

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)

§XIIth International Congress of Quantum Chemistry (XIIth 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)

§20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th 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 8th 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 La_2O_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スセンター(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)