

平成 21 年 6 月 5 日現在

研究種目：	特定領域研究
研究期間：	2005～2008
課題番号：	17064002
研究課題名（和文）	ナノバイオ物質における形状と機能の量子デザイン
研究課題名（英文）	Quantum Design of Shapes and Functions in Nano- and Bio-Materials
研究代表者	
	押山 淳 (OSHIYAMA ATSUSHI)
	東京大学・大学院工学系研究科・教授
	研究者番号： 80143361

研究成果の概要：新機能を有するナノ構造・バイオ物質の設計には量子論に基づくシミュレーション技法の確立とその実証計算が欠かせない。現実の大規模系を量子論で扱うための高速シミュレーション手法を開発し、世界最大規模の計算により、Si ナノドットの電荷注入エネルギーを初めて計算した。また、金属 Ge、炭素ナノチューブ磁石、半導体強磁性、ナノチューブ中の新物質相などの予測を行った。生体内ダイナミクスを量子論的に扱う手法を開発し、ATP-ADP 変換反応、蛋白質内プロトン移動反応などを原子スケールで解明した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005 年度	13,200,000	0	13,200,000
2006 年度	10,300,000	0	10,300,000
2007 年度	10,200,000	0	10,200,000
2008 年度	10,900,000	0	10,900,000
年度	-	-	-
総計	44,600,000	0	44,600,000

研究分野： 計算物質科学、理論物性物理学
 科研費の分科・細目： 物理学・物性 I/物性 II
 ナノマイクロ科学・ナノ材料ナノバイオサイエンス
 キーワード： 量子論、計算科学、密度汎関数理論、ナノ構造体、炭素ナノチューブ、表面・界面、半導体、タンパク質

1. 研究開始当初の背景

「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」特定領域研究では、局所密度近似を超えた計算手法の開発、励起状態も含めた手法の開発、現実問題を取り扱うための大規模計算手法の開発、の3点に焦点を当てた。本研究課題では、上記3点の内、大規模計算手法の開発と応用に焦点を当て研究を開始した。またナノ・バイオ物質を、共通の理論的および計算科学的基盤で扱うことを目指し、量子論に立脚した第一原理計算手法

の研究を開始した。

2. 研究の目的

量子論に基づく計算物理学的アプローチにより、10,000 個を超える原子群から構成されるナノ物質、バイオ物質の電子状態と形状の関係を明らかにし、さらにその形状と物性及び機能発現の機構を解明すること、さらには得られた知見に基づき新機能を有するナノ構造体を提案すること、を当初の目的にすえた。その目的達成のために、(1)10,000 個以上の原子群の量子論的記述のための高速

計算法の確立、(2)原子反応をピコ秒からサブナノ秒でシミュレートできるメタ・ダイナミクス手法の確立、(3)機能発現の温度範囲を明確にするための自由エネルギー計算手法の確立、を行い、それにより、ナノ・バイオ物質におけるナノ形状と機能発現の量子論を展開することとした。

3. 研究の方法

アルゴリズムの方針策定、コード開発、実証計算を三位一体とした、互いにフィードバックしあう研究活動を行った。アルゴリズム検討、コード開発においては、次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャを意識し、計算機科学・工学分野の研究協力者との共同を行った。実証計算においては、ポストスケール時代でのシリコンテクノロジーでの諸問題と未来のバイオテクノロジーの展開を考慮し、半導体ナノ構造、窒化物半導体、炭素ナノ物質、蛋白質内生化学反応を主なるターゲットとした。

4. 研究成果

(1) 密度汎関数理論による物性解明と予測

①実空間密度汎関数法の開発と応用

次世代スーパーコンピュータは超並列アーキテクチャとなることは必至である。従来からの平面波基底を用いた計算法における主要な演算であるフーリエ変換は、その際に通信量が莫大となり、高い実効速度が期待できない。そこで我々は、実空間に格子を導入し、格子上各点で波動関数、電子密度を表現し、Kohn-Sham 方程式〔密度汎関数理論 (DFT) の基礎方程式〕の解法を行う、実空間密度汎関数法〔Real Space DFT: RSDFT〕コードの開発と高度化を行った。アルゴリズムの変更等を行い、最も計算負荷の高いグラムシュミット直交化計算では、1000 ノード規模の並列システム上で理論ピーク性能の80%程度の速度を記録した。また全体での実効速度も20-30%に到達している。

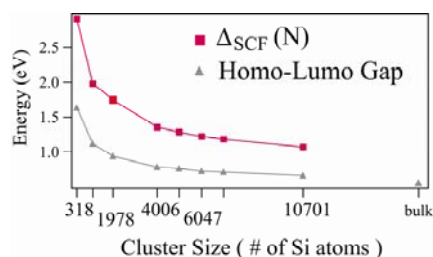


図1: Si ナノドットの第一励起エネルギーのドットサイズ依存性

この新しいRSDFTコードにより、Si ナノドット(最大直径7.6 nm、Si原子数10701、終端水素原子数1966)の電子状態計算が行われた。これは世界的にみて最大規模のDFT

計算である。イオン化エネルギーと電子親和力の差から求めた第一励起エネルギー Δ_{SCF} とKohn-Sham準位から求めたHomo-Lumoギャップは系統的に異なり、そのエネルギー差はドットへの電子注入エネルギーに相当することが判明した(図1)。

② Si 薄膜での有効質量異常

半導体デバイスでのチャネルとして、最も基本的な構造である平板形状において、その形状を特徴付ける板の厚さ、結晶方位、並びに板に平行な面内に一様に印加した歪をパラメータとして、デバイス特性を特徴付ける物理量である有効質量を計算した。あるパラメータ・セットに対して、バルクの有効質量と比べて極端に大きな値が発現することが見出された。歪が印加されていないバルクの場合にはブリリュアンゾーン境界付近に対称的に配置される二重極小形状の伝導帯下端が、歪による対称性の低下並びに、薄膜化による閉じ込め効果によって一重極小形状に変化することによって生じることを明らかにした。

③ 表面上 floating 状態の発見

Si および Al の表面において、表面原子列の外側に分布し、表面上にあたかも浮遊するような状態が存在する事を見出した。表面浮遊状態(floating 状態)は表面原子列から、2-3Å離れた真空領域に電子分布の極大を持つ状態であり、真空準位より低エネルギー側に出現する束縛状態である。詳細な解析から、この状態が表面から真空側に漏れ出した電荷間の多体効果と電荷が誘起する引力ポテンシャルによるものであり、種々の物質において普遍的に存在する、新たな表面状態である事を示した。今後の新機能発現が期待される。

④体心正方格子構造の Si、Ge の新物性

DFT は物質構造を正確に予測できる利点があるが、交換相関エネルギーに対する現時点での近似では、電子励起エネルギーの定量的計算は難しい。現在もっとも実際的な処方箋は、DFTによって構造を定め、GW近似(無限次摂動理論における自己エネルギーをグリーン関数Gと繰り込まれた相互作用Wの積で表す近似)によって励起エネルギーを計算するアプローチである。このアプローチにより、今日のテクノロジーの基幹材料であるSiおよびGeの新しい結晶相を見出した。

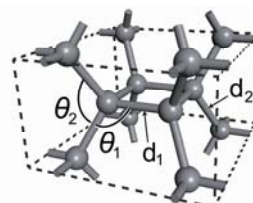


図2: DFT 計算で見出された体心正方格子を形成する Si と Ge の新しい結晶相

図2はDFT+GW計算によって発見された体心正方(body center tetragonal: bct)格子

をもつ結晶相の原子配置である。最安定のダイヤモンド構造に比べて原子1個あたり 0.1 eV 程度エネルギーは高いが準安定な構造であることが見出された。注目すべきは、全ての原子は、典型的な半導体と同様に最近接原子と4配位を形成しているにも関わらず、bct-Si ではギャップは顕著に狭くなり、bct-Ge ではそれが消失し半金属となることである。すなわち4配位では、 sp^3 の軌道混成により、tetrahedral な配置の最近接原子は結合軌道と反結合軌道を形成し、それらの間にはギャップが生じるというのが、固体物理の教科書に書かれていることである。今回の我々の結果は、たとえ4配位であって、ボンドの結合角度の変調により、金属が出現することを示している。

⑤ ナノ構造キャパシターでの量子効果

電子デバイスにおいて、キャパシタンスはコンダクタンスと並んで基本的な特性量であり、微細化の進む現在、キャパシタンスにおける量子効果の解明が急務である。円筒状の炭素ナノチューブは、電界効果トランジスターの究極構造であるサラウンディング・ゲート構造の基幹材料として期待されている。

多層炭素ナノチューブからなる円筒構造に対するキャパシタンスを、DFT によって調べ、ふたつの独立な量子効果を見出した。ひとつは波動関数の浸みだしによる有効電極間の減少に伴う、キャパシタンスの増大であり、もうひとつは、1次元構造に特有な、電子状態密度における Van-Hove 特異性による、キャパシタンスの顕著なバイアス電圧依存性である。また三重炭素ナノチューブの最外側と最内側に電極をつないで電荷を注入すると、中に挟まれた炭素ナノチューブは誘電分極し、キャパシタンスの増大が見られた。

⑥ 強磁性炭素ナノチューブの予測

zigzag 型の端を持ったグラファイトリボンでは、端に沿って広がった電子状態に起因する磁気モーメントが誘起される。この zigzag リボンをナノチューブ構造に埋め込んだ構造として、8員環と5員環からなるトポロジカル線状欠陥を持つナノチューブが考えられる(図3)。その構造では、トポロジカル欠陥に沿った電子状態がフェルミ準位直上に存在し、波数空間の原点近傍において平坦バンドが出現することを見出した。このトポロジカル欠陥の生成エネルギーは、一原子あたり 30meV 程度で極めて小さい。その基底状態では、チューブに磁気的な秩序が発現し、分極したスピンはトポロジカル欠陥近傍に局在し、さらにチューブ軸方向に強磁性的な配向を示している事が明らかになった(図3)。この磁気秩序の原因は、チューブの1次元性と、曲率による π バンド分散の増加に起因している。この理論的発見は、トポロジカル欠陥を有するナノチューブを用い

たスピン依存伝導システムの構築可能性を示唆している。

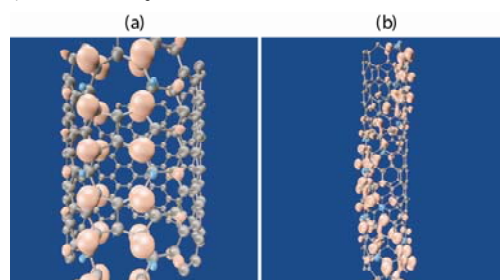


図3：トポロジカル欠陥を持つ(a) (8,8)ナノチューブ、(b) (7,0)ナノチューブのスピン分布

⑦ 炭素ナノチューブ内の氷の新しい相

炭素ナノチューブは新しい物質相生成のための鋳型としての機能が期待される。最近の X 線回折実験により、炭素ナノチューブ内中の水が室温で結晶化し、チューブ状の氷が形成されていることが示唆された。このチューブ状氷の構造を計算により決定した。可能性として、図4の(a) stacked polygon、(b) helix polygon、(c) double-helix polygon 構造を考え、最も安定な構造は stacked polygon 構造であること、その凝集エネルギーは、常圧下最安定構造である氷 Ih の 80% 程度であること、炭素ナノチューブの氷内包エネルギーは、上記凝集エネルギーに比べて一桁以上小さいこと、電子構造は通常の氷 Ih と定性的に同じであること、などが明らかとなった。

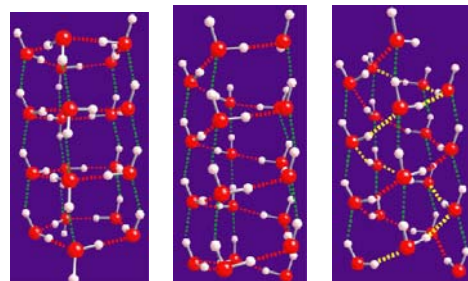


図4：チューブ状氷構造。左から、(a) stacked polygon、(b) helix polygon、(c) double-helix polygon 構造。赤丸、白丸がそれぞれ酸素、水素原子を表している。

⑧ 窒化物半導体中原子空孔の強磁性予測

GaN, InN, AlN などの窒化物半導体は直接ギャップ半導体として赤外から紫外までの波長領域をカバーする光デバイスの基幹材料である。さらにこれら物質群は、近年スピントロニクス材料としても有望視されている。すなわち、磁性不純物原子をドーピングすることによって強磁性が室温で発現していることが報告されている。しかし、磁性不純物原子1個当りの磁気モーメントが異常に大きいなど、従来の常識では理解できない現象が報告されている。電子相関の効果積極的に取り入れた DFT+U (Gd の局在した 4f 電子状態での電子相関効果をオンサイト・エ

エネルギーUで取り入れる方法)の手法によりGdドープGaNの電子状態を計算した。すると、Gd周囲のカチオン空孔が強磁性的にスピン偏極することが見出された。さらにカチオン空孔のみが存在する系でも強磁性状態が出現することが見出された。これは窒化物半導体においては、カチオン原子と窒素原子の原子半径が顕著に異なることにより、カチオン空孔周囲の窒素原子は、半導体に特徴的なヤーン・テラー歪を起こすことができず、代わりに電子同士の量子論的相互作用により、スピン偏極により安定化するためである。半導体における全く新奇な強磁性相の出現が予測される。

(2) ショットキー障壁形成の理論

デバイスの微細化に伴い、ゲート絶縁膜は従来のSiO₂から高誘電体膜、とくにHfO₂材料に置き換わりつつある。この新しい絶縁膜とゲート電極の間のショットキー障壁の電極材料依存性は、従来の界面科学の常識では説明できないことが実験的に明らかになってきた。このシリコン・テクノロジーの大問題の解決には、金属・絶縁体の界面での原子軌道のミキシングと金属の状態密度のエネルギー依存性の2点が重要であることを見出した。そこから導かれる「一般化された電荷中性点」の概念により、実験結果は見事に説明されることがわかった。これにより電極材料選択の指針が与えられた。

(3) 動力学による生体反応解明

蛋白質等のバイオ物質での反応中心では、量子論で記述される化学反応が起きている。一方、そこではダイナミクスが重要である。量子論で記述される電子のダイナミクスはフェムト秒のオーダーである。一方、原子構造のダイナミクスはピコ秒、ナノ秒さらにはミリ秒のスケールである。そのマルチスケール現象を扱うのに、密度汎関数理論に基礎をおくCar-Parrinello分子動力学法と、位相空間効率的サンプリング法であるメタダイナミクス法を結合した手法(CPMD-MeD)を開発した。

① ATP-ADP 分解反応の量子ダイナミクス

生体ダメージの回復は特有の蛋白質が担っている。HSC70 (Heat Shock Cognate 70)はその一例であり、ATP-ADP分解反応で得られた自由エネルギーを利用して、蛋白質形状が変化し、ダメージ箇所に着して回復を図る。CPMD-MeDにより、このATP-ADP分解反応経路を原子スケールで解明した。周囲のMg、K、P、O原子とプロトンが反応に重要な役割を果たしていることが示され、計算された反応の自由エネルギー障壁は実験と良い一致を示している。

② 蛋白質でのプロトン移動機構

シトクローム酸化酵素はミトコンドリア内膜に位置し、生物の呼吸作用の最終段階で、

プロトン膜内から膜間に輸送し、それによってATP合成反応を促す極めて重要な蛋白質である。牛由来のシトクロームc酸化酵素の結晶構造を元に、X線回折構造をもとに見出されたプロトン移動経路(H-path)では、Tyr440-Ser441間のペプチドグループが連続的な水素結合のネットワークを妨げており、従来のD-またはK-pathにおけるプロトン輸送とは異なる機構が必要となっていた。CPMD-MeDにより、Tyr440-Ser441間およびSer441-Asp442間の空間的に近接したふたつのペプチドグループを介した多段階反応により、共有結合を介したプロトン輸送が可能であることを示した。これは、水分子などの他の因子を必要としない新しいプロトン輸送機構である(図5)。

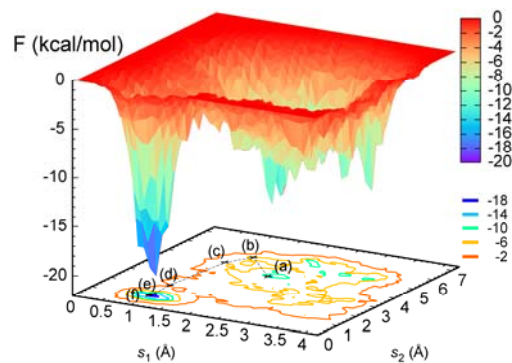
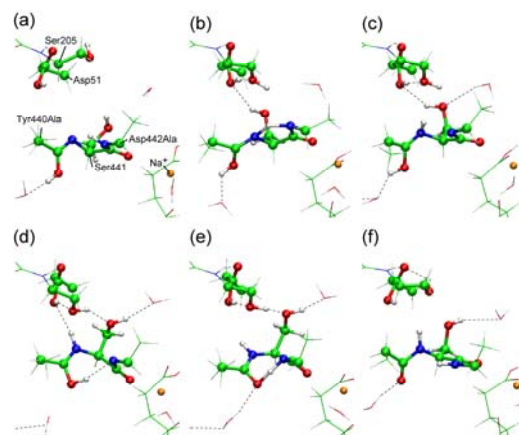


図5：ペプチド結合を横切るプロトン輸送反応の原子プロセス。緑、青、赤、白丸が、炭素、窒素、酸素、水素原子を表している。シトクローム酸化酵素の内膜から移動してきたプロトンは、Tyr440の酸素原子に配位する(a)。一方ペプチド鎖の上方に位置するプロトンはAsp51に引き抜かれ、目的地に到達する。ペプチド鎖バリエードの下方に位置するプロトンは隣のアミノ酸の助けを借りて上方に移動する[(b) - (f)]。下図は反応座標に対する自由エネルギーの変化。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (原著論文計 47 件) (原著論文の内、主な 27 件を以下に記載。全ての発表

論文は査読有)

- 1) K. Uchida and A. Oshiyama, *Electronic-structure calculations for carbonnanotube capacitor with a dielectric medium*, Phys. Rev. B in press (2009).
 - 2) K. Kamiya, S. Yamamoto, K. Shiraishi and A. Oshiyama, *Significant change in electronic structures of heme upon reduction by strong coulomb repulsion between Fe d electrons*, J. Phys. Chem. B **113**, 6886 (2009).
 - 3) Y. Gohda and A. Oshiyama, *Intrinsic ferromagnetism due to cation vacancies in Gd-doped GaN: First-principles calculations*, Phys. Rev. B **78**, 161201 (R) (2008).
 - 4) Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake, and A. Oshiyama: *A new crystalline phase of four-fold coordinated silicon and germanium*, New Journal of Physics **10**, 083001 (2008).
 - 5) S. Okada, *Energetics of carbon peapods: radial deformation of nanotubes and aggregation of encapsulated C₆₀*, Phys. Rev. B **77**, 235419 (2008).
 - 6) N. Umezawa, K. Shiraishi, Y. Akasaka, A. Oshiyama 他 8 名, *Chemical controllability of charge states of nitrogen-related defects in HfO_xN_y: First-principles calculations*, Phys. Rev. B **77**, 165130 (2008).
 - 7) S. Berber and A. Oshiyama, *Atomic and electronic structures of divacancy in carbon nanotubes*, Phys. Rev. B **77**, 165405 (2008).
 - 8) J.-I. Iwata, K. Shiraishi and A. Oshiyama, *Large-scale density-functional calculations on Si divacancies*, Phys. Rev. B **77**, 115208 (2008).
 - 9) K. Takai, K. Shiraishi and A. Oshiyama, *Ge vacancies at Ge/Si interfaces: stress enhanced pairing distroton*, Phys. Rev. B **77**, 045308 (2008).
 - 10) S. Okada, *Energetics of nanoscale graphene ribbons: Edge geometries and electronic structures*, Phys. Rev. B, **77**, 041408(R) (2008).
 - 11) J. Yamauchi, *Effective mass anomalies in strained Si thin films and crystals*, IEEE Electron Device Letters, **29**, 186 (2008).
 - 12) 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. Ame. Chem. Soc. **129**, 9663 (2007).
 - 13) J. Yamauchi and S. Matsuno, *Effective-mass anomalies of strained Si thin films: surface and confinement effects*, Jpn. J. Appl. Phys. **46**, 3273 (2007).
 - 14) N. Umezawa, K. Shiraishi, K. Torii, M. Boero 他6名, *Role of nitrogen atoms in reduction of electron charge traps in Hf-based High-k dielectrics*, IEEE Electron Device Letters **28**, 363 (2007).
 - 15) K. Uchida, S. Okada, K. Shiraishi and A. Oshiyama, *Quantum effects in double-walled carbon nanotube capacitor*, Phys. Rev. B **76**, 155436 (2007).
 - 16) T. Kurita, S. Okada and A. Oshiyama, *Energetics of ice nanotubes and their encapsulation in carbon nanotubes from density-functional theory*, Phys. Rev. B **75**, 205424 (2007).
 - 17) S. Okada, *Energetics and electronic structures of carbon nanotubes with adatom-vacancy defects*, Chem. Phys. Lett. **447**, 263 (2007).
 - 18) S. Okada, *Radial-breathing mode frequencies for nanotubes encapsulating fullerenes*, Chem. Phys. Lett. **438**, 59 (2007).
 - 19) S. Okada, K. Nakada, and T. Kawai, *Orientaiton dependence of magnetic moment of carbon nanotubes with topological line defects*, Appl. Phys. Lett. **90**, 103120 (2007).
 - 20) M. Boero, *Excess electron in water at different thermodynamic conditions*, J. Phys. Chem. A **111**, 12248 (2007).
 - 21) M. Otani, S. Okada and A. Oshiyama, *Formation of titanium-carbide in a nanospace of C₇₈*, Chem. Phys. Lett. **438**, 274 (2007).
 - 22) S. Okada, K. Nakada, K. Kuwabara, K. Daigoku, and T. Kawai, *Ferromagnetic spin ordering on carbon nanotubes with topological line defects*, Phys. Rev. B **74**, 121412(R) (2006).
 - 23) K. Shiraishi, 他8名, *Theoretial studies on the physical properties of polu-Si and metal gate/HfO₂ related high-k dielectrics interfaces*, ECS Transactions, **1**, 479 (2006).
 - 24) K. Shiraishi, 他12名, *New theory of effective work functions at metal/high-k dielectric interfaces: Application to metal/high-k HfO₂ and La₂O₃ dielectric interfaces*, ECS Transactions, **2**, 25 (2006).
 - 25) S. Berber and A. Oshiyama, *Atomic and electronic structures of carbon nanotubes on Si(001) stepped surfaces*, Phys. Rev. Lett. **96**, 105505 (2006).
 - 26) K. Kamiya, M. Boero, K. Shiraishi and A. Oshiyama, *Enol-to-keto tautomerism of peptide groups*, J. Phys. Chem. B **110**, 4443 (2006).
 - 27) S. Okada, Y. Enomoto, K. Shiraishi and A. Oshiyama, *New electron states that float on semiconductor and metal surface*, Surf. Sci. **585**, L177 (2005).
- [学会発表] (招待講演件数計 38 件) (以下では主要な招待講演 24 件を記載)
- 1) 押山淳, ナノ構造体の面白さ - 電子論による機能探索, 第 56 会応用物理学関係連合講演会シンポジウム (2009 年 3 月 30 日、筑波大学)
 - 2) S. Okada, *Energetics of Nanographite Ribbons*, Okazaki Conf 2009 (February 21-23, 2009, Okazaki Conference Center, Okazaki).
 - 3) A. Oshiyama, *Real-space density-functional-theory scheme and its application to large systems*, Supercomputing in Solid State Physics, (February 16-19, 2009, Kashiwa, Chiba).
 - 4) A. Oshiyama, *Cation vacancies in nitride semiconductors: Possibility of intrinsic ferromagnetism*, JST-DFG Workshop on Nano-electronics, (January 21-23, 2009, Kyoto).
 - 5) K. Kamiya, Y. Shigeta, A. Oshiyama, *A novel proton transfer through peptide group in protein*,

- Theory and Application in Computational Chemistry (Sep 24, 2008, Shanghai).
- 6) A. Oshiyama, *Large-scale density-functional calculations using realspace parallel computation technique*, 1st Int. Conf. of The Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nano science (June 3 - 7, 2008, Tokyo)
 - 7) K. Uchida: *Quantum Effects of Capacitance in Nano-Scale Devices*, 213th ECS (Electro-Chemical Society) Meeting, (May 18, 2008, Phoenix).
 - 8) M. Boero, *Reactive simulations for biochemical processes: the example of cytochrome c oxidase*, Materials-Biology Interface: A Simulation Approach, Institute of Physics and Chemistry of Materials (IPCMS), Strasbourg, 7 March 2008.
 - 9) M. Boero, *ATP Synthase and cytochrome c oxidase: reactive simulations for biochemical processes*, 10th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Hiroshima, 29-31 October 2007.
 - 10) A. Oshiyama, *Microscopic mechanisms of proton transfer in cytochrome c oxidase: Car-Parrinello metadynamics approach*, Handai Nanoscience and Nanotechnology Int. Sympo. (Osaka, September 26-28, 2007)
 - 11) K. Shiraishi, *How can first principles calculations give large contributions to industries?*, ISSP Int. Sympo. on Foundation and Application of density functional theory, Kashiwa, Japan, (Aug. 1-3, 2007).
 - 12) A. Oshiyama, *Density-functional approach to nano- and bio-Materials*, ICYS(NIMS)-IC MR (UC Santa Barbara) Summer School on Nanomaterials (Tsukuba, July 23-28, 2007)
 - 13) A. Oshiyama, *Proton transfer in cytochrome c oxidase using CPMD+metadynamics*, R. Car 60th Birthday Symposium (Trieste, June 21-23, 2007)
 - 14) 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(つくば市), 2007年5月21日-23日.
 - 15) 押山 淳, *Current Stage of the Density Functional Approach Toward Atom Dynamics upon electron Excitation*, 日本物理学会 2007年春季大会シンポジウム(2007年3月20日、鹿児島大学)
 - 16) A. Oshiyama, *Carbon nanotube and its hybrid structures*, 2nd Int. Sympo. on Nano meter-Scale Quantum Physics (nanoPHYS07), (Tokyo, January 24-26, 2007)
 - 17) K. Shiraishi, *What happen at high-k dielectric interfaces?*, 37th IEEE Semiconductor Interface Specialist Conference, San Diego, CA, USA, (December 7-9, 2006).
 - 18) K. Shiraishi, *Theoretical approaches for protein function*, 5th East Asian Biophysics Symposium, Okinawa, Japan (November 12- 16, 2006).
 - 19) A. Oshiyama, *Atomic and Electronic Structures of Carbon nanotubes on Si and Metal Surfaces*, 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic-Structure Calculations (Seoul, November 6, 2006).
 - 20) K. Shiraishi, *Physics of interfaces between gate electrodes and high-k dielectrics*, 8th Int. Conf. on Solid-State and Integrated-Circuit Technology, Shanghai, China (Oct. 23-26, 2006).
 - 21) M. Boero, *Hybrid reactive CPMD based QM/MM simulations of biomolecules*. 1st CMM QM/MM Workshop, Philadelphia (USA). 23-26 September 2006.
 - 22) K. Shiraishi, *Theoretical approaches towards elucidation of the cytochrome c oxidase reaction mechanism*, Int. Workshop on Reaction Mechanisms of Energy Transducing Metalloenzymes, Hyogo, (June 17, 2006).
 - 23) A. Oshiyama, *Prediction of atomic and electronic structures of hybrid materials with carbon nanotubes*, Int Workshop on Computational Challenges and Tools for Nanotubes (Nagano, June 18, 2006)
 - 24) 押山 淳, ナノ・バイオ物質での密度汎関数法計算:現象の微視的機構と予測, ナノ学会第4回大会 (2006年5月20日, 京都大学)
- [その他] (受賞)
- 1) 藤本義隆ほか: 上記発表論文リスト4番が New Journal of Physics Best of 2008 に選出
 - 2) 岡田 晋, 日本物理学会若手奨励賞(日本物理学会、2008年9月21日)
 - 3) 白石賢二, 応用物理学会欧文誌論文賞 2007年9月
6. 研究組織
- (1) 研究代表者
押山 淳 (OSHIYAMA ATSUSHI)
東京大学・大学院工学系研究科・教授
研究者番号: 80143361
 - (2) 研究分担者
白石 賢二 (SHIRAISHI KENJI)
筑波大学・大学院理物質科学研究科・教授
研究者番号: 20334039
山内 淳 (YAMAUCHI JUN)
慶應義塾大学・理工学部・専任講師
研究者番号: 90383984
(以下2005年度~2006年度)
バーバー サヴァッシュ (BERBER SAVAS)
筑波大学・大学院理物質科学研究科・助手
研究者番号: 90375402
 - (3) 連携研究者
内田 和之 (UCHIDA KAZUYUKI)
東京大学・大学院工学系研究科・助教
研究者番号: 80143361
(以下は、2005年度~2007年度は研究分担者)
ボエロ マウロ (BOERO MAURO)
Louis Pasteur 大学 (France)・教授
研究者番号: 40361315
岡田 晋 (OKADA SUSUMU)
筑波大学・大学院理物質科学研究科・准教授
研究者番号: 70302388
岩田 潤一 (IWATA JUNICHI)
筑波大学・計算科学研究センター・研究員
研究者番号: 70400695