

III. 量子物性研究部門

1. メンバ

教授 白石 賢二、日野 健一

准教授 Xiao-Min Ton、小泉 裕康、岡田 晋

助教 前島 展也、岩田 潤一、神谷 克政

研究員 高木 祥光、小鍋 哲、有川 晃弘

大学院生 5 名 (白石グループ)

2. 概要

日野グループ

当グループは、光と物質の相互作用に起因する量子ダイナミックス・量子制御ならびに分子性結晶の光誘起相転移、遷移金属酸化物における光誘起超高速ダイナミックスを中心に理論研究を行っている。

小泉グループ

銅酸化物高温超伝導体の機構解明、銅酸化物を利用した、量子電流デバイス、量子コンピューター実現の為の理論的研究を行っている。

岡田グループ

ナノスケール構造を持つ物質においては、その物性は系のサイズ、表面(端)形状等に非常に大きく依存することが知られている。このことは、他方において、既存の物質においても、物質のサイズをナノメートルオーダーとし、その形状を制御することにより、新奇物性、新機能発現を誘起させることが可能であることを示唆している。実際、興味深い物性を示す種々のナノスケール炭素物質群の合成が近年盛んになされている。例えば、有限幅のグラファイト断片（グラファイトリボン）はその端形状に依存して、端を構成する原子にスピン分極が生じる事が知られている。さらに、このリボンを丸めた有限長さのナノチューブでは、そのチューブ直径に依存して、強磁性、反強磁性磁気秩序を示す事が我々の量子論に基づく全エネルギー計算から明らかになっている。また、チューブに 5 員環と 8 員環からなるトポロジカル欠陥を導入することにより、欠陥にそって分極電子が局在しチューブ軸にそって強磁性的秩序を発現する。

我々のグループでは、ナノサイズ炭素系（ナノチューブ、フラーレン、グラファイト）の電子物性を理論的に解析することによって、サイズ、形状が誘起する特異な電子物性発現の可能性を探索する事を目的としている。

白石グループ

半導体ナノ物性グループは本年度はナノ物質・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を行った。

3. 研究成果

日野グループ

【1】テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣電子・正孔系の多体問題

光と電子系が相互作用する際、光子場強度が大きくなるにつれて遷移確率がより減少、消失するというような逆説的な予見が行われている。このような効果は、とりわけ、光媒介トンネリング (PAT) と呼ばれる現象において顕著に現れる。これは、通常のトンネル現象に際して光の吸収・放出が介在することによって、電子トンネリングの確率が変調する現象である。特に、ある特定の条件下でトンネル確率が零になる動的局在 (DL) は PAT の最も特徴的な現象である。PAT や DL の研究は、超伝導 Josephson 接合 (S-I-S 接合) におけるマイクロ波照射下でのクーパ対のトンネル現象や振動磁場下での原子の超微細構造における Landé g -因子の磁場繰り込み効果に始まる。これらは、近年、半導体超格子 (SL) 系における電気伝導特性や冷却原子系から成る光超格子において実験的に検証されている。ところで、最近の高パワー THz 波光源の技術開発に伴い、THz 波に励起された半導体ナノ構造での量子ダイナミックスの研究が進展してきている。本報では、数 100kV/cm 程度のピーク電場を有する強い THz 領域の光子場に駆動された半導体超格子を対象として、PAT や DL における Floquet 電子 (光着衣電子) 状態や Floquet 励起子 (光着衣励起子) 状態の共鳴構造の安定性を、R 行列 Floquet 理論に基づく多チャンネル散乱理論によって解析する。

[光着衣電子における動的Fano共鳴]

ここでは、SLの積層方向に静電場とTHz波 (振幅 F_1 および振動数 ω)の単色光) が印加されている系 (動的Wannier-Stark ladder: DWSL) を考察する。ただし、Bloch周波数 $\hbar$ と ω との比 $\alpha = \Omega / \omega$ は正の整数とする。駆動THz波の強度が大きくなるにつれミニバンド間結合やそれに伴う電子の連続帯ミニバンドへの励起がより重要になってくる。この系では、ミニバンド間結合として、dc電場およびac電場に起因するそれぞれdc・Zenerトンネリング (ZT) およびac-ZTの二つの効果が共存する。ミニバンドのラベルを b 、光子サイドバンド指数を j とすると、当該の光着衣状態は量子数 (b, j) で表される多重項構造を有し、隣接する光子サイドバンドはお互いにac-ZTによって結合する。とりわけ、THz波の強度が大きくなりDLが発現する際、親バンド $(1,0)$ は、隣接するバンド $(b \geq 2, j \leq -1)$ と擬エネルギー (E) 的に縮退し、Fano共鳴 (FR) に類似した現象が引き起こされる。これを「動的FR (DFR)」と呼ぶ。重要なことは、静的な結合に起因する従来のFRとは異なって、DFRを支配するac-ZT結合は、 F_1 や ω によって変調可能であることである。

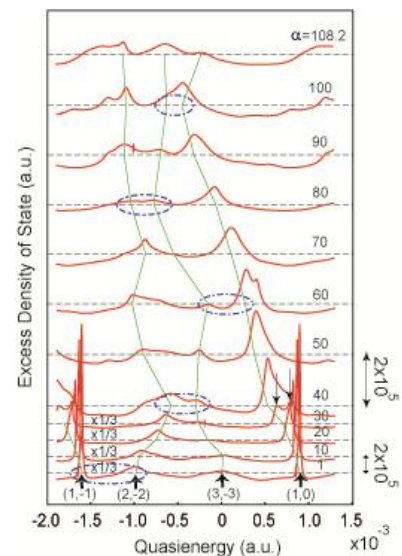


図1.1 $\alpha=1 \sim 108.2$ における擬エネルギー E に対する過剰状態密度 $\rho^{(ex)}(E)$ 。

この意味において、DFRは、超冷却原子系の強結合Bose-Einstein凝縮体における光Feshbach共鳴と類似した効果とみなせる。図1に、静電場104.5 kV/cm下のSL: 35/11ML-GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}Asにおいて、様々なponderomotive半径($=F_1/m_e\Gamma^2$)に対する過剰状態密度 $\rho^{(ex)}(E)$ の計算結果を示す。これは、ある擬エネルギー E における系の崩壊寿命に対応する物理量である。ここで、 Γ はTHz電場下での電子の古典的周期運動の軌道半径に対応し、 m_e は電子の有効質量である。DFRによって、従来非常に安定と考えられていたDL状態[$\alpha=108.2$ (a.u.)]が不安定化していることが見て取れる。

[フラクショナルDWSLにおける共鳴構造]

ここでは、 Γ が有理数の DWSL を考える。単一ミニバンドにおける強束縛模型によると、 ζ が整数の場合と異なり、この系では隣接する WSL サイト間のエネルギー差 Ω が、整数個の光子の吸収・放出過程と非共鳴になるため、PAT の効果が抑制される。それゆえ、Floquet 状態にミニバンド構造が形成されたり、DL が発現したりすることはない。しかしながら、その擬エネルギー構造は特徴的なフラクタル性を示すことが知られている。ところで、駆動光子場が強くなるに従い、ac-ZT によって単一ミニバンド模型は破綻する。さらに、

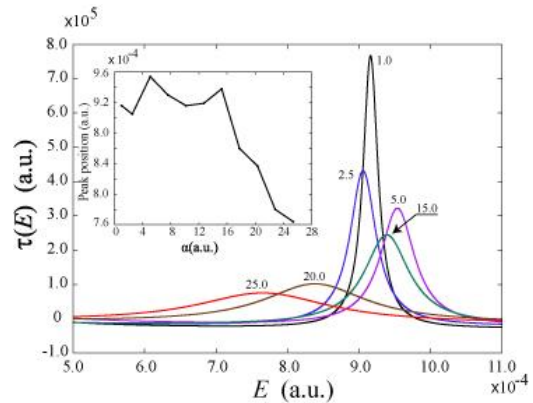


図1.2. $\alpha = 1 \sim 25$ における擬エネルギー E に対するDWSLの寿命 $\tau(E)$ 。Inset: α に対する共鳴位置の変化。

強束縛模型では DWSL の共鳴構造を正確には記

述し得ない。そこで、より正確な理論である散乱理論を適用することによって、この系の擬エネルギー構造と寿命を解析した。ここでは、問題の簡単化のため、高周波数近似($\Gamma \gg I_p$, ここで、 I_p はイオン化ポテンシャル)の適用範囲で数値計算を行った。図 2 に、静電場 122 kV/cm SL: 35/7ML-GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As における $\zeta=2/3$ のときの DWSL の寿命 $\tau(E)$ を示す。 Γ が大きくなるにつれて、共鳴状態のピーク位置が振動しながら、赤方偏移することが分かる。また、それに付随して DWSL の寿命も短くなることが分かる。上記の特異な振動は、元々の WSL のポテンシャルに光子場を繰り込んだ光着衣ポテンシャルによって理解できる。図 2 の結果は、 Γ が有理数の DWSL においては、たとえ光子場がさほど強くなくても、従来の単純な模型は破綻し、特徴的なフラクタル性も厳密には成立しないことを示している。

[光着衣励起子における動的 Fano 共鳴]

光着衣電子・正孔多体系と関連する過渡的量子ダイナミックスの問題を扱う一環として、THz 駆動下の超格子における光着衣励起子の擬エネルギー状態（擬定常状態）の解析を行う。この系では、第1ミニバンド起因フォトンサイドバンドに形成される励起子離散状態は、ac-ZTおよびクーロン結合を介した動的な結合により、上位のサイドバンドの励起子連続状態と相互作用をし、DFRを発現すると考えられる。この系にR行列Floquet理論を適用し、多チャンネル散乱問題として

数値解析を行う。ピーク電場 $E_{ac}=40$ および 200 kV/cm 、 $\Gamma=93\text{ meV}$ のレーザーに駆動されたSL: 35/11ML-GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}Asに、さらに弱プローブを照射したときの光着衣励起子の吸収スペクトルの計算結果を図3に示す。 $E_{ac}=200\text{ kV/cm}$ において、非対称形状を有する励起子DFRが発現することを示すことができた。

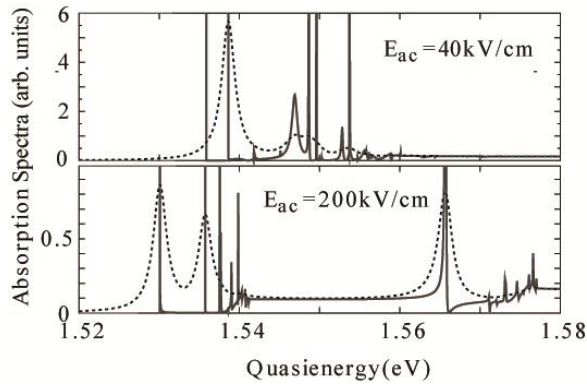
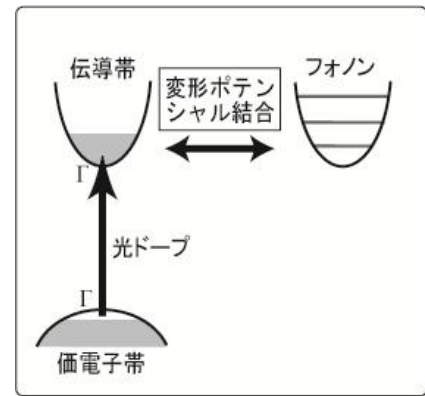


図1.3. 光着衣励起子の吸収スペクトル。実線；自然スペクトル、破線：1meVの均一広がりをつたみ込んだスペクトル。

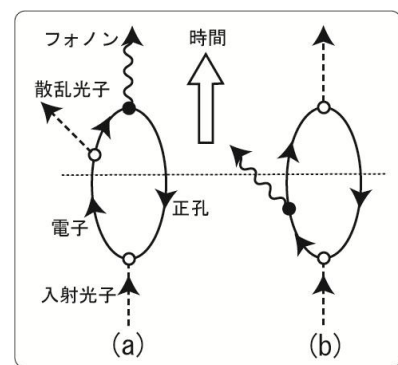
【2】超短パルス励起半導体における動的ファノ共鳴と過渡的準粒子生成

高強度超短パルスレーザーによって光ドープされた $n\text{-Si}$ において、過渡的な Fano 共鳴(FR)が発現することが実験で見出されている。本研究では、この系に誘起されるコヒーレント振動を対象として、その初期過程に発現する過渡的な FR 効果の理論的解明を目的とする。当該の Fano 共鳴を誘起する電子・光学フォノン相互作用は、照射レーザー強度に依存して時間的に変動するので、「動的 Fano 共鳴 (DFR)」というタイプに属する。この系に多チャンネル共鳴を取り込んだ散乱理論を適用し、「ポーラロニックな過渡的準粒子生成」と「プラズモン-フォノン相互作用」の二つの観点から多体理論を構築し、この系に内在する物理の詳細を明らかにする。当該系の FR は、レーザー照射直後から 50fs 程度までの非常に短い時間スケールで発現する超高速過程であり、現在までのところ Si においてのみ観測が報告されている。この系では、図 1.4 のように、光ドープされた電子が変形ポテンシャル結合を介してフォノンと相互作用し、それによって FR が誘起されと考えられる。この



1.4 DFR の概念図

DFR は、図 1.5 で示すラマン散乱過程によって模式的に理解できる。過程(a)では入射光子によって仮想的な電子・正孔対が生成されるが、一方、過程(b)では更に 1 フォノン放出を伴って伝導帯内の電子遷移が引き起こされる。両過程は、図 1.5 の水平破線で示される過渡的時間においてエネルギー的に縮退する。このとき、過程(a)の電子・正孔対状態と過程(b)のフォノン励起状態が、



1.5 1 フォノン励起ラマン散乱

過程(a)では入射光子によって仮想的な電子・正孔対が生成されるが、一方、過程(b)では更に 1 フォノン放出を伴って伝導帯内の電子遷移が引き起こされる。両過程は、図 1.5 の水平破線で示される過渡的時間においてエネルギー的に縮退する。このとき、過程(a)の電子・正孔対状態と過程(b)のフォノン励起状態が、

それぞれ閉・開チャンネルとして機能し DFR が発現する。当該の n -Si の DFR は、正孔ドープした p -Si のラマン散乱において古くから知られている FR 効果と類似している。しかしながら、両者は主として次の観点から明確に区別される。この DFR はコヒーレント振動の初期段階においてのみ発現する過渡的現象であり、数 10fs 幅の高強度パルスレーザー照射による高密度電子励起 (10^{19}cm^{-3} 程度)によって誘起される。よって、光子・電子およびフォノン・電子相互作用は、図 2 のような摂動としてではなく、実際は非摂動的な強結合である。実験で観測される DFR も「ポーラロニックな過渡的準粒子生成の痕跡」と理解されている。一方、 p -Si における FR は静的結合に起因する定常的な効果であり、少なくとも光子・電子相互作用は摂動として扱うことが可能である。ところで、このような DFR は GaAs では観測されていない。これは、GaAs ではレーザー誘起によるプラズマ振動が支配的になり、プラズモン-フォノン相互作用が DFR 結合より優勢になるためと推察されている。

【3】多軌道強相関電子系の光誘起コヒーレント振動現象の解析

光照射によって物性を制御しようとする実験的試みが様々な物質群に対してなされており、特に近年は強相関電子系に対する光照射実験が活発に行われている。強相関電子系では伝導性や磁性の異なる相が競合していることが多いために、光照射などの外部からの刺激によって電子状態を大きく変化させることが期待されている。その典型的な例として知られるのが遷移金属酸化物であり、これまでに行われた光照射による物性制御の試みとしてはペロフスカイト構造を有するマンガン酸化物やバナジウム酸化物に対する実験がある。両者ともに、光照射直後に現れた金属化の兆候がピコ秒オーダーで消失し、元の絶縁体状態に戻る様子が観測されている。最近では光照射に付随して生じる光誘起超高速ダイナミクスが主要なトピックの一つに挙げられている。本研究においては、軌道縮退を有する 1 次元強相関電子系における光誘起ダイナミクスの理論的解析を行い、照射光強度が比較的弱い状況では光学応答スペクトルに図 1.6 のようなコヒーレント振動が見られること、そしてその振動の原因が、光励起状態間の

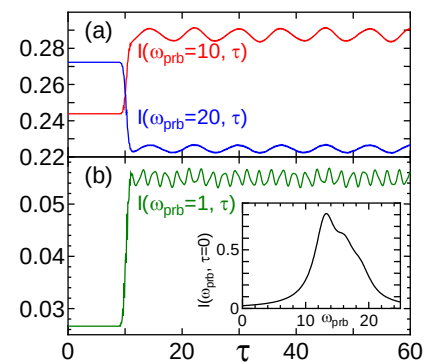


図 1.6 光学応答スペクトルの時間発展

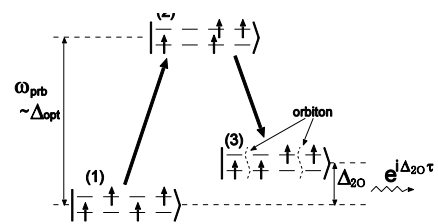


図 1.7 コヒーレント振動に寄与する状態の模式図

量子干渉であることを見出した。特に図 1.6(a)に見られるコヒーレント振動現象は、図 1.7 にある軌道波(orbiton)と呼ばれる軌道縮退系特有の素励起を起源に持つことを示し、実験による観測可能性について議論を行った。

【4】 強レーザーによるオージェ崩壊過程の制御

図 1.8 はオージェ崩壊率と加えたレーザー強度の関係である。オージェ崩壊できない原子にレーザーを加えることによって、オージェ崩壊させる。レーザー強度と到着時刻によって、何時、どの程度崩壊させるかを制御できるその発見によって、将来分子に対して特定な場所で解離させることが可能になる。その研究結果は *Physical Review Letters* に掲載された。

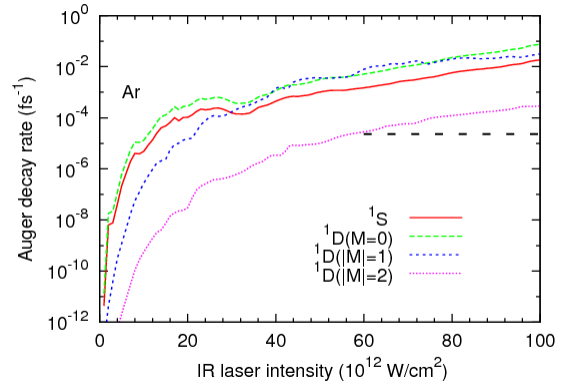


図 1.8 オージェ崩壊率とレーザー強度の関係

【5】 赤外線による光吸収過程の制御

赤外線による光吸収過程に対して、新メカニズムを提案し、そのメカニズムによって、さまざまな赤外線におけるアト秒レーザーの実験結果を解明し、赤外線による、物質の透光性を短い時間(フェト秒)で制御方法と提案した。その研究結果は三つ *Physical Review A* 論文に纏められた。

小泉グループ

【1】 砂時計型磁気励起スペクトル

銅酸化物超伝導体のスピン構造を調べるために中性子散乱による磁気励起スペクトルが観測されている。この磁気励起スペクトルをドーブしたホールを中心にスピン渦ができるとするモデルで考察して来た。これまで、磁気励起をスピン波近似で取り扱ってきたが、厳密対角化による方法で低エネルギー側の解析が精密化できることが分かった。今後、スピン波の方法と厳密対角化による方法を併用し、実験との詳細な比較を目指していく。

【2】 スピン渦誘起ループ電流

磁気励起スペクトルの解析より、スピン渦の存在がかなり確実であるが、このようなスピン渦が存在するとループ電流が誘起されることが示されている。このループ電流をつかい、銅酸化物で観測されている、異常金属状態の解明を進めている。x=1/8状態での超伝導の抑制が説明を行った。

【3】 スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューター

スピン渦誘起ループ電流は右回り、左回りの自由度がある。この自由度を量子ビットとした量子コンピューターを提案した。量子ビット状態の初期化、変換による演算、結果の読み取りについての理論的シミュレーションを行っている。

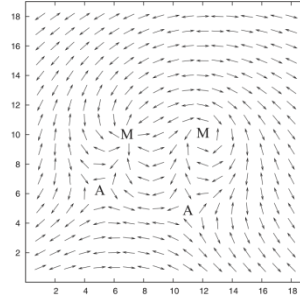


図 2.1 4つのスピンの渦の例。4量子ビットを形成する。

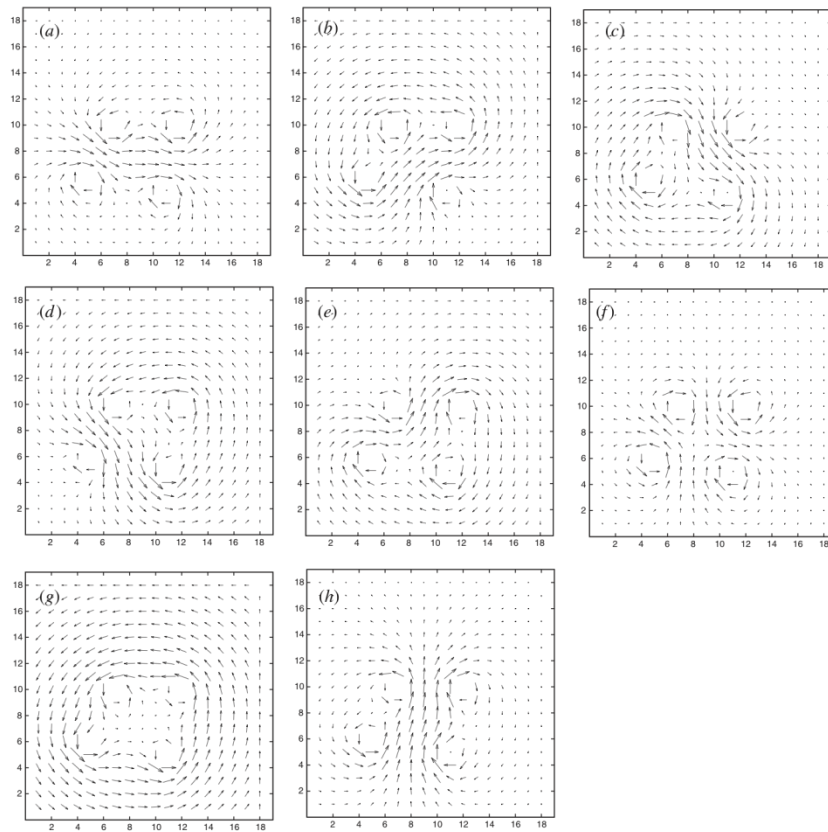


図 2.2 図 2.1 のスピンの渦で可能となる16の電流パターンのうちの8つ。残りの8つは上の電流をそれぞれ逆向きにしたものである。

岡田グループ

複合構造構築による六方晶窒化ホウ素の電子状態制御[論文 3,15,18]

六方晶窒化ホウ素(h-BN)は、ホウ素と窒素からなる蜂の巣格子状ネットワークを有する層状物質であり、数 eV のバンドギャップを有する絶縁体である。すなわち、グラファイト/グラフェンの絶縁体版である。ここでは、この h-BN の層間へのアルカリ原子導入、h-BN スラブへの外部電界印加により、h-BN が容易に金属化することを示した。また、その電子状態の詳細な解析から、伝導に寄与する電子系は、h-BN の層間に分布を有する自由電子的状态であることがあきらかになり、そのフェルミ面の形状はグラファイト層間化合物のそれと定性的に一致することを示した。この結果から、h-BN/アルカリ金属複合体、h-BN/電界複合体が、全く新たな超伝導材料の候補になり得ることを予言した。他方、電子の有効質量の解析から、キャリアの移動度は高々自由電子程度であり、高速動作を要求される半導体材料の伝導チャネルとなり得ないことが明らかになった。

菱面体相グラファイト薄膜の磁性状態の電界制御[論文 4]

菱面体相グラファイト(ABCABC..積層グラファイト)薄膜はその(0001)表面において、フェリ磁性的な磁気秩序を有することが我々の計算から明らかになっている[図 3.1(a)]。その磁性状態の起源はフェルミレベル近傍かつ波数空間端に発現する平坦バンドによるものである。ここでは、その磁性状態を面鉛直方向の電場により制御し、新たな磁性状態への相転移が起こりえることを理論的に予言した。

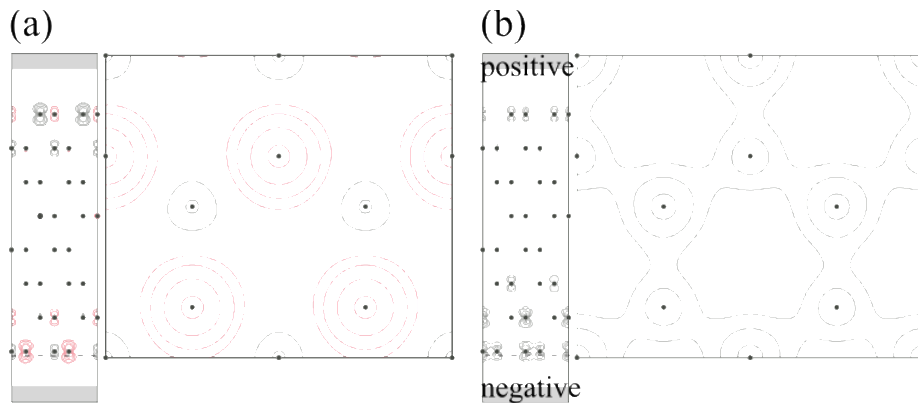


図 3.1 : (a)電界非印加時の菱面体グラファイト薄膜のスピン密度分布。(b) 電界印加時(2.6V/nm) の菱面体グラファイト薄膜のスピン密度分布。

すなわち、電界下において菱面体相グラファイト薄膜はその負電極に面した表面において、強磁性的な次期秩序を有する[図 3.1(b)]。この結果は、グラファイト薄膜の磁性材料応用の可能性を提案したものである。

絶縁体基板によるグラフェン電子構造変調[文献 15]

今日の半導体工学において広く用いられている、酸化シリコン基板上に吸着された、グラフェンの基礎物性の解明を行った。本研究では、酸化シリコン基板の構造モデルとして、 α クォーツの(0001)面を考え、その上にグラフェンシート、2層グラフェンが吸着された、構造のエネルギー論と電子状態の探索を行った。その結果、グラフェン吸着によるエネルギー利得は炭素原子一原子あたり凡そ数十 meV と、典型的な物理吸着系であることが明らかになった。一方、電子状態は相互作用が非常に弱い吸着系であるに関わらず、顕著な変調を受けることが明らかになった。すなわち、基板上においては、本来金属であるグラフェンは、基板の作り出す静電的なポテンシャル変調の影響を受けて、数十 meV のバンドギャップを有する半導体となる。

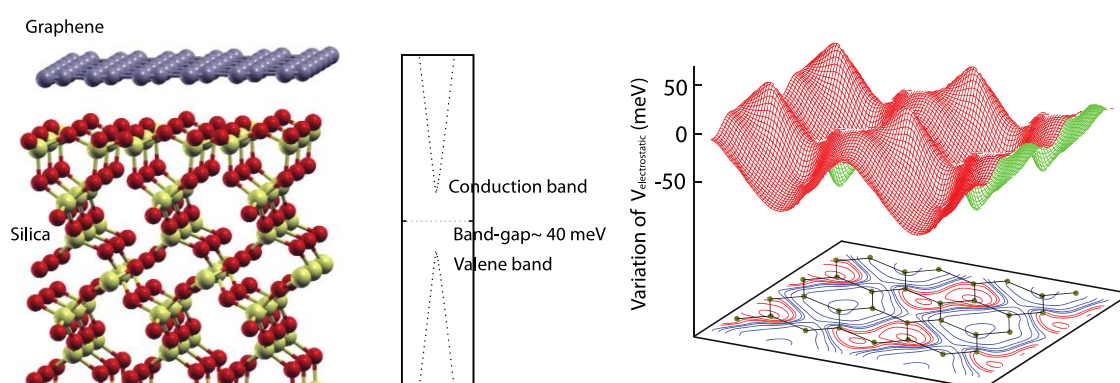


図 3.2: 酸化シリコン上のグラフェンの構造、バンドギャップ、静電ポテンシャルの空間変調。

吸着原子がグラファイト電子状態に及ぼす影響[文献 13]

次に、原子吸着によるグラファイト表面電子物性変調を明らかにするため、Pt を真空蒸着した高配向性熱分解グラファイト (HOPG) 表面の電子状態を、極低温走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いた走査トンネル分光 (STS) 計測により詳細に調べた。この結果、白金微粒子は 2 ~ 4 nm 程度の幅を持つ 1 ~ 2 原子層程度の高さのクラスターとしてグラファイト表面上に堆積しており、白金微粒子の極近傍の炭素上において、通常のグラファイト表面では現れない鋭い電子状態密度ピークがフェルミエネルギー近傍に観測された。非弾性トンネル分光による局所フォノン構造計測や第一原理計算結果より、この電子状態密度ピークは Pt が炭素と混成軌道を形成したことで現れた炭素の非結合 π 電子準位であると帰属した。即ち、Pt が炭素と結合したことでグラファイトの π 共役系が崩れ炭素の非結合 π 電子準位がフェルミエネルギー近傍に現れたものと考えられる。この結果は、ある種の金属原子、クラスター吸着によりグラフェンのフェルミレベル近傍の電子状態の制御が可能であることを示したものである。

金属表面上のカーボンナノチューブ[文献 16]

金表面とパラジウム表面に吸着した半導体型単層カーボンナノチューブの電子状態を第一原理

計算によって調べた。これらの計算により、金属の上に吸着した単層カーボンナノチューブの電子状態は金属種に依存した変更を受けることが明らかになった。金表面上の単層カーボンナノチューブの電子状態は、孤立した単層カーボンナノチューブの電子状態とあまり変わらないが、金属表面に面した炭素原子上には、カーボンナノチューブのバンドギャップ内に有限の状態密度が存在する。一方、パラジウム表面上の単層カーボンナノチューブの電子状態は、パラジウム表面の d 軌道とカーボンナノチューブの π 軌道の強い混成により、孤立した単層カーボンナノチューブの電子状態とは大きく異なる。パラジウム表面上の単層カーボンナノチューブにおいては金属表面に面する側、その反対側ともバンドギャップは存在しない。また、電子の分布からも、金表面上の単層カーボンナノチューブは金表面とはあまり結合を起こさないが、パラジウム表面とは強く混成していることがわかる。これらの計算結果は単層カーボンナノチューブを用いた電子デバイスの作製には電極に用いる金属の影響を考慮しなければならないことを示唆している。

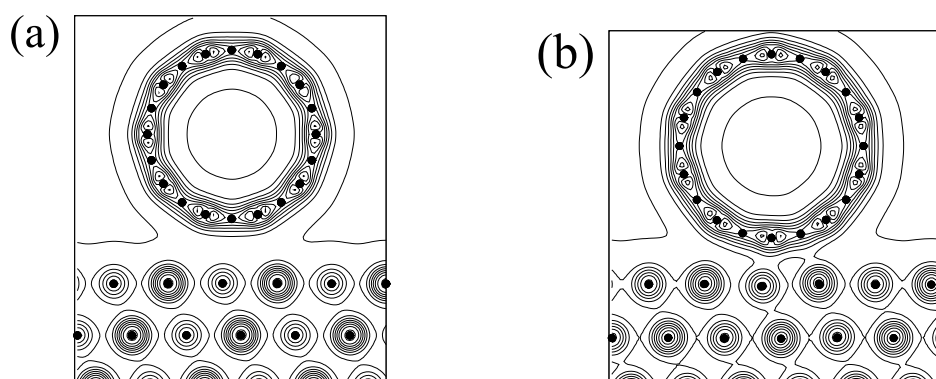
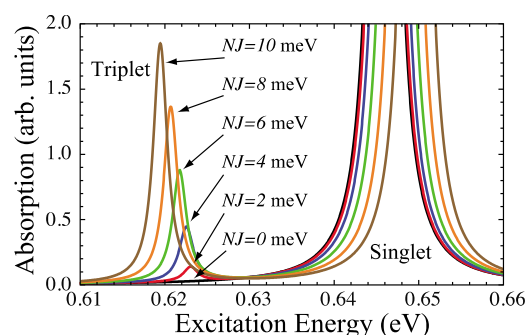


図 3.3 : 金属上に吸着された CNT の電荷密度(a)金表面と(b)パラジウム表面

原子吸着によるカーボンナノチューブ光学特性の変調[文献 1,21]

水素原子が吸着したカーボンナノチューブの光吸収を調べた。水素原子吸着によりスピン軌道相互作用が有効的に増大することに注目し、その効果をベーテ・サルピータ方程式に取り入れ励起子状態を計算した。さらに、得られた励起子状態を用いて光吸収スペクトルを計算した。その結果、吸着水素原子数の増加に伴い一重項励起子と三重項励起子の混成がおき、本来光学禁制である三重項励起子による光吸収がおきることを示した。さらに、実験グループとの共同研究により、水素原子吸着カーボンナノチューブの光学特性を調べ、蛍光スペクトルに現れる三重項励起子による発光ピークの微視的機構を明らかにした。特に、水素原子吸着による一重項励起子と三重項励起子の項間交差効率を計算し、その吸着水素原子密度依存性を明らかにした。



3.4 励起スペクトル

磁性原子内包ナノチューブに於ける光学特性の変調

磁性物質を内包したカーボンナノチューブの光学特性を調べた。カーボンナノチューブの光励起状態である励起子はベーテ・サルピータ方程式を強束縛近似のもとで解くことで求まる。本論文では、電子・正孔のスピンと内包磁性物質の局在スピンとの交換相互作用をベーテ・サルピータ方程式に加えて解くことにより、内包磁性物質の状態を反映した光学スペクトルを求めた。その結果、吸収スペクトルに本来光学禁制であるスピン三重項励起子による吸収ピークが現れることがわかった(図 3.4)。この結果は内包磁性物質の磁性状態を調べる手段として光学的手法が有効であることを示している。

まとめ

我々は量子論に立脚した計算科学の手法を基に、種々のナノカーボン物質、さらに、それらから構築される複合構造体の物性の解明を行った。特に、グラフェン、カーボンナノチューブにおいては、欠陥、原子吸着等も含んだ広義複合構造形成により、その基礎物性が劇的に変調されることを見いだした。この結果は、これらナノカーボン物質を用いた、ナノスケールデバイス実現、設計においては、ナノカーボン物質自身の物性のみならず、複合構造を考慮にいった統合的な物質設計が必須であることを意味している。また、同時に、複合構造に依る物性変調を積極的に取り込んだ、新奇機能性材料実現の可能性も提示したものである。

白石グループ

【1】書き込み／消去耐性が強い MONOS 型メモリ的设计指針の提案

MONOS型メモリでは、原子レベルの空間である窒化シリコン膜中の欠陥に電荷を注入することによってメモリ機能を発現させているため、その小型化・高速化が可能となることから、次世代メモリの候補として期待されている。しかし、原子レベルの欠陥に電荷(データ)を充電(放電)してデータの書込(消去)を行う際に窒化シリコン膜中の欠陥がどのような振る舞いをするかは全く不明であった。上述の問題を解決するために、第一原理計算を用いて原子レベルでMONOS型メモリにおける窒化シリコン中の欠陥がデータの書込・消去(電荷の充電と放電)に対してどのように振る舞うかを原子レベルで詳細に明らかにした(K. Yamaguchi 他 IEDM 2010)。得られた結果は以下の通りである。①窒化シリコン中に酸素が混入することによって生じた欠陥はデータの書込・消去によって構造が元に戻らなくなる傾向があること(不可逆的構造変化を起こす傾向があること)を示す(図4.1)。②一方、窒化シリコン中の窒素空孔を起因とする欠陥はデータの書込・消去を行っても構造が元に戻る。これは、①酸素混入欠陥はメモリ機能の劣化を引き起こすのに対し、②窒素空孔欠陥はメモリ機能の劣化を引き起こさないことを意味する。さらに、窒素空孔欠陥がデータの書込・消去によって引き起こす構造変化はヤン・テラー効果に伴う自発的対称性の破れであるため、原理的に可逆的であることも示した。

さらに、書き込み／消去に強いMONOS型メモリの実現にはSiN膜中への酸素混入を抑制することが

キーポイントであることを明らかにし、その具体的な処方箋としてSiN直下に極薄シリコン膜を挿入することによって酸素の化学ポテンシャルを大きく下げること、SiN中への酸素混入を防げることを示した。当該手法は、東芝から報告されている、SiN膜直下にナノドット列を配置するプロセスでMONOSの特性が向上することと合致している。

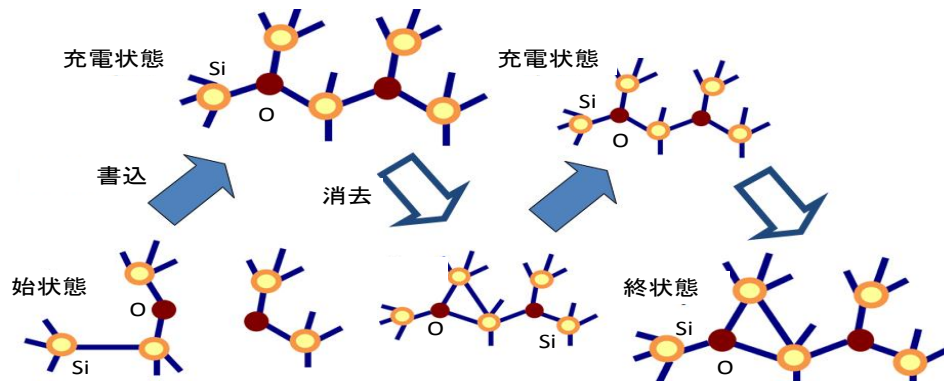


図 4.1: SiN 中欠陥の書込／消去による大きな構造変化。

【2】窒化物半導体における擬立方晶近似の妥当性の理論的研究

窒化物半導体をベースにした光デバイスは擬立方結晶近似を用いて設計されることが多い。本研究では第一原理量子論によって擬立方晶近似の妥当性について議論した。その結果、ウルツ鉱構造の窒化物半導体においては擬立方晶近似が大きく破綻することが示された。これは歪み印加の際に生じる内部パラメータの大きな変化、第三近接相互作用の物理的起源があることを明らかにした。さらに内部パラメータが大きく変位するAlNでは、特に擬立方晶近似の破綻が顕著となることも明らかにした。

【3】オーミック接触の新しい物理モデルの提案

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ギング現象が起こるため、ショットキー障壁高さの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ギング現象との矛盾を含んでいると考えられる。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ギ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 4.2)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。

今年度はさらに欠陥密度分布数が不十分であったり、欠陥密度分布が非一様である場合には、オーミック接触の様相を示さなくなることも明らかにし、実験でオーミック接触形成に失敗したサンプル特性も再現できることを明らかにした。後は本モデルをさらに高精度化してゆく予定である。

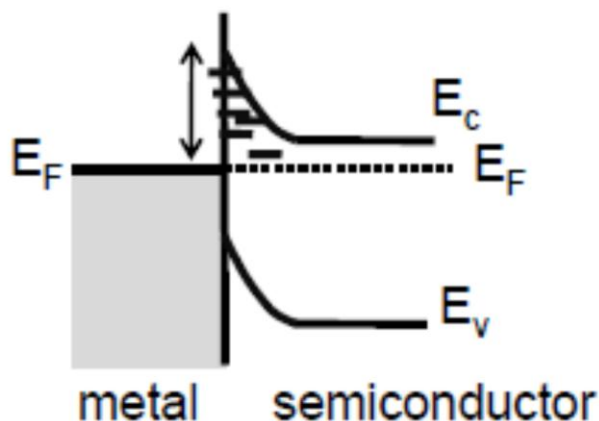


図 4.2：本研究で提案した新たなオーミック接触のモデル

【4】大規模第一原理計算によるシリコンナノワイヤーの研究

岩田を中心として大規模第一原理計算手法を開発を行い、当該手法を用いてシリコンナノワイヤーFETのバンド構造を解析し、その有効質量からのずれを明らかにした。また、当該バンド構造を用いてシリコンナノワイヤーFETのデバイス特性の解析も行った。

4. 研究業績

日野グループ

(1) 研究論文

1. Instability of dynamic localization in the intense terahertz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder due to the dynamic Fano resonance: Atsushi Kuku, Tomohiro Amano, Tomohiro Karasawa, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, Phys. Rev. B **82**, 115315 (2010)
2. Photoinduced coherent oscillations in the one-dimensional two-orbital Hubbard model: N. Maeshima, K. Hino, and K. Yonemitsu, Phys. Rev. B **82**, 161105(R) (2010)
3. Exciton Fano Resonance in Semiconductor Heterostructures and its Related Phenomena: Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, and Nobuya Maeshima, in "Exciton Quasiparticles: Theory, Dynamics and Applications" (Nova Science Publishers), p. 303 (Chapter 9)
4. Resonance Structure of Dynamic Fractional Stark Ladders in Laser-Driven Biased Superlattices: Tomohiro Karasawa, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, Solid State Communications **151**, 392 (2011)
5. Photoinduced dynamics of the multi-orbital Hubbard model: N. Maeshima, K. Hino, and K. Yonemitsu,

Physica Status Solidi (c) **8**, 213 (2011)

6. Resonance structure and stability of intense terahertz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder: T. Karasawa, T. Amano, A. Kukuu, N. Maeshima, and K. Hino, Physica Status Solidi (c) **8**, 217 (2011)
7. Parallelization of the R-matrix propagation method for the study of intense-laser-driven semiconductor superlattices: Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, to be published in Computer Physics Communications
8. Instability of Dynamic Localization in the Intense THz-Driven Semiconductor Wannier-Stark Ladder due to the Dynamic Fano Resonance: T. Karasawa, T. Amano, A. Kukuu, N. Maeshima, and K. Hino, to be published in AIP Conference Proceedings Volume 1399 (Proceedings of 30th International Conference on the Physics of Semiconductors)
9. R. Ranitovic, X. M. Tong, C. W. Hogle, X. Zhou, Y. Liu, N. Toshima, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, “Laser Enabled Auger Decay in Rare Gas Atoms”, Physical Review Letters 106 (2011) 053002:1-4.
10. T. Ishikawa, X. M. Tong, and N. Toshima, “Double ionization of He in an intense laser field via rescattering process”, Physical Review A 82 (2010) 033411:1-5.
11. X. M. Tong and N. Toshima, “Controlling atomic structures and photoabsorption processes by an infrared laser”, Physical Review A 81 (2010) 063403:1-4.
12. X. M. Tong and N. Toshima, “Infrared laser assisted photoionization of helium by a coherent extreme ultraviolet light”, Physical Review A 81 (2010) 043429:1-6.
13. X. M. Tong, P. Ranitovic, C. L. Cocke, and N. Toshima, “Mechanisms of Infrared Laser Assisted Atomic Ionization by Attosecond Pulses”, Physical Review A 81 (2010) 021404(R):1-4.
14. P. Ranitovic, X. M. Tong, B. Gramkow, S. De, B. DePaola, K. P. Singh, W. Cao, M. Magrakvelidze, D. Ray, I. Bocharova, H. Mashiko, A. Sandhu, E. Gagnon, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn, I. Litvinyuk, and C.L. Cocke, “IR-Assisted Ionization of Helium by Attosecond XUV Radiation”, New Journal of Physics 12 (2010) 013008:1-12.
15. Y. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Enhanced ionization of hydrogen molecular ions in an intense laser field via a multiphoton resonance”, Physical Review A 81 (2010) 013408:1-6.
16. J. Jin, X. M. Tong, and N. Toshima, “Ionization of hydrogen molecular ions in an intense laser field via a resonant state”, Computer Physics Communications 182 (2011) 146-148.
17. X. M. Tong and N. Toshima, “Time-dependent method in the laser-atom interactions”, Computer Physics Communications 182 (2011) 21-23.
18. N. Nakamura, F. J. Currell, Z. Hu, D. Kato, A. Komatsu, Y. Li, I. Murakami, H. Ohashi, S. Ohtani, H. A. Sakaue, M. Sakurai, M. Tona, X. M. Tong, H. Watanabe, T. Watanabe, T. Watanabe, C. Yamada, N. Yamamoto, and A. Yamazaki, “Activities at the Tokyo EBIT 2010”, Journal of Instrumentation 5 (2010) C08007:1-6.

(2) 学会発表

1. テラヘルツ光駆動半導体超格子における動的ファノ共鳴: 前島展也、日野健一, 第1回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム (筑波大学, 2010 年 5 月 6 日)
2. Dynamic Wannier-Stark Ladder における動的局在状態の安定性: 天野智広、久々宇篤志、柄澤朋宏、前島展也、日野健一, 特定領域研究「光-分子強結合反応場の創成」および新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」合同シンポジウム (日本科学未来館, 2010 年 5 月 27 日)
3. Dynamic Fano resonance of Floquet exciton states in terahertz-driven semiconductor superlattices: D. Misaki, N. Maeshima, and K. Hino, EXCON'10 (Brisbane, Australia, 2010 年 7 月 11 日)
4. Resonance structure and stability of intense terahertz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder: T. Karasawa, T. Amano, A. Kuku, N. Maeshima, and K. Hino, EXCON'10 (Brisbane, Australia, 2010 年 7 月 11 日)
5. Photoinduced dynamics of the multi-orbital Hubbard model: N. Maeshima, K. Hino, and K. Yonemitsu, EXCON'10 (Brisbane, Australia, 2010 年 7 月 11 日)
6. Instability of dynamic localization in the intense THz-driven semiconductor Wannier-Stark ladder due to the dynamic Fano resonance: T. Karasawa, T. Amano, A. Kuku, N. Maeshima, and K. Hino, The International Conference on Physics of Semiconductors (ICPS2010) (Seoul, Korea, 2010 年 7 月 25 日)
7. THz 波駆動半導体 Wannier-Stark 階段構造における共鳴構造と安定性: 日野健一、前島展也, 科研費新学術領域研究 DYCE 理論ワークショップ (大阪大学, 2010 年 8 月 9 日)
8. テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣励起子のスペクトル特異性 III: 前島展也, 見崎大地, 日野健一, 八島健太、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学, 2010 年 9 月 23 日)
9. フラクタル動的 Wannier-Stark ladder における光着衣電子の共鳴構造の解析: 柄澤朋宏, 前島展也, 日野健一、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学, 2010 年 9 月 23 日)
10. 多軌道ハバード模型における光励起状態のダイナミクス: 前島展也, 日野健一、米満賢治, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学, 2010 年 9 月 23 日)
11. テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣電子・正孔系の多体問題: 日野 健一、第 4 回 DYCE シンポジウム (京都大学, 2011 年 1 月 6 日)
12. <招待講演> IR Laser Assisted Photoabsorption of Atoms, X. M. Tong, and N. Toshima, International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, 2010, Sept. 4-7, Sendai, Japan

小泉グループ

(1) 研究論文

1. Spin-vortices in cuprates: magnetic excitations, optical conductivity, enhanced Nernst signal, and a persistent current generation: Hiroyasu Koizumi,
Physica C: Superconductivity and its applications, **S118-S120**, 470 (2010)
2. Persistent current generation by a Berry Phase: Hiroyasu Koizumi, *J. Phys. A* **43**, 354009 (2010)

(2) 学会発表

(A) 招待講演

1. Local lattice distortion and spin-vortices in cuprates: how to interpret ARPES, EXAFS, and neutron scattering results: H. Koizumi, XXth International Symposium on the Jahn-Teller Effect (August 17, 2010, Fribourg, Switzerland)

(B) その他の学会発表

1. Magnetic excitation spectra from spin-vortices and spin-vortex-induced loop currents: H. Koizumi, 強相関電子系への中性子の応用についての国際会議 2011 (東海村、2011 年 2 月 23 日)
2. スピン渦誘起ループ電流: 小泉裕康、第18回渦糸物理国内会議(東京、2010 年 12 月 2 日)
3. ARPES, EXAFS, 中性子散乱データからみた銅酸化物におけるスモールポーラロン形成: 小泉裕康、日本物理学会 2010 年秋季大会、(大阪府立大学、2010 年 9 月 24 日)
4. ドープしたホールを挟んだ反強磁性相関によるスピン渦とループ電流の生成: 秀方遼、小泉裕康、日本物理学会 2010 年秋季大会、(大阪府立大学、2010 年 9 月 23 日)
5. 銅酸化物超伝導体における砂時計型磁気励起スペクトルの起源 II: 佐川英弥、秀方遼、小泉裕康、日本物理学会 2010 年秋季大会、(大阪府立大学、2010 年 9 月 23 日)

岡田グループ

発表論文

1. K. Nagatsu, S. Chiashi, S. Konabe, and Y. Homma, "Brightening of Triplet Dark Exciton by Atomic Hydrogen Adsorption in Single-Walled Carbon Nanotubes Observed by Photoluminescence Spectroscopy", *Physical Review Letters* **105**, 157403 (2010).
2. Satoru Konabe, Nobuhito Onoda, and Kazuyuki Watanabe, "Auger Ionization in Armchair-Edged Graphene Nanoribbons", *Physical Review B* **82**, 073402 (2010).
3. Susumu Okada and Minoru Otani, "Stability and electronic structure of potassium-intercalated hexagonal boron nitride from density functional calculations", *Physical Review B* **81**, 233401 (2010).
4. Minoru Otani, Yoshiteru Takagi, Mikito Koshino, and Susumu Okada, "Phase Control on Magnetic

- State of Graphite Thin Films by Electric Field", *Applied Physics Letters*, **96**, 242504 (2010).
5. Susumu Okada, "Energetics of ultimate silicon nanowire confined in nanospace", *Japanese Journal of Applied Physics*, **49**, 065001 (2010).
 6. Satoru Konabe, Takahiro Yamamoto, and Kazuyuki Watanabe, "Photocurrents in Carbon Nanotubes with Various Diameters under High-Intensity Laser Irradiation", *Japanese Journal of Applied Physics* **49**, 02BD06 (2010)
 7. Minoru Otani and Susumu Okada, "Field-Induced Free Electron Carriers on Graphite", *Journal of Physical Society of Japan*, **79**, 073701 (2010).
 8. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, and Sumio Iijima, "Intermolecular Interaction between Single-Wall Carbon Nanotubes and Encapsulated C₆₀ Probed by Resonance Raman Spectroscopy", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **12**, 8118 - 8122 (2010).
 9. Tasuku Chiba and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Na-Doped C₆₀ Polymers", *Journal of Physical Society of Japan*. **79**, 084702 (2010).
 10. Yoshifumi Izu, Junichiro Shiomi, Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, and Shigeo Maruyama, "Growth mechanism of single-walled carbon nanotube from catalytic reaction inside carbon nanotube template", *ACS NANO*, **4**, 4769 - 4775 (2010).
 11. Shingo Okubo, Toshiya Okazaki, Kaori Hirose, Kazu Suenaga, Susumu Okada, Shunji Bandow, and Sumio Iijima, "Electronic Structures of Single-Wall Carbon Nanotubes Encapsulating Ellipsoidal C₇₀", *Journal of American Chemical Society*, **132**, 15252-15258 (2010).
 12. Hisao Miyazaki, Kazuhito Tsukagoshi, Akinobu Kanda, Minoru Otani, Susumu Okada, "Influence of Disorder on Conductance in Bilayer Graphene under Perpendicular Electric Field", *Nano Letters*, **10**, 3888-3892 (2010).
 13. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, and Sumio Iijima, "Host-guest interaction between single-wall carbon nanotubes and encapsulated C₆₀ probed by resonance Raman spectroscopy", *physica status solidi (B)*, **247**, 2700-2702 (2010).
 14. Susumu Okada, Takazumi Kawai, and Kyoko Nakada, "Electronic Structure of Graphene with Topological Line Defect", *Journal of the Physical Society of Japan*, **80**, 013709 (2011)
 15. Susumu Okada and Minoru Otani, "Electron-state Control of Hexagonal Boron Nitride: Carrier Injection into Inter-layer Band", *physica status solidi (C)*, **8**, 500-502 (2011).
 16. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Electronic-state Modulation on Single-Walled Carbon Nanotube Adsorbed on Metal Surfaces", *physica status solidi (C)*, **8**, 564-566 (2011).
 17. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Method for probing the magnetic state of nanomaterials encapsulated in carbon nanotubes" *Applied Physics Letters*, **98**, 073109 (2011).
 18. Minoru Otani and Susumu Okada, "Gate-Controlled Carrier Injection into Hexagonal Boron Nitride", *Physical Review B* **83**, 073405 (2011).

19. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Semiconducting Electronic Property of Graphene Adsorbed on (0001) Surfaces of SiO₂”, Physical Review Letters, **106**, 106801 (2011).
20. Nobuhito Onoda, Satoru Konabe, Takahiro Yamamoto, and Kazuyuki Watanabe, “Auger ionization in carbon nanotubes and graphene nanoribbons under laser irradiation”, physica status solidi (c) **8**, 570 (2011)
21. Satoru Konabe and Kazuyuki Watanabe, “Mechanism for the optical activation of dark spin-triplet excitons in hydrogenated single-walled carbon nanotubes”, Physical Review B **83**, 045407 (2011)

新聞発表

日刊工業新聞 2011 年 3 月 4 日 : グラフェンが半導体に~絶縁体基板使い”変身”

白石グループ

<発表論文>

1. Iwai H, Natori K, Shiraishi K, Iwata J, Oshiyama A, Yamada K, Ohmori K, Kakushima K, Ahmet P, “Si nanowire FET and its modeling”, SCIENCE CHINA-INFORMATION SCIENCES, 54, 1004-1011 (2011)
2. Muraguchi M, Sakurai Y, Takada Y, Shigeta Y, Ikeda M, Makihara K, Miyazaki S, Nomura S, Shiraishi K, Endoh T, “Collective Tunneling Model in Charge-Trap-Type Nonvolatile Memory Cell”, JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, 50, 04DD04 (2011)
3. Yamaguchi K, Otake A, Kamiya K, Shigeta Y, Shiraishi K, “Atomistic Design of Guiding Principles for High Quality Metal-Oxide-Nitride-Oxide-Semiconductor Memories: First Principles Study of H and O Incorporation Effects for N Vacancies in SiN Charge Trap Layers”, JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, 50, 04DD05 (2011)
4. Yamaguchi K, Otake A, Kamiya K, Shigeta Y, Shiraishi K, “Universal Guiding Principle for the Fabrication of Highly Scalable MONOS-Type Memory -Atomistic Recipes Based on Designing Interface Oxygen Chemical Potential-“, TECHNICAL DIGEST OF 2010 INTERNATIONAL ELECTRON DEVICES MEETING p.122-p.125 (2010)
5. Nakayama T, Kakushima K, Nakatsuka O, Machida Y, Sotome S, Matsuki T, Ohmori K, Iwai H, Zaima S, Chikyow T, Shiraishi K, Yamada K, “Theory of Workfunction Control of Silicides by Doping for Future Si-Nano-Devices based on Fundamental Physics of Why Silicides Exist in Nature”, TECHNICAL DIGEST OF 2010 INTERNATIONAL ELECTRON DEVICES MEETING p.375-p.378 (2010)
6. Hosoi T, Saeki M, Oku Y, Arimura H, Kitano N, Shiraishi K, Yamada K, Shimura T, Watanabe H, “Comprehensive Study and Control of Oxygen Vacancy Induced Effective Work Function Modulation in Gate-First High-k/Metal Inserted Poly-Si Stacks”, TECHNICAL DIGEST OF 2010 SYMPOSIUM

ON VLSI TECHNOLOGY, p.179-p.180 (2010)

7. Morooka T, Sato M, Matsuki T, Suzuki T, Shiraishi K, Uedono A, Miyazaki S, Ohmori K, Yamada K, Nabatame T, Chikyow T, Yugami J, Ikeda K, Ohji Y, “Suppression of Anomalous Threshold Voltage Increase with Area Scaling for Mg- or La-incorporated High-k/Metal Gate nMISFETs in Deeply Scaled Region”, TECHNICAL DIGEST O 2010 SYMPOSIUM ON VLSI TECHNOLOGY, p.33-p.34 (2010)
8. Umezawa N, Shiraishi K, “Origin of high solubility of silicon in La₂O₃: A first-principles study”, APPLIED PHYSICS LETTERS, 97, 202906 (2010).
9. Muraguchi M, Endoh T, Takada Y, Sakurai Y, Nomura S, Shiraishi K, Ikeda M, Makihara K, Miyazaki S, Shigeta, “Importance of electronic state of two-dimensional electron gas for electron injection process in nano-electronic devices”, PHYSICA E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES, 42, 2602-2605 (2010).
10. Takada Y, Muraguchi M, Endoh T, Nomura S, Shiraishi K, “Proposal of a new physical model for Ohmic contacts”, PHYSICA E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES, 42, 2837-2840 (2010)
11. Iwai H, Natori K, Kakushima K, Ahmet P, Shiraishi K, Iwata J, Oshiyama A, Yamada K, Ohmori K, “Si Nanowire Device and its Modeling”, PROCEEDING OF 15TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIMULATION OF SEMICONDUCTOR PROCESSES AND DEVICES, p.63-p.66 (2010)
12. Muraguchi M, Takada Y, Nomura S, Endoh T, Shiraishi K, “Importance of the Electronic State on the Electrode in Electron Tunneling Processes between the Electrode and the Quantum Dot”, IEICE TRANSACTIONS ON ELECTRONICS, E93C, 563-568 (2010)
13. Lee Y, Kakushima K, Shiraishi K, Natori K, Iwai H, “Trade-off between density of states and gate capacitance in size-dependent injection velocity of ballistic n-channel silicon nanowire transistors”, APPLIED PHYSICS LETTERS, 97, 032101 (2010)
14. Lee Y, Kakushima K, Shiraishi K, Natori K, Iwai H, “Size-dependent properties of ballistic silicon nanowire field effect transistors”, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, 107, 113705 (2010)
15. Kamiya K, Boero M, Shiraishi K, Oshiyama A, Shigeta Y, “Energy Compensation Mechanism for Charge-Separated Protonation States in Aspartate-Histidine Amino Acid Residue Pairs”, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 114, 6567-6578 (2010)
16. Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kwashita, J.-I. Iwata, T. Otake, G. F. Bertsch, "Coherent phonon generation in time-dependent density functional theory", Phys. Rev. B 82, 155110 (2010)
17. Takahiro Yamamoto, Kenji Sasaoka, and Satoshi Watanabe, “Universal Transition between Inductive and Capacitive Admittance of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes”, Phys. Rev. B 82, 205404 (2010).
18. Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe, “A Numerical Approach to Transient

- Currents in a Quantum Dot Connected to a Single Electrode”, ECS Trans. 33, 85 (2010).
19. Isao Maruyama, Sho Tanaya, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, “Z₂ topological number of local quantum clusters in the orthogonal dimer model”, Proceedings of the International Conference on Frustration in Condensed Matter (ICFCM) 2011:J. Phys.: Conf. Ser. 200 (2010) 022075
 20. “Guiding principles for charge trap memories -A theoretical approach-”, Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Proceeding of Solid-State and Integrated Circuit Technology (ICSICT) 2010 - Shanghai, China, p1096 (2010).
 21. Kenji Shiraishi, Takuji Hosoi, Heiji Watanabe, and Keisaku Yamada, “Control of Gate Metal Effective Work Functions and Interface Layer Thickness by Designing Interface Thermodynamics Based on Heteroatom Incorporation into High-k HfO₂ Gate Dielectrics”, ECS Trans. 33 (6), 479-486 (2010)
 22. Keita Yamaguchi, Akira Otake, and Kenji Shiraishi, “Effect of Heteroatom for Nitrogen Vacancy in SiN/SiO₂ Interface Layer in MONOS-Type Memories”, ECS Trans. 33 (6), 243-251 (2010)
 23. Keita Yamaguchi, Kenji Shiraishi, Akira Otake, and Kenji Kobayashi, “Atomistic Guideline for MONOS-Type Memories with High Program/Erase Cycle Endurance”, ECS Trans. 28 (2), 403-410 (2010)
 24. R. Hasunuma, C. Tamura, T. Nomura, Y. Kikuchi, K. Ohmori, M. Sato, A. Uedono, T. Chikyow, K. Shiraishi, K. Yamada and K. Yamabe, “Degradation in HfSiON film induced by electrical stress application”, ECS Trans. 28 (2), 263-272 (2010)
 25. Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Shintaro Nomura, and Kenji Shiraishi, “Investigation of the New Physical Model of Ohmic Contact for Future Nanoscale Contacts”, ECS Trans. 28 (1), 73-79 (2010)
 26. Y. Sakurai, S. Nomura, Y. Takada, K. Shiraishi, M. Muraguchi, T. Endoh, M. Ikeda, K. Makihara and S. Miyazaki, “Electron Tunneling Between Si Quantum Dots and Two Dimensional Electron Gas under Optical Excitation at Low Temperatures”, ECS Trans. 28 (1), 369-374 (2010)
 27. Akira Otake, Keita Yamaguchi, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, “An atomistic study on hydrogenation effects toward quality improvement of program/erase cycle of MONOS- type memory”, IEICE Transactions, Vol.E94-C, No.5, (2011). in press.
 28. Y. Ebihara, K. Kamioya, A.A. Ymaguchi, and K. Shiraishi, “Intrinsic origin of the breakdown of quasi-cubic approximation in nitride semiconductors”, Phys. Status Solidi C, 18, 3 (2011) / DOI 10.1002/pssc.201001085,
 29. “酸素の化学ポテンシャルデザインに基づく MONOS 型メモリーの原子レベルの設計指針”, 山口慶太、大竹朗、神谷克政、重田育照、白石賢二, IEDM 特集(先端 CMOS デバイス・プロセス技術) 予稿集 - 東京, p25 (2011).
 30. “第一原理計算に基づいた MONOS 型メモリ動作機構の理解”, 白石賢二, 山口慶太, 応用物理

<学術講演>

<国際会議招待講演>

1. K. Ohmori, T. Matsuki, Y. Ohkura, J. Yugami, K. Ikeda, Y. Ohji, Y. Yasuda, T. Endoh, K. Shiraishi, K. Yamada, "Effect of carrier scattering phenomena on drain current variability in Si MOSFET" 217th Electrochemical Society Meeting, Vancouver, Canada, Apr. 25-30th, 2010.
2. Ryu Hasunuma, Chihiro Tamura, Tsuyoshi Nomura, Yuuki Kikuchi, Kenji Ohmori, Motoyuki Sato, Akira Uedono, Toyohiro Chikyow, Kenji Shiraishi, Keisaku Yamada, Kikuo Yamabe, "Degradation in HfSiON film induced by electrical stress application", 217th Electrochemical Society Meeting, Vancouver, Canada, Apr. 25-30, 2010.
3. K. Ohmori, T. Matsuki, Y. Ohkura, J. Yugami, K. Ikeda, Y. Ohji, Y. Yasuda, T. Endoh, K. Shiraishi, K. Yamada, "Influence of carrier transport phenomena on drain-current variability of MOSFETs" International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology (ICSICT), Shanghai, China, Nov. 1-4, 2010.
4. K. Shiraishi, K. Yamaguchi, A. Otake and K. Kobayashi, "Atomistic Guideline for MONOS-Type Memories with High Program/Erase Cycle Endurance", 217th Meeting of Electrochemical Society, April 25-30, Vancouver, BC, Canada
5. K. Shiraishi, K. Yamaguchi, A. Otake, K. Kamiya, and Y. Shigeta, "Guiding Principles for Charge Trap Memories -A Theoretical Approach-", International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology, November 1-4, 2010, Shanghai, China
6. Kenji Shiraishi, "Crucial Contribution of First Principles Calculations for Modern Nano-Scale Semiconductor Devices", The 13th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, November 1-3, 2010, POSTECH, Pohang, Korea
7. H. Iwai, K. Natori, K. Kakushima, P. Ahmet, K. Shiraishi, J. Iwata, A. Oshiyama, K. Yamada, K. Ohmori, "Si Nanowire Device and its Modeling", The International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2010 (SISPAD), Sep.6-8, Bologna, Ital

<国内学会招待講演>

1. 中山隆史、角嶋邦之、中塚理、町田義明、五月女真一、松木武雄、大毛利健治、岩井洋、財満鎮明、知京豊裕、白石賢二、山田啓作、「ドーピングによるシリサイドの仕事関数の変調:シリサイドの物理に基づく理論」、SDM 研究会「IEDM 特集(先端 CMOS デバイス・プロセス)技術」(2011 年 1 月 31 日、東京)
2. 白石賢二、「CMOS の限界と将来の Beyond CMOS への課題」、2010 年秋季第 71 回応用物理学会学術講演会シンポジウム「シリコンテクノロジーの未来像を徹底的に考える-Never Ending Silicon

Technology-」、2010 年 9 月 14 日-17 日、長崎大学、長崎

3. 山口慶太、大竹朗、神谷克政、重田育照、白石賢二、応用物理学会シリコンテクノロジー分科会 IEDM 特集(先端 CMOS デバイスプロセス技術)、“酸素の化学ポテンシャルデザインに基づく MONOS 型メモリーの原子レベルの設計指針”, 2011 年 1 月 31 日、機械興会館、東京

<一般講演>

1. "Large-scale first-principles electronic structure calculations for silicon nanostructures", J.-I. Iwata, A. Oshiyama, K. Shiraishi, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors(ICPS30), July 25-30, 2010, Seoul, Korea
2. 「時間依存密度汎関数理論による半導体コヒーレントフォノン生成の振動数依存性の分析」篠原康、矢花一浩、川下洋輔、岩田潤一、乙部智仁、G.F. Bertsch, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 23 日 - 26 日、大阪府立大学
3. 「独立並列計算による行列固有値分布の確率的推定法」、二村保徳、多田野寛人、櫻井鉄也、岩田潤一(筑波大学)、金沢市文化ホール、2010 年 8 月 3 日 - 8 月 5 日
4. CMSI・次世代ナノ情報合同研究会、「高強度短パルスレーザーに誘起される電子-格子ダイナミクスの第一原理計算」、篠原康、乙部智仁、岩田潤一、矢花一浩、G.F. Bertsch、東京大学物性研究所、2011 年 1 月 5 日～1 月 7 日
5. 「実空間密度汎関数理論に基づく Car-Parrinello 分子動力学法の実装」、重田育照、小泉健一、神谷克政、岩田潤一、押山淳、大阪大学豊中キャンパス, 2010 年 9 月 14 日 - 17 日
6. "Structural stability and energy bands of Si nanowires along [110] direction", Dongchul Sung, J.-I. Iwata, A. Oshiyama, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors(ICPS30), July 25-30, 2010, Seoul, Korea
7. "Breakdown of the quasicubic approximation in GaN and InN -A Theoretical Approach-", Y.Ebihara, K. Shiraishi and A.A. Yamaguchi 第 29 回電子材料シンポジウム, Izu, July, 14-16 (2010), Th2-2
8. "Theoretical Studies on Deformation Potentials of Strained Nitride Semiconductor Films", Y.Ebihara, K. Shiraishi and A.A. Yamaguchi, 4th AEARU Workshop, Tsukuba, August.29-September.3 (2010), P-42.
9. 「擬立方晶近似の妥当性についての理論的考察」、海老原康裕、白石賢二、山口敦史、第 71 回応用物理学会学術講演会, Nagasaki, September.14-17 (2010), 15p-B-3
10. "Intrinsic Origin of the Breakdown of Quasi-Cubic Approximation in Nitride Semiconductors", Y.Ebihara, K. Shiraishi and A. A. Yamaguchi, IWN2010, Tampa, September.19-24 (2010), F2.6,
11. 「第一原理計算を用いた窒化物半導体の変形ポテンシャルの算出」、海老原康裕、神谷克政、白石賢二、山口敦史、第 58 回応用物理学関係連合会, Atsugi, March.24-27 (2011), 26p-BY - 8
12. 「量子ポイントコンタクトにおける交流応答の形状効果」、笹岡健二〇、山本貴博、渡邊聡、白石賢二、

日本物理学会, 2011 年年次大会, 新潟大学

13. “Transient and AC Electric Transport in Mesoscopic Devices”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, Satoshi Watanabe, and Kenji Shiraishi, Workshop in Simulation and Modeling of Emerging Electronics (SMEE), Hong Kong
14. “A Numerical Approach to Transient Currents in a Quantum Dot Connected to a Single Electrode”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, Satoshi Watanabe, and Kenji Shiraishi, 218th ECS Meeting - Las Vegas, USA.
15. “Analysis of Single Electron Emission from a Quantum Dot by Non-Equilibrium Green's Function Method in Time Domain”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe 30th International Conference of the Physics of Semiconductors (ICPS) 2010, Seoul.
16. “Real time analysis of single electron emission from a quantum dot into an electrode by non-equilibrium Green's function technique”, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe International Symposium on Technology Evolution for Silicon Nano-Electronics (ISTESNE) 2010, Tokyo (Poster)
17. “Edge States of Graphene in Magnetic Fields: Effects of Second-Neighbor Hopping”, M. Arikawa, Y. Hatsugai, H. Aoki, International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010, 2010/07/07 京都国際会議会館
18. “ Z_2 Berry phase in 2D orthogonal dimer model”, Sho Tanaya, Isao Maruyama, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics (StatPhys24), 2010/07/20, Convention Centre, Cairns, Queensland, Australia
19. “Equivalence of different expressions on the density matrix of Gutzwiller wave function”, Mitsuhiro Arikawa, XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics (StatPhys24), 2010/07/20, Convention Centre, Cairns, Queensland, Australia
20. “Dynamics of the $S = 1/2$ spin chains with Ising anisotropy”, XXIV IUPAP International Conference on Statistical Physics (StatPhys24), Jun Sato, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Saiga, 2010/07/23, Convention Centre, Cairns, Queensland, Australia
21. “Robustness of the edge states in graphene quantum Hall system: does the chiral symmetry degraded by t' matter?”, Mitsuhiro Arikawa, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS 2010), 2010/07/27, COEX, Seoul, Korea
22. “Entanglement entropy of the bond order phase in graphene in magnetic fields”, Mitsuhiro Arikawa, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai, 30th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS 2010), 2010/07/29, COEX, Seoul, Korea
23. “Edge states in graphene quantum Hall system with bond vs potential disorder”, Mitsuhiro Arikawa, Hideo Aoki, Yasuhiro Hatsugai, The 19th International Conference on the Application of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics and Nanotechnology (HMF-19), 2010/08/03, Fukuoka

International Congress Center

24. “Topological characterization of 2D orthogonal dimer model”, Sho Tanaya, Isao Maruyama, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, The international conference Highly Frustrated Magnetism 2010 (HFM 2010), 2010/08/03, The Homewood campus of the Johns Hopkins University, USA
25. 「 $S=1/2$ 2次元パイロクロア格子における Z_2 ベリー位相」、棚谷翔, 有川晃弘, 丸山勲, 初貝安弘、日本物理学会 2010 年秋季大会 (25aTE-12) 2010/09/25、大阪府立大学
26. 「グラフェン端状態のカイラル対称性の破れに対する安定性」、有川晃弘, 青木秀夫, 初貝安弘、日本物理学会 2010 年秋季大会 (23aXA-7), 2010/09/23、大阪府立大学
27. 「二次元パイロクロア格子上の $S=1/2$ ハイゼンベルグ模型に対する Z_2 ベリー位相を用いた相同定」、棚谷翔、有川 晃弘、丸山勲、初貝安弘、第 4 回 物性科学領域横断研究会、2010/11/13、東京大学武田先端知ビル 5F 武田ホール
28. 「Calogero-Sutherland 模型の動力学」、有川晃弘、第6回 数理物理・物性基礎論セミナー、2010/12/04、お茶の水女子大学 理学部
29. “Wave packet dynamics in the spin torque transfer”, 有川晃弘, 初貝安弘, 白石賢二、第 15 回 半導体スピン工学の基礎と応用 PASPS-15、2010/12/21、筑波大学計算科学センター
30. “ Z_2 topological number of local quantum clusters in the orthogonal dimer model”, Isao Maruyama, Sho Tanaya, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, International Conference on Frustration in Condensed Matter (ICFCM), 2011/01/11, Sendai International Center, Sendai, Japan
31. “Electron wave packet dynamics in the spin torque transfer”, Mitsuhiro Arikawa, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, The 1st CSIS International Symposium on Spintronics-based VLSIs and The 7th RIEC International Workshop on Spintronics, 2011/02/03, Laboratory for Nanoelectronics and Spintronics, Tohoku University
32. 「波束ダイナミクスにおけるスピントランスファートルク」、有川晃弘, 岩田潤一, 初貝安弘, 白石賢二、日本物理学会第66回年会、2011/03/26、震災により Web 公開
33. “Theoretical Study of the Hydrogen Effect on the Program/Erase Cycle of MONOS-Type Memories”, Akira Otake, Keita Yamaguchi, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 2010 Asia-Pacific Workshop on Fundamentals and Applications of Advanced Semiconductor Devices , 東京工業大学, 2010 年 6 月. 口頭発表
34. “Atomistic Design of Guiding Principles for High Quality MONOS Memories-First Principles Study of H and O Incorporation Effects for N Vacancies in SiN Charge Trap Layers”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials , 東京大学, 2010 年 9 月. 口頭発表
35. “Effect of Heteroatom to a Nitrogen Vacancy in a SiN/SiO₂ Interface Region in MONOS-Type Memories”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi,

218th ECS Meeting, Las Vegas, NV, 2010 年 10 月. ポスター発表

36. “Atomistic Design of Interface Layer for MONOS-Type Memories with High Program/Erase Cycle Endurance”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 41st IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference, San Diego, CA, 2010 年 12 月. 口頭発表
37. “Universal Guiding Principle for the Fabrication of Highly Scalable MONOS-Type Memory -Atomistic Recipes Based on Designing Interface Oxygen Chemical Potential-“, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 2010 International Electron Devices Meeting, San Francisco, 2010 年 12 月. 口頭発表
38. “界面酸素の化学ポテンシャルデザインに基づく極微細 MONOS 型メモリーの原子レベルの設計指針”, Keita Yamaguchi, Akira Otake, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Kenji Shiraishi, 春期第 58 回応用物理学会, 神奈川工科大学, 2011 年 3 月. 口頭発表
39. 「EMC-MD シミュレーションによる電流揺らぎのチャネル幅依存性評価」、神岡武文、大毛利健治、白石賢二、鎌倉良成、渡邊孝信、2010 年 秋季 第 71 回応用物理学会学術講演会(2010 年 9 月 14-17 日)
40. 「微細 MOSFET ドレイン電流ばらつきのゲート/ドレイン電圧依存性」、大毛利健治、白石賢二、山田啓作、2010 年 秋季 第 71 回応用物理学会学術講演会(2010 年 9 月 14-17 日)
41. 「Poly-Si/TiN/HfO₂/SiO₂ ゲートスタック MOSFET の低周波ノイズ特性に対するゲートファーストプロセスの影響」、松木武雄、ランガ ヘッティアラッチ、フェン ウェイ、白石賢二、山田啓作、大毛利健治、ゲートスタック研究会 ―材料・プロセス・評価の物理―(第16回研究会)(2011 年 1 月 21 日～23 日、東京工業大学)
42. 「低温における Si ナノワイヤーの発光特性」、櫻井蓉子、大毛利健治、山田啓作、角嶋邦之、岩井洋、白石賢二、野村晋太郎、日本物理学会 第 66 回年次大会(2011 年 3 月 25-28 日)
43. 「デバイス評価に向けた Si ナノワイヤーの発光測定」、櫻井蓉子、大毛利健治、山田啓作、角嶋邦之、岩井洋、白石賢二、野村晋太郎、2011 年春季第 58 回応用物理学関係連合講演会(2011 年 3 月 24-27 日、神奈川工科大学)
44. 「EMC-MD シミュレーションによる電流揺らぎのチャネル幅依存性評価」、神岡武文、大毛利健治、白石賢二、鎌倉良成、渡邊孝信、第 71 回応用物理学会学術講演会、14a-ZE-6、長崎大学、2010 年 9 月 14 日.
45. 「EMC-MD シミュレーションによる電流揺らぎのチャネル幅依存性評価(II)」、神岡武文、大毛利健治、白石賢二、鎌倉良成、渡邊孝信、2011 年春季第 58 回応用物理学関係連合講演会(2011 年 3 月 24-27 日、神奈川工科大学)
46. “Proposal of a new electronic structure model of Ohmic contacts for the future metallic source and drain”, Yukihiro Takada, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Shintaro Nomura, Kenji Shiraishi, 10th International Workshop on Junction Technology, May 10 - 11, 2010 Shanghai, China

<受賞>

1. 白石賢二、表面科学会フェロー 2010 年 5 月

山口慶太、IEEE Japan Chapter Student Award 2011 年 1 月