

令和 5 年 5 月 26 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19H02544

研究課題名（和文）層状物質とその局所構造におけるフォノン関連物性の理論解析

研究課題名（英文）Theoretical analyses of phonon-related properties of layered materials and their local structures

研究代表者

渡邊 聡 (Watanabe, Satoshi)

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授

研究者番号：00292772

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,210,000円

研究成果の概要（和文）：層状物質のフォノン関連物性の定量的評価と欠陥等の影響の解明、およびそのための計算法の開発に取り組んだ。計算法では、少ない逆格子空間サンプル点数での電子フォノン相互作用行列要素の計算精度向上、機械学習原子間ポテンシャル（MLP）によるフォノンバンドや熱伝導率の高精度予測法の確立、欠陥の荷電状態を考慮したMLPの開発、パーシステント図を用いたMLP用新規構造記述子の開発等の成果を得、物性解析では、Li添加2層MoS₂における引張歪・圧縮歪の両方での超伝導転移温度上昇、窒素空孔含有GaNのフォノンバンドの空孔の荷電状態による顕著な変化、アモルファスカーボンの熱伝導率と密度との強い相関等を見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

全世界的に求められている情報処理やエネルギー変換の一層の高度化・高性能化を実現できる材料として層状物質は期待されている。その性能を發揮させる上でフォノン関連物性とそれに及ぼす欠陥等の影響の理解は重要である。本研究では、層状物質のフォノン関連物性を欠陥等の影響まで含めて予測・解析することに大きく貢献している計算法を開発でき、熱伝導率と構造の相関や超伝導転移温度と歪みの関係等について様々な新たな知見を得ることができた。この点で学術的・社会的意義が大きい。

研究成果の概要（英文）：We conducted quantitative evaluation of phonon-related properties of layered materials and clarification of the effects of defects, etc., as well as development of computational methods for this purpose. For the computational methods, we succeeded in improving the numerical accuracy of electron-phonon interaction matrix elements with a small number of reciprocal space sampling points, establishing a high-accuracy prediction method for phonon bands and thermal conductivity using machine-learning potential (MLP), developing MLP that takes account of defect charge states, developing a new structural descriptor for MLP with persistent diagram, etc. For the property analyses, we found increases in the superconducting transition temperature under both tensile and compressive strains in Li-doped bilayer MoS₂, a remarkable change in the phonon bands of GaN with nitrogen vacancies by their charge states, a strong correlation between the thermal conductivity and density of amorphous carbon, etc.

研究分野：計算材料物理

キーワード：密度汎関数法 フォノン 層状物質 電子フォノン相互作用 熱伝導 機械学習ポテンシャル 点欠陥

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 層状物質は、超伝導体やトポロジカル絶縁体なども含む多様な物性を有する物質群である。単原子層をファンデルワールス (vdW) 力により貼り合わせた vdW ヘテロ接合を活用すると、新材料創出の場がさらに広がりうることから、電子状態を中心に、実験・理論の両面からその物性の研究が活発に進められてきた。フォノン関連物性の研究も盛んになりつつあったが、現実のデバイス応用において重要となる基板の効果や vdW 接合がフォノン関連物性をいかに変調し、それに由来する電気伝導特性にどのように影響するかについては未開拓の段階だった。フォノン関連物性におけるエッジや欠陥の効果についても同様である。

(2) 高精度な第一原理計算手法は、微視的な状態を高い信頼性で予測できることから上記の点の解明の強力な道具である一方、フォノン関連物性の第一原理計算コストは電子状態の計算に比べて高く、基板・接合・エッジ・欠陥を扱う場合にはさらに計算コストが高くなる。このため、精度を確保しつつ計算コストを大幅に下げよう、高速化・効率化をはかることが必要である。このような高速化・効率化に機械学習の応用が有効であることが原子ダイナミクス等の研究で明らかになりつつあったが、同様の方法論をフォノン関連物性に適用する取り組みはあまりなされていなかった。

2. 研究の目的

(1) 本研究では、フォノンバンドおよび電子フォノン相互作用の高精度計算と、それに基づく熱伝導、超伝導、キャリア移動度等のフォノン関連物性の定量的評価を行い、これらの諸物性における接合界面やエッジ、欠陥等の影響の解明を目指した。このために、密度汎関数理論および密度汎関数摂動理論に基づくフォノンバンドおよび電子フォノン相互作用の効率的計算法の開発も進めた。

3. 研究の方法

(1) 電子フォノン相互作用の計算においても、機械学習を用いた原子間ポテンシャルの作成においても、系の電子状態と各原子に働く力の第一原理計算が必要である。この計算は、世界中で広く用いられている、密度汎関数法に基づく標準的な方法により行った。

(2) 電子フォノン相互作用については、密度汎関数法に基づいて高精度計算する方法論が既に開発されているが、その方法は計算コストがきわめて大きい。効率的に計算する方法としては、電子の波動関数を局在化したワニエ関数でフィッティングし、このワニエ関数を用いて相互作用を計算する手法が提案されている。しかし、層状物質における表面鏡像状態のようにほぼ均等な分布を持つバンドはワニエ関数でうまく近似できない。そこで、できる限り粗い波数メッシュ点での計算から詳細な情報を再現できる補間手法の開発を進めた。

(3) 本研究の研究代表者は、高次元ニューラルネットワーク (NN) を用いた原子間ポテンシャル [1] の作成とそれを用いたイオン伝導の解析の実績を有していた。そこで、機械学習法等の改良によりフォノンバンドや熱伝導特性を十分な精度で評価する方法の開発を進めた。さらに、半導体や絶縁体においては系のフェルミ準位に応じて欠陥が複数の荷電状態を取る可能性があることから、このような複数の荷電状態を考慮できる機械学習ポテンシャルの開発にも取り組んだ。

(4) 熱伝導率の計算には非調和格子動力学法を用いた。

(5) 超伝導転移温度は、電子フォノン相互作用定数を計算した上で McMillan-Allen-Dynes 公式を用いて計算した。

4. 研究成果

(1) 電子フォノン相互作用の高精度計算については、以下の成果を得た。

Li 添加 2 層 MoS₂ について、計算条件を詳細に検討し、逆格子空間での積分に関する諸パラメータに超伝導転移温度が敏感であることを明らかにすると共に、有意な値を得るための計算条件をほぼ確立した。

グラフェンについて、少ない k 点数では十分な精度が得られない原因が電子バンド交差時にバンドの対応付けが正しくなくなってしまうことがあるためであることを見出し、隣接 k 点間の波動関数の重なり具合をもとにバンドの対応付けを補正する方法を考案した。さらに、同様の補正がフォノンバンドについても必要であることを見出し、これを解決するプログラム実装を行った。まだ補正しきれないケースが若干残っているものの、これらの対策により大部分のケースで電子フォノン相互作用行列要素の計算精度を大幅に向上させることができた。

(2) フォノン関連物性に対する機械学習ポテンシャルの開発については、以下の成果を得た。

層状物質に取り組む前段階としてウルツ鉱型 GaN 結晶の熱伝導率を予測可能な高次元 NN ポテンシャルの作成法の改善に取り組み、エネルギーと共に原子に働く力も用いて機械学習を行うことにより、熱伝導率に対しても第一原理計算とよく一致する NN ポテンシャルを作成可能であることを示した。

上記の方法を用いてダイヤモンドとグラファイトの両方の熱伝導率について第一原理計算とよく一致する NN ポテンシャルの作成に成功し、さらにアモルファスカーボンも扱える NN ポテンシャルの作成にも成功した。

NN ポテンシャルへの入力情報(記述子)に系の体積当たりの電荷量を加えるという簡単な変更により、点欠陥の荷電状態の違いを考慮できる NN ポテンシャルを開発した。図 1 に、NN ポテンシャルによるエネルギー・力の予測値と第一原理計算値との比較を示す。従来法では様々な荷電状態を含むデータに対応できていないのに対し、今回提案した新手法では第一原理計算とよく一致する結果が得られていることがわかる。

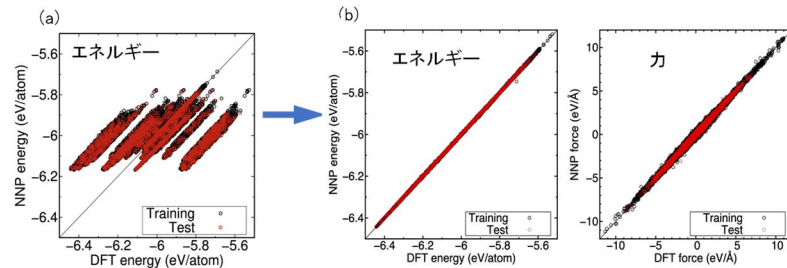


図 1 NN ポテンシャルによる予測値と第一原理計算値の比較 [2]。(a)従来法、(b)新提案手法。

本研究で用いてきた高次元 NN ポテンシャルで採用されている NN は全結合型の構成をしているが、近年、これとは異なるタイプの NN ポテンシャルがいくつか提案されている。そこで有望な NN ポテンシャルに対しフォノンバンド構造の予測精度の評価を行い、グラフ NN を用いたポテンシャル[3]が GaN のフォノンバンド構造について本研究で用いてきた NN ポテンシャルと同等以上の性能を示すとの結果を得た。

パーシステント図を 2 次元のヒストグラムに変換し、それを正規化することにより、機械学習ポテンシャル用の新しい構造記述子を生成する方法を開発した。この記述子をアモルファスカーボン構造に適用し、学習に用いたサイズより大きい系も含めてエネルギーを数十 meV/原子程度の精度で予測可能であることを示すことができた。高次元 NN ポテンシャルによく用いられる構造記述子である対称性関数ではハイパーパラメータの最適化が面倒であるのに対し、これが不要である優位性を持っており、今後の発展が期待できる方法である。

歪・欠陥等の存在下でのフォノン関連物性の評価については、以下の成果を得た。

Li 添加 2 層 MoS₂ において歪印加による格子定数の変調等がフォノンや超伝導特性等に与える影響を解析し、引張歪・圧縮歪の両方で超伝導転移温度が上昇することを見出した。これは Na 添加 2 層 MoS₂ に対する先行研究結果とは異なる振舞いである。さらに、歪の向きにより超伝導転移温度上昇の機構が異なることを明らかにした。次に単層 ZrS₂ についても歪みの影響を解析し、圧縮ひずみで金属化するが電荷密度波(CDW)相転移により 2×2 周期で新たな安定相をとること、および歪の調整により CDW と超伝導の共存状態が現れる可能性を見出した。

2 次元物質と格子歪の観点から層状 WTe₂ の電子状態について実験グループとの共同研究に取り組み、数層 WTe₂ においては表面分極電荷が生じること、その分極の大きさを層間のせん断歪によって制御可能であることを示した。

欠陥の荷電状態を考慮できる NN ポテンシャルを用いて窒素空孔を含む GaN のフォノンバンド構造を解析し、空孔の荷電状態によりフォノンバンド構造が大きく変化することを見出した。

アモルファスカーボンの熱伝導特性を第一原理分子動力学法により解析し、熱伝導率が密度と共にほぼ線形に増大するという強い相関関係を見出した。加えて、sp/sp²/sp³ 結合の比率およびこれを反映した構造のトポロジカルな特徴が密度と強い相関を示すことを見出した。さらに、これらの構造的特徴がパーシステントホモロジー解析で定量化でき、これを用いて熱伝導率に対する線形回帰モデルを構築することができた。

WS₂ 薄膜の解析に利用できる高次元 NN ポテンシャルを作成した。これを用いて S 原子欠損を導入した WS₂ 薄膜に対して分子動力学計算を行い、S シートと W シートにまたがる 5 員環+9 員環構造が自発的に形成されることを見出した。さらに、この構造が面内では容易に移動できる等、この薄膜における欠陥構造の振舞いを明らかにした。

WS₂ 薄膜の解析に利用できる高次元 NN ポテンシャルを作成した。これを用いて S 原子欠損を導入した WS₂ 薄膜に対して分子動力学計算を行い、S シートと W シートにまたがる 5 員環+9 員環構造が自発的に形成されることを見出した。さらに、この構造が面内では容易に移動できる等、この薄膜における欠陥構造の振舞いを明らかにした。

< 引用文献 >

- [1] J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 98, 146401 (2007).
- [2] K. Shimizu et al., Phys. Rev. B 106, 054108 (2022).
- [3] K. T. Schütte et al., J. Chem. Theory Comput. 15, 448 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 清水康司, E. F. Arguelles, 李文文, 安藤康伸, 南谷英美, 渡邊聡	4. 巻 64
2. 論文標題 ニューラルネットワークポテンシャルによる金-リチウム合金化過程の解析	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 表面と真空	6. 最初と最後の頁 369-374
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/vss.64.369	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 渡邊聡, 清水康司, 南谷英美	4. 巻 48
2. 論文標題 窒化物半導体におけるフォノン関連物性の解析のための 機械学習ポテンシャルの開発	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 日本結晶成長学会誌	6. 最初と最後の頁 48-4-05 1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.19009/jjacg.48-4-05	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Emi Minamitani, Takuma Shiga, Makoto Kashiwagi, and Ippei Obayashi	4. 巻 40
2. 論文標題 Relationship between local coordinates and thermal conductivity in amorphous carbon	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Vac. Sci. Technol. A	6. 最初と最後の頁 033408 1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1116/6.0001744	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Poobodin Mano, Emi Minamitani, Satoshi Watanabe	4. 巻 2
2. 論文標題 Straintronic effect for superconductivity enhancement in Li-intercalated bilayer MoS ₂	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanoscale Advances	6. 最初と最後の頁 3150-3155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0NA00420K	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nao H Shimada, Emi Minamitani, Satoshi Watanabe	4. 巻 32
2. 論文標題 Theoretical prediction of superconductivity in monolayer h-BN doped with alkaline-earth metals (Ca, Sr, Ba)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 435002 1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/aba674	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koji Shimizu, Elvis F. Arguelles, Wenwen Li, Yasunobu Ando, Emi Minamitani, and Satoshi Watanabe	4. 巻 103
2. 論文標題 Phase stability of Au-Li binary systems studied using neural network potential	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094112 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.094112	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 清水 康司, 渡邊 聡	4. 巻 28
2. 論文標題 ニューラルネットワークを用いた原子間ポテンシャルの材料科学における応用事例	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 日本神経回路学会誌	6. 最初と最後の頁 3-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3902/jnns.28.3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ni Zeyuan, Minamitani Emi, Kawahara Kazuaki, Arafune Ryuichi, Lin Chun-Liang, Takagi Noriaki, Watanabe Satoshi	4. 巻 124
2. 論文標題 Mechanically Tunable Spontaneous Vertical Charge Redistribution in Few-Layer WTe2	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2008 ~ 2012
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b10423	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Minamitani Emi, Ogura Masayoshi, Watanabe Satoshi	4. 巻 12
2. 論文標題 Simulating lattice thermal conductivity in semiconducting materials using high-dimensional neural network potential	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 095001 ~ 095001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab36bc	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Isshiki H., Kondou K., Takizawa S., Shimose K., Kawabe T., Minamitani E., Yamaguchi N., Ishii F., Shiotari A., Sugimoto Y., Miwa S., Otani Y.	4. 巻 19
2. 論文標題 Realization of Spin-dependent Functionality by Covering a Metal Surface with a Single Layer of Molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 7119 ~ 7123
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.9b02619	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koji Shimizu, Ying Dou, Elvis F. Arguëlles, Takumi Moriya, Emi Minamitani, and Satoshi Watanabe	4. 巻 106
2. 論文標題 Using neural network potentials to study defect formation and phonon properties of nitrogen vacancies with multiple charge states in GaN	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 054108 ~ 054108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.054108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計42件 (うち招待講演 14件 / うち国際学会 15件)

1. 発表者名 Satoshi Watanabe, Koji Shimizu and Emi Minamitani
2. 発表標題 Dynamical behaviors of ions in solids studied via neural network interatomic potentials
3. 学会等名 The 19th International Nanotech Symposium & Exhibition (NANO KOREA 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡邊聡, 清水康司
2. 発表標題 機械学習ポテンシャルによる固体電解質および固体電解質-電極界面でのイオン挙動の解析
3. 学会等名 第1回計算イオニクス研究会 (第78回固体イオニクス研究会) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ying Dou, Koji Shimizu, Hiroshi Fujioka, Satoshi Watanabe
2. 発表標題 Study of InN/AlN Heterostructures with High-Dimensional Neural Network Potentials
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡邊聡
2. 発表標題 ナノ構造における伝導現象に関する理論的研究
3. 学会等名 2021年 日本真空表面学会 学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水康司, 安藤康伸, 南谷英美, 渡邊聡
2. 発表標題 ニューラルネットワークポテンシャルによるAu/Li3PO4界面近傍での欠陥挙動解析
3. 学会等名 2021年 日本真空表面学会 学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Satoshi Watanabe and Bo Xiao
2. 発表標題 Atomistic Simulations to Understand Microscopic Mechanism of Ion-Migration-based Resistive Switching Systems
3. 学会等名 4th International Conference on Memristive Materials, Devices & Systems (MEMRISYS 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Shimizu, W. Liu, W. Li, Y. Ando, E. Minamitani, and S. Watanabe
2. 発表標題 Construction of neural network potential to investigate interface structures of metal/Li3PO4
3. 学会等名 4th International Conference on Memristive Materials, Devices & Systems (MEMRISYS 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Junichi Okamoto, Koji Shimizu and Satoshi Watanabe
2. 発表標題 Cu diffusion in amorphous-Ta2O5 containing H2O studied with high-dimensional neural network potential
3. 学会等名 4th International Conference on Memristive Materials, Devices & Systems (MEMRISYS 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Koji Shimizu, Elvis F. Arguelles, Wenwen Li, Yasunobu Ando, Emi Minamitani, and Satoshi Watanabe
2. 発表標題 Alloying Process at the Interface of Au-Li Studied Using Neural Network Potential
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南谷英美
2. 発表標題 ナノスケール磁性およびフォノンの計算物質科学
3. 学会等名 ISSP Women ' s week 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南谷英美
2. 発表標題 電子フォノン相互作用と発熱の理論
3. 学会等名 表面界面スペクトロスコープ2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Emi Minamitani
2. 発表標題 Atomic scale simulation of thermal transport and heat generation in semiconducting materials
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Emi Minamitani
2. 発表標題 Ab-initio predictions of superconductivity in layered materials
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岡本隼一, 清水康司, 渡邊 聡
2. 発表標題 ニューラルネットワークポテンシャルを用いたH ₂ O 含有アモルファス Ta ₂ O ₅ 中のCu拡散の研究
3. 学会等名 2022年 第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大塚竜慈, 清水康司, 渡邊聡
2. 発表標題 ボルン有効電荷を予測するニューラルネットワークの開発：電場印加下の分子動力学計算に向けて
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 飛田倫太郎, 清水康司, 渡邊聡
2. 発表標題 高次元ニューラルネットワークポテンシャルを用いたGaNの熱伝導率の欠陥密度依存性の解析
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高原泉, 清水康司, 渡邊聡
2. 発表標題 高次元ニューラルネットワークポテンシャルの多元系への応用に向けた改良法の比較検討
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 西尾健人, 清水康司, 渡邊聡
2. 発表標題 記述子による調整を必要としないニューラルネットワークポテンシャルの開発
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Koji Shimizu and Satoshi Watanabe
2. 発表標題 Analysis of Atom and Ion Behavior near Interfaces and Defects using Machine Learning Potentials
3. 学会等名 Summit of Materials Science and Global Institute for Materials Research Tohoku User Meeting 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 マノーブーボディン, 南谷英美, 渡邊聡
2. 発表標題 単層 ZrX_2 ($X=S, Se$) におけるひずみ誘起電荷密度波の理論解析
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水康司, Elvis F. Arguelles, Wenwen Li, 安藤康伸, 南谷英美, 渡邊聡
2. 発表標題 ニューラルネットワークポテンシャルによる金-リチウム合金系の解析
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 原田樹, 渡邊聡, 南谷英美
2. 発表標題 電子フォノン相互作用行列要素の効率的計算手法の開発
3. 学会等名 2020年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 マノー ブーボディン, 清水康司, 渡邊聡, 南谷英美
2. 発表標題 単層 ZrX ₂ (X=S, Se) におけるひずみ誘起電荷密度波の理論解析
3. 学会等名 2020年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水康司, E.F. Arguëlles, 李文文, 安藤康伸, 南谷英美, 渡邊聡
2. 発表標題 ニューラルネットワークポテンシャルによる金 - リチウム合金化過程の解析
3. 学会等名 2020年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水康司, 李文文, 安藤康伸, 南谷英美, 渡邊聡
2. 発表標題 ニューラルネットワークポテンシャルによるAu(111)/Li ₃ P ₀₄ 界面近傍での欠陥挙動解析
3. 学会等名 第46回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Satoshi Watanabe, Koji Shimizu and Emi Minamitani
2. 発表標題 Study of thermal transport properties of GaN using high-dimensional neural network potentials
3. 学会等名 International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (ISWGPDs) 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 マノー・ブーボディン、南谷英美、渡邊聡
2. 発表標題 Li添加2層MoS2における超伝導に対する歪みの影響
3. 学会等名 日本表面真空学会2019年度 関東支部学術講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ling Zhou, Emi Minamitani, Satoshi Watanabe
2. 発表標題 First-Principles Calculation of Electron-Phonon Interaction in 2D/3D -Mo03
3. 学会等名 日本表面真空学会2019年度 関東支部学術講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田樹、渡邊聡、南谷英美
2. 発表標題 グラフェンにおける電子フォノン相互作用行列要素の第一原理解析
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原聡一郎, 渡邊聡, 南谷英美
2. 発表標題 二次元トポロジカル絶縁体の欠陥物性に関する理論計算
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 樽岡裕司, 南谷英美, 渡邊聡
2. 発表標題 鉄系超伝導体LiFeAsにおける欠陥の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 マノーブーボディン, 南谷英美, 渡邊聡
2. 発表標題 Li 添加2層MoS ₂ における超伝導に対するひずみの影響の第一原理解析
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ling Zhou, Emi Minamitani, Satoshi Watanabe
2. 発表標題 Density-Functional-Theory Analysis of Electron-Phonon Interaction in 2D/3D -Mo03
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Emi Minamitani
2. 発表標題 Ab-initio simulation of phonon related transport phenomena: inelastic electron tunneling spectroscopy & thermal conductivity
3. 学会等名 Electron-phonon coupling: Computational methods for electronic transport in nanostructures and in bulk materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Emi Minamitani
2. 発表標題 Theory of single spin spectroscopy at surfaces: from Kondo singlet to spin-orbit interaction
3. 学会等名 Exploring the Limits of Nanoscience with Scanning Probe Methods (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Emi Minamitani
2. 発表標題 Computation of phonon related transport properties in semiconducting materials
3. 学会等名 Summit of Materials Science 2019 and GIMRT User Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yushi Taruoka, Emi Minamitani, and Satoshi Watanabe
2. 発表標題 First-principles calculation on defects in LiFeAs
3. 学会等名 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Poobodin Mano, Emi Minamitani, and Satoshi Watanabe
2. 発表標題 First-principles analysis on superconductivity under strain in Li-intercalated bilayer MoS ₂
3. 学会等名 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田樹、渡邊聡、南谷英美
2. 発表標題 グラフェンにおける電子フォノン相互作用行列要素の第一原理解析
3. 学会等名 2019年日本真空表面学会学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 マノーブーボディン、南谷英美、渡邊聡
2. 発表標題 Li 添加2層MoS ₂ における超伝導に対するひずみの影響の第一原理解析 II
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 原田樹、渡邊聡、南谷英美
2. 発表標題 電子フォノン相互作用行列要素の高効率計算手法の開発
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Emi Minamitani
2. 発表標題 Molecular spins at surfaces: from Kondo singlet to application for spintronics
3. 学会等名 The 3rd Symposium for The Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	南谷 英美 (Minamitani Emi) (00457003)	大阪大学・産業技術研究所・教授 (14401)	
研究分担者	清水 康司 (Shimizu Koji) (00838378)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・助教 (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------