

## **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AI 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)