

平成 17 年(2005 年)

【国際会議】

§7th 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)

§45th 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)

§2nd 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)