

II-1 計算物性分野

1. メンバ

教授	白石賢二
准教授	岡田晋
客員教授	押山淳
博士研究員	岩田潤一、高木祥光、村口正和
大学院生	7名

2. 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20年度の成果を報告する。

3. 研究成果

【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

〔国内会議 [1-5]〕

密度汎関数法に基づく第一原理計算は物理・化学のみならず、材料開発の現場においても非常に重要なツールとなっている。本研究は次世代超並列計算機を有効活用し、大規模なナノスケールシテムを扱える実空間密度汎関数コード(RSDFT)の開発を行う。コード開発と平行して、実際に 10000 原子を越えるSi量子ドット系に対する応用計算、計算科学者との連携によるアルゴリズムの見直しおよびチューニング、性能測定など、様々な角度から研究を進めている。また通常の基底状態に対する応用に留まらず、時間依存密度汎関数法に基づく電子励起状態、電子ダイナミクスに対する大規模計算への応用も目指し、コード開発・応用計算を進めている。

【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) C₆₀ 内包ナノチューブのエネルギー論 [論文[8]]

C₆₀ や種々のフラーレンを内包したナノチューブは、炭素ピーポッドと呼ばれ、異なる次元性を有する sp² 炭素ナノ複合構造体として98年の発見以降、ナノスケール炭素物質科学の分野で注目を集めている。特に、次元性の違いが誘起する電子構造の差異に起因する、種々の興味深い物性発現が予言、報告なされている。例えば、C₆₀ を内包した金属ナノチューブでは、全炭素系にも関わらず、CNT からフラーレンへの電荷移動が生じる事が我々によって示されている。

ここでは、直径の大きなナノチューブに着目し、そこへの C₆₀ 内包のエネルギー論を調べた。特に、内包によるナノチューブの変形の可能性を調べた。図に変形、非変形のピーポッドの最適化構造を示す。

(12,12)から(20,20)までの全てのナノチューブに対して、変形、非変形構造時の内包エネルギー利得の見積を行った。その結果、内包によるエネルギー利得は変形ナノチューブの方が常に大きく、チューブ径によらず、ほぼ C_{60} あたり 1eV 程度となった(図1)。他方、非変形ピーポッドでは、チューブ径の増加に伴い内包エネルギーは減少し $0.2\text{eV}/C_{60}$ に漸近していく。この違いは、変形チューブでは C_{60} を囲む構造が、 C_{60} と 3.3\AA の壁間距離領域を大きく有している事によるものであり、また、この C_{60} 近傍の構造がチューブ径増加で変化しない事に起因している。一方、非変形では、チューブ径増加にともなうチューブ曲率の減少により、 C_{60} 近傍の局所構造はグラファイトに漸近していく、故に、 C_{60} のグラファイト上の吸着エネルギー 0.2eV となる。

次に、(10,10)ナノチューブ中に内包された C_{60} 分子の長周期の構造変調の可能性を調べた。ここでは、ユニットセルに2個の C_{60} を含んだピーポッドを考えて、その安定構造の探索をおこなった。さらに、実験的に報告がなされている、電子線照射等による C_{60} の重合化の活性障壁の見積をおこなった。まず、2倍周期の範囲での長周期の構造変調は存在し得ない事をあきらかにした。すなわち、ナノチューブ中において C_{60} は等間隔に配置されているのがエネルギー的に最安定である事があきらかになった。次に、内包 C_{60} 間に[2+2]結合有するダイマー形成のエネルギー論を調べた。その結果、重合化の活性障壁は 1.4eV 程度と見積もられ、ピーポッド構造において、自発的な重合化は起こり得ず、電子線、熱等の何らかの外的要因が重合化を引き起こしている事が示された。

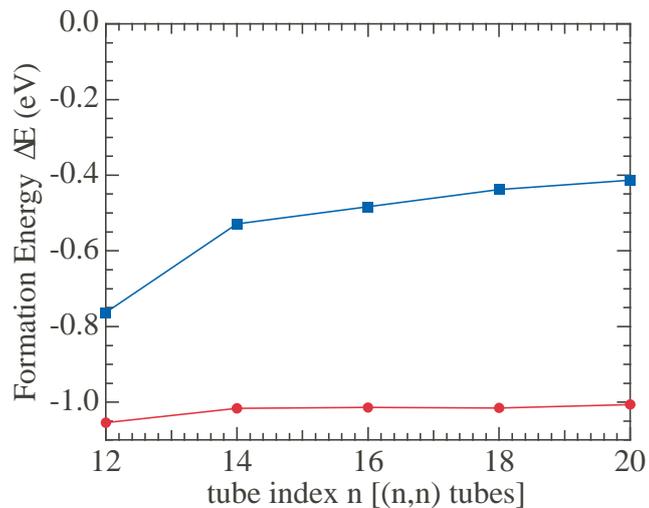


図1 : Reaction energies per C_{60} in the encapsulation reaction for the (12,12), (14,14), (16,16), (18,18) and (20,20) armchair nanotubes with circular (blue squares) and elliptical (red circles) cross-sections.

(2) ピーポッドにおける電子状態変調 [論文[6]]

我々はこれまでに、ナノチューブにフラ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たい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_{60} 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_{60} 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くためである。それに対して、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_{60} 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の増加し、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。さらに、ジグザグ螺旋度を有するナノチューブに対しても RBM シフトの解析を行い、そのシフトがアームチェアと同様に、太いチューブでは低波数側、細いチューブでは高波数側にシフトする事があきらかになった。この結果を元に、実験による測定の理論解析を行い、実験結果に対する理論的解釈を与えた。

(3) シリコン表面に於けるエッジ状態 [論文[7]]

ジグザグ型の端を持つグラフェンリボンでは特異な端局在状態、すなわちエッジ状態の発現が知られている。エッジ状態は、波数空間の限られた領域においてのみ、平坦なバンドを伴う端局在性を示し、その発現条件は解析的に示されている。ここでは、グラフェンにおけるエッジ状態が、シリコン表面に於いても発現する事を密度汎関数理論に基づく計算からあきらかにした。すなわち、シリコンの(111)表面において、フェルミレベル下 $4eV \sim 5eV$ の限られた波数領域において平坦なバンドを形成し、その分布はグラフェンにおけるエッジ状態と同様に、限られた波数において表面に完全に局在し、それ以外の波数空間では広がったふるまいを示す。解析計算の結果、この状態がグラフェンのエッジ状態と同様に電子のサイト間遷移のバランスによる表面局在状態である事があきらかになった。

(4) グラフェンの端のエネルギー論 [論文[5]]

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

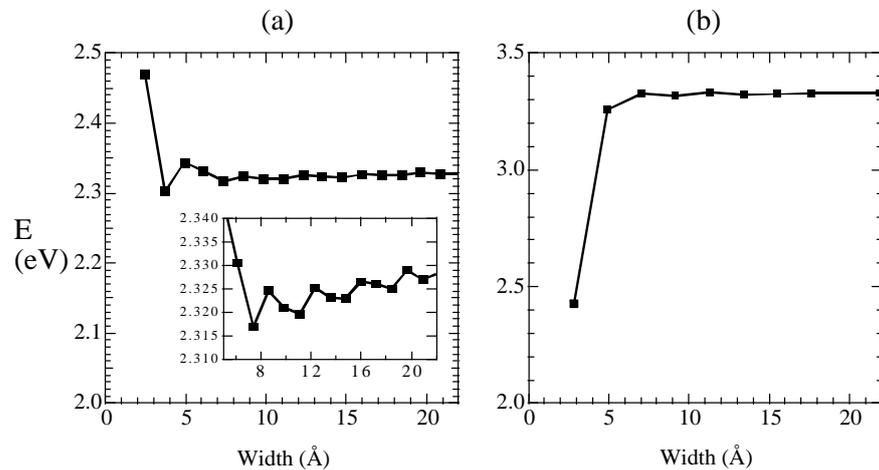


図2: グラファイトリボンにおける端の生成エネルギー(a)アームチェア端、(b)ジグザグ端

らかになった。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^2 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。

(5) オーミック接触の新しい物理モデルの提案 [論文[19]、国際会議[27,40]、修士論文[2]]

金属と半導体のオーミック接触作製は、様々なデバイスや量子ホール効果等の物性実験において欠かせない技術である。特に、将来のLSIに導入が期待されている金属ソース/ドレインの作製のためには金属とシリコンの界面にナノスケールのオーミック接触を作る必要があり、このとき仕事関数の制御が次の技術的な難題である。これまでオーミック接触は、ショットキー障壁高さを制御することによって達成されていると考えられてきた。しかしながら、これまでの界面物理の知見は、金属と半導体の界面でフェルミレベルピンング現象が起こるため、ショットキー障壁高さを制御が困難であることを示している。そのため、従来のオーミック接触のバンドダイアグラムはフェルミレベルピンング現象との矛盾を含んでいると考えられる。

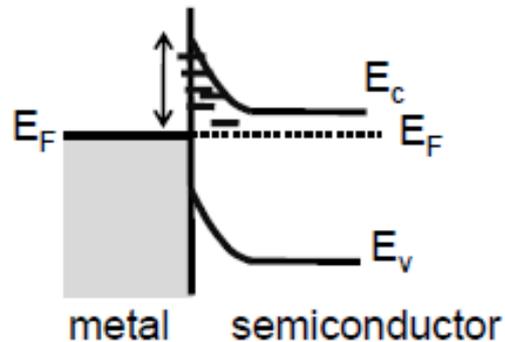


図3：本研究で提案した新たなオーミック接触のモデル

このような観点から、本研究では実験で得られるオーミック接触と第一原理計算で考察した金属/半導体界面のフェルミレベルピンング現象の双方に矛盾のない、新たなオーミック接触のモデル(図3)を提案した。このモデルでは、ショットキー障壁の広い範囲のエネルギー領域に多数の欠陥レベルが存在しており、電子はこの欠陥レベルを介した共鳴トンネルによる伝導によってオーミック接触が達成されていると考えている。さらに詳細について、今後の研究で本モデルの真偽も含めて検討してゆく予定である。

(6) MONOS型メモリの電荷蓄積機構の研究 [国内会議[43,44]]

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。MONOS型メモリはSiN/SiO₂の界面をその構成要素としているため、界面付近での原子の相互拡散がどのようにメモリ動作に影響するかを考察することは科学的そして産業的に極めて重要となる。計算の結果、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た。具体的には、SiN膜中に酸素原子が混入されると、メモリの書き込み/消去動作の基本である電子及びホール注入による荷電状態の変化による混入してO原子が2配位にも3配位にもなりうることを明らかにした。こ

これは書き込み／消去動作によってOが混入したSiN膜の構造が崩壊する可能性を示している。このことは、実用的にOが多く混入しているSiNを実用的に使いこなすのは困難が伴うことを示唆しており、産業上も重要な結果である。これに対し、N空孔のみを有するSiN膜に対して書き込み／消去を行ってもヤン・テラー効果に対応したN空孔周辺の構造変化が生じるのみで、構造が大きく崩れることはなかった。このことは、N空孔にキャリアを注入する方式でMONOS型メモリを作製すれば、メモリ動作を多数回行ってもその特性は維持できることを示しており、理想的なMONOS型メモリが実現できることを示唆している。しかしながら、Oを混入しないとSiN膜中にN空孔等の欠陥の数が十分に形成されないことが実験的に示唆されていることを考慮すると、最適なO混入量が存在することを示唆している。

(7) サファイア表面の第一原理計算 [博士論文[2]]

サファイア表面を第一原理計算で行い、イオン性と共有結合性の競合によってサファイア表面は大きな構造緩和を起こすことが分かった。こうした大きな構造緩和がストイキオメトリック表面の安定性やサファイア表面が化学的に不活性であることと密接に関連していることを体系的に明らかにした。

(8) 歪んだGeチャネルのホールキャリアの起源 [博士論文[1]、論文[24]、国際会議[19,20]]

歪んだGeチャネルに空孔が生じると特に一軸性の圧縮歪みにおいてGe空孔レベルが価電子帯の直上に出現しアクセプタ準位となることを示した。この結果は、実験で観測されているGeチャネルのホールキャリアの起源に示唆を与えるものである。

(9) バイオ物質におけるプロトン親和性の再考 [国内会議[32]、修士論文[1]]

バイオ物質におけるプロトン親和性に対して、統計力学と第一原理計算による考察を行った。その結果、注目する部位が外界の水溶液と繋がっているか否かで配置のエントロピー効果が大きく異なるため、プロトン親和性が劇的に(3ケタから5ケタ程度)変調されることを明らかにした。本計算は第一原理計算でプロトン親和性を求めることの難しさを如術に示すものである。

4. 研究業績

<論文>

1. T. Otobe, M. Yamagiwa, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa, G. F. Bertsch, "First-principles electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under an intense laser field", *Physical Review B* 77, 165104 (2008).
2. T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata, "First-principle calculation of the electron dynamics in crystalline SiO₂", *Journal of Physics Condensed Matter* 21, 064224 (2008).
3. T. Otobe, K. Yabana, J.-I. Iwata, "First-principle electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under an intense laser field", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, in press.
4. T. Obata, J.-I. Iwata, K. Shiraishi, A. Oshiyama, "First-principles studies on In-related nitride semiconductors", *Journal of Crystal Growth* 311, 2772 (2009).
5. Susumu Okada, "Energetics of nanoscale graphene ribbons: Edge geometries and electronic

- structures” *Physical Review B*, Vol. 77, art. no. 041408(R) (2008).
6. 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*, Vol. 130, 4122 -- 4128 (2008).
 7. Yohiteru Takagi and Susumu Okada “Topologically Induced Surface Electron State on Si(111) Surfaces” *Surface Science*, Vol. 602, 2876--2879 (2008).
 8. Susumu Okada, “Energetics of carbon peapods: Elliptical deformation of nanotubes and aggregation of encapsulated C_{60} ” *Physical Review B*, Vol. 77, art. no. 235419 (2008).
 9. M. Kadoshima, T. Matsuki, S. Miyazaki, K. Shiraishi, T. Chikyo, K. Yamada, T. Aoyama, Y. Nara, and Y. Ohji, “Effective-Work-Function Control by Varying the TiN Thickness in Poly-Si/TiN Gate Electrodes for Scaled High-k CMOSFETs”, *IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS*, Vol 30, 466-468 (2009)
 10. Y. Kita, S. Yoshida, T. Hosoi, T. Shimura, K. Shiraishi, Y. Nara, K. Yamada, and H. Watanabe, “Systematic study on work-function-shift in metal/Hf-based high-k gate stacks”, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, Vol 94, Art. No. 122905 (2009)
 11. M. Muraguchi, K. Shiraishi, T. Okunishi, K. Takeda, “Theoretical study of the time-dependent phenomenon of photon-assisted tunneling through a charged quantum dot”, *JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER*, Vol 21, Art. No. 064230 (2009).
 12. N. Umezawa, M. Sato, K. Shiraishi, “Reduction in charged defects associated with oxygen vacancies in hafnia by magnesium incorporation: First-principles study”, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, Vol 93, Art. No. 223104 (2008).
 13. M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura, and K. Shiraishi, “Theoretical Study of the Time-Dependent Phenomena on a Two-Dimensional Electron Gas Weakly Coupled with a Discrete Level”, *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, Vol 47, 7807-7811 (2008)
 14. M. Sato, C. Tamura, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, K. Yamada, R. Hasunuma, T. Aoyama, Y. Nara, and Y. Ohji, “Cathode Electron Injection Breakdown Model and Time Dependent Dielectric Breakdown Lifetime Prediction in High-k/Metal Gate Stack p-Type Metal-Oxide-Silicon Field Effect Transistors”, *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, Vol 47, 3326-3331 (2008)
 15. Y. Takada, M. Muraguchi, and K. Shiraishi, “Quantum cascade multi-electron injection into Si-quantum-dot floating gates embedded in SiO₂ matrices”, *APPLIED SURFACE SCIENCE*, Vol 254, 6199-6202 (2008)
 16. N. Umezawa, K. Shiraishi, Y. Akasaka, A. Oshiyama, S. Inumiya, S. Miyazaki, K. Ohmori, T. Chikyow, T. Ohno, K. Yamabe, Y. Nara, and K. Yamada, “Chemical controllability of charge states of nitrogen-related defects in HfO_xN_y:First-principles calculations”, *PHYSICAL REVIEW B*, Vol 77m Art. No. 165130 (2008)
 17. M. Sato, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, K. Yamada, C. Tamura, R. Hasunuma, S. Inumiya, T. Aoyama, Y. Nara, and Y. Ohji, “Comprehensive analysis of positive and negative bias temperature

- instabilities in high-k/metal gate stack metal-oxide-silicon field effect transistors with equivalent oxide thickness scaling to sub-1 nm”, JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, Vol 47, 2354–2359 (2008)
18. Y Sakurai, S Nomura, K Shiraishi, M Ikeda, K Makihara and S Miyazaki, “Temperature dependence of capacitance of Si quantum dot floating gate MOS capacitor”, J. Phys.: Conf. Ser. Vol, 50, 022071 (2009)
 19. Y Takada, M Muraguchi, S Nomura and K Shiraishi, “Theoretical studies of coupled quantum dot system with a two-dimensional electron gas in the magnetic fields”, J. Phys.: Conf. Ser. Vol, 150, 022083 (2009)
 20. M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura and K. Shiraishi, “Theoretical study of the electron dynamics of a quantum wire coupled with the quantum dots”, J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 150, 022061 (2009)
 21. Yeonghun Lee, Takahiro Nagata, Kuniyuki Kakushima, Kenji Shiraishi, and H. Iwai, “Electronic Structure Analysis of Silicon Nanowires for High Conductivity in n- and p-channel Nanowire-FET”, ECS Trans. 16 (40), 1 (2009)
 22. Kikuo Yamabe, Kouichi Murata, Tomohiro Hayashi and T.C. Tamura, Motoyuki Sato, Akira Uedono, Kenji Shiraishi, Naoto Umezawa, Toyohiro Chikyow, Heiji Watanabe, Yasuo Nara, Yuzuru Ohji, S. Miyazaki, Keisaku Yamada, and Ryu Hasunuma, “Effect of Annealing on Electronic Characteristics of HfSiON Films fabricated by Damascene Gate Process”, ECS Trans. 16 (5), 521 (2008)
 23. Heiji Watanabe, Shinichi Yoshida, Yuki Kita, Takuji Hosoi, Takayoshi Shimura, Kenji Shiraishi, Yasuo Nara, and Keisaku Yamada, “Fundamental Aspects of Effective Work Function Instability of Metal/Hf-based High-k Gate Stacks”, ECS Trans. 16 (5), 27 (2008)
 24. Kentaro Takai, Kenji Shiraishi, and Atsushi Oshiyama, “Generation of Acceptor Levels in Ge by the Uniaxial Strain – A Theoretical Approach”, ECS Trans. 16 (10), 261 (2008)
 25. Seiichi Miyazaki, Hiromichi Yoshinaga, Akio Ohta, Yasushi Akasaka, Kenji Shiraishi, Keisaku Yamada, Seiji Inumiya, Masaru Kadoshima, and Yasuo Nara, “Photoemission Study of Metal/HfSiON Gate Stack”. ECS Trans. 13 (2), 67 (2008)
 26. Kenji Shiraishi, Takashi Nakayama, Takashi Nakaoka, Akio Ohta, and Seiichi Miyazaki, “Theory of Metal/Dielectric Interfaces –Breakdown of Schottky Barrier Limits–”, ECS Trans. 13 (2), 21 (2008)
 27. Kenji Ohmori et al., “Control of Crystalline Microstructures in Metal Gate Electrodes for Nano CMOS Devices”, ECS Trans. 13 (2), 201 (2008)
 28. Naoto Umezawa, Kenji Shiraishi, Kuniyuki Kakushima, Hiroshi Iwai, Kenji Ohmori, Keisaku Yamada, and T. Chikyow, “Relation between Solubility of Silicon in High-k Oxides and the Effect of Fermi Level Pinning”, ECS Trans. 13 (2), 15 (2008).
 29. K. Ohmori, T. Matsuki, D. Ishikawa, T. Morooka, T. Aminaka, Y. Sugita, T. Chikyow, K. Shiraishi, Y. Nara, K. Yamada, “Impact of additional factors in threshold voltage variability of metal/high-k gate stacks and its reduction by controlling crystalline structure and grain size in the

- metal gates”, Tech. Digest 2008 IEEE Electron Devices Meeting, p.409–412, 2008.
30. M. Sato, N. Umezawa, J. Shimokawa, H. Arimura, S. Sugino, A. Tachibana, M. Nakamura, N. Mise, S. Kamiyama, T. Morooka, T. Eimori, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, K. Yamada, T. Aoyama, T. Nabatame, Y. Nara, Y. Ohji, ”Physical model of the PBTI and TDDB of la incorporated HfSiON gate dielectrics with pre-existing and stress-induced defects”, Tech. Digest 2008 IEEE Electron Devices Meeting, p. 119–122, 2008.
 31. M. Sato, N. Umezawa, N. Mise, S. Kamiyama, M. Kadoshima, T. Morooka, T. Adachi, T. Chikyow, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, K. Yamada, T. Aoyama, T. Eimori, Y. Nara, Y. Ohji, ”Physical understanding of the reliability improvement of dual high-k CMOSFETs with the fifth element incorporation into HfSiON gate dielectrics”, Tech. Digest 2008 Symposium on VLSI Technology, p.66–67, 2008.
 32. Kadoshima, M.; Matsuki, T.; Mise, N.; Sato, M.; Hayashi, M.; Aminaka, T.; Kurosawa, E.; Kitajima, M.; Miyazaki, S.; Shiraishi, K.; Chikyo, T.; Yamada, K.; Aoyama, T.; Nara, Y.; Ohji, Y. “Improved FET characteristics by laminate design optimization of metal gates –Guidelines for optimizing metal gate stack structure–”, Tech. Digest 2008 Symposium on VLSI Technology, p.48–49, 2008.
 33. Y. Kangawa, T. Akiyama, T. Ito, K. Shiraishi, K. Kakimoto, “Theoretical approach to structural stability of GaN: How to grow cubic GaN”, Journal of Crystal Growth 311, 3106–3109 (2009)
 34. Keita Yamaguchi, Akira Otake, Kenji Kobayashi, Kenji Shiraishi, ”Atomistic origin of high-quality “novel SiON gate dielectrics”, Microelectronic Engineering, 86, 1680–1682 (2009).
 35. <招待論文> Kenji Shiraishi, ”Theoretical models for work function control”, Microelectronic Engineering, 86, 1733–1736 (2009).
 36. Naoto Umezawa, Kenji Shiraishi, Toyohiro Chikyow, ”Stability of Si impurity in high- ϵ oxides” Microelectronic Engineering, 86, 1780–1781 (2009).
 37. Akira Otake, Keita Yamaguchi, Kenji Kobayashi, Kenji Shiraishi, ”Theoretical studies on the charge trap mechanism of MONOS type memories – Relationship between atomistic information and program/erase actions”, Microelectronic Engineering, 86, 1849–1851 (2009).

<講演>

国際会議

1. <招待講演> A. Oshiyama, J.-I. Iwata, K. Shiraishi, ”Large-Scale Density Functional Calculations Using Real-Space Parallel-Computation Techniques”, The 1st international conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, Tokyo, June 3–7, 2008.
2. J.-I. Iwata, Y. Kawashita, K. Yabana, ”Real-Space and Real-Time Method for Linear and Nonlinear Optical Properties of Fullerene-based Materials”, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Crete, Greece, Sep. 25–30, 2008
3. J.-I. Iwata, T. Obata, K. Shiraishi, A. Oshiyama, ”Hidden Metallic Nature of In-containing Nitride semiconductors”, International Workshop on Nitride semiconductors, Montreux, Switzerland, Oct. 6–10, 2008

4. Susumu Okada, "Energetics of Nanographite: Edge Geometries and Electronic Structure" 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
5. Takazumi Kawai, Susumu Okada, and Yoshiyuki Miyamoto, "Mechanical-Tearing Simulations of Graphene for the Validation of Favorable Atomic Edge Structures" 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
6. Minoru Otani and Susumu Okada. "Electric-field induced semiconductor-metal transition of bilayer graphene", 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
7. K. Yanagi, Y. Miyata, Z. Liu, K. Suenaga, S. Okada, and H. Kataura, "Optical properties of metallic and semiconducting single-wall carbon nanotubes with encapsulated molecules" 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), June 29 -- July 4, 2008, Montpellier.
8. <招待講演>Susumu Okada, "Energetics of Nanographite Ribbons", Okazaki Conference 2009: From Aromatic Molecules to Graphene: Chemistry, Physics and Device Applications, February 21 - 23, 2009, Okazaki Conference Center, Okazaki.
9. <招待講演>K. Shiraishi, T. Nakayama, S. Miyazaki, A. Ohta, Y. Akasaka, H. Watanabe, Y. Nara and K. Yamada, "Theoretical investigations on metal/high-k interfaces", 2008 International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology, Beijing, China (Oct. 20-23, 2008).
10. <招待講演>K. Shiraishi, T. Nakayama, T. Nakaoka, A. Ohta and S. Miyazaki, "Theoretical Investigation of Metal/Dielectric Interfaces -Breakdown of Schottky Barrier Limits-", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008).
11. <招待講演>K. Shiraishi, "What happens at nano-scale interfaces?", The 5th International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, (November 9-13, 2008, Tokyo)
12. <招待講演>N. Umezawa, K. Shiraishi, K. Kakushima, H. Iwai, K. Ohmori, K. Yamada and T. Chikyow, "Relation Between Solubility of Silicon in High-k Oxides and the Effect of Fermi Level Pinning", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008)
13. <招待講演>S. Miyazaki, H. Yoshinaga, A. Ohta, Y. Akasaka, K. Shiraishi, K. Yamada, S. Inumiya, M. Kadoshima and Y. Nara, "Photoemission Study of Metal/HfSiON Gate Stack", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008)
14. <招待講演>K. Ohmori, T. Chikyow, T. Hosoi, H. Watanabe, K. Nakajima, T. Adachi, A. Ishikawa, Y. Sugita, Y. Nara, Y. Ohji, K. Shiraishi, K. Yamabe and K. Yamada, "Control of Crystalline Microstructures in Metal Gate Electrodes for Nano CMOS Devices", 214th Meeting of Electrochemical Society, Phoenix, AZ., USA, (May., 2008)
15. <招待講演>H. Watanabe, S. Yoshida, Y. Kita, T. Hosoi, T. Shimura, K. Shiraishi, Y. Nara, and K. Yamada, "Fundamental Aspects of Effective Work Function Instability of Metal/Hf-based High-k Gate Stacks", 215th Meeting of Electrochemical Society, Honolulu, HI., USA, (October, 2008).
16. <招待講演>K. Yamabe, T. Hayashi, T. C. Tamura, A. Uedono, K. Shiraishi, N. Umezawa, T.

- Chikyow, H. Watanabe, Y. Nara, Y. Ohji, S. Miyazaki, K. Yamada and R. Hasunuma, "Annealing Effect on Electronic Characteristics of HfSiON Films fabricated by Damascene Gate Process", 215h Meeting of Electrochemical Society, Honolulu, HI., USA, (October, 2008)
17. T. Obata, K. Shiraishi and A. Oshiyama, "First-principles studies on In-related nitride semiconductors", International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Shizuoka, Japan (July 6-9, 2008)
 18. Y. Kangawa, T. Akiyama, T. Ito, K. Shiraishi, and K. Kakimoto, "Theoretical approach to structural stability of GaN: How to grow cubic GaN", International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Shizuoka, Japan (July 6-9, 2008)
 19. K. Takai, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Theoretical Investigation on Ge Vacancies under Uniaxial Strain -Generation of Acceptor Level Induced by Uniaxial Strain-" The 4th International SiGe Technology and Device Meeting, Hsinchu, Taiwan, May 11-14, 2008.
 20. Kentaro Takai, Kenji Shiraishi, and Atsushi Oshiyama, "Generation of Acceptor Levels in Ge by the Uniaxial Strain -A Theoretical Approach", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science, Honolulu, Hawaii, USA, October 13-17, 2008.
 21. Yeonghun Lee, Takahiro Nagata, Kuniyuki Kakushima, Kenji Shiraishi, and H. Iwai, "Electronic Structure Analysis of Silicon Nanowires for High Conductivity in n- and p-channel Nanowire-FET", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science, Honolulu, Hawaii, USA, October 13-17, 2008.
 22. Motoyuki Sato, Chihiro Tamura, Kikuo Yamabe, Kenji Shiraishi, Seiichi Miyazaki, Keisaku Yamada, Ryu Hasunuma, Takayuki Aoyama, Yasuo Nara and Yuzuru Ohji, "Impact of nitrogen in HfSiON and of activation annealing on hole trapping and applicable of a technique to separate hole trap effects from interface state degradation in NBTI of HfSiON/TiN", IEEE International Reliability Physics Symposium, Phoenix, AZ, USA, April 28 - 30, 2008.
 23. T. Ishida, N. Tega, Y. Mori, H. Miki, T. Mine, H. Kume, M. Muraguchi*, Y. Takada*, K. Shiraishi* and R. Yamada, "A New Insight into the Dynamic Fluctuation Mechanism of Stress-Induced Leakage Current", IEEE International Reliability Physics Symposium, Phoenix, AZ, USA, April 28 - 30, 2008.
 24. Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Shintaro Nomura and Kenji Shiraishi, "Tunable interaction between the two-dimensional electron gas and an isolated level by the magnetic field", International Conference on Physics of Semiconductor, Rio de Janeiro, Brazil, July 27-August 1 2008.
 25. Masakazu Muraguchi, Yukihiro Takada, Shintaro Nomura and Kenji Shiraishi, "Theoretical Study on Electron Dynamics for a Two-Dimensional Electron Gas Coupled with a Quantum Dot", International Conference on Physics of Semiconductor, Rio de Janeiro, Brazil, July 27-August 1 2008.
 26. Y Sakurai, S Nomura, K Shiraishi, M Ikeda, K Makihara and S Miyazaki, "Temperature dependence of capacitance of Si quantum dot floating gate MOS capacitor", 25th International Conference on

Low Temperature Physics (LT25), Amsterdam, The Netherlands, 6–13 August 2008

27. Y Takada, M Muraguchi, S Nomura and K Shiraishi, “Theoretical studies of coupled quantum dot system with a two-dimensional electron gas in the magnetic fields”, 25th International Conference on Low Temperature Physics (LT25), Amsterdam, The Netherlands, 6–13 August 2008
28. M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura and K. Shiraishi, “Theoretical study of the electron dynamics of a quantum wire coupled with the quantum dots”, 25th International Conference on Low Temperature Physics (LT25), Amsterdam, The Netherlands, 6–13 August 2008
29. Yoko Sakurai, Shintaro Nomura, Yukihiro Takada, Kenji Shiraishi, Masakazu Muraguchi¹, Tetsuo Endoh, Mitsuhsa Ikeda, Katsunori Makihara, Seiichi Miyazaki, “Temperature Dependence of Electron Transport between Quantum Dots and Electron Gas”, International Symposium on Nanoscale Transport and Technology (*ISNTT2009*), Atsugi, Kanagawa, Japan, January 20–23, 2009
30. Y. Sakurai, S. Nomura, Y. Takada, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, “Temperature Dependence of Electron Tunneling between Quantum Dots and Electron Gas”, American Physical Society March Meeting 2009, Pittsburgh, USA, Mar. 15–19 2009
31. Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yoko Sakurai¹, Shintaro Nomura¹, Yukihiro Takada¹, Kenji Shiraishi¹, Mitsuhsa Ikeda², Katsunori Makihara², Seiichi Miyazaki², Yasuteru Shigeta, “New insight into Tunneling Process between Quantum Dot and Electron Gas”, American Physical Society March Meeting 2009, Pittsburgh, USA, Mar. 15–19 2009
32. K. Ohmori, T. Matsuki, D. Ishikawa, T. Morooka, T. Aminaka, Y. Sugita, T. Chikyow, K. Shiraishi, Y. Nara, K. Yamada, “Impact of additional factors in threshold voltage variability of metal/high-k gate stacks and its reduction by controlling crystalline structure and grain size in the metal gates”, 2008 IEEE Electron Devices Meeting, San Francisco, CA, USA, Dec. 15–17, 2008.
33. M. Sato, N. Umezawa, J. Shimokawa, H. Arimura, S. Sugino, A. Tachibana, M. Nakamura, N. Mise, S. Kamiyama, T. Morooka, T. Eimori, K. Shiraishi, K. Yamabe, H. Watanabe, K. Yamada, T. Aoyama, T. Nabatame, Y. Nara, Y. Ohji, “Physical model of the PBTi and TDDB of Ia incorporated HfSiON gate dielectrics with pre-existing and stress-induced defects”, Tech. Digest 2008 IEEE Electron Devices Meeting, San Francisco, CA, USA, Dec. 15–17, 2008.
34. M. Sato, N. Umezawa, N. Mise, S. Kamiyama, M. Kadoshima, T. Morooka, T. Adachi, T. Chikyow, K. Yamabe, K. Shiraishi, S. Miyazaki, A. Uedono, K. Yamada, T. Aoyama, T. Eimori, Y. Nara, Y. Ohji, “Physical understanding of the reliability improvement of dual high-k CMOSFETs with the fifth element incorporation into HfSiON gate dielectrics”, 2008 Symposium on VLSI Technology, Honolulu, HI, USA, June 15–17, 2008.
35. Kadoshima, M.; Matsuki, T.; Mise, N.; Sato, M.; Hayashi, M.; Aminaka, T.; Kurosawa, E.; Kitajima, M.; Miyazaki, S.; Shiraishi, K.; Chikyo, T.; Yamada, K.; Aoyama, T.; Nara, Y.; Ohji, Y. “Improved FET characteristics by laminate design optimization of metal gates –Guidelines for optimizing metal gate stack structure–”, 2008 Symposium on VLSI Technology, Honolulu, HI, USA, June 15–17, 2008.

36. Masakazu Muraguchi, Yukihiro Takada, Yoko Sakurai, Tetsuo Endoh, Shintaro Nomura, Mitsuhisa Ikeda, Katsunori Makihara, Seiichi Miyazaki, and Kenji Shiraishi "Theoretical investigation of quantum dot coupled to a two-dimensional electron system", 13th Advanced Heterostructures and Nanostructures Workshop, Hapuna Beach, HI, December 7-12, 2008
37. Shintaro Nomura, Yoko Sakurai, Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Mitsuhisa Ikeda, Katsunori Makihara, Seiichi Miyazaki, and Kenji Shiraishi, "Capacitance measurements on quantum dots coupled to a two-dimensional electron system", 13th Advanced Heterostructures and Nanostructures Workshop, Hapuna Beach, HI, December 7-12, 2008
38. Yoko Sakurai, Shintaro Nomura, Yukihiro Takada, Kenji Shiraishi, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Mitsuhisa Ikeda, Katsunori Makihara, and Seiichi Miyazaki, "Temperature Dependence of Electron Tunneling from Two Dimensional Electron Gas to Quantum Dots", The Second International Symposium on Interdisciplinary Materials Science (ISIMS-2009), Tsukuba, Japan, March 9-10, 2009.
39. Yeonghun Lee, Takahiro Nagata, Kuniyuki Kakushima, Kenji Shiraishi, Hiroshi Iwai, "A Study on Electronic Structure of Silicon Nanowires with Diverse Diameters and Orientations for High Performance FET", 2008 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ULSI DEVICES: SCIENCE AND TECHNOLOGY. Tokyo, Japan, November 5-7, 2008
40. Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Shintaro Nomura, Kenji Shiraishi, "Theoretical studies on the magnetic field effect of the two-dimensional tight-binding lattice coupled to a discrete level", The Sixth Conference on Physical Phenomena in High Magnetic Fields (PPHMF-VI), Tallin, Estonia, August 1-5, 2008
41. M. Muraguchi, T. Okunishi, K. Shiraishi and K. Takeda, "Theoretical Study on Time-dependent Phenomena of Photon-Assisted Tunneling through Charged Quantum Dot", International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, Tokyo, Japan, May 31-June 3, 2008
42. H. Watanabe, T. Hosoi, Y. Kita, T. Shimura, K. Shiraishi, Y. Nara, and K. Yamada, "Origins of interface dipoles at p-metal/Hf-based high-k gate stacks", International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD) 2008, Tokyo, Japan, May 31-June 3, 2008
43. Katsumasa Kamiya, Mauro Boero, Masaru Tateno, Kenji Shiraishi and Atsushi Oshiyama, "POSSIBLE MECHANISM OF PROTON TRANSFER THROUGH PEPTIDE GROUPS IN THE H-PATHWAY OF THE BOVINE CYTOCHROME C OXIDASE", 15th European Bioenergetics Conference 2008, Dublin, Ireland, July 19-24, 2008.
44. <招待講演> K. Shiraishi, "Study of nanowire band structure for the analysis of its conduction", IEEE EDS Mini-colloquium for Nano CMOS and Nanowire, Yokohama, Feb. 21, 2009

国内会議

1. 岩田潤一, 「Ral-Space Density-Functional Theory code for large-scale electronic structure calculations」, 計算量子科学によるナノアーキテクチャの構築, 東京大学, 2008年6月24日
2. 岩田潤一, 白石賢二, 押山淳, 「数 nm サイズ Si 量子ドットの大規模第一原理計算」、日本物理

学会 2008 秋季大会 2008 年 9 月 20 日～23 日、盛岡

3. 岩田潤一,「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ」,次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会,学士会館,東京,2009年3月11日
4. 岩田潤一,「超並列機向け実空間DFTコード(RSDFT)-現状と今後-」,TDDFT:光応答計算の基礎、応用と展開,キャンパスイノベーションセンター,東京,2009年3月18日
5. 辻美和子,押山淳,佐藤三久,岩田潤一,「RSDFT コードの OpenMP/MPI ハイブリッド並列化と性能評価」,次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア第3回公開シンポジウム,自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター,2009年3月4日～5日
6. 二村保徳,櫻井鉄也,多田野寛人,岩田潤一,「密度汎関数法で考慮する電子状態数の収束性への影響評価」,日本応用数理学会,京都大学理学部6号館,2008年3月7日～8日
7. 高木祥光,大野隆央,岡田 晋 ``カーボンナノチューブを擦ることによるカーボンナノチューブの回転運動” フラーレン・ナノチューブ学会,第35回フルーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
8. S.-K Jeong, 岡崎俊也,岸直希,中西毅,岡田 晋,坂東俊治,飯島澄男, ``単層カーボンナノチューブのブリージングモードに対するフルーレン内包の影響”フルーレン・ナノチューブ学会,第35回フルーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
9. 河合孝純,岡田 晋,宮本良之,日浦英文, ``グラフェンシートと引き裂きの MD シミュレーション:端の原子構造”フルーレン・ナノチューブ学会,第35回フルーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
10. 岡田 晋, ``SiO₂ 上に吸着された半導体ナノチューブの電子構造とエネルギー論”フルーレン・ナノチューブ学会,第35回フルーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
11. 岡崎俊也,大窪清吾,岸直希,中西毅,岡田 晋,飯島澄男, ``フルーレン内包による単層カーボンナノチューブの直径に依存したバンドギャップ変化”フルーレン・ナノチューブ学会,第35回フルーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(東京,東京工業大学),2008年8月27日--29日
12. 岡田晋 ``SiO₂ 上に吸着された半導体ナノチューブの電子構造とエネルギー論” 日本物理学会第2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
13. 岡田晋,柳和宏,片浦弘道 ``β カロテン内包ナノチューブの電子構造”日本物理学会2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
14. 河合孝純,岡田晋,宮本良之,日浦英文 ``グラフェン引き裂きにおける原子スケール端構造の安定性:分子動力学シミュレーション”日本物理学会2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
15. 大谷実,岡田晋 ``電圧印加による2層グラフェンの再金属化”日本物理学会2008年秋季大会(盛岡市,岩手大学)2008年9月20--23日
16. <招待講演>岡田 晋 ``カーボン系構造変化の第一原理シミュレーション”第4回励起ナノプロセス研究会(応用物理学会),(和歌山市,和歌山大学サテライト),2008年11月21日,22日
17. 高木祥光,岡田晋 ``紫外領域における単層カーボンナノチューブの光学的性質”フルーレン・ナノ

- チューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
18. 大谷実、岡田晋`非開口ナノチューブにおける自発分極`フラーレン・ナノチューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
 19. 岡田晋`炭素ナノワイヤのエネルギー論と電子構造`フラーレン・ナノチューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
 20. 田中倫子、河合孝純、岡田晋`半金属分子ナノワイヤ: 酸素分子内包カーボンナノチューブ`フラーレン・ナノチューブ学会, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム(名古屋,名城大学),2009 年 3 月 2 日--4 日
 21. 斎藤峯雄, 澤田啓介, 石井史之, 岡田晋, 河合孝純`グラフェンナノリボンのキャリアドーピングによる磁性制御`日本物理学会第 64 回年次大会 (東京,立教学院),2009 年 3 月 27 日--30 日
 22. 高木祥光, 岡田晋 `紫外線領域に於ける単層カーボンナノチューブのバンド間遷移`日本物理学会第 64 回年次大会 (東京,立教学院),2009 年 3 月 27 日--30 日
 23. 岡田晋`炭素ナノワイヤのエネルギー論`日本物理学会第 64 回年次大会 (東京,立教学院),2009 年 3 月 27 日--30 日
 24. <招待講演>石田 猛, 手賀直樹, 毛利友紀, 三木浩史, 峰利之, 久米均, 鳥居和功, 村口正和, 高田幸宏, 白石賢二, 山田廉一、”可変ストレス誘起リーク電流(V-SILC)の機構解析”、第 55 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ユビキタス世界を支える LSI デバイスの信頼性物理—信頼性を損なうのはだれだ? なぜか?—」(中部大学 2008 年 9 月)
 25. <招待講演>村口正和, 白石賢二、”信頼性を支配するトンネル現象に対する新しい理解”、第 55 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ユビキタス世界を支える LSI デバイスの信頼性物理—信頼性を損なうのはだれだ? なぜか?—」(中部大学 2008 年 9 月)
 26. <招待講演>白石賢二、”量子効果が生み出すナノ材料の新物性とナノ界面科学”、第 55 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「シリコンナノエレクトロニクス新展開— 新材料導入によるシリコンプラットフォームの超機能化 —」(中部大学 2008 年 9 月)
 27. <招待講演>白石賢二、”埋もれた界面に関する理論および計算科学研究の最前線”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「X線・中性子による埋もれた界面研究の最前線」、(筑波大学 2009 年 3 月)
 28. <招待講演>岩井洋, 名取研二, 白石賢二, 山田啓作, 大毛利健治, 筒井一生, 角嶋邦之, パールハット アヘト、”シリコンナノワイヤ FET 研究の現状とロードマップ作成の考え方”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ナノ CMOS への新展開-高機能化・高性能化を図る新材料・新構造技術」、(筑波大学 2009 年 3 月)
 29. <招待講演>野村晋太郎, 櫻井蓉子, 高田幸宏, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一、 “電子励起状態を介した量子ドットへのトンネル現象の変調”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「Si系およびC系ナノ構造と励起プロセス」、(筑波大学 2009 年 3 月)
 30. <招待講演>白石賢二、”ポストスケーリング時代にデバイス・物性物理は何をなすべきか?”、第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ポストスケーリング時代をデバイス・物性物理から斬る

-これが半導体デバイスの未来像だ-、(筑波大学 2009 年 3 月)

31. <招待講演>村口正和, 遠藤哲郎, 牧原克典, 池田弥央, 宮崎誠一, 櫻井蓉子, 高田幸宏, 野村晋太郎, 白石賢二, ”少数電子で動く未来デバイスの姿 量子電子ダイナミクスからのメッセージ” 第 56 回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ポストスケール時代をデバイス・物性物理から斬る -これが半導体デバイスの未来像だ-」、(筑波大学 2009 年 3 月)
32. T. Tanaka, K. Kamiya, Y. Shigeta and K. Shiraishi, “Theoretical proposal of a new pKa concept applicable in protein environment by the first principles calculations”、日本生物物理学会第46回年会、2008 年 12 月 3 日-5 日、福岡
33. 神谷克政, 重田育照, マウロボエロ, 白石賢二, 押山淳, 「蛋白質の立体構造・電子状態・生物機能の間の相関関係の研究」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
34. 高田幸宏, 櫻井蓉子, 村口正和, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 遠藤哲郎, 野村晋太郎, 白石賢二, 「電子ガス-量子ドット結合系における電子構造 II」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
35. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 高田幸宏, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 「電子ガス-量子ドット結合系における C-V 特性および I-V 特性の Sweep Rate 依存性」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
36. 村口正和, 遠藤哲郎, 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 高田幸宏, 白石賢二, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 斎藤慎一, 「電子ガス-量子ドット結合系における電子ダイナミクス II」、日本物理学会 第 64 回年次大会、東京、2009 年 3 月 27 日-3 月 30 日
37. 高田幸宏, 村口正和, 野村晋太郎, 白石賢二, 「電子ガス・量子ドット結合系における電子状態」、日本物理学会 2008 年秋季大会、盛岡、岩手、2008 年 9 月 20 日-23 日
38. 村口正和, 高田幸宏, 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 斎藤慎一, 白石賢二, 「電子ガス-量子ドット結合系における電子ダイナミクス」、日本物理学会 2008 年秋季大会、盛岡、岩手、2008 年 9 月 20 日-23 日
39. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 「電子ガス-量子ドット結合系における C-V 特性」、日本物理学会 2008 年秋季大会、盛岡、岩手、2008 年 9 月 20 日-23 日
40. 高田幸宏, 村口正和, 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 白石賢二, 「シリコン量子ドットフローティングゲート型メモリの理論的考察」、2008 年秋季第69回応用物理学学会学術講演会、春日井、愛知、2008 年 9 月 2 日-5 日。
41. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一, 「量子ドットフローティングメモリの低温における C-V 特性」、2008 年秋季第69回応用物理学学会学術講演会、春日井、愛知、2008 年 9 月 2 日-5 日。
42. 李 映勲, 永田貴弘, 白石賢二, 角嶋邦之, 岩井 洋, 「第一原理計算によるシリコンナノワイヤの電子構造解析」、2008 年秋季第69回応用物理学学会学術講演会、春日井、愛知、2008 年 9 月 2 日-5 日。
43. 山口慶太, 大竹 朗, 小林賢司, 白石賢二, 「MONOS 型メモリにおける SiN 層の N 空孔型欠陥の原子構造と電子構造」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月

30日-4月2日

44. 大竹 朗, 山口慶太, 小林賢司, 白石賢二、「MONOS 型メモリにおける SiN 層への O 混入の効果の理論的検討」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
45. 李 映勲, 永田貴弘, 角嶋邦之, 白石賢二, 名取研二, 岩井 洋、「引っ張り歪み Si ナノワイヤの電子構造とバリスティック伝導」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
46. 櫻井蓉子, 野村晋太郎, 白石賢二, 村口正和, 遠藤哲郎, 池田弥央, 牧原克典, 宮崎誠一、「Si 量子ドットフローティングゲート MOS キャパシタにおける過渡電流特性」、2009 年春季第 56 回応用物理学関連講演会、つくば、茨城、2009 年 3 月 30 日-4 月 2 日
47. <招待講演> 白石賢二、「LSI 開発の効率化ー計算科学的手法による次世代デバイスの高効率製造ー」、08 秋季 半導体プロセスシンポジウム、「32/22nm 以降を見据えたプロセス技術ー要素技術開発の現状と今後の課題を徹底検証ー」、東京、2008 年 10 月 3 日。
48. 白石賢二、小林賢司、石田 猛、奥山 裕、山田廉一、「MONOS 型メモリの電荷蓄積機構の理論的研究」、応用物理学会、シリコンテクノロジー分科会、第 101 回研究集会「ゲートスタック構造の新展開:高移動度チャネル技術を中心に」、東京、2008 年 6 月 9 日-10 日
49. 幸田みゆき、梅澤直人、角嶋邦之、Parhat Ahmet、白石賢二、知京豊祐、山田啓作、服部健雄、岩井洋、「価電子揺動 Ce 酸化物を利用した High-k 膜中の固定電荷の抑制」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
50. 大竹朗、山口慶太、小林賢司、白石賢二、「MONOS 型メモリの電荷蓄積機構の第一原理計算による考察」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
51. 大毛利健治、松木武雄、石川大、諸岡哲、網中敏夫、杉田義博、知京豊裕、白石賢二、奈良安雄、山田啓作、「金属/high-k 絶縁膜構造トランジスタにおいて金属結晶が閾値電圧ばらつきに及ぼす影響とその抑制」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
52. 石田猛、手賀直樹、毛利友紀、三木浩史、峰利之、久米均、鳥居和功、村口正和、高田幸宏、白石賢二、山田廉一、「可変ストレス誘起リーク電流(V-SILC)の機構解析」、ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、第 14 回特別研究会、三島、静岡、2009 年 1 月 23 日-24 日
53. <招待講演> 寒川義裕、秋山 亨、伊藤智徳、白石賢二、柿本浩一、「立法晶 GaN エピ成長における成長形の制御」、第 38 回結晶成長国内会議、仙台、2008 年 11 月 4 日-6 日
54. <招待講演> 白石賢二、「チトクローム酸化酵素プロトン輸送の理論計算」、菅野シンポジウム、「配位子場の科学に基づく融合科学の創成のために」、つくば、2009 年 3 月 7 日
55. Yoshihiro Kangawa, Toru Akiyama, Tomonori Ito, Kenji Shiraiishi, Koichi Kakimoto, "Theoretical study of growth condition of cubic GaN", 第 27 回電子材料シンポジウム、修善寺、静岡、2008 年 7 月 9 日~11 日
56. <招待講演> 渡部平司、喜多祐起、細井卓治、志村考功、白石賢二、奈良安雄、山田啓作、「金属電極と Hf 系高誘電率絶縁膜界面の実効仕事関数変調機構」、第 72 回半導体・集積回路技術シ

ンポジウム、小金井、東京、2008年7月10日-11日

<学位論文（修士）>

- 1) 田中朝紀 「たんぱく質環境下でのプロトン親和性の理論的考察」
- 2) 高田幸宏 「2次元電子ガスー量子ドット結合系の電子構造」

<学位論文（博士）>

- 1) 高井健太郎 「Theoretical Study on the Electronic Structure of the Vacancies in Compressively Strained Ge」
- 2) 栗田貴宏 「Theoretical Investigation into Atomic and Electronic Structures of Sapphire Surfaces」