

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- κ 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の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）