

## VII-2 計算物性グループ

教授 白石賢二、押山淳（現東大）  
准教授 岡田晋  
博士研究員 岩田潤一、内田和之、村口正和、藤本義隆  
大学院生 7名

### 概要：

計算物性グループは本年度は大きくわけて2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研究室で行っているテーマを上記2つの大きなテーマに分類し、各々のテーマについての19年度の成果を報告する。

### [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 [論文 1、講演 18-20]

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。19年度 RSDFT の PACS-CS 上での超並列化を行い、Si 中の原子空孔の計算、さらには一万个以上のシリコン原子から構成されるナノクラスタの計算に成功した。

### [2] 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) グラフェンの端のエネルギー論 [論文 21、講演 32,37]

グラファイト、CNT 等の  $sp^2$  炭素ネットワーク物質の端に対するエネルギー論はこれまでまったくなされていない。しかしながら、CNT やグラファイトをデバイスとして用いる際、その端の存在、さらには端と異種物質との複合界面の存在は本質である。例えば、シリコン等の半導体に対しては、その表面の生成エネルギー等が詳細に調べられている。そこで、我々は  $sp^2$  炭素ネットワークの端（1次元表面）生成のエネルギー論の解明を行った。ここでは、グラファイトリボンに対して、その端の生成エネルギーの計算を行った。その結果、清浄、水素化端両者に対して、アームチェア型と呼ばれる端形状がより安定であることが

明らかになった (図 1)。清浄端の生成エネルギーは、アームチェアで 2.3eV/bond、ジグザグで 3.3eV/bond であり、水素終端により、このエネルギーは著しく減少し、アームチェアでは 0.1eV/bond、ジグザグでは 0.3eV/bond となる。清浄端におけるアームチェアの高い安定性は、端における 2 配位サイトの構造緩和によるものである。すなわち、端の 2 つの 2 配位サイトが強くダイマー化し、三重結合を形成し安定化する。これに対して、ジグザグ端ではそのような構造緩和ができない。水素化端における、ジグザグ端の高い生成エネルギーの起源は、グラファイトジグザグ端において本質である、フェルミレベルに発現する平坦バンド状態によるものである。また、ジグザグ端の生成エネルギーが比較的リボン幅に依存しないのに対して、アームチェアのそれは明らかなリボン幅依存性を示す。これは、アームチェア端を持つリボンにおいて、その幅の 3 倍周期で、金属 (スモールギャップ半導体)、ラージギャップ半導体と電子状態の特徴を反映している。すなわち、sp<sup>2</sup> 炭素ネットワークにおける端形成においては、その電子状態が端安定性と密接に関係している。

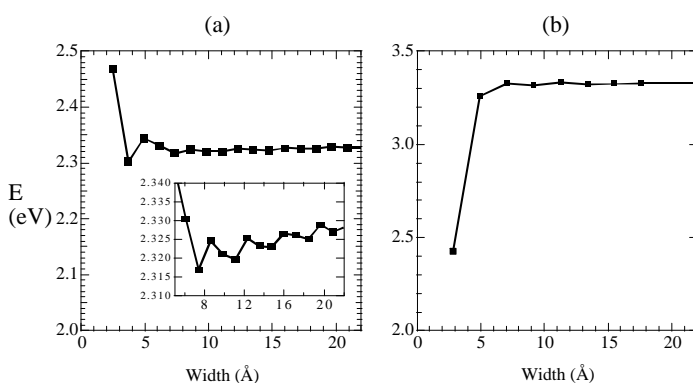


図 1: グラファイトリボンにおける端の生成エネルギー (a) アームチェア端、(b) ジグザグ端

## 2) ピーポッドにおける電子状態変調 [論文 18]

我々はこれまでに、ナノチューブにフラーレンを挿入することにより得られるピーポッドにおいて、その電子物性が構成単位であるフラーレン、ナノチューブの単純な足し合わせではないことを示してきた。すなわち、空隙に存在する電子状態を介して、両者の電子構造の間の混成が生じ、空隙の大きさに依存した電子構造の変調が生じる。この事は、ホストであるチューブ固有の物性に対しても何らかの影響を及ぼしていることが予想される。そこで、我々は、C<sub>60</sub> を内包したアームチェアナノチューブにおいて、その動径収縮モードの内包前後での変調を調べた。その結果、(10, 10) チューブでは、RBM 振動数のハードニングが起こることがあきらかになった。これは、内包 C<sub>60</sub> が (10, 10) チューブに対して、その動径方向の構造変化に対して障害物として働いたためである。これに対して、太いチューブにおいては、その RBM シフトは僅かにソフト化することが明らかになった。これは、C<sub>60</sub> とチューブの間の波動関数混成により、空隙領域での電荷分布が増加し、その結果として CNT の π 電子密度が有効的に減少したことに起因するものである。

また、この混成が CNT の電子構造に及ぼす影響も明らかにした。すなわち、半導体ナノチューブにおける、第一ギャップ・第二ギャップが、C<sub>60</sub> の内包の前後においてわずかにシフトする。また、このシフトは、チューブのカイラリティに依存し、内包分子-CNT の複合

構造の直接的な影響に加えて、複合構造体+構成単位の詳細構造も重要な物性決定の条件である。

### 3) 欠陥を持つナノチューブの電子状態 [論文 22]

熱処理による欠陥修復が可能なナノチューブの実験的報告がなされている。我々は、そのような欠陥構造の構造候補の同定を行った。その結果、アドアトム-原子空孔欠陥がその生成のエネルギー障壁が大きく、修復のエネルギー障壁が小さいことが明らかになった。計算の結果得られた、欠陥生成の活性障壁は約 10eV、これに対して、修復の活性障壁は 2eV 程度となり、実験で報告されている可逆的な現象の説明となる。

また、特筆すべき特徴として、(9, 0) CNT では欠陥導入により電子状態が半導体的に変調される。また、全ての CNT の電子状態は、導入される欠陥の向きに大きく依存し、対称に導入された場合は 2 本の欠陥順位がディープレベルとしてチューブのギャップ中に形成される。それに対して、非対称に導入された場合は、1 本の深い順位と 1 本の浅い順位が形成され、浅い順位は CNT のバルク状態と強く混成することが明らかになった。

### 4) ショットキーバリア高さ極限の破綻 [論文 12]

これまで「バーディーン極限」と「ショットキー極限」がショットキーバリア高さにおける絶対的な極限として信じられてきた。我々は界面の選択的な軌道混成と界面構造を第一原理量子論等で詳細に検討することにより、上記 2 つの極限は本当の極限ではないことを理論的に明らかにした。さらに、ショットキー極限の破綻については実験グループと共同でこのことを検証し、界面物理学に新しい展開を与えることに成功した。

### 5) ショットキー障壁高さの制御指針の研究 [講演 5, 9]

平衡プロセス（高温プロセス）で CMOS 構成が可能なプロセスを模索した。その結果、Si 基板側の界面を制御することは有効な指針となることを示すと同時に、酸素を導入して酸素空孔を消滅させる手法について特に考察した。その結果、フェルミレベルピンニングが起こっている状況では酸素空孔を消滅させる反応は基板の Si を酸化する反応と熱力学的には等価であることを証明した。この結果は、酸素空孔の消滅と有効絶縁膜厚の増加はトレードオフの関係にあり、酸素空孔だけを消滅させるプロセスウインドーは極

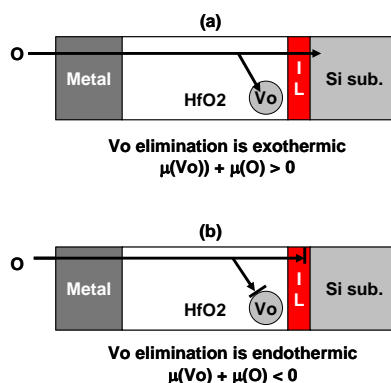


図 2：酸素注入による酸素空孔消去プロセス。(a)酸素空孔が消去できると Si 基板も酸化される。(b)基板酸化が進まない条件では酸素空孔も消去できない。

めて狭いことを明らかにした。上記考察は、酸素注入による酸素空孔の消去を行うプロセスは、集積化を目指した手法としては望み薄であることを意味している（図2）。

## 6) SiN 電荷蓄積層の量子論的考察 [講演 23]

MONOS 型メモリの電荷蓄積層である SiN 絶縁膜の電荷蓄積機構を第一原理計算で検討した。その結果、SiN 絶縁膜の堅固さと柔軟さが電荷トラップ機構に密接に関係することを明らかにし、酸素が混入して柔軟になった SiN 絶縁膜は電子トラップ・ホールトラップ双方ともに形成されやすいことを明らかにした（図3）

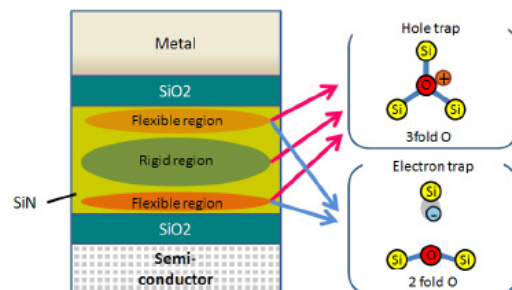


図3 : SiN 絶縁膜の堅固さとキャリアトラップとの関係の模式図。

## <論文>

- 1) JI. Iwata, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, “Large-scale density-functional calculations on silicon divacancies”, Phys. Rev. B, in press.
- 2) K. Takai, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, “Ge vacancies at Ge/Si interfaces: Stress-enhanced pairing distortion”, Phys. Rev. B, Vol 77, Art. No. 045308 (2008).
- 3) N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Sugino, A. Tachibana, K. Ohmori, K. Kakushima, H. Iwai, T. Chikyow, T. Ohno, Y. Nara, and K. Yamada, “Suppression of oxygen vacancy formation in Hf-based high-k dielectrics by lanthanum incorporation”, Appl. Phys. Lett., Vol 91, Art. No. 132904 (2007)
- 4) N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Miyazaki, T. Ohno, T. Chikyow, K. Yamada, and Y. Nara. “Hafnium 4f core-level shifts caused by nitrogen incorporation in Hf-based high-k gate dielectrics”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol 46, pp,3507-3509 (2007).
- 5) N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, Y. Akasaka, S. Inumiya, R. Hasunuma, K. Yamabe, H. Momida, T. Ohno, K. Ohmori, T. Chikyow, Y. Nara, and K. Yamada, “Guiding principle of energy level controllability of silicon dangling bonds in HfSiON”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol 46, pp. 1891-1894 (2007).
- 6) A. Uedono, T. Naito, T. Otsuka, K. Ito, K. Shiraishi, K. Yamabe, S. Miyazaki, H. Watanabe, N. Umezawa, T. Chikyow, T. Ohdaira, R. Suzuki, Y. Akasaka, S. Kamiyama, Y. Nara, and K. Yamada, “Characterization of metal/high-k structures using monoenergetic positron beams”, Jpn. J. Appl. Phys., Vol 46, pp,3214-3218 (2007)
- 7) K. Doi, Y. Mikazuki, S. Sugino, T. Doi, P. Szarek, M. Senami, K. Shiraishi, H. Iwai, N. Umezawa, T. Chikyow, K. Yamada, and A. Tachibana, “Electronic Structure Study of Local Dielectric Properties of Lanthanoid Oxide Clusters”, Jpn. J. Appl. Phys. Vol 47, pp. 205-211 (2008).

- 8) N. Umezawa, K. Shiraishi, K. Torii, M. Boero, T. Chikyow, H. Watanabe, K. Yamabe, T. Ohno, K. Yamada, and Y. Nara, "Role of nitrogen atoms in reduction of electron charge traps in Hf-based high-kappa dielectrics", IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS, Vol 28, pp. 363-365 (2007)
- 9) K. Ohmori, P. Ahmet, M. Yoshitake, T. Chikyow, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, Y. Akasaka, Y. Nara, K.-S. Chang, M. L. Green, and K. Yamada, "Influences of annealing in reducing and oxidizing ambients on flatband voltage properties of HfO<sub>2</sub> gate stack structures", J. Appl. Phys., Vol 101, Art. No. 084118 (2007)
- 10) Kazuyuki Uchida, Susumu Okada, Kenji Shiraishi, and Atsushi Oshiyama, "Quantum effects in cylindrical carbon-nanotube capacitor " Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 19, Art. No. 365218 (2007).
- 11) Kazuyuki Uchida, Susumu Okada, Kenji Shiraishi, and Atsushi Oshiyama, "Quantum effects in double-walled carbon nanotube capacitor", Physical Review B, Vol. 76, art. no. 155436 (2007)
- 12) 白石賢二、中山隆史、「金属/絶縁体界面の統一理論」、表面科学, Vol 29, pp. 92-98, (2008)
- 13) K. Kamiya, M. Boero, M. Tateno, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "Possible mechanism of proton transfer through peptide groups in the H-pathway of the bovine cytochrome c oxidase", J. Am. Chem. Soc. 129, 9663-9673 (2007).
- 14) K. Kamiya, M. Boero, M. Tateno, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "First-principles molecular dynamics study of proton transfer mechanism in bovine cytochrome c oxidase", J. Phys. Cond. Matt. 19, Art. No. 3652209 (2007).
- 15) Susumu Okada, Kyoko Nakada, and Takazumi Kawai, "Orientation Dependence of Magnetic Moment of Carbon Nanotubes with Topological Line Defects", Applied Physics Letters, Vol. 90, art. no. 103120 (2007).
- 16) Susumu Okada, "Electronic structures of finite-length carbon nanotubes: Crossover from fullerenes to nanotubes", NANO, Vol. 2, pp. 51--57 (2007).
- 17) Shojun Hino, Masayuki Kato, Daisuke Yoshimura, Hiroe Moribe, Hisashi Umamoto, Yasuhiro Ito, Toshiki Sugai, Hisanori Shinohara, Minoru Otani, Yoshihide Yoshimoto, and Susumu Okada, "Effect of encapsulated atoms on the electronic structure of the fullerene cage: A case study on La<sub>2</sub>@C<sub>78</sub> and Ti<sub>2</sub>C<sub>2</sub>@C<sub>78</sub> via ultraviolet photoelectron spectroscopy", Physical Review B, Vol. 75, 125418 (2007).
- 18) Susumu Okada, "Radial-breathing mode frequencies for nanotubes encapsulating fullerenes", Chemical Physics Letters, Vol. 438, pp. 59-62 (2007).
- 19) Minoru Otani, Susumu Okada, and Atsushi Oshiyama . "Formation of

- Titanium-carbide in nanospace of C78 fullerenes'. Chemical Physics Letters, Vol. 438, pp. 274-278 (2007).
- 20) Takahiro Kurita, Susumu Okada, and Atsushi Oshiyama, "Energetics of ice nanotubes and their encapsulation in carbon nanotubes from density-functional theory", Physical Review B Vol. 75, art. no. 205424 (2007).
  - 21) Susumu Okada, Kyoko Nakada, and Takazumi Kawai, "Energetics and Electronic Structure of Armchair Nanotubes with Topological Line Defect", Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 19, 365231 (2007).
  - 22) Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Carbon Nanotubes with Adatom-Vacancy Defects", Chemical Physics Letters, Vol. 447, pp 263-267 (2007).
  - 23) Susumu Okada, "Energetics of nanoscale graphene ribbons: Edge geometries and electronic structures", Physical Review B, Vol. 77, art. no. 041408(R) (2008).
  - 24) Toshiya Okazaki, Shingo Okubo, Takeshi Nakanishi, Takeshi Saito, Minoru Otani, Susumu Okada, Shunji Bandow, and Sumio Iijima, "Optical Bandgap Modulation of Single-Walled Carbon Nanotubes by Encapsulated Fullerenes", Journal of the American Chemical Society, in press.

#### <講演>

- 1) <招待講演> K. Shiraishi, Y. Akasaka, G. Nakamura, T. Nakayama, S. Miyazaki, H. Watanabe, A. Ohta, K. Ohmori, T. Chikyow, Y. Nara, K. Yamabe, and K. Yamada, "Theoretical Studies on Metal/High-k Gate Stacks" (invited), 211th Meeting of Electrochemical Society, Chicago, USA, (May 7-10, 2007).
- 2) <招待講演> K. Shiraishi, "How can first principles calculations give large contributions to industries?", (invited) ISSP International Workshop/Symposium on Foundation and Application of Density Functional Theory, Kashiwa, Japan, (Aug. 1-3, 2007).
- 3) <招待講演> R. Hasunuma, T. Naito, C. Tamura, A. Uedono, K. Shiraishi, N. Umezawa, T. Chikyow, S. Inumiya, M. Sato, Y. Tamura, H. Watanabe, Y. Nara, Y. Ohji, S. Miyazaki, K. Yamada and K. Yamabe, "Tight Distribution of Dielectric Characteristics of HfSiON" (invited), 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7-12, 2007).
- 4) <招待講演> M. Zhao, K. Nakajima, M. Suzuki, K. Kimura, M. Uematsu, K. Torii, S. Kamiyama, Y. Nara, H. Watanabe, K. Shiraishi, T. Chikyow and K. Yamada (invited), "Interface Reaction of High-k Gate Stack Structures Observed by High-Resolution RBS", 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7-12, 2007).
- 5) <招待講演> K. Shiraishi, Y. Akasaka, G. Nakamura, M. Kadoshima, H. Watanabe, K. Ohmori, T. Chikyow, K. Yamabe, Y. Nara, Y. Ohji and K. Yamada (invited), "Theoretical Studies on Fermi Level Pinning of Hf-Based High-k Gate Stacks Based on Thermodynamics", 212th Meeting of

- Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7 –12, 2007).
- 6) <招待講演> M. Kadoshima, Y. Sugita, K. Shiraishi, H. Watanabe, A. Ohta, S. Miyazaki, K. Nakajima, T. Chikyow, K. Yamada, T. Aminaka, E. Kurosawa, T. Matsuki, T. Aoyama, Y. Nara and Y. Ohji, “Improvement in Fermi-Level Pinning of p-MOS Metal Gate Electrodes on HfSiON by Employing Ru Gate Electrodes” , 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7 –12, 2007).
  - 7) <招待講演> N. Umezawa, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, Y. Akasaka, S. Inumiya, A. Oshiyama, R. Hasunuma, K. Yamabe, H. Momida, T. Ohno, K. Ohmori, T. Chikyow, Y. Nara and K. Yamada, “Role of the Ionicity in Defect Formation of Hf-Based Dielectrics”, (invited) 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7 –12, 2007).
  - 8) <招待講演> M. Sato, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, K. Yamada, C. Tamura, R. Hasunuma, S. Inumiya, T. Aoyama, Y. Nara and Y. Ohji, “Microscopic Understanding of PBTI and NBTI Mechanisms in High-k / Metal Gate Stacks”, (invited) 212th Meeting of Electrochemical Society, Washington D. C., USA, (Oct. 7 –12, 2007).
  - 9) <招待講演> K. Shiraishi, “Interface Properties of Hf-Based High-k Gate Dielectrics -O Vacancies and Interface Reaction-“ 14th International Workshop on the Physics of Semiconductor Devices, Mumbai, India (Dec. 16-20, 2007)
  - 10) <招待講演> K. Shiraishi, “Characteristic Nature of High-k Dielectric Interfaces”, IEEE EDS WIMNACT 2008 on NANOELECTRONICS, Sikkim, India, (Mar. 6-8, 2008).
  - 11) <招待講演> T. Nakayama, R. Ayuda, H. Nii, K. Shiraishi, "Physics of Schottky barrier at Metal/high-k Interfaces" (invited), 2008 MRS Spring Meeting, H5.5, Mar.24-28, 2008, San Francisco, USA.
  - 12) Y. Takada, K.Shiraishi: “Physical Model for Multi-electron Injection to Si-Quantum-Dot Floating Gate Embedded in SiO<sub>2</sub> Matrix from Si Substrates”, 5<sup>th</sup> International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructure,, Marseille France, May 20-25, 2007
  - 13) K. Takai, K. Shiraishi, and A. Oshiyama: “Atomic Structures and Energetics of Ge Vacancies at Ge/Si Interfaces”, 5<sup>th</sup> International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructure,, Marseille France, May 20-25, 2007
  - 14) Y. Takada, M.Muraguchi, K.Shiraishi: “Quantum Cascade Multi-electron Injection into Si-Quantum-Dot Floating Gate Embedded in SiO<sub>2</sub> Matrix”,5<sup>th</sup> International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces,, Tokyo Japan, November 12-14, 2007
  - 15) M. Kadoshima, Y. Sugita, K. Shiraishi, H. Watanabe, S. Miyazaki, T. Chikyow, K. Yamada, T. Aminaka, E. Kurosawa, T. Matsuki, T. Aoyama, Y. Nara, Y. Ohji, “Gate-component-induced high-k compositional change for dual-metal/dual-high-k CMOS- Cost-effective approach to utilize the effective work function stabilization by pinning –” 2007 Symp. on VLSI Tech. June 13-15, 2007 Kyoto, Japan.

- 16) M. Kadoshima, T. Matsuki, M. Sato, T. Aminaka, E. Kurosawa, A. Ohta, H. Yoshinaga, S. Miyazaki, K. Shiraishi, K. Yamabe, K. Yamada, T. Aoyama, Y. Nara, Y. Ohji: "Practical dual-metal-gate dual-high-k CMOS integration technology for hp 32 nm LSTP utilizing process-friendly TiAlN metal gate", 2007 International Electron Devices Meetings, Dec. 12-14, 2007, Washington D.C. USA.
- 17) K. Ohmori, T. Chikyow, T. Hosoi, H. Watanabe, K. Nakajima, T. Adachi, A. Ishikawa, Y. Sugita, Y. Nara, Y. Ohji, K. Shiraishi, K. Yamabe, K. Yamada: "Wide Controllability of Flatband Voltage by Tuning Crystalline Microstructures in Metal Gate Electrodes", 2007 International Electron Devices Meetings, Dec. 12-14, 2007, Washington D.C. USA.
- 18) 岩田潤一、押山淳、白石賢二、岡田晋、藤本義隆、"実空間密度汎関数コード (RSDFT) による大規模第一原理電子状態計算"、理研・ナノ統合拠点連携ワークショップ、2007年6月14日
- 19) 岩田潤一、白石賢二、押山淳、"実空間差分法による大規模第一原理電子状態計算"、理研次世代スーパーコンピューティングシンポジウム、2007年10月3日-4日
- 20) 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"、日本物理学会第 62 回年次大会 (札幌市北海道大学)、2007年9月21--24日
- 21) 高田幸宏、白石賢二："SiO<sub>2</sub> に埋め込まれたフローティングゲートへの多電子注入機構の提案"、シリコン材料・デバイス研究会、広島大学、2007年6月7日-8日
- 22) 高田幸宏、村口正和、白石賢二："絶縁膜に埋め込まれた量子ドットフローティングゲートへの多電子注入機構の理論提案"、第 68 回応用物理学会学術講演会、北海道工業大学、2007年9月4日-8日
- 23) <2007 年度応用物理学会 JJAP 論文賞受賞記念講演> 赤坂泰志、中村源志、白石賢二、梅澤直人、山辺紀久夫、小川修、李明範、網中利夫、粕谷透、渡部平司、知京豊裕、大塚文雄、奈良安雄、中村邦雄："Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning"、第 68 回応用物理学会学術講演会、北海道工業大学、2007年9月4日-8日
- 24) 高田幸宏、村口正和、白石賢二："絶縁膜に埋め込まれたシリコン量子ドットフローティングゲートへの量子なだれの多電子注入機構の理論提案"、第 55 回応用物理学会学術講演会、日本大学、2008年3月27日-30日
- 25) 小林賢司、白石賢二："MONOS 型メモリの劣化の原子レベルの機構の第一原理計算による考察、第 13 回ゲートスタック研究会、2008年1月13日-15日、三島、静岡
- 26) 小幡輝明、白石賢二、押山淳："密度汎関数理論に基づく窒化インジウムガリウムにおける窒素単原子空孔の研究"、第 55 回応用物理学会学術講演会、日本大学、2008年3月27日-30日
- 27) イ ヨンフン、大竹朗、永田貴弘、白石賢二："シリコンナノワイヤの電子構造の理論的研究"、第 55 回応用物理学会学術講演会、日本大学、2008年3月27日-30日



- 28) 小林賢司、白石賢二：“MONOS 型メモリの電荷トラップ機構の第一原理計算による考察”，第 55 回応用物理学会学術講演会，日本大学，2008 年 3 月 27 日－30 日
- 29) 喜多祐起，景井悠介，細井卓治，志村考功，渡部平司，白石賢二，門島勝，奈良安雄，山田啓作：“格子間酸素に起因した金属電極/Hf 系ゲート絶縁膜の実効仕事関数変調”，第 55 回応用物理学会学術講演会，日本大学，2008 年 3 月 27 日－30 日
- 30) <招待講演> 白石賢二、梅澤直人、杉野信也、立花明知、知京豊裕：“High-k ゲート絶縁膜への元素添加効果の物理的起源”，第 55 回応用物理学会学術講演会シンポジウム，日本大学，2008 年 3 月 27 日－30 日
- 31) <招待講演> 岡田 晋 “ナノチューブ新奇物性：複合構造体とネットワーク制御” ナノ学会第 5 回大会(つくば市エポカルつくば), 2007 年 5 月 21 日--23 日
- 32) 岡田 晋 “ナノグラファイトのエネルギー論：端形状と電子状態” フラレーン・ナノチューブ学会，第 33 回フラレーン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2007 年 7 月 11 日--13 日
- 33) 岡田 晋 “ナノチューブ内における C<sub>60</sub> のエネルギー論” フラレーン・ナノチューブ学会，第 33 回フラレーン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2007 年 7 月 11 日--13 日
- 34) 内田和之、岡田晋 “カーボンナノチューブに対する電界ドーピングの第一原理計算” フラレーン・ナノチューブ学会，第 33 回フラレーン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2007 年 7 月 11 日--13 日
- 35) 岡崎俊也、大窪清吾、中西毅、斎藤毅、大谷実、岡田晋、坂東俊治、飯島澄男 “フラレーン内包による単層カーボンナノチューブの光学的バンドギャップ変調” フラレーン・ナノチューブ学会，第 33 回フラレーン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2007 年 7 月 11 日--13 日
- 36) <2007 年度日本物理学会若手奨励賞受賞記念講演> 岡田晋 “ナノスケール炭素物質の電子状態：ネットワークと階層構造” 日本物理学会第 62 回年次大会（札幌市北海道大学）2007 年 9 月 21--24 日
- 37) 岡田晋 “ナノグラファイトのエネルギー論：端形状と電子状態” 日本物理学会第 62 回年次大会（札幌市北海道大学）2007 年 9 月 21--24 日
- 38) 内田和之，岡田晋 “グラフェンリボンに対する電界ドーピングの第一原理計算” 日本物理学会第 62 回年次大会（札幌市北海道大学）2007 年 9 月 21--24 日
- 39) 岡田 晋 “原子空孔を持つフラレーンのエネルギー論と電子状態” フラレーン・ナノチューブ学会，第 34 回フラレーン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2008 年 3 月 3 日--5 日
- 40) 岡田 晋 “Si ナノチューブの物質設計：新しい多層ナノチューブ” フラレーン・ナノチューブ学会，第 34 回フラレーン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2008 年 3 月 3 日--5 日

- 41) 澤田啓介, 石井史之, 齋藤峯雄, 岡田 晋, 河合孝純 ``グラファイトリボンのノンコリニア磁気相図" フラワーレン・ナノチューブ学会, 第 34 回フラワーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(福岡市九州大学),2008 年 3 月 3 日--5 日
- 42) <招待講演> 岡田晋 ``ナノチューブ関連新物質設計の理論" 日本物理学会第 63 回年次大会 (東大阪市近畿大学) 2008 年 3 月 22--26 日
- 43) 岡田晋 ``ナノチューブ内空隙を用いた新たなチューブ上物質の物質設計"日本物理学会第 63 回年次大会 (東大阪市近畿大学) 2008 年 3 月 22--26 日

### <受賞>

- 1) 白石賢二 応用物理学会 JJAP 論文賞 (平成 19 年 9 月) 「Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning」
- 2) 岡田晋 日本物理学会 若手奨励賞 (平成 19 年 9 月) 「炭素クラスター及びカーボンナノチューブの第一原理電子状態計算」

### <新聞発表>

- 1) 日刊工業新聞 (平成 19 年 6 月 12 日号) 「原子レベルの界面制御により高誘電率絶縁膜を用いたトランジスタの閾値制御に指針確立」

### <学位論文 (修士) >

- 1) 小幡輝明 「密度汎関数理論に基づく窒化インジウムガリウムにおける窒素単原子空孔の研究」
- 2) 小林賢司 「SiN 絶縁膜中の欠陥の第一原理による考察」