

[著書(和文)およびその他の論文]

<http://fock.c.s.osakafu-u.ac.jp/~shiro/papers.html> に掲載.

- *. 小関史朗
「ペンタレン, ヘプタレンおよびオクタレンの幾何学的構造に関するMO計算」
修士論文(東北大学 大学院理学研究科), **1982**年 3月.
- *. 小関史朗
「共役炭化水素の基底及び電子的励起状態における電子相関効果」
博士論文(東北大学大学院理学研究科), **1985**年 3月.
1. Michael W. Schmidt, Jerry A. Boatz, Kim K. Baldridge, Shiro Koseki, Mark S. Gordon, Steven T. Elbert, and Brenda Lam.
“General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS)”
Quantum Chemistry Program Exchange (QCPE) Bulletin **1987**, 7, 115–117.
2. Michael W. Schmidt, Kim K. Baldridge, Jerry A. Boatz, Jan H. Jensen, Shiro Koseki, Mark S. Gordon, Kiet A. Nguyen, Theresa L. Windus, Steven T. Elbert.
“General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS)”
Quantum Chemistry Program Exchange (QCPE) Bulletin **1990**, 10, 52–54.
3. 小関史朗
「有機ケイ素化合物の分子軌道計算」
“化学と工業”(日本化学会), **1990**年, 43巻4号, 619–624.
4. 小関史朗・石谷明彦
「シリコンCVDの理論的研究」
“応用物理”(応用物理学会), **1990**年, 59巻8号, 1014–1026.
5. Akihiko Ishitani and Shiro Koseki.
“A Model for SiN_x CVD Film Growth Mechanism by Using SiH₄ and NH₃ Source Gases”
Extended abstracts of the 22nd Conference on Solid State Devices and Materials, **1990**, 187–190.
6. Azumao Toyota and Shiro Koseki.
“Violation of Hund's Rule in the Lowest Excited Singlet-triplet Pair of Bicyclo[5.1.0] octa-tetraene”
Bulletin of the Yamagata University **1991**, 12, 343–347.
7. 石谷明彦・小関史朗・安藤公一.
「極薄シリコン窒化膜形成技術-量子化学計算によるシミュレーションとプロセス最適化」
“応用物理”(応用物理学会), **1991**年, 60巻11号, 1131–1135.
8. Akihiko Ishitani and Shiro Koseki.
“A Model for SiN_x CVD Film Growth Mechanism by Using SiH₄ and NH₃ Source Gases”
NEC Research & Development **1992**, 33(1), 1–6 (Jan. 1992).

9. 小関史朗
「非経験的分子軌道法」
“応用物理”（応用物理学会），（技術ノート）. **1993** 年，**62** 卷 11 号，1136–1137.
10. 富岡秀雄，小関史朗，Athanasios Nicolaidis.
「新規な構造を持つカルベン，ナイトレンに関する理論計算による研究」
岡崎国立共同研究機構分子科学研究所電子計算機センター・センターレポート.
1998 年，**19** 卷，245–248.
11. 小関史朗
「ドラッグデザインにおいて再び注目を集める理論計算」
化学同人月刊“化学”，1999 年の化学，**1999** 年，**54** 卷 6 号，62–63.
12. 小関史朗，松下武司.
「有機 EL 発光材料の理論設計のために」
“応用物理”（応用物理学会），（解説）. **2009** 年，**77** 卷 4 号，308–315.
13. 小関史朗
「有機 EL ディスプレイの開発は理論的分子設計から」
月刊“化学”（化学同人），（2010 年の化学）. **2010** 年，**65** 卷 3 号，68–69.
14. 小関史朗，池田浩，八木繁幸，内藤裕義.
「大阪府立大学における分野横断型研究の展開 第 3 章 分子サイズの電気回路一分子設計・合成から評価まで」
大阪府立大学 2 1 世紀科学機構編. 2010 年，pp.26–43.
15. 小関史朗
「第 3 章 色素の理論計算」
機能性色素の科学”. 化学同人，中澄博行編. 2013 年，pp.55-65.
16. 小関史朗
「第 2 章 2. 1 光励起状態とスピン変換」
“金属錯体の量子・計算化学”，三共出版，山口兆，榊茂好，増田秀樹編著. 2014 年，pp.125-141.
17. 小関史朗
「ノート PC で行う量子化学計算」— GAMESS を用いて —
静電気学会誌 45 卷 5 号 2021 年，印刷中 (8 pages).