

Publications and Invited Talks

Atsushi Oshiyama

(A) Original Papers

1. Y. Matsushita, S. Furuya and A. Oshiyama, “Floating Electron States in Covalent Semiconductors” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 246404 (2012).
2. K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and A. Oshiyama, “Microscopic Mechanisms of Initial Oxidation of Si(100): Reaction Pathways and Free-Energy Barriers ” *Phys. Rev. B* **85**, 205314:1-4 (2012).
3. S. Furuya, Y. Matsushita and A. Oshiyama, “Electron Confinement due to Stacking-Control of Atomic Layers in SiC Polymorphs” *Phys. Rev. B* (2012).

(B) Review Papers and Books

1. 押山淳, “第一原理に基づく物質計算の現状と展望” *日本シミュレーション学会誌* **31**, 11 (2012)
2. (編集) 宇川彰、押山淳、小柳義夫、杉原正顯、住明正、中村春木、岩波講座「計算科学」全6巻・別巻1 (2012、岩波書店)
3. 押山淳他、計算と物質 (岩波講座「計算科学」第3巻) (2012、岩波書店).
4. 押山淳, “第一原理に基づく物質計算の現状と展望” *日本シミュレーション学会誌* **31**, 11 (2012).
5. 岩田潤一、古家真之介、押山淳, “実空間密度汎関数法コード RSDFT による大規模第一原理計算” *計算工学* **17**, 22 (2012).
6. 古家真之介、岩田潤一、長谷川幸宏、松下雄一郎、押山淳、賀谷信幸、「シリコンナノワイヤのシミュレーションと -CAVE システムによる可視化」、*可視化情報学会誌*, **32**, 138-143 (2012).

(C) Invited Talks

1. 押山淳, “コンピューティクスによる物質デザイン: RSDFT を中心に” 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト第6回公開シンポジウム (2012年3月5-6日、神戸ポートアイランドセンター)
2. A. Oshiyama, “Materials Design through Computics: Nanostructures of Silicon and Carbon” 10th Int. Meeting on High Performance Computing for Computational Science (VECPAR2012), July 17-20, 2012, Kobe, Japan).
3. A. Oshiyama, “Real-Space Density-Functional Approach to Electronic Properties of Nanostructures” Conference on Computational Physics, (October 14-18, 2012, Kobe, Japan)