

## **平成 21 年(2009 年)**

### **【国際会議】**

#### **13<sup>th</sup> ICQC**

平成 21 年 6 月 22 日(月)～27 日(土)

MARITIM Hotel Berlin, Berlin, Germany

A.128 “Aluminum nano-structures in hydrogen storage by Regional Density Functional Theory”

P. Szarek, K. Watanabe, K. Hirai, D. Henry, I. Yarovsky and A. Tachibana (Poster) (6/23)

#### **THERMEC' 2009**

平成 21 年 8 月 25 日(火)～29 日(土)

MARITIM Hotel Berlin, Berlin, Germany

“Electronic stress tensor study of aluminum nanostructures for hydrogen storage”

A. Tachibana, P. Szarek, K. Watanabe, K. Ichikawa (Invited, oral) (8/29)

#### **DFT09**

平成 21 年 8 月 31 日(月)～9 月 4 日(金)

Universite Claude Bernard Lyon 1, Lyon, France

P157 “Stress Tensor of Chemical Bonds”

K. Ichikawa, and A. Tachibana (poster) (9/1)

P805 “Role of aluminum atoms for hydrogen adsorption on graphene sheets”

A. Fukushima, A. Sawairi, K. Doi, M. Senami, L. Chen, H. Cheng and A. Tachibana (poster) (9/1)

#### **APCTCC-4 (Fourth Asian Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry)**

平成 21 年 12 月 21 日(月)～23 日(水)

The Legend Water Chalets, Port Dickson, Malaysia

OP02 “Chirality Control with Spin Torque and Zeta Force in Relativistic Quantum Chemistry”

K. Ichikawa, and A. Tachibana (oral) (12/21)

### **【国内発表】**

#### **§ 第14回ゲートスタック研究会**

平成 21 年 1 月 23 日(金)～24 日(土)

東レ研修センター(三島市末広町 21-9)

「Si ナノワイヤーの伝導特性に関する第一原理解析」

池田裕治, 福島啓悟, 瀬波大土, 立花明知(口頭)

### § ポストスケール第五回全体会議・第三回成果報告会

平成 21 年 1 月 28 日(水)～29 日(木)

東京大学本郷キャンパス (東京都文京区本郷)

「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

立花明知(口頭)

P115 「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

瀬波大土, 立花明知(ポスター)

### § 第64回日本物理学会年次大会

平成 21 年 3 月 27 日(金)～30 日(月)

立教大学 池袋キャンパス(東京都豊島区西池袋 3-34-1)

28pRC-6「第一原理計算を用いたスピン平衡状態と潜在的トルクの記述」

瀬波大土, 立花明知(口頭)

27aVC-5「ストレステンソルと領域積分を用いた化学結合の研究」

市川和秀, 立花明知(口頭)

### § 日本化学会第89春季年会(2009)

平成 21 年 3 月 27 日(金)～30 日(月)

日本大学 理工学部 船橋キャンパス(千葉県船橋市習志野台 7-24-1)

「ホウ素系ガス輸送プロセスにおける鉄不純物混入に関する量子化学計算」

明楽俊幸, 市川和秀, 石原良夫, 伊崎隆一郎, 立花明知(ポスター)

### § 第56回応用物理学関係連合学術講演会

平成 21 年 3 月 30 日(月)～4 月 2 日(木)

筑波大学 (茨城県つくば市天王台 1-1-1)

30p-ZV-11 「グラフェンへの水素吸着に対する金属の影響に関する理論的考察」

福島啓悟, 瀬波大土, 立花明知(口頭)

1a-P13-10 「物質中の電気伝導を表現する第一原理計算」

瀬波大土, 渡辺宏平, 立花明知(口頭)

1a-P13-11 「第一原理計算を用いたスピン平衡状態と潜在的トルクの記述」

瀬波大土, 立花明知(口頭)

1p-ZT-7 「場の量子論から見る未来デバイス材料」

立花明知 (招待講演, 口頭)

### § 第12回理論化学討論会2009

平成 21 年 5 月 28 日(木)~30 日(土)

東京大学本郷キャンパス 武田先端知ビル 武田ホール

1A1a 「スピントルクとキラリティー」

市川和秀、立花明知 (口頭)(28 日)

2P30 「水素化パラジウムクラスターにおける化学結合のストレステンソルに基づく研究」

我妻歩、市川和秀、立花明知 (ポスター)(29 日)

2P35 「スピントルクの数値計算に関する研究」

原誉明、市川和秀、立花明知 (ポスター)(29 日)

3B3a 「電流存在下での化学結合の研究」

市川和秀、立花明知 (口頭)(30 日)

### § 特定領域研究「実在系の分子理論」第4回公開シンポジウム

平成 21 年 5 月 30 日(土)~31 日(日)

東京大学本郷キャンパス 武田先端知ビル 武田ホール

P15 「ストレステンソルエネルギー密度による化学結合の新理論」

市川和秀、立花 明知(ポスター) (30 日)

### § ポストスケール第六回全体会議

平成 21 年 8 月 6 日(木)~7 日(金)

メルパルク名古屋 (名古屋市東区)

「ストレステンソルエネルギー密度による新エレクトロニクス材料のナノ物性解明」

立花明知(口頭)

P117 「物質中の局所的な電気伝導を表現する第一原理計算」

瀬波大土、立花明知(ポスター)

### § 第 3 回分子科学討論会2009

平成 21 年 9 月 21 日(月)~24 日(木)

名古屋大学東山キャンパス

1P124 「第一原理計算によるスピンに対するトルク」

西川潤、原 誉明、瀬波大土、立花明知 (ポスター) (9/21)

3P119 「H<sub>2</sub><sup>+</sup>分子のストレステンソルによる解析」

市川和秀、立花明知 (ポスター) (9/23)

4P137 「化学結合に対する電流の効果の研究」

瀬波大土、市川和秀、池田裕治、立花明知 (ポスター) (9/24)

4P139 「相対論的電子状態計算におけるスピントルクとキラリティー」

市川和秀、瀬波大土、西川潤、原誉明、立花明知 (ポスター) (9/24)

### § 第 70 回応用物理学会学術講演会

平成 21 年 9 月 8 日 (火)～11 日 (金)

富山大学(富山県富山市五福 3190 番地)

8p-G-16 「アルミニウムナノワイヤー表面に吸着した水素原子の挙動に関する理論的研究」

福島啓悟、平井浩介、瀬波大土、立花明知(口頭)

9a-ZH-1 「物質中の局所的な電気伝導を表現する第一原理計算」

瀬波大土、池田裕治、福島啓悟、立花明知(口頭)

### § 第 50 回電池討論会

平成 21 年 11 月 30 日 (月)～12 月 2 日 (水)

国立京都国際会館

3A21 「新規な電池理論の研究開発」

佐野茂、楠美智子、立花明知(口頭) (12/2)

### §

平成 21 年 12 月 15 日 (火)

東京エレクトロン(山梨県韮崎市)

「量子化学の基礎と半導体関係の事例」

中村康一、立花明知(依頼講演)

### § 化学工学会反応工学部会

平成 21 年 12 月 16 日 (水)

銀座ルノアール(東京)

「GaN および関連物質の MOCVD プロセスにおける反応量子化学」

中村康一、立花明知(依頼講演)