論的研究」

駒沢尚哉、市川和秀、立花明知（ポスター）（15 日）

1P099「アルミニウムクラスターにおける化学結合の電子ストレステンソル密度解析」

寺嶋 亮、市川和秀、立花明知（ポスター）（14 日）

## § 日本物理学会 2010 年秋季大会

平成 22 年 9 月 23 日（木）～26 日（日）

大阪府立大学 中百舌鳥キャンパス（堺市中区学園町 1 番 1 号）

24aPS-139「金属酸化物の局所的な電場応答に関する理論的研究」

瀬波大土、福島啓悟、土田康志、立花明知（ポスター）

25aTG-12「運動エネルギー密度のゼロ面による水素分子イオンの結合形成の可視化について」

市川和秀、立花明知（口頭）（25 日）

25pTE-7「電子状態計算に基づくスピントルクの評価」

瀬波大土、原誉明、立花明知（口頭）

## § 第 51 回電池討論会

平成 22 年 11 月 9 日（火）～11 日（木）

名古屋 愛知県産業労働センター

2B14「新規な電池理論の研究開発(II)」

佐野茂、楠美智子、立花明知（口頭）（11/10）

## § PCOS(相変化記録研究会)2010

平成 22 年 11 月 25 日（木）～26 日（金）

熱海ニューフジヤホテル

「Quantum chemical calculation for CVD process of GeSbTe」（25 日）

市川和秀、立花明知、新谷俊通（口頭、招待講演）

## **平成 21 年(2009 年)**

### **【国際会議】**

#### **13<sup>th</sup> ICQC**

平成 21 年 6 月 22 日(月)～27 日(土)

MARITIM Hotel Berlin, Berlin, Germany

A.128 “Aluminum nano-structures in hydrogen storage by Regional Density Functional Theory”

P. Szarek, K. Watanabe, K. Hirai, D. Henry, I. Yarovsky and A. Tachibana (Poster) (6/23)

#### **THERMEC' 2009**

平成 21 年 8 月 25 日(火)～29 日(土)

MARITIM Hotel Berlin, Berlin, Germany

“Electronic stress tensor study of aluminum nanostructures for hydrogen storage”

A. Tachibana, P. Szarek, K. Watanabe, K. Ichikawa (Invited, oral) (8/29)

#### **DFT09**

平成 21 年 8 月 31 日(月)～9 月 4 日(金)

Universite Claude Bernard Lyon 1, Lyon, France

P157 “Stress Tensor of Chemical Bonds”

K. Ichikawa, and A. Tachibana (poster) (9/1)

P805 “Role of aluminum atoms for hydrogen adsorption on graphene sheets”

A. Fukushima, A. Sawairi, K. Doi, M. Senami, L. Chen, H. Cheng and A. Tachibana (poster) (9/1)

#### **APCTCC-4 (Fourth Asian Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry)**

平成 21 年 12 月 21 日(月)～23 日(水)

The Legend Water Chalets, Port Dickson, Malaysia

OP02 “Chirality Control with Spin Torque and Zeta Force in Relativistic Quantum Chemistry”

K. Ichikawa, and A. Tachibana (oral) (12/21)

### **【国内発表】**

#### **§ 第14回ゲートスタック研究会**

平成 21 年 1 月 23 日(金)～24 日(土)

東レ研修センター(三島市末広町 21-9)

「Si ナノワイヤーの伝導特性に関する第一原理解析」

池田裕治, 福島啓悟, 瀬波大土, 立花明知(口頭)

### § ポストスケール第五回全体会議・第三回成果報告会

平成 21 年 1 月 28 日(水)～29 日(木)

東京大学本郷キャンパス (東京都文京区本郷)

「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

立花明知(口頭)

P115 「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

瀬波大土, 立花明知(ポスター)

### § 第64回日本物理学会年次大会

平成 21 年 3 月 27 日(金)～30 日(月)

立教大学 池袋キャンパス(東京都豊島区西池袋 3-34-1)

28pRC-6「第一原理計算を用いたスピン平衡状態と潜在的トルクの記述」

瀬波大土, 立花明知(口頭)

27aVC-5「ストレステンソルと領域積分を用いた化学結合の研究」

市川和秀, 立花明知(口頭)

### § 日本化学会第89春季年会(2009)

平成 21 年 3 月 27 日(金)～30 日(月)

日本大学 理工学部 船橋キャンパス(千葉県船橋市習志野台 7-24-1)

「ホウ素系ガス輸送プロセスにおける鉄不純物混入に関する量子化学計算」

明楽俊幸, 市川和秀, 石原良夫, 伊崎隆一郎, 立花明知(ポスター)

### § 第56回応用物理学関係連合学術講演会

平成 21 年 3 月 30 日(月)～4 月 2 日(木)

筑波大学 (茨城県つくば市天王台 1-1-1)

30p-ZV-11 「グラフェンへの水素吸着に対する金属の影響に関する理論的考察」

福島啓悟, 瀬波大土, 立花明知(口頭)

1a-P13-10 「物質中の電気伝導を表現する第一原理計算」

瀬波大土, 渡辺宏平, 立花明知(口頭)

1a-P13-11 「第一原理計算を用いたスピン平衡状態と潜在的トルクの記述」

瀬波大土, 立花明知(口頭)

1p-ZT-7 「場の量子論から見る未来デバイス材料」

立花明知(招待講演, 口頭)

### § 第12回理論化学討論会2009

平成 21 年 5 月 28 日(木)～30 日(土)

東京大学本郷キャンパス 武田先端知ビル 武田ホール

1A1a 「スピントルクとキラリティー」

市川和秀、立花明知 (口頭)(28 日)

2P30 「水素化パラジウムクラスターにおける化学結合のストレステンソルに基づく研究」

我妻歩、市川和秀、立花明知 (ポスター)(29 日)

2P35 「スピントルクの数値計算に関する研究」

原誉明、市川和秀、立花明知 (ポスター)(29 日)

3B3a 「電流存在下での化学結合の研究」

市川和秀、立花明知 (口頭)(30 日)

### § 特定領域研究「実在系の分子理論」第4回公開シンポジウム

平成 21 年 5 月 30 日(土)～31 日(日)

東京大学本郷キャンパス 武田先端知ビル 武田ホール

P15 「ストレステンソルエネルギー密度による化学結合の新理論」

市川和秀、立花 明知(ポスター) (30 日)

### § ポストスケール第六回全体会議

平成 21 年 8 月 6 日(木)～7 日(金)

メルパルク名古屋 (名古屋市東区)

「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

立花明知(口頭)

P117 「物質中の局所的な電気伝導を表現する第一原理計算」

瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § 第 3 回分子科学討論会2009

平成 21 年 9 月 21 日(月)～24 日(木)

名古屋大学東山キャンパス

1P124 「第一原理計算によるスピンに対するトルク」

西川潤、原 誉明、瀬波大土、立花明知 (ポスター) (9/21)

3P119 「H<sub>2</sub><sup>+</sup>分子のストレステンソルによる解析」

市川和秀、立花明知 (ポスター) (9/23)

4P137 「化学結合に対する電流の効果の研究」

瀬波大土、市川和秀、池田裕治、立花明知（ポスター）(9/24)

4P139 「相対論的電子状態計算におけるスピントルクとキラリティー」

市川和秀、瀬波大土、西川潤、原誉明、立花明知（ポスター）(9/24)

### § 第 70 回応用物理学会学術講演会

平成 21 年 9 月 8 日(火)～11 日(金)

富山大学(富山県富山市五福 3190 番地)

8p-G-16 「アルミニウムナノワイヤー表面に吸着した水素原子の挙動に関する理論的研究」

福島啓悟、平井浩介、瀬波大土、立花明知(口頭)

9a-ZH-1 「物質中の局所的な電気伝導を表現する第一原理計算」

瀬波大土、池田裕治、福島啓悟、立花明知(口頭)

### § 第 50 回電池討論会

平成 21 年 11 月 30 日(月)～12 月 2 日(水)

国立京都国際会館

3A21 「新規な電池理論の研究開発」

佐野茂、楠美智子、立花明知(口頭) (12/2)

### §

平成 21 年 12 月 15 日 (火)

東京エレクトロン(山梨県韮崎市)

「量子化学の基礎と半導体関係の事例」

中村康一、立花明知(依頼講演)

### § 化学工学会反応工学部会

平成 21 年 12 月 16 日 (水)

銀座ルノアール(東京)

「GaN および関連物質の MOCVD プロセスにおける反応量子化学」

中村康一、立花明知(依頼講演)

---

---

## **平成 20 年(2008 年)**

### **【国際会議】**

#### **Materials Research Society spring meeting 2008 (MRS)**

平成 20 年 3 月 24 日(月)～28 日(金)

Moscone West Convention Center, Marriott Hotel, San Francisco, CA

H2.7 “Effects of Lanthanum Incorporation on the Formation of Oxygen Vacancies in HfO<sub>2</sub>”

N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Sugino, A. Tachibana, K. Ohmori, K. Kakushima, H. Iwai, T. Chikyow, T. Ohno, Y. Nara, and K. Yamada (口頭)

#### **The 2nd International Symposium on “Molecular Theory for Real Systems”**

平成 20 年 8 月 4 日(月)～6 日(水)

Okazaki Conference Center, Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan

P29 “Theoretical Study of Electronic States of Chemical Bonds”

Pawel Szarek, Akitomo Tachibana (ポスター)

#### **MDMM 2008**

平成 20 年 6 月 23 日(月)～28 日(土)

Piechowice, Poland

L21 “Stress tensor description of chemical bonds - formulation of non-classical bond order concept” (Wednesday, June 25, 2008)

Pawel Szarek, Akitomo Tachibana (招待講演、口頭 ; Honorary international committee member)

#### **WATOC 2008**

平成 20 年 9 月 14 日(日)～19 日(金)

Sydney, Australia

OC065 “The QED Stress Tensor Description of Chemical Bonds – Formulation of a Non-Classical Bond Order Concept” (Wednesday, September 17, 2008)

Pawel Szarek, Akitomo Tachibana (口頭)

#### **TACC 2008**

平成 20 年 9 月 23 日(火)～27 日(土)

Shanghai, China

IN-MN020 “Regional DFT - Electronic Stress Tensor Study of Aluminum Nanostructures for Hydrogen Storage” (Friday, September 26, 2008)

P. Szarek, K. Ichikawa, D. Henry, I. Yarovsky and A. Tachibana (招待講演、口頭)

**2008 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ULSI DEVICES: SCIENCE AND TECHNOLOGY**

平成 20 年 11 月 5 日(水)～7 日(金)

Ookayama campus, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan

P2-24 “Theoretical Study of Local Dielectric Properties of La and Hf Oxide”

Akinori Fukushima, Masato Senami, Akitomo Tachibana (ポスター)

**The IUMRS International Conference in Asia 2008 (IUMRS-ICA 2008)**

平成 20 年 12 月 9 日(火)～13 日(土)

Nagoya Congress Center, Nagoya, Japan

ZP-4 “Theoretical study of La and Hf oxide as the gate insulator”,

A. Fukushima, M. Senami, A. Tachibana (ポスター) (12/9)

ZP-7 “First-principles Study on the Conduction Properties of Si Nanowire”

Y. Ikeda, A. Fukushima, M. Senami, A. Tachibana (ポスター) (12/9)

**2008 IEDM**

San Francisco, CA, USA

平成 20 年 12 月 15 日(月)～17 日(水)

5.5 “Physical Model of the PBTI and TDDB of La Incorporated HfSiON Gate Dielectrics with Pre-existing and Stress-Induced Defects,”

M. Sato, N. Umezawa, J. Shimokawa, H. Arimura, S. Sugino, A. Tachibana, M. Nakamura, N. Mise, S. Kamiyama, T. Morooka, T. Eimori, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, K. Yamada, T. Aoyama, T. Nabatame, Y. Nara, Y. Ohji (口頭)

**【国内発表】**

**§ 第13回ゲートスタック研究会**

平成 20 年 1 月 14 日(月)～15 日(火)

東レ研修センター(三島市末広町 21-9)

「高誘電率酸化物の化学結合状態と誘電物性に関する理論的研究」

杉野真也、福島啓悟、土井謙太郎、瀬波大土、立花明知(口頭)

「電流および電磁場中の Si ナノワイヤーに対する第一原理計算」

池田祐治、福島啓悟、土井謙太郎、瀬波大土、立花明知(ポスター)

“Effects of Lanthanum Incorporation on the Formation of Oxygen Vacancies in HfO<sub>2</sub>”

N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Sugino, A. Tachibana, K. Ohmori, K. Kakushima, H. Iwai, T. Chikyow, T. Ohno, Y. Nara, and K. Yamada (口頭)

### § 第63回日本物理学会年次大会

平成 20 年 3 月 22 日(土)～26 日(水)

近畿大学 本部キャンパス(大阪府東大阪市小若江 3-4-1)

24pPSA-49「電流および電磁場中の Si ナノワイヤーに対する第一原理計算」

池田祐治、福島啓悟、土井謙太郎、瀬波大土、立花明知(ポスター)

26aZD-1「素粒子模型における暗黒物質とその検出」

瀬波大土(招待講演、口頭)

### § 日本化学会第88春季年会(2008)

平成 20 年 3 月 26 日(水)～30 日(日)

立教大学 池袋キャンパス(東京都豊島区西池袋 3-34-1)

2PC-127「グラフェンの水素吸着に対する Al 原子の影響に関する理論的研究」

福島啓悟、土井謙太郎、瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § 第55回応用物理学関係連合学術講演会

平成 20 年 3 月 27 日(木)～30 日(日)

日本大学 理工学部 船橋キャンパス(千葉県船橋市習志野台 7-24-1)

29a-Y-11「Al 及び AlB ナノワイヤーの水素吸着に関する理論的研究」

福島啓悟、土井謙太郎、瀬波大土、立花明知(口頭)

27p-X-7「High-k ゲート絶縁膜への元素添加効果の物理的起源」

白石 賢二、梅澤 直人、杉野 信也、立花 明知、知京 豊裕(口頭)

### § 第11回理論化学討論会2008

平成 20 年 5 月 22 日(木)～24 日(土)

慶応義塾大学理工学部 矢上キャンパス (神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1)

1D-3a「ストレステンソルエネルギー密度方程式」

立花明知(口頭)

1E-1a「Stress Tensor Description of Chemical Bonds – New Bond Order Concept」

Pawel Szarek, 立花明知(口頭)

2P-31「Al 及び AlB ナノワイヤーへの水素吸着に関する理論的研究」

福島啓悟、瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § 日本機械学会2008年度年次大会



平成 20 年 8 月 3 日(日)～7 日(木)

横浜国立大学(神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台 79)

761「Al 及び AlB ナノワイヤーに関する理論的研究」

福島啓悟、瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § ポストスケール第四回全体会議

平成 20 年 8 月 7 日(木)～8 日(金)

KKR ホテル名古屋(名古屋市中区三の丸 1-5-1)

「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

瀬波大土、立花 明知(口頭)

「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

池田祐治、福島啓悟、瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § 第 69 回応用物理学会学術講演会

平成 20 年 9 月 2 日(火)～5 日(金)

中部大学(愛知県春日井市松本町 1200)

2p-P5-9「Al をドーブしたグラフェンへの水素吸着に対する理論的研究」

福島啓悟、瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § 日本物理学会 2008 年秋季大会

平成 20 年 9 月 20 日(土)～23 日(火)

岩手大学上田キャンパス (岩手県盛岡市上田三丁目 18 番 8 号)

20pVC-13「水素吸着材料としての Al 及び AlB ナノワイヤーに関する理論的研究」

福島啓悟、瀬波大土、立花明知(口頭)

22pPSA-36「Si ナノワイヤーの伝導特性に関する第一原理解析」

池田祐治、福島啓悟、瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § 第2回分子科学討論会2008

平成 20 年 9 月 24 日(水)～27 日(土)

福岡国際会議場(福岡市博多区石城町 2-1)

1P033「Al クラスターの水素吸着に関する理論的研究」

Pawel Szarek, 渡辺宏平、立花 明知 (ポスター)

1P036「Pt クラスターの H<sub>2</sub> 吸着, 脱離に関する理論研究」

Pawel Szarek, 浦上貢輔、Chenggang Zhou, Hansong Cheng, 立花明知(ポスター)

4E12「Stress Tensor Description of Chemical Bonds and New Bond Order Concept」

Pawel Szarek, 立花明知(口頭)

4P127「GaN(0001)表面におけるGa-Ga結合の電子状態に関する理論的研究」

大森則史、瀬波大土、立花明知(ポスター)

4P132「新しい絶縁膜としての高誘電体材料に関する理論的研究」

福島啓悟、瀬波大土、立花明知(ポスター)

### **§ 特定領域研究「実在系の分子理論」A01, A03 班合同 研究交流会**

平成 20 年11月14日(金)～15日(土)

関西セミナーハウス(京都市左京区一乗寺竹ノ内町 23)

“New Theory of Chemical Bonds in terms of Stress Tensor Energy Density”

市川和秀、立花 明知(依頼講演;口頭)

### **§ 特定領域研究「実在系の分子理論」公開シンポジウム**

平成 20 年12月16日(火)～18日(木)

北海道大学 学術交流会館

「ストレステンソルエネルギー密度による化学結合の新理論」

市川和秀、立花 明知(依頼講演;口頭)

## **平成 19 年(2007 年)**

### **【国際会議】**

#### **§ Special Seminars**

2007 年 11 月 19 日 1:30pm-2:30pm

Institute of Theoretical Chemistry and Computational Sciences, China University of Geosciences, Wuhan, P.R. China

"A new visualization scheme of chemical energy densities"

立花明知（招待講演、口頭）

2007 年 11 月 19 日 3:00pm-4:00pm

Institute of Theoretical Chemistry and Computational Sciences, China University of Geosciences, Wuhan, P.R. China

" Aluminum nanowires for hydrogen storage materials "

立花明知（招待講演、口頭）

2007 年 11 月 21 日 10:30am-11:30am

Functional Materials and Nano Devices Dept.

Ninbo Institute of Materials Technology and Engineering

Chinese Academy of Sciences, Ninbo, P.R. China

"A new visualization scheme of chemical energy densities with application to aluminum nanowires for hydrogen storage materials"

立花明知（招待講演、口頭）

### **【国内発表】**

#### **§ 第12回ゲートスタック研究会**

平成 19 年 2 月 2 日(金)～3 日(土)

東レ研修センター(三島市末広町 21-9)

「高誘電率材料の誘電率の起源に関する理論的研究」

土井謙太郎、三日月豊、杉野真也、土井立樹、Pawel Szarek、立花明知(口頭)

#### **§ 日本化学会第87春季年会(2007)**

平成 19 年 3 月 25 日(日)～28 日(水)

関西大学 千里山キャンパス(吹田市山手町 3-3-35)

2PC-127「AI および AIB ナノワイヤーの水素吸着過程についての理論研究」

土井謙太郎、福島啓悟、北川優太、平井浩介、Pawel Szarek、立花明知(ポスター)

#### **§ 第54回応用物理学関係連合学術講演会**

平成 19 年 3 月 27 日(火)～30 日(金)

青山学院大学 相模原キャンパス(相模原市淵野辺 5-10-1)

28a-K-10「ゲート絶縁膜における金属原子周りの酸素原子の影響についての理論的研究」

土井謙太郎、杉野真也、三日月豊、Pawel Szarek、立花明知(口頭)

28a-Q-2「GaN(0001)表面の Ga-Ga 結合の解離反応に関する理論的考察」

土井謙太郎、大森則史、毎田憲亮、Pawel Szarek、立花明知(口頭)

30a-P10-7「GaN-nanowire/Si(111)界面の電子状態についての理論的考察」

土井謙太郎、木村弘太郎、浅野洋介、Pawel Szarek、立花明知(ポスター)

### § 第10回理論化学討論会2007

平成 19 年 5 月 14 日(月)～16 日(水)

名古屋大学

2B3a “The field theoretical study of chemical interaction in terms of the Rigged QED: new reactivity indices”

Pawel Szarek and Akitomo Tachibana (口頭)

2P42 “The Rigged QED density interpretation of physic-chemical properties of molecules and chemical processes”

Pawel Szarek, Yutaka Sueda and Akitomo Tachibana (ポスター)

### § 第3回「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム～PACS-CS システムと計算科学～

平成 19 年 9 月 3 日(月)～4 日(火)

筑波大学計算科学研究センター

「Rigged QED 理論に基づく化学結合の表現」

立花明知(招待講演、口頭)

### § 第 1 回分子科学討論会2007

平成 19 年 9 月 17 日(月)～20 日(木)

東北大学川内北キャンパス(仙台市青葉区川内 41)

1E12 “The covalent bond formation between Al atoms in Al-clusters hydrides”

Pawel Szarek, Kouhei Watanabe and Akitomo Tachibana (ポスター)

1P047 「欠陥を含んだ **GaN** の発光メカニズムの理論的解明」

木村弘太郎、浅野洋介、**Pawel Szarek**、土井謙太郎、立花明知(ポスター)

1P048 「水素吸着による Al 及び AIB ナノワイヤーの電子状態変化に関する理論的研究」

福島 啓悟、土井 謙太郎、立花 明知(ポスター)

1P049 「高誘電率材料における原子間相互作用に関する理論研究」

杉野真也, 三日月豊, **Pawel Szarek**, 土井謙太郎, 立花明知 (ポスター)

1P086 「グラフェン上の水素吸着に対するAl ナノワイヤーの影響に関する理論的研究」

福島 啓悟, 土井 謙太郎, **Pawel Szarek**, 立花 明知 (ポスター)

3P056 「**GaN(0001)**表面の**Ga-Ga** 結合の解離反応に関する理論的考察」

大森 則史, 毎田 憲亮, Pawel Szarek, 土井 謙太郎, 立花 明知 (ポスター)

3P058 「新しいBond order による化学結合の評価」

末田豊, Pawel Szarek, 立花明知 (ポスター)

## **§ 東京大学宇宙線研究所 理論研究会「初期宇宙と素粒子標準模型を超える物理」**

平成 19 年 12 月 10 日(月)～11 日(火)

東京大学宇宙線研究所 (柏市柏の葉 5-1-5)

「素粒子模型における暗黒物質候補とその検出」

瀬波大土(招待講演、口頭)

## **平成 18 年(2006 年)**

### **【国際会議】**

#### **§International Workshop on NANO CMOS**

平成18 年 1 月 30 日(月)～2 月 1 日(水)

東レ総合研修センター(静岡県三島市末広町 21-9)

“Local-property analysis for modeling of gate insulator materials”

Kentaro Doi, Koichi Nakamura, and Akitomo Tachibana(口頭)

#### **§ACS Spring 2006 National Meeting & Exposition**

平成18 年 3 月 26 日(日)～30 日(木)

Atlanta, GA, USA

“Stress tensor in the standard model of elementary particles and the origin of the electronic spindle structure of chemical bond”

Akitomo Tachibana(招待講演、口頭)

#### **§XII<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry (XII<sup>th</sup> ICQC)**

平成 18 年 5 月 21 日(日)～26 日(金)

Kyoto TERRSA, Kyoto, Japan

A074 “Application of DTSS and Rigged QED in protein engineering”

P. Szarek, E. Dyguda-Kazimierowicz, W. A. Sokalski, H. Nakano, A. Tachibana,

Y. Cheng, Y. Zhang, and J. A. McCammon (ポスター)

B170 “Intermolecular bonding by Rigid QED and hybrid variation-perturbation conceptual models”

P. Szarek, W. A. Sokalski, and A. Tachibana (ポスター)

#### **§Satellite Symposium of XII-th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), Material-oriented Quantum Chemistry (MOQC)**

平成 18 年 5 月 27 日(土)～29 日(日)

Senri Life Science Center (5F SCIENCE HALL), Osaka, Japan

1I-1 “Stress concepts in chemistry: a quantum electrodynamics approach”

Akitomo Tachibana (国際会議招待講演; 口頭)

#### **§20<sup>th</sup> IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11<sup>th</sup> FAOBMB Congress**

平成 18 年 6 月 18 日(日)～23 日(金)

Kyoto International Hall, Kyoto, Japan

1P-B-019 “Catalytic reaction mechanism of hydrogen production in [NiFe] hydrogenase”

Hiroshi Nakano, Yoshiyuki Tyujo, Kentaro Doi, and Akitomo Tachibana (ポスター)

2P-C-254 “The catalyst-reactants interactions: physical and chemical outlook on the enzyme active site”

P. Szarek, E. Dyguda-Kazimierowicz, W. A. Sokalski, H. Nakano, A. Tachibana, Y. Cheng, Y. Zhang, and J. A. McCammon (ポスター)

### **§International Conference on PROCESSING & MANUFACTURING OF ADVANCED MATERIALS (THERMEC' 2006)**

平成 18 年 7 月 4 日 (火)～8 日 (土)

Vancouver, Canada

“First-Principle Molecular-Dynamics Study of Hydrogen and Aluminum Nanowires in Carbon Nanotubes”

Kentaro Doi, Hiroshi Nakano, Hirokazu Ohta, and Akitomo Tachibana (招待講演、口頭)

### **§MDMM II 2006**

平成 18 年 9 月 10 日 (日)～15 日 (金)

Wroclaw, Poland

“A New Energy Density Visualization Scheme for External Field Effects on Molecular Systems”

Akitomo Tachibana (honorary 招待講演、口頭)

### **§International Workshop on Nitride Semiconductors 2006 (IWN2006)**

平成 18 年 10 月 22 日 (日)～27 日 (金)

Kyoto International Hall, Kyoto, Japan

“First-Principle Study on Crystal Growth of Ga and N layers on GaN substrate”

Kentaro Doi, Noriaki Maida, Kotaro Kimura, and Akitomo Tachibana (ポスター)

### **§The 8<sup>th</sup> International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology (ICSICT-2006)**

平成 18 年 10 月 23 日 (月)～26 日 (木)

Hotel Equatorial, Shanghai, China

E2.2 “Local Model Analysis of Gate Insulator Oxides”

Kentaro Doi, Yutaka Mikazuki, Shinya Sugino, and Akitomo Tachibana (招待講演、口頭)

### **§2006 International Workshop on Dielectric Thin Films for Future ULSI Devices (2006 IWDTF)**

平成 18 年 11 月 8 日 (水)～10 日 (金)

Kawasaki City Industrial Promotion Hall, Kanagawa, Japan

P2-7 “Local dielectric analysis of gate insulator oxide cluster models”

Kentaro Doi, Yutaka Mikazuki, Shinya Sugino, and Akitomo Tachibana (ポスター)

## § Special Seminars

2006 年 12 月 6 日 4:00pm-5:00pm

Dept. of Applied Physics, RMIT University, Melbourne, Australia

“A new visualization scheme of chemical bonding using regional energy densities”

立花明知 (招待講演、口頭)

2006 年 12 月 11 日 4:00pm-5:00pm

Dept. of Applied Physics, RMIT University, Melbourne, Australia

“Computational chemistry approaches to aluminum nanowires for hydrogen storage materials”

立花明知 (招待講演、口頭)

## 【国内発表】

### § 第 11 回ゲートスタック研究会

平成18 年 2 月 3 日(金)～4 日(土)

東レ総合研修センター(静岡県三島市末広町 21-9)

P-16「希土類酸化物クラスター( $\text{La}_2\text{O}_3, \text{Ce}_2\text{O}_3, \text{Gd}_2\text{O}_3$ )の電子状態についての第一原理計算」

土井謙太郎、三日月豊、杉野真也、立花明知(ポスター)

P-42「分子動力学計算によるシリコン酸窒化膜の安定構造とその電子状態」

土井謙太郎、阪本俊夫、上原寛貴、立花明知(ポスター)

### § アクセルリス フォーカスグループミーティング(FGM)

平成 18 年 2 月 23 日(木)、24(金)

日本ヒューレットパッカード株式会社 本社ビル 23F(東京都品川区東品川 2-2-24)

「量子化学計算、DFT の基礎と最前線」

立花 明知 (口頭)

「DFT によるアルミニウム内容カーボンナノチューブの水素吸着過程」

土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知 (ポスター)

### § 第 53 回応用物理学関係連合講演会

平成 18 年 3 月 22 日(月)～26 日(日)

武蔵工業大学(東京都世田谷区)

23a-V-9「シリコン酸化物およびシリコン酸窒化物の電子構造についての分子動力学計算」



土井謙太郎、阪本俊夫、上原寛貴、立花明知(口頭)

23a-V-10「ランタノイド酸化物の high-k 材料としての可能性についての電子状態計算」

三日月豊、杉野真也、土井謙太郎、立花明知(口頭; 当日発表は三日月)

### § 日本化学会第 86 春季年会(2006)

平成 18 年 3 月 27 日(月)～30 日(木)

日本大学理工学部船橋キャンパス(千葉市船橋市習志野台)

2PA-080「QM および QM/MM 法による[NiFe]ヒドロゲナーゼ触媒機構の反応経路解析」

中野博史、土井謙太郎、立花明知(ポスター)

### § 第 67 回応用物理学会学術講演会

平成 18 年 8 月 29 日(火)～9 月 1 日(金)

立命館大学 びわこ・くさつキャンパス(滋賀県草津市野路東 1-1-1)

29a-ZF-6「GaN 基板上的ガリウムおよび窒素層の成長に関する第一原理計算」

土井謙太郎、毎田憲亮、木村弘太郎、立花明知(ポスター)

31p-ZN-3「ランタノイド酸化物クラスターモデルにおける化学結合解析」

土井謙太郎、杉野真也、三日月豊、立花明知(口頭)

### § Nano CMOS 今後 15 年の展望とその技術課題

平成 18 年 9 月 11 日(月)

早稲田大学小野記念講堂(東京都新宿区西早稲田 1-6-1)

「原子核相互作用まで考慮した Rigged QED による  $\text{La}_2\text{O}_3$  のクラスターモデル」

立花明知(口頭)

### § 分子構造総合討論会 2006 静岡

平成 18 年 9 月 20 日(水)～30 日(土)

グランシップ、静岡県コンベンションツアーセンター(静岡市駿河区池田 79-4)

2E12 “Properties of molecular structures by quantum energy density analysis”

Pawel Szarek, Akitomo Tachibana, and Andrzej W. Sokalski(口頭)

2P050「AIB ナノワイヤーの安定構造と電子構造についての理論研究」

福島啓悟、土井謙太郎、Pawel Szarek、立花明知(ポスター)

3P109 “Investigation of supramolecular bonding”

Pawel Szarek, Akitomo Tachibana, and Andrzej W. Sokalski(ポスター)

### § 物理学会2006千葉

平成 18 年 9 月 20 日(水)～23 日(土)

千葉大学西千葉キャンパス()

「Rigged QED 理論による化学結合の可視化」

立花明知(招待講演、口頭)

## **平成 17 年(2005 年)**

### **【国際会議】**

#### **§7<sup>th</sup> Congress of the World Association of Theoretically Oriented Chemists (WATOC-05)**

Cape Town, South Africa

January 16-21, 2005

“Investigation of the role of the ‘chemical force effect’ for the open system”

Piotr Ordon and Akitomo Tachibana (ポスター)

#### **§45<sup>th</sup> Sanibel Symposium 2005**

March 5th through March 11th, 2005

World Golf Village Renaissance Resort, St. Augustine, Florida

“A New Energy Density Visualization Scheme for External Field Effects on Chemical Reaction Systems”

Akitomo TACHIBANA (ポスター)

#### **§2<sup>nd</sup> International Conference on Polymer Batteries and Fuel Cells (PBFC2)**

2005 年 6 月 12 日(日)～17 日(金)

Las Vegas, Nevada, USA

"First-principle molecular-dynamics study of hydrogen adsorption on an aluminum-doped carbon nanotube"

Akitomo Tachibana (ポスター)

#### **§International Hydrogen Congress and Exhibition (IHEC-2005)**

2005 年 7 月 13 日(水)～15 日(金)

Istanbul, Turkey

"Novel Interaction of Hydrogen and Aluminum Nanowires"

Akitomo Tachibana (口頭発表)

#### **§11th International Conference on the Applications of Density Functional Theory (DFT) in Chemistry and Physics**

Geneva, Switzerland

September 11 - 15, 2005

“Regional density functional theory applied to metallic crystal structure,”

Piotr Ordon and Akitomo Tachibana (ポスター)

“Nuclear stiffness in search for maximum hardness principle and for softest states along the chemical reaction

path,”

Piotr Ordon and Akitomo Tachibana (ポスター)

## **\$PACIFICHEM2005**

Hawaii, USA

2005 年 12 月 15 日(木)～20 日(火)

“New visualization scheme of quantum energy density in chemical reaction systems,”

Kentaro Doi, Koichi Nakamura, and Akitomo Tachibana (ポスター)

## **【国内発表】**

### **\$ 第10回研究会「極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性」**

平成17年 1 月 28 日(金)～29日(土)

東レ総合研修センター(静岡県三島市末広町 21-9)

「シリコン酸化物と酸化窒素膜のアモルファス構造の伝導性に関する第一原理計算」

土井謙太郎、上原寛貴、中村康一、立花明知 (ポスター)

### **\$ アクセルリス フォーカスグループミーティング(FGM)**

平成 17 年 2 月 23 日(木)、24(金)

日本ヒューレットパッカード株式会社 本社ビル 23F(東京都品川区東品川 2-2-24)

「量子化学計算、DFT の基礎と最前線」

立花 明知 (口頭)

「DFT によるアルミニウム内容カーボンナノチューブの水素吸着過程」

土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知 (ポスター)

### **\$ 日本化学会第85 春季年会(2005)**

平成 17 年 3 月 26 日(土)～29 日(火)

神奈川大学横浜キャンパス

「III-V 窒化物半導体結晶成長における気相反応の置換基効果」

岡田敬信、阪本俊夫、土井謙太郎、中村康一、立花明知 (ポスター)

### **\$ 2005 年春季第52 回応用物理学関係連合講演会**

平成17年3月29日(火)～4月1日(金)

埼玉大学(さいたま市桜区下大久保 255)

29a-YG-7「ペンタセン結晶の有効質量に関する第一原理計算」

(京大院工、パイオニア、三菱化学科技セ) 土井 謙太郎、吉田 功一、中野 博史、立花 明知、田辺 貴久、小島 優子、岡崎 慶二 (口頭)

31a-ZB-1「シリケート酸化物薄膜の誘電物性に関する第一原理シミュレーション」

中村康一、土井謙太郎、藤谷究、立花明知（口頭）

## § シンポジウム「来るべきナノ CMOS 時代に向けての挑戦とその課題」

平成17年4月27日(水)～4月28日(木)

早稲田大学

講演 14「ナノ領域表面・界面のモデル化」(京都大学)

立花 明知(依頼講演、口頭)

## § 第9回理論化学討論会

平成17年5月17日(火)～19日(木)

京都大学

1A1b “Maximum hardness principle revisited. Application to chemical reactions,”

Piotr Ordon and Akitomo Tachibana (口頭発表)

1C1b 「素粒子スタンダードモデルにおける電子ストレスと化学結合のスピンドル構造」

Akitomo Tachibana (口頭発表)

1P10「Desulfovibrio vulgaris Mitazaki F 株における酸化型[NiF]hydrogenase モデルの水素生成反応機構」

中野博史、土井謙太郎、立花明知(ポスター)

1P15「III-V 窒化物半導体結晶成長時の寄生反応における電子ストレス密度」

岡田敬信、阪本俊夫、土井謙太郎、中村康一、立花明知(ポスター)

1P30「ペンタセン固体の電子有効質量に関する第一原理計算」

土井謙太郎、吉田功一、中野博史、立花明知(ポスター)

1P31「高誘電率酸化膜材料の電子物性に関する第一原理計算」

(京大院工、武蔵工大工) 土井謙太郎、藤田究、門脇直樹、中村康一、立花明知、服部健雄(ポスター)

1P32「活性アルミニウムを含むグラフェン層への水素吸着に関する分子動力学シミュレーション」

河野久美子、土井謙太郎、太田裕一、中野博史、立花明知(ポスター)

1P74「分子系および周期系の領域密度汎関数理論プログラム開発」

中村康一、土井謙太郎、中野博史、立花明知(ポスター)

1P81 “Softest state versus transition state of chemical reactions. Reactivity indices and energy density study”

Piotr Ordon and Akitomo Tachibana (ポスター)

## § 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス研究会「ゲート絶縁膜、容量膜、機能膜およびメモリ技術」

広島大学、東広島キャンパス

2005年6月9日(木)、10日(金)

「高誘電率ゲート絶縁膜における電子ストレスの Rigged QED (Quantum Electrodynamics) 理論に基づく第一原理計算」

立花明知(招待講演、口頭発表)

### **§ 2005 年第 66 回秋季応用物理学会学術講演会**

平成17年9月7日(水)～9月11日(日)

徳島大学

7a-P1-36「活性アルミニウムを含むグラフェン層への水素吸着に関する第一原理分子動力学計算」

中野博史、太田裕一、横江明、土井謙太郎、立花明知 (ポスター)

10p-F-20「アルミニウムをドーピングしたカーボンナノチューブへの水素吸着に関する第一原理分子動力学計算」

中野博史、太田裕一、横江明、土井謙太郎、立花明知 (口頭)

### **§ 分子構造総合討論会 2005**

平成 17 年 9 月 27 日(火)～30 日(金)

東京工業大学

3D11「素粒子の標準模型におけるストレステンソルと化学結合における電子状態のスピンドル構造の起源」

立花明知(口頭)

2P096「QM/MM による酸化型[NiFe]hydrogenase モデルの水素生成反応機構」

中野博史・土井 謙太郎・立花 明知 (ポスター)

## **平成 16 年(2004 年)**

### **【国際会議】**

#### **§ Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2004)**

Gyeongju, Korea, during February 15-20, 2004

“Spindle Structure of Chemical Bond”

Akitomo TACHIBANA (口頭発表)

#### **§44<sup>th</sup> Sanibel Symposium 2004**

February 28 through March 5th, 2004

World Golf Village Renaissance Resort, St. Augustine, Florida

“Spindle structure of covalent bonding”

Akitomo TACHIBANA (ポスター)

#### **§The 5<sup>th</sup> International Symposium on Blue Laser and Light Emitting Diodes (ISBLLED-2004)**

Hotel Hyundai, Gyeongju, Korea, from March 15 to 19, 2004

“Quantum chemical study on substitution effect of gas-phase reactions in III-V nitride semiconductor crystal growth”

Takanobu Okada, Kentaro Doi, Koichi Nakamura, and Akitomo Tachibana\*

“First-principle study on electronic properties of gallium nitride and aluminum nitride nanowires”

Nobuyuki Higashimaki, Yoshihiko Kawakami, Kentaro Doi, Koichi Nakamura, and Akitomo Tachibana\*

#### **§ 次世代 ULSI デバイスのための誘電体薄膜科学と技術に関する 2004 年国際ワークショップ 2004 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ULSI DEVICES: SCIENCE AND TECHNOLOGY (IWDTF-04)**

2004 年 5 月 24 日(月)～5 月 28 日(金)

日本科学未来館(東京都江東区青海 2 丁目 41 番地)

“First-Principle Study on Nitridation of Silicon Dioxide and Electronic Properties of Silicon Oxynitride Thin Film”

Hiroki Uehara, Kentaro Doi, Koichi Nakamura, and Akitomo Tachibana\* (口頭)

#### **§The Twelfth International Conference on Metal Organic Vapor Phase Epitaxy (ICMOVPEXII)**

2004 年 5 月 30 日(日)～6 月 4 日(金)

Westin Maui Hotel, Lahaina, Maui, Hawaii

“Growth Mechanism of Atmospheric Pressure MOVPE of GaN and its Alloys”

Koh Matsumoto and Akitomo Tachibana (基調講演, 招待講演, 口頭発表)

**§Memorial Symposium on Molecular Informatics, Modeling, and Simulation  
(MS MI MS 2004)**

Memorial University of Newfoundland,

St. John's, Newfoundland, Canada

June 23-26, 2004

“Spindle Structure of Chemical Bond”

Akitomo Tachibana (招待講演, 口頭発表)

**§International Conference on Molecular Quantum Mechanics**

St. John's College, Cambridge University, England

July 24-29, 2004

“Nuclear reactivity indices within Regional Density Functional Theory”

Piotr Ordon and Akitomo Tachibana (ポスター)

**§International Conference on Modeling and Design of Molecular Materials**

Wroclaw, Poland

September 16-20, 2004

“A New Visualization Scheme of Chemical Energy Density and Bonds in Molecules”

Akitomo Tachibana (ポスター)

“Maximum hardness principle for transition states of chemical reaction”

Piotr Ordon and Akitomo Tachibana (ポスター)

**【国内発表】**

**§ 第9回研究会「極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性」**

平成16年 1 月 23 日(金)～24 日(土)

熱川ハイツ(静岡県賀茂郡東伊豆町奈良本 1240-14)

P-16「High- $\kappa$  酸化物薄膜の微視的構造と誘電物性に関する第一原理計算」

藤谷 究、加島 瑛樹、門脇 直樹、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知、服部 健雄 (ポスター)

P-8「シリコン酸窒化物薄膜の形成過程と誘電物性に関する第一原理計算」

上原 寛貴、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知 (ポスター)

**§ 日本化学会第84春季年会(2004)**



平成16年3月26日(金)～29日(月)

関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス(兵庫県西宮市上ヶ原)

3月26日 12:30～14:00

1PB-038「ペンタセン分子結晶の電気伝導性に関する電子状態計算」

(京大院工・三菱化学科技研セ) 土井謙太郎, 吉田功一, 中村康一, 立花明知, 岡崎慶二, 小島優子 (ポスター)

3月26日 12:30～14:00

1PB-047「ジアセチルおよびその置換体の2段階励起に関する量子化学計算」

(京大院工・NTT フォトニクス研) 井蓋直臣, 小早川智志, 土井謙太郎, 中村康一, 立花明知, 森裕平 (ポスター)

### § 2004年春季第51回応用物理学関係連合講演会

平成16年3月28日(日)～31日(水)

東京工科大学(東京都八王子市片倉町 1404-1)

30p-D-3「シリコン酸窒化薄膜の形成過程と誘電物性に関する量子化学計算」上原寛貴、土井謙太郎、中村康一、立花明知(口頭; 当日発表は上原)

31a-C-7「High-k 酸化物周期系モデルの第一原理誘電特性に関する領域密度汎関数理論の応用計算」藤谷究、加島瑛樹、土井謙太郎、中村康一、立花明知(口頭; 当日発表は藤谷)

29p-YE-4「III-V 族窒化物結晶成長時の寄生反応における置換基効果に対する量子化学計算」岡田敬信、土井謙太郎、中村康一、立花明知(口頭; 当日発表は岡田)

29p-F-14「カーボンナノチューブによって囲まれた Al ナノワイヤーへの水素吸着過程に関する領域密度汎関数理論の応用計算」

川上佳彦、野島弥一、河野久美子、横江明、土井謙太郎、中村康一、立花明知(口頭; 当日発表は川上)

### § 第8回理論化学討論会

平成16年6月7日(月)～9日(水)

広島大学

2D1A「化学反応場の量子エネルギー密度ーQuantum Energy Density of Chemical Reaction Fieldー」

立花 明知 (口頭発表)

### § 分子構造総合討論会 2004

平成16年9月27日(月)～30日(木)

広島大学

1C04「化学的相互作用場の理論的研究」

立花明知（口頭発表）

1P022 「GaN および AlN ナノワイヤーの電子物性に関する第一原理解析」

土井 謙太郎、東楨伸之、中村 康一、立花 明知（ポスター）

3P091 「III-V 族窒化物結晶成長時の寄生反応における t-ブチル置換基効果」

岡田敬信、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（ポスター）

## **平成 15 年(2003 年)**

### **【国際会議】**

#### **§The Fifth International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-5) 第5回 窒化物半導体国際会議**

平成 15 年 5 月 25 日 (日)～30 日 (金)

奈良県新公会堂

“First-principle study on the structures and electronic properties of gallium nitride nanowires”

Yoshihiko Kawakami, Nobuyuki Higashimaki, Kentaro Doi, Koichi Nakamura,  
and Akitomo Tachibana (ポスター)

Department of Engineering Physics and Mechanics, Kyoto University

#### **§1st International Conference on Polymer Batteries and Fuel Cells (PBFC-1)**

平成 15 年 6 月 1 日 (日)～6 日 (金)

Shilla Hotel, Jeju Island, Korea

“First-Principle Study on Structures and Electronic Properties of Aluminum Nanowire Wrapped in Carbon Nanotube”

Yoshihiko Kawakami, Kentaro Doi, Koichi Nakamura, and Akitomo Tachibana

Department of Engineering Physics and Mechanics, Kyoto University

#### **§International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC' 2003)**

平成 15 年 7 月 7 日 (月)～11 日 (金)

Leganes, Madrid, Spain

“First-Principle Study on the Reactions and Dynamical Electronic Characteristics of Electromigration of Aluminum Nanowires”

Akitomo Tachibana (招待講演、口頭発表)

Department of Engineering Physics and Mechanics, Kyoto University

### **【国内発表】**

#### **§ 第8回研究会「極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性」**

平成 15 年 1 月 24 日～25 日

熱川ハイツ (静岡県賀茂郡東伊豆町奈良本 1240-14)

「High- $\kappa$  酸化物薄膜の微視的構造と誘電物性に関する第一原理計算」

藤谷 究、加島 瑛樹、門脇 直樹、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知、服部 健雄 (ポスター)

「シリコン酸窒化物薄膜の形成過程と誘電物性に関する第一原理計算」

上原 寛貴、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（ポスター）

### § 日本化学会第 83 春季年会(2003)

平成15年3月18日(火)～21日(金)

早稲田大学西早稲田(本部)キャンパス(東京都新宿区西早稲田)

3月18日

1C2-55 「ポリスチレンモデルの光酸化分解反応過程に関する領域密度汎関数理論の応用計算」  
(京大院工) 藤井宏文、中村康一、立花明知（口頭発表）

3月19日

2PA-071 「クラスターの結合生成における電子相互作用に関する領域密度汎関数理論の応用計算」  
(京大院工) 土井 謙太郎、中村康一、立花明知（ポスター）

3月20日

3PC-079 「ベンゼン-1,4-ジチオール/ニッケル系電子材料接合界面の量子電磁相互作用」  
(京大院工) 井蓋直臣、土井 謙太郎、中村康一、立花明知（ポスター）

### § 2003 年春季第 50 回応用物理学関係連合講演会

平成15年3月27日～30日

神奈川大学(横浜キャンパス)(神奈川県横浜市神奈川区六角橋 3-27-1)

27a-T-1 「GaN ナノワイヤーに関する領域密度汎関数理論の応用計算」  
川上佳彦、東槇伸幸、牧田俊樹、土井謙太郎、中村康一、立花明知（口頭発表）

30a-P14-23 「シリケート誘電体に関する領域密度汎関数理論の応用計算」  
藤谷 究、山田啓介、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（ポスター）

### § 日本物理学会第58回年次大会

平成15年3月28日(金)～31日(月)

東北大学川内キャンパス

28aXE-7 「高スピン状態におけるアルカリ金属クラスター生成過程の量子エネルギー密度解析」  
土井謙太郎、中村康一、立花明知（口頭発表）

### § 第7回理論化学討論会

平成15年5月13日(火)～15日(木)

岡崎コンファレンスセンター

2012A “Local Stress in Quantum Electrodynamics and a Unified Scheme for Generalized Chemical Reactivity”

立花 明知（口頭発表）

## § 2003年秋季第 64 回応用物理学会学術講演会

平成15年8月30日（土）～9月2日（火）

福岡大学（七隈キャンパス）（福岡市城南区七隈 8-19-1）

30a-YL-17 「ゲルマン分子を含む化学反応系の反応過程に関する量子化学的研究」

井蓋 直臣、相良 文彦、上原 寛貴、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知、石原 良夫\*（口頭）

1p-S-4 「チオールラジカル系電子材料のスピン輸送現象に関する領域密度汎関数理論の応用計算」

井蓋 直臣、河野 久美子、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（口頭）

1p-E-9 「カーボンナノチューブによって囲まれた Al ナノワイヤーに関する領域密度汎関数理論の応用計算」

川上 佳彦、横江 明、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（口頭）

31a-YE-2 「ペロブスカイト型強誘電体の誘電物性に関する量子エネルギー密度計算」

土井 謙太郎、平野 弘二、中村 康一、立花 明知（口頭）

31p-R-1 「GaN ナノワイヤーの電子物性制御に関する第一原理計算」

東槇 伸幸、川上 佳彦、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（口頭）

1a-V-3 「ガドリニウム酸化物に関する領域密度汎関数理論の応用計算」

門脇直樹、藤谷究、土井謙太郎、中村康一、立花明知、服部健雄（口頭）

1a-V-4 「シリケート誘電体の第一原理誘電特性に関する領域密度汎関数理論の応用計算」

藤谷究、岡田敬信、土井謙太郎、中村康一、立花明知（口頭）

## § 日本物理学会 2003年秋季大会

平成15年9月20日（金）～23日（月）

岡山大学津島キャンパス

9月20日（金）

20aPS-78 「カーボンナノチューブによって囲まれたアルミニウムナノワイヤーの電子物性」

川上 佳彦、横江 明、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（ポスター）

9月21日（土）

21aXC-8 「シリケート化合物の誘電物性に関する第一原理シミュレーション」

藤谷 究、岡田 敬信、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（口頭；当日発表は藤谷）

21pPSB-4 「III-V 窒化物ナノワイヤーの電子物性制御に関する第一原理シミュレーション」

東槇 伸幸、川上 佳彦、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（ポスター；当日発表は東槇）

9月23日（月）

23aTE-8 「アルカリ金属クラスターのイオンおよび励起状態に対する基底関数依存性」

土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（口頭）

23aTE-7 「ジチオールピラジカルのスピン輸送における外部電場応答」

井蓋 直臣、河野 久美子、土井 謙太郎、中村 康一、立花 明知（口頭；当日発表は井蓋）

### § 分子構造総合討論会 2003

平成15年 9 月 24 日（水）～27 日（土）

京都テルサ（京都市南区新町通り九条下る）

「QED(Quantum Electrodynamics)に基く局所応力と化学反応性」

立花明知（口頭）

3Aa01「摂動論による誘電体の電場応答解析および誘電物性予測」

中村康一、土井謙太郎、藤谷 究、立花明知（口頭）

「アルミニウムナノワイヤーへの水素吸着過程およびエレクトロマイグレーションに関する第一原理計算」

川上佳彦、木倉崇晴、横江明、土井謙太郎、中村康一、立花明知（ポスター）

「アルカリ金属クラスターの励起状態およびイオン状態における成長過程」

土井 謙太郎、河野 久美子、中村 康一、立花 明知（ポスター）

1Pp121「ゲート絶縁薄膜材料の電子物性に関する量子化学計算」

（京大院工、武蔵工大工\*）藤谷 究、門脇 直樹、岡田 敬信、土井 謙太郎、中村 康一、立花明知、服部 健雄\*（ポスター）

「水触媒によるゲルマン分解反応過程に関する量子化学計算」

（京大院工・日本酸素\*）井蓋 直臣、相良 文彦、上原 寛貴、土井 謙太郎、中村 康一、立花明知、石原 信夫\*（ポスター）