

## VI-2 計算物性物理グループ

教授 押山淳  
助教授 白石賢二、Mauro Boero  
講師 岡田晋  
助手 大谷実  
大学院生 7名

### 概要:

計算物性物理グループは本年度は大きくわけて2つのテーマを中心に研究を推進した。第1のテーマは新奇ナノ物質・ナノ材料の新機能・新物性のデザイン・探索を目指した研究であり、第2のテーマはナノ構造を作製するために必要なミクロスコピックな情報の獲得、すなわちナノ構造形成過程の原子レベルの解明である。

本報告書は計算物性物理研究室で行っているテーマを大きく上記2つのテーマに分類し、各々のテーマについての15年度の成果を詳細に報告する。

### [1] ナノ物質・ナノ材料の新機能・新物性探索

(1) 炭素ビーボッドのエネルギー論と電子構造 (岡田、押山、大谷) 論文[1-4]、講演[1,2]

1998年に発見された炭素ビーボッド(さやえんどう)は、フラーレン分子がチューブ内空隙に内包された新しい階層構造を持つ炭素固体相として注目を集めている(図1)。内包されるフラーレン分子種は球状の $C_{60}$ のみならず、 $C_{70}$ といった異方性のあるフラーレンまでと多様性に富んでいる。

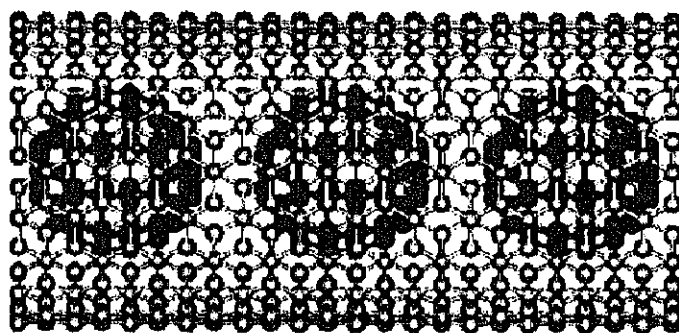


図1: 炭素ビーボッドの構造。炭素ナノチューブの中にフラーレンが内包されていることがわかる。

しかしながら、種々のフラーレンのチューブ内空隙への内包過程のエネルギー論、また、

巨大フラーレンからなるピーポッドの電子構造は明らかになっていない。ここでは  $C_{60}$  ピーポッドに対して、その電子構造とエネルギー論のチューブ- $C_{60}$  間空隙依存性について調べた。その結果、ピーポッドの電子構造ならびにエネルギー安定性は、空隙の大きさに依存する事が明らかになった。特に、半導体ピーポッドにおいてはそのバンドギャップが、空隙の僅かな変化によって、大きく変調され、最大で 0.5eV 程度のギャップ幅の違いが生じる。

次に、 $C_{70}$  ピーポッドに対して、その電子構造とエネルギー論の探索を行った。この場合、フラーレン分子が異方性を持つため、分子のチューブ内配向が、ピーポッドの電子状態とエネルギー安定性を決定する事が明らかになった。最後に、 $C_{78}$  分子を内包した半導体チューブ、 $C_{78}$  ピーポッドに対する電子状態計算から、この系の構成単位がいずれも半導体であるにもかかわらず、ピーポッドは半金属的電子構造を示す事を予言した。これらの結果は、フラーレンをチューブ内に内包させる事によりチューブの電子構造制御の可能性のある事を示した結果として注目されている。

## (2) 有限長ナノチューブによる磁性物質のデザイン (岡田、押山) 論文[5]、講演[3]

炭素ナノチューブにはその巻き方 (カイラリティ) によって多様なバンド構造や物性が出現することが本グループのメンバー (押山) によって理論的予言され、実験的にも検証されている。本研究では、zigzag 形と呼ばれるある種のカイラリティをもった炭素ナノチューブを有限の長さで切断し、その両端を水素で終端した新しい炭素ナノ物質を持つ物性を量子論に基づいて予言した。

その結果、両端を水素で終端された zigzag ナノチューブの両端の 2 配位サイトに局在した状態が出現し、端の円周にそって強磁性的な磁気秩序が発現することを示した (図 2)。

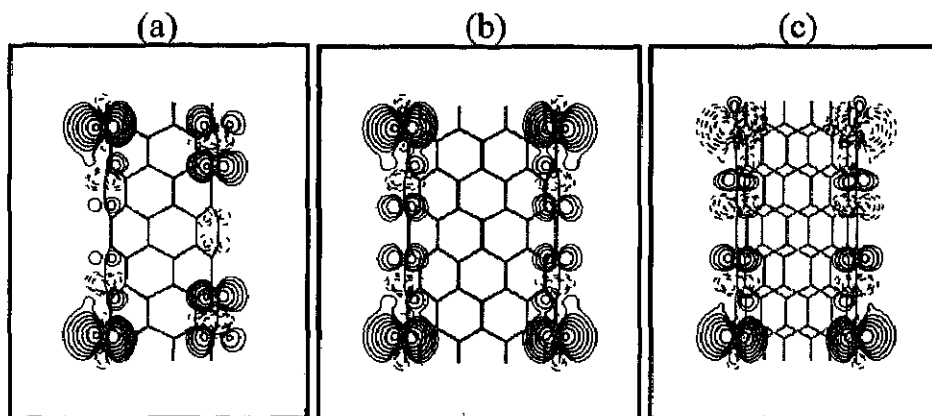


図 2 : 有限長ナノチューブにおけるスピン密度 ( $\Delta n(\mathbf{r}) = n^{\uparrow}(\mathbf{r}) - n^{\downarrow}(\mathbf{r})$ ) の等高線図。(a) (7,0), (b) (10,0), (c) (8,0) チューブ。点線、実線はそれぞれ  $\Delta n(\mathbf{r})$  の正および負の値に対応している。

さらに、両端の分極スピン間のカップリングは、チューブの直径、長さに大きく依存し

て、反強磁性、強磁性両者の振舞いを取りうる事が明らかになった。例えば、(10, 0), (7, 0) からなる有限長チューブは高スピン状態が基底状態となるのに対して、直径がわずかに異なる(8, 0)では反強磁性的なカップリングにより、全スピン=0の状態が基底状態となる。これらの、磁気秩序発現の機構はグラファイトを有限幅にした、グラファイトリボンにおける特異な端局在状態、すなわちエッジ状態の離散化によって理解できる事を明らかにした。

### (3) $C_{60}$ ポリマーの電子構造 (岡田、押山) 論文[6]、講演[4]

$C_{60}$  分子は、高圧高温下において、分子間に共有結合を形成し、互いに重合した  $C_{60}$  ポリマー相を形成する事が知られている。これまでに、実験的に合成が報告されているポリマー相はいずれも半導体的な電子構造を持つ事が、知られている。しかし、近年、 $C_{60}$  ポリマー相において強磁性的な振舞いを示す新たな相の合成が報告されており、その構造と電子物性の解明が期待されている。本研究では、金属的なポリマー相の構造候補を予言しその安定性を明らかにした(図 3)。また、その電子状態の詳細な検討から、この系が磁性  $C_{60}$  ポリマー系の候補になり得ない事を明らかにした。

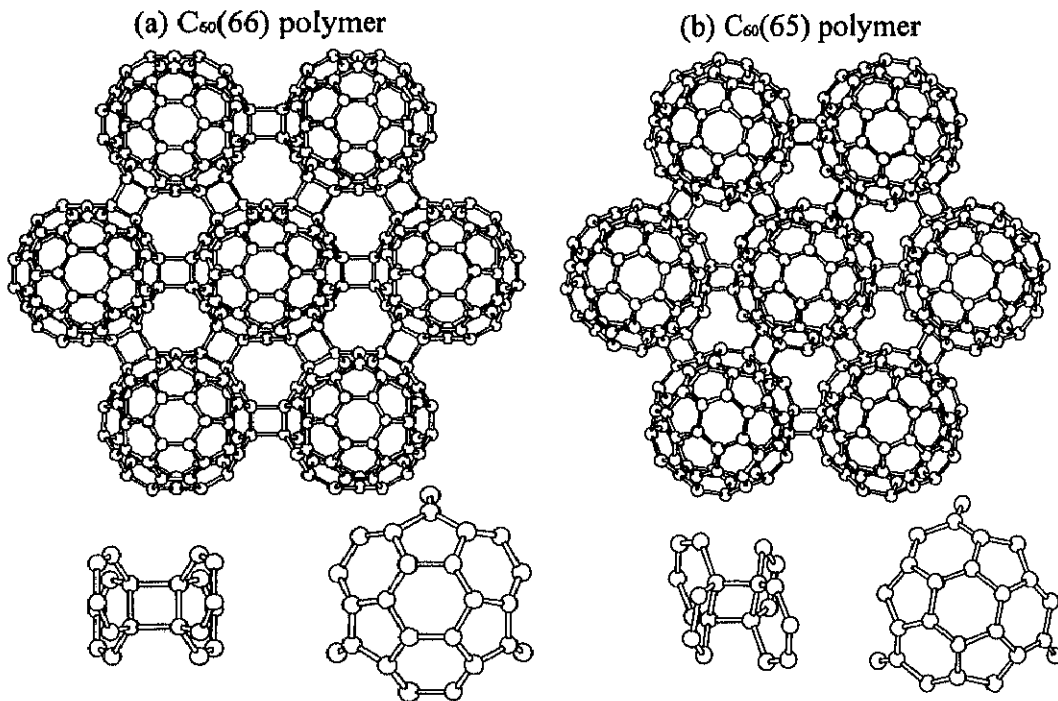


図 3 : (a)半導体電子構造を持つ、 $C_{60}$  ポリマー菱面体相。(b)金属的電子構造を持つ、 $C_{60}$  ポリマー菱面体相。

### (4) 曲率の相違が誘起する 2 層ナノチューブの特異な電子状態 (岡田、押山) 論文[7]

炭素ナノチューブはその中にフラーレンやより内径の小さいナノチューブを包含するこ

とがあることが知られているが、本研究では2層ナノチューブの特異な物性を量子論に基づいて予言した。

単層炭素ナノチューブのバンド構造はその巻き方（カイラリティ）によって、系が半導体になるか金属になるかが決定されてしまうことが知られている。したがって、半導体炭素ナノチューブの中により内径の小さい半導体ナノチューブが内包されている2層炭素ナノチューブは当然その物性も半導体的になると予想できる。ところが本研究による詳細な量子力学的な計算の結果、内外の炭素ナノチューブの曲率の差から生じる電子状態の変化によって半導体ナノチューブのみからなる2層ナノチューブが金属的になりうるという驚くべき帰結が得られた。この結果は以下のような物理的な理由によって説明することができる。曲率の大きい内側の細かいナノチューブにおいて顕著になる $\pi$ - $\sigma$ 混成は、結果として内側のナノチューブの $\pi$ バンドの $s$ 軌道成分を増加させるため、バンドを低エネルギー側にシフトさせる。その結果、外側のナノチューブの $\pi$ バンドから内側のナノチューブの $\pi$ バンドへ電荷移動を伴う軌道混成が生じる。この結果、内側のナノチューブには電子が存在し、外側のナノチューブにはホールが存在するという、ある種半金属的なバンド構造が出現する。これが2つの半導体ナノチューブから構成される2層ナノチューブが金属的になる場合もある理由である。

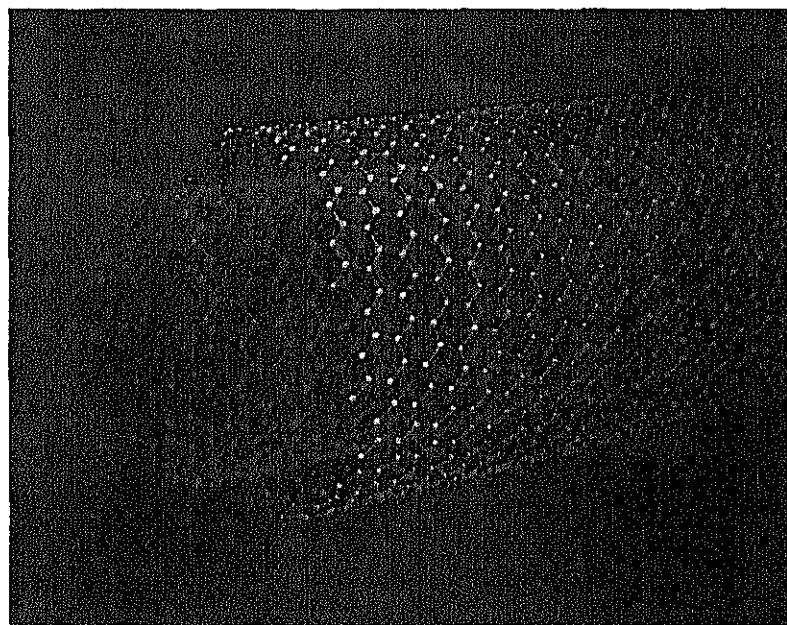


図4：2層炭素ナノチューブの構造

(5) **原子ワイヤーのコンダクタンスの第一原理計算による考察**（岡野, 白石, 押山），論文[8], 講演[5]

近年のナノ微細加工技術の発展により、人工的に Al や Au の原子ワイヤーを作製するこ

とが可能となり、コンダクタンスの量子化をはじめとする興味深いナノ伝導特性が報告されている。本研究では Al と Si の原子ワイヤーを例にとり、そのコンダクタンスを第一原理量子論に基づいて計算した。その結果、現実の Al や Si の原子ワイヤーでは通常のコンダクタンスの量子化に加え、構成原子の価電子のもつ波動関数のキャラクター（例えば、 $s$  軌道や  $p$  軌道）を反映した特異な伝導特性を示すことを明らかにした。特に Al 原子ワイヤーでは、Al 原子ワイヤーの伸張によりコンダクタンスが増加する場合があるというマクロの世界の常識では予想できない結果が量子論的解析から得られた（図 5）。これは、Al 原子ワイヤーの  $s$  軌道および、 $p$  軌道の character をもつ 2 本のバンドとフェルミ面とのエネルギー位置関係の順序が原子ワイヤーの伸張によって入れ替わることにより、effective な伝導 channel に変化が生じることから帰結される興味深いコンダクタンスの増加である。この結果は、原子ワイヤー系がバラエティに富んだ新しいナノ物性の宝庫であることを如実に物語っている。

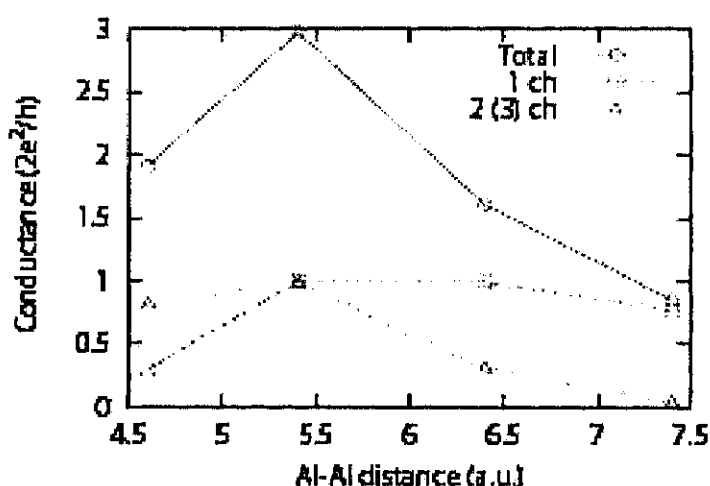


図 5 : Al 原子ワイヤーの最近接原子間距離とコンダクタンスの関係

(6) 量子ドット結合系による新しい材料設計 (田村(NTT)、白石、高柳(NTT)), 論文[9], 講演 [6]

量子ドットのサイズとバリア高さを制御することにより、各量子ドットに1つのスピンを立てることができる。このように孤立スピンをもち量子ドットを伝導電子が存在するホスト半導体の中に制御よく配列させることにより、量子ドット中のスピ間に働く交換相互作用の符号をプラスにもマイナスにも人為的に制御することができることを示した（図 6）。これは RKKY 相互作用の量子ドット版と言えるものである。さらに、我々の見積もりによると現存する半導体自己組織化を用いた量子ドット列作製技術によって、ドットサイズ、ドット間距離、ホスト半導体のキャリア数を制御することで、量子ドット間の交換相互作用の符号を人為的に制御することができることを明らかにした。今後は実験グルー

ブとの連携の上、本理論的提案の実験的検証を目指す予定である。

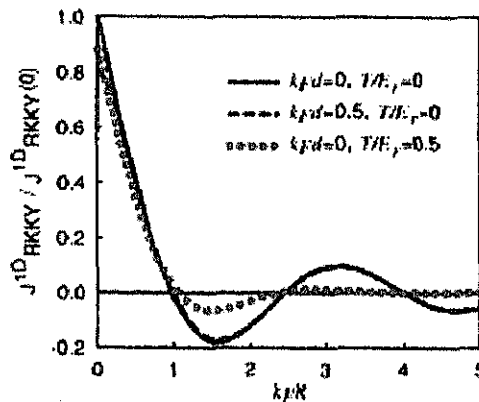


図6：ドット間 RKKY 相互作用のドット間距離依存性

## [2] ナノ物質、ナノ構造の形成過程の原子レベルでの検討

(1) シリコン酸化膜中およびシリコン/シリコン酸化膜界面における B 拡散の検討 (大谷, 白石, 押山), 論文[10-12], 講演[7-10]

シリコン酸化膜中の不純物拡散はトランジスタの基本的特性を左右する重要な現象である。中でもシリコン酸化膜中の B 不純物はトランジスタ特性に甚大な影響を与えるためその拡散機構の解明は非常に重要である。今年度はシリコン酸化膜中およびシリコン/シリコン酸化膜界面の B の拡散について第一原理計算による検討を行い、B の拡散機構に対してひとつの統一モデルを提案することを目指した。

計算は  $\alpha$  水晶構造で近似したモデルシリコン酸化膜中を BO 複合体が拡散する様子を検討した。ここでは +1 の荷電状態の拡散機構について説明する。まず拡散の最初の状況で B は 3 個の酸素原子に囲まれていて  $\text{BO}_3$  的結合を作っていることがわかる(図6)。強い BO 結合のみから形成されていることから、この構造は安定であることが予想される。最も特徴的なのは、B と結合している O 原子が 3 配位になっていることである。この 3 配位酸素の形成は、「スカスカな」 $\text{SiO}_2$  中の格子間領域にボンド形成を保ちながら

BO が挿入されたため、元来原子間距離が遠くて 3 配位結合が形成し得なかった酸素原子と B の距離が短くなったためである。BO 複合体は、B 不純物が Si の置換サイトに存在する場合には「B(Si)SiO 複合体」とみなすことができる。このように BO 或いは「BSiO 複合体」の存在によって「広い範囲にわたって」共有結合を形成することが可能になる。この共有

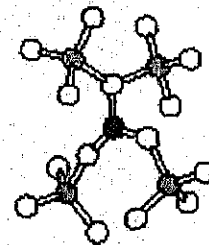


図7：格子間酸素原子と結合した、荷電状態+1のB原子の原子構造。

結合の形成が相対的に拡散のエネルギー障壁を低下させ、計算によって得られるエネルギー障壁は 2.5 eV 程度で、実験とよい一致をみる。

また、シリコン/シリコン酸化膜界面における B 不純物の拡散を検討した。その結果、界面付近に酸素原子が存在しないときには B 原子はシリコン基板側にとどまるのに対し、酸素原子が存在すると B 原子はシリコン基板から酸化膜側に拡散して B<sub>O</sub> 複合体を形成することがわかった。これまで、無酸素条件の実験が行われていたことに疑問がある状況であることを考え合わせると、本計算結果は B 拡散の制御に示唆を与えるものである。

### (2) Si 表面の C 欠陥の起源の解明(岡野, 押山), 論文[13]

Si (001) 表面には 3 つのタイプの欠陥 (A, B, C 欠陥) あることが知られている。中でも STM で原子レベルで 2 つ並んだ dark spot として観測される C 欠陥はその原因が究明されていないのが現状である。本研究では、Si (001) 表面に吸着した H<sub>2</sub>O 分子が H と OH の 2 つに解離して吸着するというモデルに基づいて C 欠陥の様々な特性が説明できることを第一原理計算によって明らかにした。H<sub>2</sub>O が解離吸着して H と OH に分かれた構造は、STM のどちらの方向のバイアスに対しても dark spot を与え、原子レベルで 2 つ並んだの dark spot を形成することを明らかにした。このように我々が提案した H<sub>2</sub>O の解離吸着モデルは Si (001) 表面の C 欠陥の特徴をよく再現することがわかった。

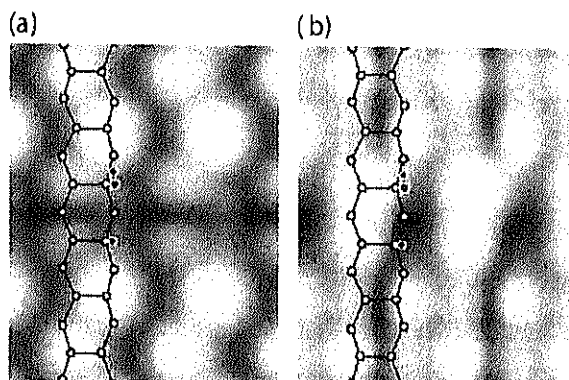


図 8 : 第一原理計算シミュレーションによって得られた H<sub>2</sub>O 起因のモデル構造に基づく STM 像。実験とのよい一致を見る。

### (3) 次世代 GaN 基板 ZrB<sub>2</sub> の第一原理計算による研究 (岩田, 白石, 押山), 論文[14-16], 講演[11]

青色発光ダイオードで知られる GaN を作製する上で最も大きな問題となっているのは、格子定数と熱膨張係数が GaN と近い基板が存在しないことである。このため、日亜化学を中心とした青色発光ダイオードも格子定数が 2.0% 近くも異なるサファイアを基板として

発光ダイオード等の開発を行っているのが現状である。今後、青色レーザーや高周波デバイスへの GaN の応用を考える上では格子定数の近い基板の利用による GaN の膜質向上は不可欠である。最近単結晶化が成功した  $ZrB_2$  は GaN と格子定数が近いだけでなく、熱膨張係数も近いため、その GaN のエピタキシャル成長基板として期待されている。

本研究では、GaN 成長に用いる  $ZrB_2$  基板の可能性とその有効利用に関する提言を目指して、第一原理計算による考察を行った。その結果、界面の 3 本の Zr-N ボンドが形成されるタイプの界面 (図 9) が  $ZrB_2$  基板の格子整合性を保持し、*p* タイプのショットキーバリア高さが低いことから、現時点では最も有望な界面構造であることが結論できる。また、界面に B-N ボンドが形成されると、は B シートをジグザグに変形させて  $ZrB_2$  基板のもつ格子整合性を壊す方向に働くことがわかった。従って界面での B-N ボンド形成を阻害することが  $ZrB_2$  基板を有効利用する非常に重要な指針である。

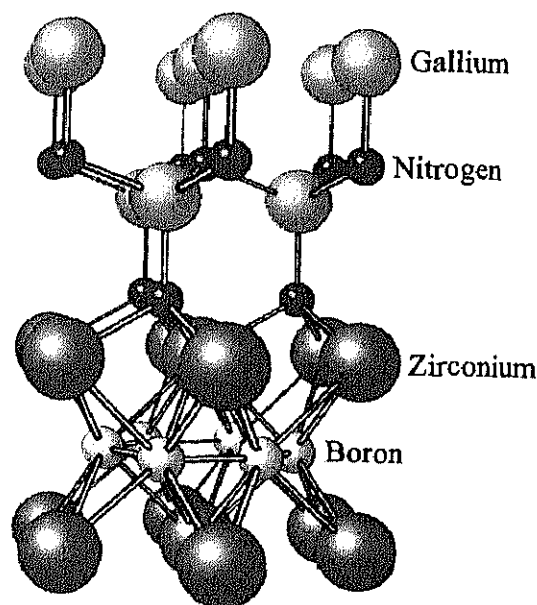


図 9 : 良好な界面特性が得られる GaN/ $ZrB_2$  界面構造

#### (4) InN の真のバンドギャップの GW 法による計算 (白石, 押山), 論文 [17, 18], 講演 [12]

InN は青色発光ダイオード作製する際に GaN に混ぜる物質として非常に重要である。しかしながら、InN 単体の物性はこれまで詳しく調べられていかなかったのが現状である。10 年程前までは、InN のバンドギャップは 2.0 eV 程度として信じられていた。ところが、最近、プラズマ支援 MBE や MOCVD によって単結晶の InN 結晶が作製されるようになってくると、0.7 eV という非常に小さなバンドギャップ値が報告されるようになってきた。もし InN のバンドギャップが 0.7 eV であるのであれば、赤外領域から近紫外領域までのあらゆる波長のレーザーが GaN と InN の混晶のみで原理的に作製できることになるため、この小さなバンドギャップ値の真偽の程は実用上非常に重要である。

本研究では、バンドギャップの計算に対して最も信頼できる手法である FLAPW 法に基づく GW 計算を行った。その結果、計算によって得られた結果は、小さいバンドギャップ値を与えることがわかった。本理論計算の結果は InN のバンドギャップが 0.7 eV 程度以下であることを強く示唆するものである。

#### (5) $SiO_2$ 中での Si 自己拡散に与える Si/ $SiO_2$ 界面の影響のマクロシミュレーションによる解析と SIMS 実験による検証 (植松 (NTT), 影島 (NTT), 深津 (慶大), 伊藤 (慶大), 白石), 論文 [19-21]



シリコン/シリコン酸化膜界面における分解反応に従って Si 拡散種が Si/SiO<sub>2</sub> 界面から放出しているというモデルが本研究グループのメンバー（白石）によって提案され、本モデルに基づく 30 年来のシリコン熱酸化現象の謎であった初期増速酸化の現象を説明できることが報告されていた。この提案の意味するところは、Si/SiO<sub>2</sub> 界面はマクロスコピックには固定された界面であってもミクロスコピックにみると原子レベルでの素過程が頻繁に起こっていることである。このような Si/SiO<sub>2</sub> 界面付近の素過程の存在は SiO<sub>2</sub> 自体のある種の基礎物性が界面付近とバルクとでは大きく異なることを意味している。

本研究では SiO<sub>2</sub> 中の Si の自己拡散に与える Si/SiO<sub>2</sub> 界面の影響についてマクロスコピックシミュレーションと SIMS 実験の両面から調べた。その結果、一定の拡散係数を仮定した場合には、界面からの距離が近いほど拡散係数は大きくなることがわかった（図 10）。そのメカニズムとして、Si/SiO<sub>2</sub> 界面で生成した SiO が SiO<sub>2</sub> 中を拡散し Si の自己拡散を促進するため、発生源である界面が近いほど SiO 濃度が高くなり促進の度合いが大きくなると考えた。これをモデル化することにより、定量的に Si 自己拡散の促進を再現することができた。さらに、計算シミュレーションから Si 自己拡散が時間依存性をもつことを予測した。実際、本時間依存性

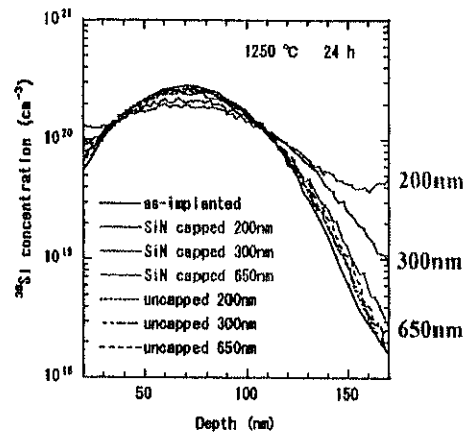


図10:シミュレーションと実験によって得られた<sup>30</sup>Siの深さ方向プロファイルと1250 °Cで24時間アニールした後のシミュレーションによって得られた<sup>28</sup>SiOのプロファイル。

は実験によって明快に確認され、SIMS 測定結果は計算から求めたプロファイルと良く一致した。本研究は初めての SiO<sub>2</sub> 中での時間に依存した自己拡散の理論的、実験的証拠である。

本研究で得られた結果は示唆的である。Si/SiO<sub>2</sub> 界面は完全に凍結されているのではなく、原子レベルの素過程が界面付近で起きているのである。本結果は工業的な見地からも重要である。今後の LSI のさらなる微細化を行うと SiO<sub>2</sub> 絶縁膜厚が原子レベルのサイズに到達するため、本研究で得られた界面での原子レベルの素過程が直接デバイス特性にまで影響を及ぼす影響がでてくるからである。

#### (6) 超臨界水と通常の水の第一原理分子動力学計算 (Boero, Parrinello, 寺倉, 池庄治, Liew) 論文[22], 講演[13]

超臨界水と通常の水の中の Hydrated electron の挙動を第一原理計算で考察した。その結果、溶媒自体の性質が液体の熱力学的状態に強く依存することを見出した。これらの結果は、光伝導スペクトルの実験をよく説明するとともに、水における光伝導の原子レベルの基礎付けを与える重要な結果である。

**(7) 0 空孔のない状態での E' センターの出現の第一原理計算による解析** (Boero, 押山, Silvestrelli) 論文[23], 講演[14, 15]

レーザー照射下での SiO<sub>2</sub> の原子構造変化の機構解明のため、自由エネルギー第一原理分子動力学法を開発し、レーザー照射による Si 結晶析出機構、スピン中心生成機構を解明した。

**(8) 0 空孔のない状態での E' センターの出現の第一原理計算による解析** (Oshikiri, Boero, Ye, Aryasetiawan, Kido) 論文[24]

可視光領域における InVO<sub>4</sub> の光触媒反応過程を第一原理計算によって検討した。その結果、電子構造は金属原子の周囲の O 原子の構造に敏感に依存することが明らかになった。この敏感な電子構造の変化がこの種の触媒のデザインに基本的な指針を与えると考えられる。

**(9) チトクローム酸化酵素の電子構造の第一原理計算による検討** (神谷, 白石, 押山) 講演[29]

生命活動の基本である呼吸から ATP を製造する上で非常に重要な役割を占めることが知られているチトクローム酸化酵素の電子構造を第一原理計算で検討した。その結果チトクローム酸化酵素が電子を捕獲していない構造 (酸化型構造) と捕獲した構造 (還元型構造) において、最低非占有分子軌道 (LUMO) のキャラクターが大きく変化することを見出した。酸化型構造においては、LUMO 軌道は 50 番目のアスパラギン酸付近に局在しているのに対し、還元型構造においては、LUMO 軌道は 50 番目アスパラギン酸と 51 番目アスパラギン酸の 2 つの軌道に跨って存在することを明らかにした。

#### < 論文 >

- [1] S. Okada, M. Otani and A. Oshiyama, "Electron-State Control of Carbon Nanotubes by Space and Encapsulated Fullerenes", *Phys. Rev. B* **67** (2003) 205411.
- [2] S. Okada, M. Otani, and A. Oshiyama, "Energetics and Electronic Structure of C<sub>70</sub>-Peapods and One-Dimensional Chains of C<sub>70</sub>" *New Journal of Physics, Carbon Nanotube Focused Issue*, **5** (2003) 122.1–122.11.
- [3] M. Otani, S. Okada and A. Oshiyama, "Energetics and Electronic Structures of One-dimensional Fullerene Chains Encapsulated in Zigzag Nanotubes" *Phys. Rev. B* **68** (2003) 125424.
- [4] L. Kavan, L. Dunsch, H. Kataura, A. Oshiyama, M. Otani and S. Okada, "Electrochemical Tuning of Electronic Structure of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> Fullerene Peapods: In-situ Vis-NIR and Raman Study" *Journal of Physical Chemistry B*, **107** (2003) 7666.
- [5] S. Okada and A. Oshiyama, "Nanoscale Ferromagnets: Carbon Nanotubes with Finite Length", *J. Phys. Soc. Jpn.* **72** (2003) 1510-1515.
- [6] S. Okada and A. Oshiyama, "Electronic Structure of Metallic Rhombohedral C<sub>60</sub> Polymers" *Phys. Rev. B* **68** (2003) 235402.
- [7] S. Okada and A. Oshiyama, "Curvature-Induced Metallization of Double-Walled Semiconducting Zigzag Carbon Nanotubes" *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 216801.
- [8] S. Okano, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Density Functional Calculations and Eigenchannel

- Analyses for Electron Transport in Al and Si Atomic Wires" *Phys. Rev. B* **69** (2004) 045401.
- [9] H. Tamura, K. Shiraishi, and H. Takayanagi, "Tunable Exchange Interaction in Quantum Dot Devices" *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, **43** (2004) L691-693.
- [10] M. Otani, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Theoretical Study on Stable Structures and Diffusion Mechanisms of B in SiO<sub>2</sub>" *Appl. Surf. Sci.* **216** (2003) 490.
- [11] M. Otani, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Charge-State Dependent Boron Diffusion in SiO<sub>2</sub>" *Physica B* **340-342** (2003) 949-952.
- [12] M. Otani, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "First-Principles Calculations of Boron-related Defects in SiO<sub>2</sub>" *Phys. Rev. B* **68** (2003) 184112.
- [13] S. Okano and A. Oshiyama, "A New Identification of C-Type Defects on Si(100) Surfaces" *Surf. Sci.* **554** (2003) 272-279.
- [14] J.-I. Iwata, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "First-Principles Studies of GaN Epilayer on Lattice Matched ZrB<sub>2</sub> Substrates", *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 2560.
- [15] J.-I. Iwata, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "First-Principles Studies of GaN Epilayer on ZrB<sub>2</sub> Substrates", *phys. stat. solid* **0** (2003) 2482-2485.
- [16] 白石 賢二, 岩田 潤一, 押山 淳 "第一原理計算による ZrB<sub>2</sub> 基板上 GaN エピタキシャル成長の理論的研究" *日本結晶成長学会誌* **30** (2003) 68-72.
- [17] M. Usuda, N. Hamada, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Band-Gaps of Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N by All-Electron GWA Calculation", *phys. stat. solid* **0** (2003) 2733-2736.
- [18] M. Usuda, N. Hamada, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Band Structures of Wurtzite InN and Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N by All-Electron GW Calculation", *Jpn. J. Appl. Phys.* **43** (2004) L407-L410.
- [19] M. Uematsu, H. Kageshima, Y. Takahashi, S. Fukatsu, K. M. Itoh, K. Shiraishi, and U. Gosele, "Modeling of Si self-diffusion in SiO<sub>2</sub>: Effect of the Si/SiO<sub>2</sub> interface including time-dependent diffusivity", *Appl. Phys. Lett.* **84**, (2004) 876-878.
- [20] S. Fukatsu, T. Takahashi, K. M. Itoh, M. Uematsu, A. Fujiwara, H. Kageshima, Y. Takahashi, K. Shiraishi, and U. Gösele, "Effect of the Si/SiO<sub>2</sub> interface on self-diffusion of Si in semiconductor-grade SiO<sub>2</sub>", *Appl. Phys. Lett.* **83**, 3897-3899 (2003).
- [21] S. Fukatsu, T. Takahashi, K.M. Itoh, M. Uematsu, A. Fujiwara, H. Kageshima, Y. Takahashi, and K. Shiraishi, "The effect of partial pressure of oxygen on self-diffusion of Si in SiO<sub>2</sub>", *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2* **42**, L1492-1494 (2003).
- [22] Mauro Boero, Michele Parrinello, Kiyoyuki Terakura, Tamio Ikeshoji, Chee Chin Liew, "First Principles Molecular Dynamics Simulations of a Hydrated Electron in Normal and Supercritical Water" *Phys. Rev. Lett.* **90**, 226403 (2003).
- [23] M. Boero, A. Oshiyama and Pier Luigi Silvestrelli, "E' Centers in a Quartz in the Absence of Oxygen Vacancies: A First-Principles Molecular Dynamics Study" *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 206401.
- [24] Mitsutake Oshikiri, Mauro Boero, Jinhua Ye, Ferdi Aryasetiawan and Giyuu Kido "Electronic Structures of Thin Films of InVO<sub>4</sub> and TiO<sub>2</sub> by First Principles Calculations" *Thin Solid Films* **445**, 168 (2003)
- [25] X.-R. Chen, A. Oshiyama and S. Okada, "First-Principles Calculation for Scanning-Tunneling-Microscopy Images of Kr Adsorbed on a Monolayer Graphite Surface", *Phys. Rev. B* **67** (2003) 033408.
- [26] Kimura T, Tamura H, Kuroki K, Shiraishi K, Takayanagi H, and Arita R, "Quantum wire networks for superconducting quantum-dot superlattices", *Physica B*, **329**, (2003) 1395-1396.
- [27] M. Nagase, S. Horiguchi, K. Shiraishi, A. Fujiwara, and Y. Takahashi, Single-electron devices formed by thermal oxidation", *J. Electroanal. Chem.* **559**, (2003) 19-23.
- [28] N. Miyagishima, T. Shinoda, K. Suzuki, T. Kaneko, K. Takeda, K. Shiraishi, and T. Ito, "Atomic and electronic structure of misfit dislocations in GaSb/GaAs(001)", *Physica B*, **340**, (2003) 1009-1012.

< 学位論文 (修士) >

- [1] 福士輝「オーダーN タイトバインディング法によるシリコン結晶中の複原子空孔の生成機構の解明」(2004) 3月
- [2] 小林裕一郎「タイトバインディング法による Si(001)表面・ステップの反射率差スペクトルの理論解析」(2004) 3月

<講演>

- [1] M. Otani, S. Okada, and A. Oshiyama, "Electronic structures of metallofullerene peapods" APS March meeting (March 2004 Montreal, Canada)
- [2] 岡田 晋, 大谷実, 押山淳, "C<sub>70</sub>-peapod の電子状態と安定性"日本物理学会 2003 年秋の分科会、(岡山市、岡山大学、2003 年9月)
- [3] 岡田 晋, 押山 淳, "有限長ナノチューブの電子状態: フラーレン、ナノチューブの境界", 第26回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (岡崎市、岡崎国立共同研究機構, 2004 年1月)
- [4] 岡田 晋, 宮本良之, 斎藤峯夫, 斎藤晋, 押山 淳, "単純立方晶 C<sub>60</sub> の電子状態"第25回フラーレン総合シンポジウム、(淡路、淡路夢舞台、2003 年7月)
- [5] 岡野真也, 白石賢二, 押山淳, "Al および Si 原子鎖のコンダクタンス計算" 日本物理学会 2003 年秋の分科会、(岡山市、岡山大学、2003 年9月)
- [6] H. Tamura, K. Shiraishi, and H. Takayanagi, "Toward Tunable Magnetism in Quantum Dot Devices", International Symposium on Mesoscopic Superconductivity, and Spintronics 2004 (March 2004, Atsugi, Japan)
- [7] M. Otani, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Charge-state dependent boron diffusion in SiO<sub>2</sub>" The 22nd International Conference on Defects in Semiconductors (July 2003, Aarhus, Denmark)
- [8] M. Otani, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "First-principle calculations for B diffusion in SiO<sub>2</sub>" The 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (November 2003, Tsukuba, Japan)
- [9] M. Otani, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Atomistic Mechanism of B Diffusion in Gate Si-Oxides", 2003 MRS Fall Meeting (December, 2003, Boston, USA)
- [10] 大谷 実, 白石 賢二, 押山 淳, "SiO<sub>2</sub> 中の B 拡散の第一原理計算" 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス研究会「ゲート絶縁膜, 容量膜, 機能膜およびメモリ技術」合同開催: 応用物理学会 シリコンテクノロジー分科会 研究集会「極薄ゲート絶縁膜・シリコン界面の評価技術・解析技術」(広島市、広島大学、2003 年6月)
- [11] J. -I. Iwata, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "First-principles studies of GaN epitaxy on ZrB<sub>2</sub> substrates", 5<sup>th</sup> International Conference on Nitride Semiconductor (May, 2003, Nara, Japan).
- [12] M. Usuda, N. Hamada, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Band-Gaps of Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>N by All-Electron GWA Calculation", 5<sup>th</sup> International Conference on Nitride Semiconductor (May, 2003, Nara, Japan).
- [13] (招待講演) M. Boero, "Hydrogen bond driven chemical reactions: a first principles molecular dynamics simulation of Beckmann rearrangement in supercritical water" Joint Meeting Int.l Conf. On Molecular Simulations and Computational Science Workshop 2004 ICMS-CSW2004, (Jun, 2004, Tsukuba, Japan)
- [14] (招待講演) M. Boero, "First principles molecular dynamics with hot electrons: simulation of pulsed-laser irradiated SiO<sub>2</sub> α-quartz" The 6<sup>th</sup> Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, (Nov. 2003, Tsukuba, Japan).
- [15] M. Boero, "First Principles Molecular Dynamics with Hot Electrons: simulation of pulsed-laser-irradiated SiO<sub>2</sub> α-quartz" Joint Meeting of the 2<sup>nd</sup> Int.l Symp. On Future-Oriented Interdisciplinary Materials Science and 1<sup>st</sup> Int.l Symp. on Nanoscience, (Nov. 2003, Tsukuba, Japan).
- [16] (招待講演) A. Oshiyama, "Prediction of New Properties of Nanoscale Materials" FIMS/ ITNs-2003 (2nd International Symposium on Future-Oriented Interdisciplinary Materials Science / 1<sup>st</sup> International Tsukuba Symposium on Nanoscience) (Tsukuba,

- November 2003).
- [17] S. Okada, Y. Enomoto, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "New Electron states on Semiconductor and Metal Surfaces", The 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (November 2003, Tsukuba, Japan)
  - [18] Susumu Okada, Kenji Shiraishi, and Atsushi Oshiyama, "Stability of  $\pi$ -bonded Chains on Nano-meter Scale Clean Si(111) Surfaces" 7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (November, 2003, Nara, Japan)
  - [19] S. Okada, A. Oshiyama, H. Aoki, and R. Arita, "Electronic Structure of Chain of Fullerene Shuttlecocks" APS March meeting (March 2004 Montreal, Canada)
  - [20] H. Kageshima, T. Akiyama, K. Akagi, M. Uematsu, K. Shiraishi, and S. Tsuneyuki, "First-principles study of behavior of excess Si atoms around ultra thin Si-Oxide/Si interfaces", 2003 MRS Fall Meeting (December, 2003, Boston, USA)
  - [21] H. Kageshima, T. Akiyama, K. Akagi, M. Uematsu, K. Shiraishi, and S. Tsuneyuki, "Stability of excess Si defects near SiO<sub>2</sub>/Si(100) interfaces", 7th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (November 2003, Nara, Japan)
  - [22] K. Shiraishi, M. Saito, and T. Ohno, "Charge State Dependent Point Defect in High- $k$  Dielectric HfO<sub>2</sub>", International Workshop on Gate Insulator (IWGI2003), (November, 2003, Tokyo)
  - [23] K. Shiraishi, H. Tamura, and H. Takayanagi, "Design of New Properties and Functions Based on Quantum Wire Networks", The International Symposium on Functional Semiconductor Nanosystems (November 2003, Atsugi, Japan)
  - [24] 岡田 晋, 榎本 雄介, 白石 賢二, 押山 淳, "金属, 半導体表面における非局在表面状態" 日本物理学会 2003 年秋の分科会, (岡山市, 岡山大学, 2003 年 9 月)
  - [25](招待講演) 白石賢二, 山田啓作, 齋藤峯雄, 大野隆央, 川原孝昭, 鳥居和功, 三橋理一郎, 武藤彰良, 堀内淳, 伊藤浩之, 北島洋, 有門経敏, "High- $k$  絶縁膜中 HfO<sub>2</sub> 中の欠陥の原子構造と電子構造—第一原理計算による検討—", 応用物理学会春季講演会シンポジウム「High- $k$  ゲート絶縁膜—現状と課題」(八王子市, 東京工科大学, 2004 年 3 月)
  - [26] 影島博之, 植松真司, 秋山 亨, 赤木和人, 常行真司, 白石賢二, "シリコン酸化膜/シリコン界面における界面放出 Si の安定性(II)", 応用物理学会春季講演 (八王子市, 東京工科大学, 2004 年 3 月)
  - [27] 小林裕一郎, 白石賢二, 押山 淳, "Tight-binding 法による Si(001)表面・ステップの反射率差スペクトルのスラブモデル層厚依存性" 応用物理学会春季講演 (八王子市, 東京工科大学, 2004 年 3 月)
  - [28] 福士輝, 押山淳, "シリコン結晶中の複原子空孔の生成メカニズム: 0(N)タイトバインディング法によるシミュレーション", 日本物理学会 2004 年 第 59 回年次大会, (福岡市, 九州大学), 2004 年 3 月
  - [29] 神谷克政, 白石賢二, 押山淳, "密度汎関数理論に基づくポリグリシンおよびチトクロム酸化酵素の電子構造", 日本物理学会 2004 年 第 59 回年次大会, (福岡市, 九州大学), 2004 年 3 月
  - [30] N. Miyagishima, T. Shinoda, K. Suzuki, T. Kaneko, K. Takeda, K. Shirahsi, and T. Ito, "Atomic and electronic structure of misfit dislocations in GaSb/GaAs (001)", 22nd International Conference on Defects in Semiconductors (July 2003, Aarhus, Denmark)
  - [31] K. Shiraishi, H. Tamura, and H. Takayanagi, "Design of New Properties and Functions Based on Quantum Wire Networks", The International Symposium on Functional Semiconductor Nanosystems (FSNS2003), (Nov. 2003, Atsugi, Japan)