

令和 2 年 6 月 3 日現在

機関番号：12501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05488

研究課題名(和文) 電場下の金属/固体界面における金属原子のイオン化と拡散の理論

研究課題名(英文) Theory of metal-atom ionization and diffusion around metal/solid interfaces in electric fields

研究代表者

中山 隆史 (Nakayama, Takashi)

千葉大学・大学院理学研究院・教授

研究者番号：70189075

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、量子力学に基づく大型数値計算を用いて、電場下の様々な金属/固体界面における金属原子や点欠陥のイオン化および侵入拡散の仕組みを調べた。その結果、(1)金属原子の電子状態は界面近傍で金属誘起ギャップ状態(MIGS)と混成するため、金属原子は界面からMIGSの侵入長だけ離れた位置でイオン化すること、(2)金属原子と金属電極間では電子移動が起き、イオン価数は界面からの距離と共に変化し、侵入の拡散障壁は電場強度にほぼ線形に減少すること、(3)これら侵入拡散現象は、固体の誘電率等の物質パラメータと電場強度を変数とした普遍的なモデル式(物理描像)で記述されること等を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

金属/固体界面において金属層に電圧をかけると金属原子がイオン化して固体内に侵入・拡散していくことが知られているが、どのような仕組みでイオン化が起こるか、どのような電場強度で拡散が始まるかは明らかでなかった。本研究では、量子力学に基づく数値計算を行い、これらの疑問点を世界で初めて解明した。特に、界面からの距離に依存したイオン価数の変化や拡散のエネルギーバリアを記述する普遍的な式を導出し、界面における「イオン化と拡散の理論」を構築したことは学術的に大きな意義を持つ。本結果は、近年のナノデバイスの劣化を理解し、新しい電子デバイス開発に多くの知見を与えると期待される。

研究成果の概要(英文)：Mechanisms of ionization and diffusion of metal atoms and point defects have been studied around metal/solid interfaces in electric fields by the first-principles calculations. This project has clarified; (1) due to the hybridization of metal-atom/defect states with metal-induced gap states (MIGS), the ionization occurs at the point with the MIGS penetration length away from the interface, (2) the electron transfer occurs between metal electrode and metal-atom/defect, which changes the ionization charges of metal-atom/defect and decreases the penetration energy barrier of metal-atom/defect into solids, and (3) these penetration behaviors are described by the universal formula with the applied electric field and material parameters such as the bonding energy of metal atoms and the dielectric constant of solid.

研究分野：物性理論、表面界面物理、半導体物理、ナノサイエンス

キーワード：金属/固体界面 電場環境下 イオン化 侵入拡散 金属イオン 点欠陥 クラスタ 第一原理計算

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

金属/固体界面は、光学伝導実験や電子デバイスの心臓とも言える基本構造である。デバイス稼働時に金属層に電圧を印加すると、金属原子がイオン化して固体中に侵入拡散し、リーク電流を生み出しデバイスを劣化させることが古くから知られていた。この現象は、特に近年のナノサイズの金属ドット・金属ワイヤデバイスにおいては致命的な破壊となる。しかし研究開始当初、電場蒸発などの金属/気液相界面での金属原子のイオン化過程は良く理解されていたが、固体相は高密度であるため拡散する金属原子と固体との相互作用が強く、固体界面で金属原子がイオン化する仕組みは全く不明であった。電場下の金属/固体界面において、金属原子はいつどのようにイオン化するか、どのような金属種はイオン化しやすいか等を解明し、界面における「イオン化と拡散の物理」を構築することは、重要な学術的課題の1つであった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、第一原理計算を用いて、電場下の様々な金属/固体界面における金属原子のイオン化のメカニズムとイオン化後の固体中での拡散過程を解明し、金属/固体界面における金属原子の「イオン化と拡散の理論」を構築することである。特に、代表的な金属種・絶縁半導体基板に対して、電場下での金属原子の拡散に対する断熱ポテンシャル、拡散中のイオン価数の変化、それらの電場強度依存性を調べることで、イオン化・拡散メカニズムの分類を行い、いつ・どこでイオン化が起こるか、金属イオンの拡散バリアは電場にどのように依存するか等を解明し、イオン化と拡散の物理描像を明らかにする。

3. 研究の方法

物理描像の未解明な現象を系統的に調べるには、第一原理計算が最適である。本研究では、図1(a)のように、様々な金属層と絶縁・半導体基板からなる30Å程の十分長い界面膜(2×2、3×3のrepeated slab)を用意し、金属原子を界面から固体中に侵入拡散させ、第一原理計算により拡散中の断熱ポテンシャルやイオン価数、電子状態の変化を調べた。代表的な金属としてsp電子系のAl, Au, Agやd電子系のTi, W, Ta等を、絶縁・半導体基板としてSiO₂, SiC等を対象とした。得られた計算結果を基に、イオン化・拡散現象を基本的な物質定数を用いて予測可能な、固体界面での「金属原子のイオン化と拡散の理論」を構築した。

第一原理計算において界面膜に電場を印加する方法はいくつかあるが、本研究が対象とする現象においては、金属電極の一部である金属原子が電極から電荷を盗みながら固体層に侵入するため、独自の方法を開発した。この方法では、膜の左右に異なる金属層を付け、膜から電荷を取る。この時、膜の左右の非対称性が原因となって、固体層内には図1(b)のように一様な電場が発生する。この電場を用いた。膜から取る電荷量を変えることで電場強度を変化させた。

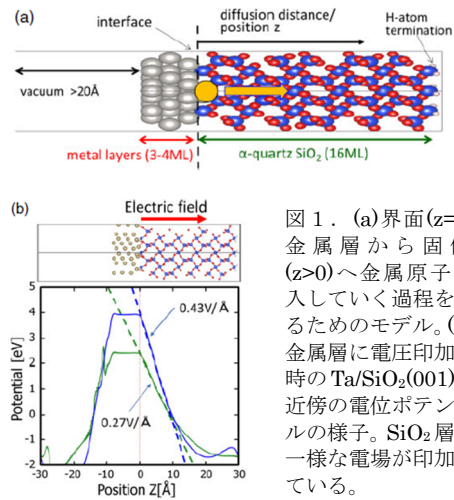


図1. (a)界面(z=0)の金属層から固体中(z>0)へ金属原子が侵入していく過程を調べるためのモデル。(b)Ta金属層に電圧印加した時のTa/SiO₂(001)界面近傍の電位ポテンシャルの様子。SiO₂層内に一様な電場が印加されている。

4. 研究成果

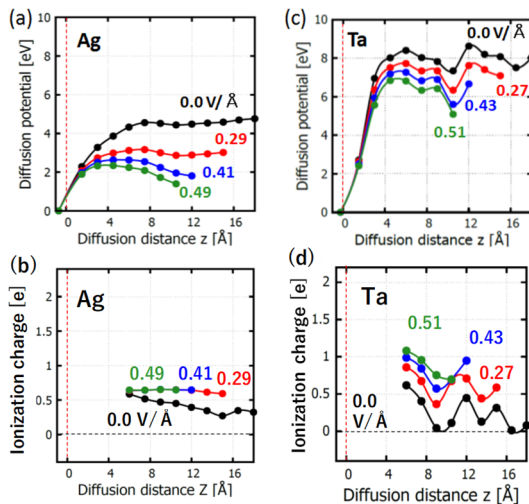


図2. 金属/SiO₂界面近傍での金属原子の侵入拡散ポテンシャルとイオン価数の界面からの距離依存性。(a),(b)はAg,(c),(d)はTa金属の場合。いくつかの電場強度に対して示す。

(1)界面での侵入拡散とイオン化過程:

図2に、金属/SiO₂界面からの代表的な金属原子Ag, Taの侵入拡散ポテンシャルと拡散中のイオン価数を示す。まず大きな特徴として、両原子とも、約6Åまでポテンシャルは単調に増加し、そこまでの領域でイオン化が起こっていることが分かる。一方、拡散障壁はAg, Taではそれぞれ約4.5, 8.5eVと大きく異なっている。また、バルク内部でのポテンシャル変化はAgではなだらかであるが、Taでは振動し同時にイオン価数も変化している。

ポテンシャルの模式図を図3(a)に示す。障壁(侵入バリア)φ_Bは、図3(b)に見るように、金属膜中の金属原子の化学ポテンシャルμ(つまり凝集エネルギー)がその主要原因となっている。一方、Agでは侵入によりSiO₂に歪が発生するため、TaではSi, Oと結合が起こるため、φ_Bはμの値から有意に変化している。バルク内部でのポテンシャルやイオン価数の変化も、

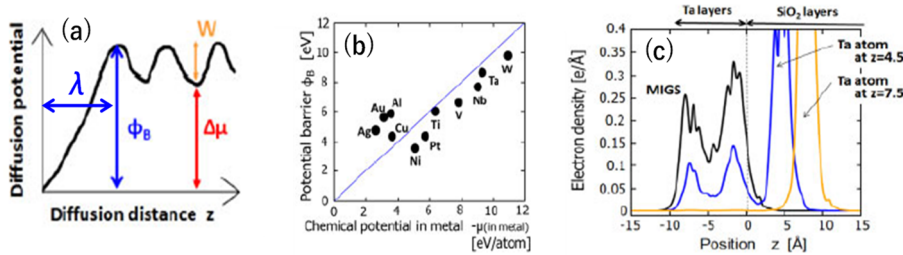


図3. (a)侵入拡散ポテンシャルの模式図。侵入長さ λ と障壁 ϕ_B で特徴づけられる。(b)障壁 ϕ_B と金属中の金属原子化学ポテンシャル μ の関係。(c)Ta/SiO₂界面でのTaの電子状態とMIGSの混成の様子。

金属原子と SiO₂ との相互作用の違いにより同様に説明される。一方、ポテンシャルが変化する領域幅 λ は、図3(c)に示すように、SiO₂のバンドギャップ中に浸み込んだ金属の波動関数(MIGS: metal-induced gap states)が拡散金属原子の電子状態と混成することで決まっている。つまり界面から遠ざかると混成が弱まりポテンシャルが増大する。このため、金属原子のイオン化は、このMIGSの侵入領域で達成されていると言うことができる。

(2)侵入障壁の電場強度依存性： 図2に見るように、電場を印加すると、Agのイオン価数はすぐに+0.6eで飽和し、ポテンシャルは徐々に減少している。一方、Taではポテンシャルが電場強度増大と共に減少することは共通であるが、イオン価数は増大していることが分かる。イオン価数のこの相違は、金属原子の電子状態の違いによる。Agでは、d電子は占有されているためs価電子だけがイオン化に寄与し、価数が飽和しやすい。sp電子系のAlなどでも事情は同じである。一方、d電子が部分占有なTaでは、周辺のSi, O原子と価数に応じて強い結合を作り、結合は原子の位置で変化するためにポテンシャルや価数は原子位置に依存して変動する。

電場下での侵入障壁の大きさは、以下の描像で見積もることができる。まず、MIGSにより侵入ポテンシャルは、ラフに $\phi(z) = \phi_B(1 - \exp(-z/\lambda))$ と書くことができる。Agにおいては、イオン価数Qは飽和しているため、電場Eはポテンシャルを $\Phi(E, z) = \phi(z) - QEz$ (zは界面からの距離)と変化させる。この $\Phi(E, z)$ から障壁の高さ $\Phi_B(E)$ を導出すると、 $\Phi_B(E) = \phi_B - QE\lambda(1 - \log(QE\lambda/\phi_B))$ となる。この $\Phi_B(E)$ を描いたのが図4(b)である。電場増大と共にポテンシャルが減少する様子が、 ϕ_B とQ, λ を物質パラメータとしたこの普遍的な表式で良く記述されることが分かる。ポテンシャルのほぼ線形な減少は金属原子の侵入を加速し、実験結果をよく説明する。

Taにおいては、電場強度と共にイオン価数が変化している。これは、図4(a)に示すように、金属原子から金属電極への電子移動が生じるためである。電場がない時の金属原子の電子占有な準位の金属のフェルミエネルギーからの位置をV₀、電場による電位の変化をEzとすると、イオン電荷は $Q = C(V_0 + Ez)$ (但しCは金属原子と金属電極間のコンデンサ容量で有効面積をSとすると $\epsilon S/z$)となり、この電子移動によるエネルギー得を考慮すると、侵入拡散ポテンシャルは $\Phi(E, z) = \phi(z) - C(V_0 + Ez)^2/2$ となる。この式から求めた障壁の高さ $\Phi_B(E)$ を図4(c)に示す。この表式は、Ta, Nb, Ti, Vに対してその電場依存性をよく記述していることが分かる。

以上の結果はSiO₂基板の場合であるが、基板を変えても同様な現象がみられる。これら結果から、本研究により、電場下におけるイオン化の普遍的な物理描像が明らかにされた。

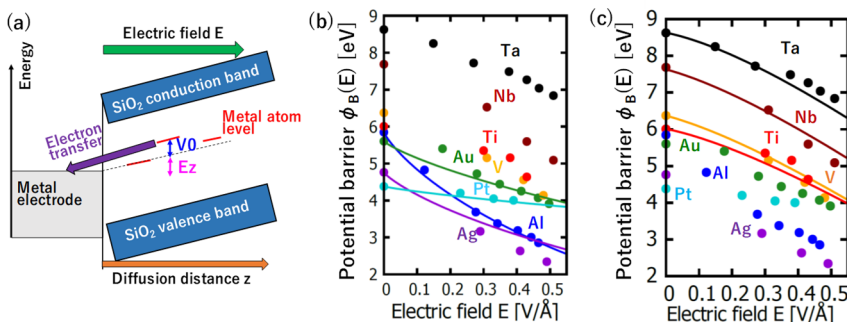


図4. (a)電場下の金属/固体界面における金属原子の電子状態と金属層間の電子移動の模式図。(b)イオン化数が飽和する、および(c)飽和しない金属原子の侵入障壁 ϕ_B の電場強度依存性。

(3)バルク中の金属原子イオンの拡散： 次にイオン化した金属原子が、バルク固体内で拡散する様子を調べた。amorphous-SiO₂ (a-SiO₂)内におけるAg, W原子の、図5(a)に示す経路での拡散ポテンシャルを図5(b), (c)に示す。中性原子の場合、Ag, Wの拡散障壁は約2.2, 3.0eVである。前者の障壁は、Ag原子がSiO₂中の狭い領域を通過する時にSiO₂に歪を発生させることで発生している。そのため、+1価にイオン化すると、イオン半径が小さくなるために障壁は約1.7eVに減少する。一方、W原子の場合は、周囲のSi, O原子と強い結合を作るため、拡散中にその結合が切断されると大きな障壁が発生する。+1価にイオン化しても、周辺と結合を結ぶことは変わらないため、正にイオン化しても拡散ポテンシャルには大きな変化は起こらない。このように、金属原子の電子状態に依存して、イオン化した金属原子の拡散傾向は大きく異なる。

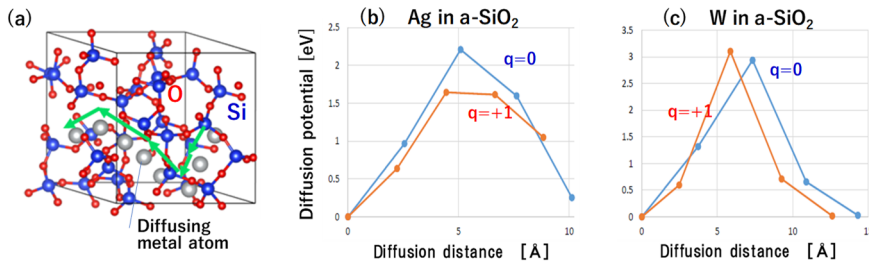


図5. (a) a-SiO₂中の金属原子の拡散経路の例。(b) Ag、(c) W原子の拡散ポテンシャル。中性および+1価の場合を示す。

(4)ドーパント・点欠陥への展開：固体中には、金属原子の他に、意図的に混入させるドーパントや原子空孔などの様々な欠陥が存在する。これら点欠陥の、電場下での金属/固体界面近傍での振る舞いを調べた。図6(a)-(c)は、Au/SiC界面近傍におけるC原子空孔V_C、ドナーP_{Si}およびアクセプターAl_{Si}不純物原子の形成エネルギーを、界面からの距離の関数として示したものである。正電圧がAu金属層に印加されると、界面近傍におけるV_C、P_{Si}の形成エネルギーは減少する。これは、これら点欠陥は正に帯電するために欠陥とAu電極間にクーロン斥力が働き、界面を離れた領域で安定化するためである。一方、Al_{Si}の形成エネルギーは増加して、界面近傍で形成されることはない。これは、Al_{Si}は負に帯電しやすいため、正の金属層に引かれて、界面に析出するためである。Au電極に負の電圧をかけると、逆のことが起こる。同様な結果は、金属/GaN界面でも得られている。これら結果から、界面近傍での点欠陥やドーパントの濃度は、印加電圧により制御可能であることが分かる。この傾向は最近の実験で観測されている。

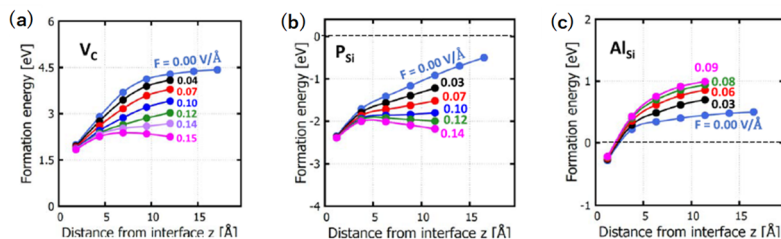


図6. 電場下のAu/SiC界面近傍における(a)C原子空孔、(b)Pドナー不純物原子、および(c)Alアクセプター不純物原子の形成エネルギーの、界面からの距離依存性。

(5)バルク中の金属原子・点欠陥のクラスター化：界面近傍でイオン化して固体内に侵入した金属原子や点欠陥が固体内でどのような分布をとるかは興味深い。図7(a)は、Au, W, Ti金属原子がa-SiO₂内で安定化した配置である。Auの場合は比較的大きな金属クラスターが形成されるが、Wではクラスターのサイズは減少しその数が増え、Tiの場合はSiO₂内でばらばらに分布していることが分かる。これら分布の違いは、金属原子間(M-M)および金属原子の固体中のSi, O原子との結合(M-Si, M-O)のエネルギーを考えると説明できる。図7(b)に示すように、Auの場合は、Au-Au, Au-Si, Au-O結合エネルギーはほぼ等しいため、Au原子はわざわざ強いSi-O結合を壊すことなくAuどうしで金属結合して大きなクラスターとなる。一方、Wの場合は、W-W, W-O結合が強いため、Wどうしで固まると共に周辺のO原子とも結合を作り小さなクラスター形態をとる。Tiでは、Ti-O結合が他の結合より異常に強いため、ホストのSi-O結合を切断してSi-O間に入り込み安定化する。このためにSiO₂内で分散した分布形態となる。

クラスター化した不純物がイオン化すると、分布形態がどのように変化するかも興味深い。金属原子クラスターの場合は、ある程度の電荷を蓄積することができ、これが金属ナノドットを電荷保存型メモリに利用できるメリットとなっている。一方、原子空孔欠陥の場合はイオン化で大きな変化が起きる。TiO₂中のO原子空孔V_Oが、図8(a)に示すような分散及びクラスター分布をした場合の、両者の系のエネルギー差をV₀当たりの帯電数の関数をして図8(b)に示す。中性時には周辺の原子の歪が小さくて済むクラスター分布が安定であるが、電荷を帯びるとV₀は徐

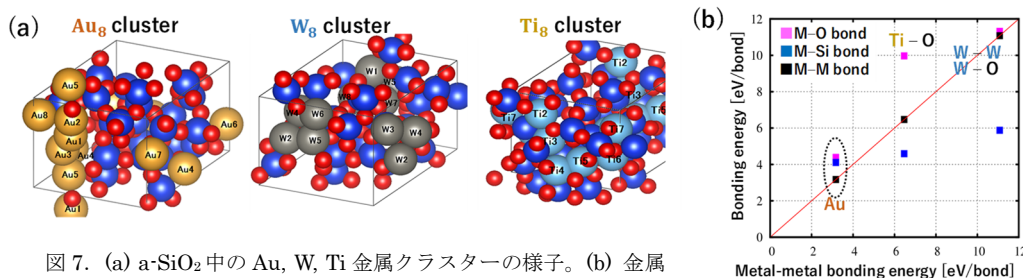


図7. (a) a-SiO₂中のAu, W, Ti金属クラスターの様子。(b) 金属原子とSi, Oとの結合エネルギー。

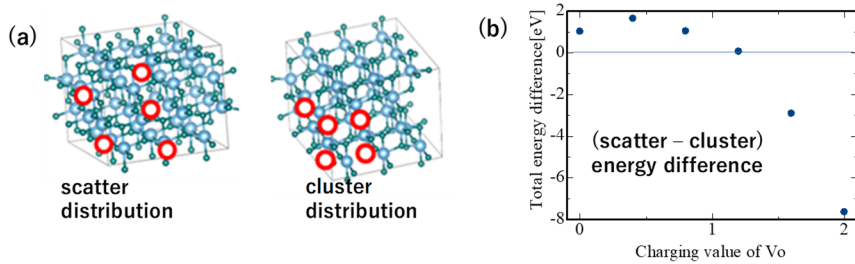


図 8. (a) TiO₂中の酸素空孔 V_o (赤丸) の分散・クラスター分布。(b)分散及びクラスター分布のエネルギー差の帯電数依存性。

々にクラスターから解離し、分散した分布へと変化する。このように、イオン化は固体内の欠陥の分布形態の変化を誘起する。近年の抵抗変化型メモリなどで欠陥のナノワイヤの抵抗値が変化する原因は、これら描像から理解することができる。

(6)有機半導体基板への展開： 以上では、固体基板が無機な絶縁体や半導体の場合を考えた。基板が有機物質に変化した場合、金属原子の侵入拡散がどのように変化するかも興味深い。図 9(a), 9(b)はそれぞれ、 σ 結合をした鎖状分子が並んだ SAM 分子膜、および π 結合した環状分子が並んだペンタセン膜へ、Al 金属原子が侵入する場合の拡散ポテンシャルである。 σ 結合分子と Al 原子の電子状態との相互作用は弱く、Al が SAM 膜に侵入すると膜に歪が誘起されるために約 0.5eV の小さな侵入障壁が存在する。しかし、一旦膜内に入ると、相互作用が弱いために膜内を自在に拡散することが分かる。一方、Al 原子の電子状態は π 結合したペンタセン分子の反結合な π^* 軌道に電子を供給して Al⁺-(pentacene)の強いイオン結合を作り、Al 原子はペンタセン分子に強く吸着して安定化する。そのため、界面から分子膜内へ自発的に侵入するポテンシャル形態となる。分子膜内では、分子の位置によりイオン結合の価数が変化するため、ポテンシャルは原子位置に依存して凸凹に変化し、分子膜内を拡散しにくいことが分かる。これら結果は、有機分子膜中で観測される金属原子の振る舞いをよく説明する。

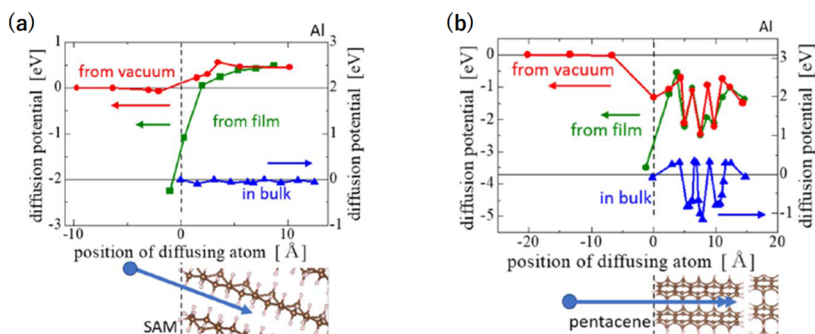


図 9. (a) SAM 分子膜、および(b) ペンタセン分子膜への、Al 原子の侵入拡散ポテンシャル。z=0 が界面の位置。下に横軸に対応する分子の位置を示す。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12件／うち国際共著 1件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 R. Nagasawa, T. Nakayama	4. 巻 58
2. 論文標題 Effect of electric field on formation energies of point defects around metal/SiC and metal/GaN interfaces: First-principles study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 091006-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab3839	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 T. Nishimoto, T. Nakayama	4. 巻 58
2. 論文標題 Origin of Fermi-level depinning at TiN/Ge(001) interfaces: first-principles study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 061007-1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab1c6d	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 S. Cho, S. Iizuka, T. Nakayama	4. 巻 58
2. 論文標題 Resonance-enhanced tunneling current through Si-p/n junction with additional dopants; theoretical study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 061004-1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab1717	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 T. Nakanishi, K. Chokawa, M. Araidai, T. Nakayama, K. Shiraishi	4. 巻 215
2. 論文標題 Theoretical studies on the switching mechanism of VMCO memories	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Microelectronic Engineering	6. 最初と最後の頁 110997-1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.1016/j.mee.2019.110997	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 T. Nakayama, T. Nishimoto	4. 巻 86
2. 論文標題 Physics of Fermi-Level "Unpinning" at Metal/Ge Interfaces; First-Principles View	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ECS Transactions	6. 最初と最後の頁 291-298
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1149/08607.0291ecst	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 T. Nakayama, S. Yamazaki, Y. Shiraishi	4. 巻 86
2. 論文標題 Structural and Charging Stability of Metal Nanodot Memory in SiO ₂ ; First-Principles Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ECS Transactions	6. 最初と最後の頁 69-75
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1149/08602.0069ecst	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 S. Watanabe, T. Nakayama	4. 巻 58
2. 論文標題 Metal-atom penetration and diffusion in organic solids: difference between - and - orbital molecular systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 SI1B28-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab19af	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 T. Nishimoto, T. Nakayama	4. 巻 58
2. 論文標題 Origin of Fermi-level depinning at metal/Ge interfaces: first-principles study on effect of segregation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 SI1B11-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab1bd1	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 R. Nagasawa, Y. Asayama, T. Nakayama	4. 巻 57
2. 論文標題 Acceleration of metal-atom diffusion under electric field at metal/insulator interfaces: First principles study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 04FB05-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.7567/JJAP.57.04FB05	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 T. Nakayama, Y. Asayama, R. Nagasawa	4. 巻 80
2. 論文標題 Metal-atom Ionization and Diffusion under Electric Field around Metal/insulator Interfaces; First-principles View (invited paper)	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ECS Transactions	6. 最初と最後の頁 285-293
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi: 10.1149/08001.0285ecst	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 M. Ishikawa, T. Nakayama, K. Wakita, Y.G. Shim, N. Mamedov	4. 巻 123
2. 論文標題 First-principles study of giant thermoelectric power in incommensurate TlInSe2	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 161575-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1063/1.5011337	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 該当する

1. 著者名 T. Mori, S. Iizuka, T. Nakayama	4. 巻 7
2. 論文標題 Material engineering for silicon tunnel field-effect transistors: isoelectronic trap technology	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 MRS communications	6. 最初と最後の頁 541-550
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1557/mrc.2017.63	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41件（うち招待講演 3件 / うち国際学会 17件）

1. 発表者名 T. Nakayama
2. 発表標題 Physics of Gap-state Control at Metal/Semiconductor Junctions; Schottky Barrier and Interface Defects
3. 学会等名 19th International Workshop on Junction Technology (IWJT 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Oikawa, R. Nagasawa, M. Araidai, K. Shiraishi, T. Nakayama
2. 発表標題 Scattered distribution of oxygen vacancies in anatase TiO ₂ film; first-principles study on VMCO-memory characteristics
3. 学会等名 International Conference on Solid State Devices and materials (SSDM 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Watanabe, T. Nakayama
2. 発表標題 Generation of one-dimensional metal-atom nano-rods in insulating SAM films: first-principles study
3. 学会等名 International Conference on Solid State Devices and materials (SSDM 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Cho, T. Nakayama
2. 発表標題 New types of resonant tunneling currents at Si-p/n junctions; Theoretical design
3. 学会等名 International Conference on Solid State Devices and materials (SSDM 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 M.Ishikawa, T.Nakayama, K.Wakita, Y.G.Shim, T.Onodera, N.Mamedov
2 . 発表標題 First-principles study of defect properties in radiation-detectable TlBr
3 . 学会等名 The 46th International Symposium on Compound Semiconductor (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Nakayama, T. Nishimoto
2 . 発表標題 Why Fermi-level Pinning is broken at some Metal/Ge Interfaces : based on first-principles study of TiN/Ge(001)
3 . 学会等名 9th Int. SiGe Technol. and Device Meeting & 11th Int. Conf. on Silicon Epitaxy and Hetero-structures (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 S. Cho, S. Iizuka, T. Nakayama
2 . 発表標題 Resonance-enhanced Tunneling Current through Doped Si-p/n Junction; Theoretical Study
3 . 学会等名 2018 Int. Conf. on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Nishimoto, T. Nakayama
2 . 発表標題 Origin of Fermi-level depinning at metal/Ge interfaces: first-principles study
3 . 学会等名 14th Int. Conf. Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Watanabe, T. Nakayama
2. 発表標題 Metal-atom Penetration into Organic Solids: Difference between d - and p -orbital Molecular Systems
3. 学会等名 14th Int. Conf. Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Ishikawa, T. Nakayama, K. Wakita, Y. G. Shim, N. Mamedov
2. 発表標題 Electronic and optical properties of 2-dimensional incommensurate TI-based semiconductors: First-principles study on TIInS_2 , TIGaSe_2 and TIGaS_2
3. 学会等名 34th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Nakayama, T. Nishimoto
2. 発表標題 Physics of Fermi-Level "Unpinning" at Metal/Ge Interfaces; First-Principles View
3. 学会等名 Americas International Meeting on Electrochemistry and Solid State Science (AiMES 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Nakayama, S. Yamazaki, Y. Shiraishi
2. 発表標題 Structural and Charging Stability of Metal Nanodot Memory in SiO_2 ; First-Principles Study
3. 学会等名 Americas International Meeting on Electrochemistry and Solid State Science (AiMES 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Tomita, K. Kawabata, T. Nakayama
2. 発表標題 Metal-atom distribution and its effects on carrier transport in organic semiconductors
3. 学会等名 19th Int. Symp. Physics of Semiconductors and Applications (ISPSA 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Tomita, K. Kawabata, T. Nakayama
2. 発表標題 Metal-atom distribution and its effects on carrier transport in organic semiconductors
3. 学会等名 UK Semiconductors 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Nakayama, Y. Asayama, R. Nagasawa
2. 発表標題 Metal-atom Ionization and Diffusion under Electric Field around Metal/insulator Interfaces; First-principles View
3. 学会等名 232nd ECS MEETING (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 R. Nagasawa, Y. Asayama, T. Nakayama
2. 発表標題 Acceleration of metal-atom diffusion under electric field at metal/insulator interfaces: First principles study
3. 学会等名 2017 Int. Conf. on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 M. Ishikawa, T. Nakayama, K. Wakita, Y. G. Shim, N. Mamedov
2. 発表標題 First-principles study of optical properties in incommensurate TlInS ₂ , TlGaSe ₂ and TlGaS ₂
3. 学会等名 29th Int. Conf. Defects in Semiconductors (ICDS29) (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 T. Nakayama (eds. T. Matsuoka and Y. Kangawa)	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Springer International Publishing AG	5. 総ページ数 26 pages in 218 pages
3. 書名 "Polarity Inversion and Electron Carrier Generation in III-nitride Semiconductors" in "Epitaxial Growth of III-Nitride Compounds, Computational Approach"	

〔産業財産権〕

〔その他〕

千葉大学大学院理学研究院 中山研究室ホームページ http://phys8.s.chiba-u.ac.jp/nakayama1/index.html

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