

## VII-2 計算物性物理グループ

教授	押山淳
助教授	白石賢二、Boero Mauro、舘野賢、岡田晋
講師	重田育照
助手	Berber Savas、Park Jung Mee
博士研究員	岩田潤一、内田和之、神谷克政、藤本義隆
大学院生	4名

### 概要:

計算物性物理グループは本年度は大きくわけて3つの大きなテーマを中心に研究を推進した。第1のテーマは新しい計算手法の開発、第2のテーマは原子・電子レベルのアプローチにバイオ物質の研究、第3のテーマはナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンスの研究である。

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3つのテーマに分類し、各々のテーマについての18年度の成果を詳細に報告する。

### [1] 新しい計算手法の開発

#### 1) 超高速並列計算機 PACS-CS 上での実空間密度汎関数法プログラムの開発とその応用 [講演 40]

実空間に格子を導入し、全ての量を格子点上で計算する RSDFT は、FFT などの重い通信タスクが生じないこと、非周期系・周期系などの任意の境界条件を計算セルに設定できること、などから次世代並列計算機での主要シミュレーションツールになると期待されている。17年度にほぼ完成したバージョンを18年度は、並列計算機 PACS-CS (筑波大学計算科学研究センター: 2560 nodes, 1 node = 5.6 GFLOPS) 上でチューニング、洗練化を行った。主なる新規開発点は、①大規模計算で重要な Gram-Schmidt 直交化計算のアルゴリズム変更を行い、[行列 x 行列] 計算の形に帰着させ、それによりこの部分 (order  $N^3$  の負荷) の実行速度を飛躍的に向上させ、256-node 並列計算において node ピーク性能の 64% の実効性能を達成した点、②部分空間対角化に新たなアルゴリズムである Divide and Conquer 法を採用し、同じく 71% の実効性能を達成した点、があげられる。

この RSDFT を用いて、半導体テクノロジーで重要な、シリコン中の欠陥構造の同定計算、圧縮された Ge 薄膜での 90 度転位形成機構の解明が進んでいる。

## 2) プロトンの量子効果を記述する計算手法の開発 [論文 31]

生体内分子で最も重要な役割を果たす電子移動反応とプロトン移動反応を解析するため、第一原理計算動力学法に基づく手法論を開発した。特に、プロトン移動の量子効果を記述する為の簡便な方法として、量子キュムラント動力学法という新規的な理論を提唱し、分子内水素移動反応などに応用している。

## [2] 原子・電子レベルのアプローチによるバイオ物質の研究

### 1) シトクローム酸化酵素でのプロトン移動 [講演 15, 31, 47]

シトクローム *c* 酸化酵素はミトコンドリア膜蛋白質であり、呼吸作用の最終段階で、ATP 合成のためのプロトン移動を担っている。昨年度、ペプチド結合を横切るケト・エノール互変異性化によるプロトン移動の機構を提唱した。本年度は詳細な CPMD・MeD 計算を実行し、隣り合うペプチド結合部分の協奏的プロトン輸送が生じており、その自由エネルギー障壁[図1]は実験と良い一致を示すことがわかった。

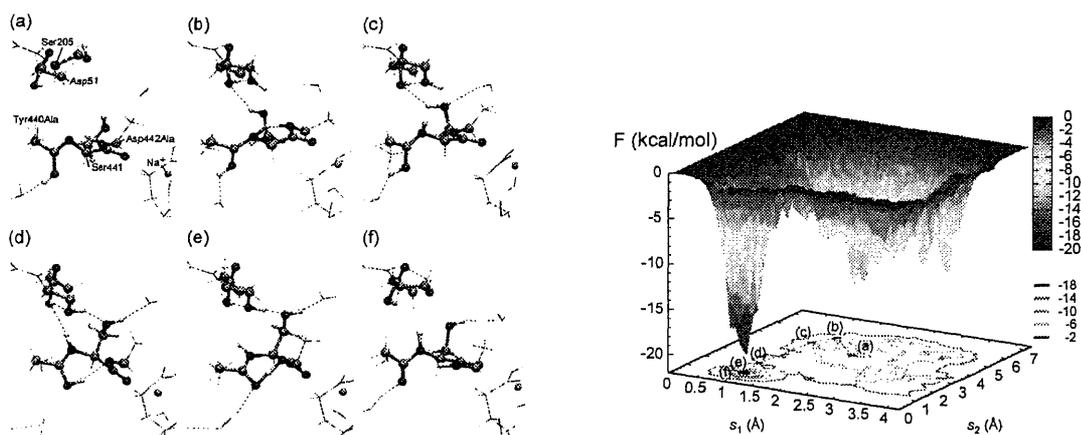


図1: シトクローム *c* 酸化酵素でのペプチド結合を横切るプロトン移動。左図は反応機構。Tyr440 と Ser441 の間の下側のプロトン(白丸で表示)が周囲の酸素(赤丸)、炭素(緑丸)、窒素(青丸)と反応し、(a)-(f)の過程を経て、上側に移動している。右図は(a)-(f)過程に対応した自由エネルギー変化。

### 2) HSC(Heat Shock Cognate)70 蛋白質での ATP 分解反応 [論文 8]

HSC70 は様々なストレスから細胞を保護する蛋白質の一群であり、ストレスに反応して ATP の分解が生じ、その形状を変化させることにより、細胞保護の機能を発揮する。しかし、その ATP 分解機構については謎であった。今回 CPMD・MeD 計算により、この分解が周囲の水分子、1 価および2価の金属イオンが参加した協奏的加水分解反応であることが判明し、計算された自由エネルギーは実験と良く一致している。尚、この計算では、CPMD・MeDに加えて、QM/MM ハイブリッド手法が新たに導入され、50730 原子群のシミュレーションが実行された。

- 3) タンパク質のドッキングの計算シミュレーションによるアプローチ  
タンパク質のドッキングはこれまで、経験をベースにした現象論的なものが多かったが、ドッキングの基礎となる相互作用である疎水性結合、親水性結合を電子・原子レベルで取り扱うことにより、信頼できるドッキングシミュレーションの基盤となる手法を構築した。さらに、この手法をチトクロームcとチトクローム酸化酵素のドッキング等に適用した。
- 4) チトクローム酸化酵素中に含まれる銅とその近傍の電子状態の研究 [修士論文 1]  
チトクローム酸化酵素中に含まれる銅とその近傍の電子状態を第一原理計算によって解明した。通常、酸化型と還元型の電子数の違いは銅の原子の価数変化によって起こると考えられており、 $\text{Cu}^+$  から  $\text{Cu}^{2+}$  に変化すると表現される。しかし、第一原理計算で詳細に銅近傍の電子構造を詳細に検討した結果、電子数変化に対して銅原子には正味0.1 個の電子しか入らず、酸化還元状態を単純に銅原子の価数変化では表現できないということが明らかとなった。本研究は永田の修士論文としてまとめられた。

### [3] ナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び新奇ナノ物質のデザイン

- 1) ショットキー障壁形成での界面選択的軌道混成の役割 [講演 17, 32]  
金属・半導体(絶縁体)界面でのショットキー障壁は、金属の仕事関数と半導体(絶縁体)の電子親和力の差で第一義的に与えられ、そこに界面での電氣的二重層の効果が現れる、と考えられてきた。しかし最近の金属/高誘電率膜界面においては、従来の考え方では説明できない障壁が観測されている。これは高絶縁率膜  $\text{HfO}_2$  と金属の間の、それぞれの原子間の選択的な軌道混成を考えると見事に説明できることを示した。さらに本概念は金属/炭素ナノチューブ界面にも適用すべきであることを理論的に予言した。
- 2) ナノ界面反応の電子論 [論文 24、講演 16, 17, 32]  
MOS 半導体デバイスのように、金属/絶縁体/半導体のような3種類の物質が積層構造を作っており、中間に存在する絶縁体の膜厚がナノスケールになってくると、二つの界面を別個に考えるわけにはいかないことがわかってきた。すなわち、半導体/絶縁体界面で原子反応がおこり、欠陥が生じ、比較的高い位置に欠陥に起因する電子準位が存在すると、その電子準位から金属のフェルミ準位に電子が流れ込み、絶縁体/金属界面のショットキー障壁が固定されることが DFT 計算等を基礎とする考察によって予測された。この新しい概念は  $\text{TiN}/\text{HfO}_2/\text{Si}$  というナノ界面のショットキーバリア高さの光電子分光測定により、実験的にも実証された。
- 3) 炭素ナノチューブ中トポロジカル欠陥による磁性 [論文 1]  
炭素ナノチューブの6員環ネットワーク中に、5員環、8員環からなるトポロジカ

ルな線状欠陥を導入すると、強磁性的な基底状態が発現する事が示された（図2）。この強磁性状態は、トポロジカル欠陥近傍に広がった波動関数のバランスにより形成される、平坦なバンドが電子充填される事によって生じるものであり、通常の遷移金属磁性、有機導体磁性とは異なる、非局在電子による磁性である。

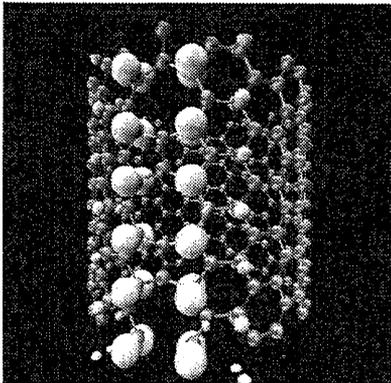


図2：5員環、8員環から成るネットワーク・トポロジーを持つ炭素ナノチューブにおけるスピン密度雲。線状トポロジカル欠陥に沿ってスピンの強磁性的に偏極している。

#### 4) 二重壁炭素ナノチューブのキャパシタンス [講演 36, 46]

次世代半導体テクノロジーにおいては、ナノ構造での物理量の同定が重要である。キャパシタンスはその一例である。18年度において、密度汎関数理論に基づくキャパシタンス計算手法を定式化し、二重炭素ナノチューブでのキャパシタンスに応用した。その結果、古典的キャパシタンス値からの大きな増加とキャパシタンスの顕著なバイアス電圧依存性という二つの重要な量子効果を見出した。

### <論文>

- 1) S. Okada, K. Nakada, K. Kuwabara, K. Daigoku, and T. Kawai, "Ferromagnetic Spin Ordering on Carbon Nanotubes with Topological Line Defects" *Phys. Rev. B* **74**, art. no. 121412(R) (2006).
- 2) S. Okada, K. Nakada, and T. Kawai, "Orientation Dependence of Magnetic Moment of Carbon Nanotubes with Topological Line Defects" *Appl. Phys. Lett.* **90**, art. no. 103120 (2007).
- 3) S. Okada, "Radial-Breathing Mode Frequencies for Nanotubes Encapsulating Fullerenes", *Chem. Phys. Lett.* **438**, 59 (2007).
- 4) S. Hino, M. Kato, D. Yoshimura, H. Moribe, H. Umemoto, Y. Ito, T. Sugai, H. Shinohara, M. Otani, Y. Yoshimoto and S. Okada, "Effect of Encapsulated Atoms on the Electronic Structure of the Fullerene cage: A Case Study on  $\text{La}_2@C_{78}$  and  $\text{Ti}_2C_2@C_{78}$  via Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy", *Phys. Rev. B* **75**, 125418 (2007).
- 5) M. Oshikiri and M. Boero, "Water Molecule Adsorption Properties on the  $\text{BiVO}_4$  (100)

- Surface”, *J. Phys. Chem. B* **110**, 9188 (2006).
- 6) F. L. Gervasio, M. Boero and M. Parrinello, “Double Proton Coupled Charge Transfer in DNA”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **45**, 5606 (2006).
  - 7) L. M. Ramaniah and M. Boero, “Structural, Electronic, and Optical Properties of the Diindenoperylene Molecule from First-Principles Density Functional Theory”, *Phys. Rev. A* **74**, 042505 (2006)
  - 8) M. Boero, T. Ikeda, E. Ito and K. Terakura, “Hsc70 ATPase: An Insight into Water Dissociation and Joint Catalytic Role of  $K^+$  and  $Mg^{2+}$  Metal Cations in the Hydrolysis Reaction”, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 16798 (2006).
  - 9) M. Boero, F. L. Gervasio and M. Parrinello, “Charge Localisation and Hopping in DNA”, *Mol. Simul.* **33**, 57 (2007).
  - 10) T. Ikeda, M. Boero and K. Terakura, “Hydration of Alkali Ions from First Principles Molecular Dynamics Revisited”, *J. Chem. Phys.* **126**, 034501 (2007).
  - 11) Y. Akasaka, G. Nakamura, K. Shiraishi, N. Umezawa, K. Yamabe, O. Ogawa, M. Lee, T. Amiaka, T. Kasuya, H. Watanabe, T. Chikyow, F. Ootsuka, Y. Nara, and K. Nakamura, “Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning”, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, **45**, L1289-L1292, (2006).
  - 12) A. Uedono, T. Naito, T. Otsuka, K. Shiraishi, K. Yamabe, S. Miyazaki, H. Watanabe, N. Umezawa, T. Chikyow, Y. Akasaka, S. Kamiyama, Y. Nara, and Yamada, “Introduction of defects into HfO<sub>2</sub> gate dielectrics by metal-gate deposition studied using x-ray photoelectron spectroscopy and positron annihilation”, *J. Appl. Phys.* **100**, Art. No. 064501 (2006).
  - 13) K. Shiraishi, K. Yamada, K. Torii, Y. Akasaka, K. Nakajima, M. Konno, T. Chikyow, H. Kitajima, T. Arikado and Y. Nara, “Oxygen-vacancy-induced threshold voltage shifts in Hf-related high-k gate stacks”, *Thin Solid Films*, **508**, 305-310 (2006).
  - 14) M. Uematsu, H. Kageshima, S. Fukatsu, K.M. Itoh, K. Shiraishi, M. Otani and A. Oshiyama, “Enhanced Si and B diffusion in semiconductor-grade SiO<sub>2</sub> and the effect of strain on diffusion”, *Thin Solid Films*, **508**, 270-275 (2006)
  - 15) JI, Iwata, A. Oshiyama, and K. Shiraishi, “Real-space density-functional calculations for Si divacancies with large size supercell models”, *PHYSICA B-CONDENSED MATTER*, **376**, 196-199 (2006).
  - 16) N. Umezawa, K. Shiraishi, T. Ohno, M. Boero, H. Watanabe, T. Chikyow, K. Torii, K. Yamabe, K. Yamada, and Y. Nara, “Unique behavior of F-centers in high-k Hf-based oxides”, *PHYSICA B-CONDENSED MATTER*, **376**, 392-394 (2006)
  - 17) H. Kageshima, M. Uematsu, K. Akagi, S. Tsuneyuki, T. Akiyama and K. Shiraishi, “Mechanism of oxide deformation during silicon thermal oxidation”, *PHYSICA B-CONDENSED MATTER*, **376**, 407-410 (2006)

- 18) K. Shiraishi, K. Torii, Y. Akasaka, T. Nakayama, T. Nakaoka, S. Miyazaki, T. Chikyow, K. Yamada, and Yasuo Nara, "THEORETICAL STUDIES ON THE PHYSICAL PROPERTIES OF POLY-SI AND METAL GATES/HfO<sub>2</sub> RELATED HIGH-K DIELECTRICS INTERFACES", ECS Transactions, 1 (5) 479-493 (2006).
- 19) K. Higuchi, T. Naito, A. Uedono, K. Shiraishi, K. Torii, M. Boero, T. Chikyow, S. Yamasaki, K. Yamada, R. Hasunuma, and K. Yamabe, "ASYMMETRIC DISTRIBUTION OF CHARGE TRAP IN HfO<sub>2</sub>-BASED HIGH-K GATE DIELECTRICS", ECS Transactions, 1 (5) 777-788 (2006).
- 20) K. Shiraishi, T. Nakayama, Y. Akasaka, S. Miyazaki, T. Nakaoka, K. Ohmori, P. Ahmet, K. Torii, H. Watanabe, T. Chikyow, Y. Nara, H. Iwai, and K. Yamada, "New Theory of Effective Work Functions at Metal/High-k Dielectric Interfaces -Application to Metal/High-k HfO<sub>2</sub> And La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Dielectric Interfaces -", ECS Transactions, 2 (1) 25-40 (2006).
- 21) N. Umezawa, K. Shiraishi, H. Watanabe, K. Torii, Y. Akasaka, S. Inumiya, M. Boero, A. Uedono, S. Miyazaki, T. Ohno, T. Chikyow, K. Yamabe, Y. Nara, and K. Yamada, "Extensive Studies for Effects of Nitrogen Incorporation into Hf-based High-*k* Gate Dielectrics", ECS Transactions, 2 (1) 63-78 (2006).
- 22) T. Nakayama, K. Shiraishi, S. Miyazaki, Y. Akasaka, T. Nakaoka, K. Torii, A. Ohta, P. Ahmet, K. Ohmori, N. Umezawa, H. Watanabe, T. Chikyow, Y. Nara, H. Iwai, and K. Yamada, "Physics of Metal/High-k Interfaces", ECS Transactions, 3 (3) 129-140 (2006).
- 23) K. Ohmori, P. Ahmet, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, Y. Akasaka, N. Umezawa, K. Nakajima, M. Yoshitake, T. Nakayama, K.-S. Chang, K. Kakushima, Y. Nara, M.L. Green, H. Iwai, K. Yamada, and T. Chikyow, "Wide Controllability of Flatband Voltage in La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Gate Stack Structures – Remarkable Advantages of La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> over HfO<sub>2</sub> –", ECS Transactions, 3 (3) 351-362 (2006)
- 24) Y. Akasaka, K. Shiraishi, N. Umezawa, O. Ogawa, T. Kasuya, T. Chikyow, F. Ootsuka, Y. Nara and K. Nakamura, "A Novel Remote Reactive Sink Layer Technique for the Control of N and O Concentrations in Metal/High-k Gate Stacks", Technical Digest of 2006 Symposium on VLSI Tech., Honolulu, USA, p.206-207, (2006).
- 25) Z. Ming, K. Nakajima, M. Suzuki, K. Kimura, M. Uematsu, K. Torii, S. Kamiyama, Y. Nara, H. Watanabe, K. Shiraishi, T. Chikyow, K. Yamada, "High-resolution RBS analysis of Si-dielectrics interfaces", Extend Abstract of the 2006 International Conference on Solid State Devices and Materials, Yokohama, Japan, p.380-381, (2006).
- 26) H. Yamaguchi, M. Tateno, and K. Yamasaki, "Solution structure and DNA-binding mode of the matrix attachment region-binding domain of the transcription factor SATB1 that regulates the T-cell maturation" J. Biol. Chem., **281**, 5319 (2006).
- 27) Y. Shigeta, K. Hirao, S. Hirata, "Exact-exchange time-dependent density-functional theory

- with the frequency-dependent kernel ", Physical Review A 73, 010502, (2006).
- 28) T. Matsui, Y. Shigeta, K. Hirao, "Influence of Pt complex binding on the guanine-cytosine pair: A theoretical study ", Chemical Physics Letters 423, 331-334, (2006).
  - 29) I. Birth, J. Manz, Y. Shigeta, K. Yagi, " Unidirectional Electronic Ring Current Driven by a Few Cycle Circularly Polarized Laser Pulse: Quantum Model Simulations for Mg-Porphyrin", Journal of American Chemical Society 128, 7043-7049, (2006).
  - 30) H. Miyachi, Y. Shigeta, K. Hirao, "Real Time Mixed Quantum-Classical Dynamics with ab initio Quartic Force Field: Application to Molecular Vibrational Frequency Analysis", Chemical Physics Letters 432, 585-590(2006).
  - 31) Y. Shigeta, H. Miyachi, K. Hirao, "Quantum qumulant dynamics: general theory", Journal of Chemical Physics 125, 244102(2006).
  - 32) T. Matsui, Y. Shigeta, K. Hirao, "Multiple proton-transfer reaction in DNA base pairs by coordination of Pt complex", Journal of Physical Chemistry B 111, 1176-1181 (2007).

#### <講演>

- 1) <招待講演>K. Shiraishi, T. Nakayama, Y. Akasaka, S. Miyazaki, T. Nakaoka, K. Ohmori, P. Ahmet, K. Torii, H. Watanabe, T. Chikyow, Y.Nara, H. Iwai, and K. Yamada, "A new theory of the Schottky barrier heights at metal/metal oxide interfaces based on the first principles calculations", Computational Science Workshop, Tsukuba, Japan, (April 17-19, 2006).
- 2) <招待講演>Y. Akasaka, K. Miyagawa, T. Sasaki, K. Shiraishi, S. Kamiyama, O. Ogawa, F. Ootsuka, and Y. Nara, "Impact of Electrode-side Chemical Structure on Electron Mobility in Metal/HfO<sub>2</sub> MISFETs", Symposium on Gate Stack Scaling - Materials Selection, Role of Interfaces, and Reliability Implications in 2006 MRS Spring Meeting, San Francisco, CA, USA, (April 17 - 21, 2006).
- 3) <招待講演>A. Uedono, K. Ikeuchi, T. Otsuka, K. Shiraishi, K. Yamabe, S. Miyazaki, N. Umezawa, A. Hamid, T. Chikyow, T. Ohdaira, M. Muramatsu, R. Suzuki, S. Inumiya, S. Kamiyama, Y. Akasaka, Y. Nara and K. Yamada, "Characterization of Hf-Based High-k Gate Dielectrics Using Monoenergetic Positron Beams", Symposium on Gate Stack Scaling - Materials Selection, Role of Interfaces, and Reliability Implications in 2006 MRS Spring Meeting, San Francisco, CA, USA, (April 17 - 21, 2006).
- 4) <招待講演>K. Shiraishi, T. Nakayama, Y. Akasaka, S. Miyazaki, T. Nakaoka, K. Ohmori, P. Ahmet, K. Torii, H. Watanabe, T. Chikyow, Y. Nara, 1H. Iwai, and K. Yamada, "New theory of effective workfunctions at metal/high-k dielectric

interfaces -Application to metal/high-k HfO<sub>2</sub> and La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dielectric interfaces-", SECOND INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON DIELECTRICS FOR NANOSYSTEMS: MATERIALS SCIENCE, PROCESSING, RELIABILITY, AND MANUFACTURING at the 209th Meeting of Electrochemical Society - Denver, Colorado, USA (May 7-12, 2006).

- 5) <招待講演>N. Umezawa, K. Shiraishi, H. Watanabe, K. Torii, Y. Akasaka, S. Inumiya, M. Boero, A. Uedono, S. Miyazaki, T. Ohno, T. Chikyow, K. Yamabe, Y. Nara, K. Yamada, "Extensive Studies for the Effect of Nitrogen Incorporation into Hf-based High-k Gate Dielectrics", SECOND INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON DIELECTRICS FOR NANOSYSTEMS: MATERIALS SCIENCE, PROCESSING, RELIABILITY, AND MANUFACTURING at the 209th Meeting of Electrochemical Society - Denver, Colorado, USA (May 7-12, 2006).
- 6) <招待講演>K. Shiraishi, K. Kamiya, S. Yamamoto, M. Boero, M. Tateno and A. Oshiyama, "Theoretical Approaches towards Elucidation of the Cytochrome *c* Oxidase Reaction Mechanism", International Workshop on Reaction Mechanisms of Energy-Transducing Metalloenzymes, Kamigohri, Akoh, Hyogo, (June 17, 2006).
- 7) <基調講演> A. Uedono, T. Naito, T. Otsuka, K. Ito, K. Shiraishi, K. Yamabe, S. Miyazaki, H. Watanabe, N. Umezawa, A. Hamid, T. Chikyow, T. Ohdaira, R. Suzuki, S. Ishibashi, S. Inumiya, S. Kamiyama, Y. Akasaka, Y. Nara, and K. Yamada, "high-k gate dielectrics by means of positron annihilation", The 14th International Conference on Positron Annihilation, Ontario, Canada, (July 23-28, 2006).
- 8) <招待講演>K. Shiraishi, H. Takeuchi, Y. Akasaka, H. Watanabe, N. Umezawa, T. Chikyow, Y. Nara, T.-J. King Liu, and K. Yamada, "Theory of Fermi Level Pinning of High-k Dielectrics", 2006 International Conference on Simulation of Semiconductor Process and Devices, Monterey, CA, USA (September 6-8, 2006).
- 9) <招待講演> Z. Ming, K. Nakajima, M. Suzuki, K. Kimura, M. Uematsu, K. Torii, S. Kamiyama, Y. Nara, H. Watanabe, K. Shiraishi, T. Chikyow, K. Yamada, "High-resolution RBS analysis of Si-dielectrics interfaces", 2006 International Conference on Solid State Devices and Materials, Yokohama, Japan, (September 12-15, 2006).
- 10) <招待講演>K. Shiraishi, H. Takeuchi, Y. Akasaka, T. Nakayama, S. Miyazaki, T. Nakaoka, A. Ohta, H. Watanabe, N. Umezawa, K. Ohmori, P. Ahmet, K. Toii, T. Chikyow, Y. Nara, T.-J. King Liu, H. Iwai, and K. Yamada, "Physics of interfaces between gate electrodes and high-k dielectrics", 8th International Conference on

Solid-State and Integrated-Circuit Technology, Shanghai, China (Oct. 23-26, 2006).

- 11) <招待講演>Z. Ming, K. Nakajima, M. Suzuki, K. Kimura<sup>1</sup>, M. Uematsu, K. Torii, S. Kamiyama, Y. Nara, H. Watanabe, K. Shiraishi, T. Chikyow, K. Yamada, "Oxidation process of HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>/Si structures observed by high-resolution RBS", 8th International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology, Shanghai, China (Oct. 23-26, 2006).
- 12) <招待講演>H. Takeuchi, K. Shiraishi, and T-J. King Liu, "Role of Oxygen States in High-K Gate Stack Engineering", 8th International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology, Shanghai, China (Oct. 23-26, 2006).
- 13) <招待講演>K. Ohmori, P. Ahmet, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, Y. Akasaka, N. Umezawa, K. Nakajima, M. Yoshitake, T. Nakayama, K.-S. Chang, K. Kakushima, Y. Nara, M.L. Green, H. Iwai, K. Yamada, T. Chikyow, "Wide Controllability of Flatband Voltage in La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Gate Stack Structures -Remarkable Advantages of La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> over HfO<sub>2</sub> -", Fourth International Symposium on High Dielectric Constant Gate Stacks at the 210th Meeting of Electrochemical Society, Cancun, Mexico, (October 29 - November 03, 2006).
- 14) <招待講演> T. Nakayama, K. Shiraishi, S. Miyazaki, Y. Akasaka, K. Torii, P. Ahmet, K. Ohmori, N. Umezawa, H. Watanabe, T. Chikyow, Y. Nara, H. Iwai and K. Yamada, "Physics of Metal/High-k Interfaces", Fourth International Symposium on High Dielectric Constant Gate Stacks at the 210th Meeting of Electrochemical Society, Cancun, Mexico, (October 29 - November 03, 2006).
- 15) <招待講演> K. Shiraishi, K. Kamiya, S. Yamamoto, M. Boero, M. Tateno, and A. Oshiyama, "Theoretical approaches for protein function", Fifth East Asian Biophysics Symposium "Structural chemical studies on physiological functions of proteins", Okinawa, Japan, (November 12-16, 2006).
- 16) <招待講演> K. Shiraishi, T. Nakayama, Y. Akasaka, H. Takeuchi, S. Miyazaki, N. Umezawa, G. Nakamura, A. Ohta, T. Nakaoka, H. Watanabe, K. Yamabe, K. Ohmori, P. Ahmet, T. Chikyow, Y. Nara, H. Iwai, and K. Yamada, "What Happen at High-k Dielectric Interfaces?", 37<sup>th</sup> IEEE Semiconductor Interface Specialist Conference, San Diego, CA, USA, (December 7-9, 2006).
- 17) <招待講演>K. Shiraishi, T. Nakayama, S. Okada, S. Miyazaki, H. Watanabe, Y. Akasaka, T. Chikyow, Y. Nara, and K. Yamada, "Recent Progress in Understanding the Mechanism of Shottoky Barrier Height Formation at Various Interfaces", International Symposium on Theories of Organic-Metal Interfaces 2007, Suita, Osaka, Japan, (January 15-17th, 2007).

- 18) <招待講演>白石賢二、「次世代ゲート絶縁膜の理論計算による設計」、21 世紀 COE「原子論的生産技術の創出拠点」ワークショップ:「次世代半導体デバイス開発における計算科学の現状と将来」、大阪府吹田市、2006 年 5 月 17 日。
- 19) <招待講演>中山隆史, 白石賢二, 赤坂泰志, 宮崎誠一, 中岡高司, 中村源治, 鳥居和功, 太田晃生, Parhat Ahmet, 大毛利健治, 渡部平司, 知京豊裕, Martin Green, 奈良安雄, 山田啓作:「ゲート金属の有効仕事関数の設計指針」, SEMI FORUM JAPAN 2006 – 大阪、2006 年 6 月 12–13 日
- 20) <招待講演>白石賢二, 梅澤直人, 宮崎誠一, 上殿明良, 赤坂泰志, 犬宮誠治, 初田浩義, 大野隆央, 大毛利健治, 奈良安雄, 知京豊裕、「HfSiON 膜中における Si-N 結合の形成と結晶化抑制のメカニズム」、第67回応用物理学会学術講演会、2006 年 8 月 29 日–9 月 1 日、立命館大学、滋賀県草津市。
- 21) <招待講演>大毛利健治, Parhat Ahmet, 白石賢二, 吉武道子, 山部紀久夫, 渡部平司, 赤坂泰志, 奈良安雄, K.-S. Chang, M.L. Green, 山田啓作, 知京豊裕、「コンビナトリアル手法を用いた金属電極材料及び High-k 絶縁膜の界面特性制御」、第67回応用物理学会学術講演会、2006 年 8 月 29 日–9 月 1 日、立命館大学、滋賀県草津市。
- 22) <招待講演>白石賢二、「半導体におけるシミュレーションの活用現状と将来展望」、第1回スーパーコンピューティングセミナー、2006 年 10 月 12 日、石垣記念ホール、東京。
- 23) <基調講演> 白石賢二、「High-k ゲート絶縁膜の課題と今後の展開」、第6回インテリジェント・ナノプロセス研究会、2006 年 12 月 20 日、東北大学流体科学研究所、仙台。
- 24) <招待講演>A. Oshiyama, ``Prediction of Atomic and Electronic Structures of Hybrid Materials with Carbon Nanotubes" International Workshop on Computational Challenges and Tools for Nanotubes (Nagano, June, 2006)
- 25) <招待講演>M. Boero, ``Reactive hybrid QM/MM simulations of biomolecules", Workshop on large scale - high accuracy electronic structure calculation methods. Osaka University, Osaka, Japan. 13-14 July 2006
- 26) <招待講演>岡田 晋, ``分子内包ナノチューブの理論" 日本物理学会 2006 年秋季大会 (千葉大学, 2006 年 9 月).
- 27) <招待講演>M. Boero, ``Hybrid reactive CPMD based QM/MM simulations of biomolecules", 1<sup>st</sup> CMM QM/MM Workshop "Developers Meet Users". Center for Molecular Modeling (CMM), (University of Pennsylvania, September 2006).
- 28) <招待講演>A. Oshiyama, ``Atomic and Electronic Structures of Carbon nanotubes on Si and Metal Surfaces" 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic-Structure Calculations (Seoul, November, 2006).
- 29) <招待講演>押山淳、``密度汎関数理論によるナノ・バイオ計算", Supercomputer Workshop 2007 計算分子科学の 30 年と将来、(自然科学研究機構, 2007 年 2 月).
- 30) <招待講演>押山淳, ``Current Stage of the Density-Functional Approach Toward

Atom Dynamics upon Electron Excitation” 日本物理学会春季大会（鹿児島大学、2007年3月）

- 31) <招待講演>K. Kamiya, M. Tateno, M. Boero, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, “Atomistic insight into an uncommon proton transfer through peptide groups in the H-pathway of bovine CcO”, International Symposium on Biological Application of Vibrational Spectroscopy, 2007年3月、Harima, Hyogo, Japan.
- 32) <招待講演>白石賢二「ナノ界面科学の新展開とナノテクノロジー」、ナノサイエンス特別プロジェクト講演会、2007年3月8日、筑波大学。
- 33) <招待講演>Y. Shigeta, “Bio-molecular electronic device: Switch by proton transfer”, Material oriented Quantum Chemistry, satellite symposium of 12<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry, 2006年5月27日 Osaka, Japan
- 34) <招待講演>重田育照, 「熱揺らぎと量子揺らぎの分子動力学」、分子科学コロキウム、—分子の電子状態と反応の新しい量子化学計算と多次元分解分光—2007年2月28日 東北大学.
- 35) 岩田潤一他、`時間依存密度汎関数法によるバルク固体光応答の実時間シミュレーション” 日本物理学会秋季大会（千葉大学、2006年9月）.
- 36) 内田和之、岡田晋、白石賢二、押山淳、`炭素ナノ物質のキャパシタにおける量子効果” 日本物理学会秋季大会（千葉大学、2006年9月）.
- 37) 岡田晋、河合孝純、中田恭子、`高密度原子欠陥をもつナノチューブの安定構造” 日本物理学会秋季大会（千葉大学、2006年9月）.
- 38) 高井健太郎、白石賢二、押山淳、`密度汎関数理論に基づくGe/Si(001)界面近傍におけるGe原子空孔の構造” 日本物理学会秋季大会（千葉大学、2006年9月）.
- 39) 栗田貴宏、岡田晋、押山淳、`カーボンナノチューブ内氷結晶の構造とエネルギー論” 日本物理学会秋季大会（千葉大学、2006年9月）.
- 40) 岩田潤一、白石賢二、押山淳、`Si複空孔欠陥構造に関する大規模第一原理計算” 日本物理学会春季大会（鹿児島大学、2007年3月）
- 41) 岩田潤一他、`電子イオン系とパルスレーザー場の相互作用の第一原理的記述” 日本物理学会春季大会（鹿児島大学、2007年3月）
- 42) 内田和之、岡田晋、白石賢二、押山淳、`ナノ・キャパシタにおける電荷分極状態の第一原理的な計算手法の開発と量子効果の解析” 日本物理学会春季大会（鹿児島大学、2007年3月）
- 43) K. Kamiya, M. Boero, M. Tateno, K. Shiraishi and A. Oshiyama, ``Theoretical Investigation into Proton Transfer Mechanism Involving Peptide Bonds” 第44回日本生物物理学会/5<sup>th</sup> East Asian Biophysics Symposium, (Okinawa, November 2006).
- 44) C. Yulong, Y. Hagiwara and M. Tateno, ``Computational Analyses of Mechanisms

of Large Conformational Changes for Switching of Distinct Catalytic Reactions of an Enzyme” 第 44 回日本生物物理学会／5<sup>th</sup> East Asian Biophysics Symposium, (Okinawa, November 2006).

- 45) Y. Hagiwara and M. Tateno, “Calculation of Binding Free Energy Based on a Variational Principle for QSAR” 第 44 回日本生物物理学会／5<sup>th</sup> East Asian Biophysics Symposium, (Okinawa, November 2006).
- 46) K. Uchida, S. Okada, K. Shiraishi and A. Oshiyama, “Quantum Effects in Cylindrical Capacitor of Carbon Nanotubes”, Int. Conf. on Quantum Simulators and Design, (Hiroshima Univ, December 2006).
- 47) K. Kamiya, M. Boero, M. Tateno, K. Shiraishi and A. Oshiyama, “Molecular Architecture of Cytochrome c Oxidase for a Novel Mechanism of Proton Transfer”, C. Yulong, Y. Hagiwara and M. Tateno, “Computational Analyses of Mechanisms of Large Conformational Changes for Switching of Distinct Catalytic Reactions of an Enzyme” 第 44 回日本生物物理学会／5<sup>th</sup> East Asian Biophysics Symposium, (Okinawa, November 2006).
- 48) 高井健太郎、白石賢二、押山淳、「圧縮歪みを受けた Ge チャンネル層における原子空孔の構造とエネルギー論」、第12回ゲートスタック研究会、2007年2月、静岡県三島市。

### <受賞>

- 1) 重田育照、“PCCP Prize Certificate for Outstanding Achievement of Young Scientists in Physical Chemistry and Chemical Physics”、2007年3月、日本化学会。
- 2) 高井健太郎、「服部賞」、2007年2月、静岡県三島市、第12回ゲートスタック研究会

### <学位論文（修士）>

- 1) 永田貴弘 「シトクロム酸化酵素中の  $\text{Cu}_b$  原子とその近傍の電子状態  
～第一原理計算による解析～」