

## 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 - Quantum Energy Density of Chemical Reaction Field -」

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）