

令和 5 年 10 月 23 日現在

機関番号：14101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K05324

研究課題名(和文) ボンドエンジニアリングによるオクテットAB型二元系原子層物質のマテリアルデザイン

研究課題名(英文) Materials design of two-dimensional octet AB compounds by bond engineering

研究代表者

秋山 亨 (Akiyama, Toru)

三重大学・工学研究科・准教授

研究者番号：40362363

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：オクテットAB型二元系材料に対して、バルク状態で安定となる構造に加え二層八ニカム(DLHC)構造やHaeckelite構造を含む様々な構造を採用して第一原理計算を実行した。膜厚が薄い場合においてはどの材料においてもDLHC構造が安定となることを見出した。また、ヘテロ構造の形成可能性に関する検討もおこない、グラフェンならびに六方晶BNとDLHC構造をとるオクテットAB型二元系材料からなる新たなヘテロ構造を提案した。さらに新物質探索として、DLHC構造をとるヤヌス原子層(表面と裏面で構成元素が異なる原子層)が形成可能であることを見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果によって、オクテットAB型二元系材料による新たなバンドエンジニアリングの実現と新物質創製および新規物性の提案がなされた。これらの成果は、原子層新物質によるバンドエンジニアリング、スピントロニクス等へと発展する可能性が高く、これら各研究分野におけるデバイス開発および素子応用へと波及していくことが考えられる。また、本研究課題の成果は原子層エレクトロニクスの学理の構築に寄与しており、原子層科学ならびにナノ構造科学の進展に大きく貢献する意義がある。

研究成果の概要(英文)：We performed first-principles calculations for AB-type binary compound using various structures including double-layer honeycomb (DLHC) structure and Haeckelite structure in addition to most stable structures in bulk phase. We found that the DLHC structure is the most stable when the film thickness is small. We also evaluated the formation of heterostructures containing AB-type binary materials with graphene and hexagonal BN. We revealed that the DLHC structure is stable for AB-type binary materials that proposed new type heterostructures composed of DLHC structure. Furthermore, we found that Janus monolayer can be formed for AB-type binary compound with DLHC structure.

研究分野：計算物性物理学

キーワード：原子層物質 二層八ニカム構造 ヤヌス型原子層 格子不整合度

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

VI 族元素で構成される原子層物質の作製とその応用に関する研究が国内外を問わずなされている。これら原子層物質は、グラフェンと同様にディラックコーンが存在し得る特異な電子状態を持ち、そのデバイス応用も盛んに検討されている。一方、III-V 族および II-VI 族化合物半導体に代表されるオクテット AB 型二元系材料(オクテット則を満たす A および B 元素で構成される二元系材料で GaN 等の化合物半導体が該当)に注目すると、AlN および GaN において原子層物質の形成が近年報告されている [1, 2]。これらの化合物は構成元素により様々な材料が考えられ、それに応じて物性も大きく変化することから、二元系材料による原子層物質における新物質創製および新機能探索も、検討されるべき重要な研究項目であると考えられる。特に GaAs や InAs 等においては、これまでに報告されていない二層ハニカム (DLHC) 構造という新たな原子層物質の形成とそのトポロジカル絶縁体の可能性が理論的に提案 [3] されている。一方、GaN においては 4 員環と 8 員環が交互に積層する Haeckelite 構造が安定化することも提案 [4] されており、薄膜での AB 型二元系材料における構造安定性および物性については未解明な点が多いのが現状である。

### 2. 研究の目的

これまでに研究代表者は「半導体物性は原子種に依存するのではなく原子間ボンド種に依存する」という考え方にもとづくボンドエンジニアリング概念 [5] を III-V 族半導体薄膜および IV 族原子層物質へ適用して、その原子配列および物性の制御指針を提案してきた。本研究課題では、このボンドエンジニアリング概念を III-V 族および II-VI 族元素で構成されるオクテット AB 型二元系へと適用し、この概念を考慮した計算科学的アプローチ(スピン軌道相互作用を考慮した密度汎関数 (DFT) 計算等)により以下の目的を達成することを具体的な到達点とする。

- (1) 全てのオクテット AB 型二元系化合物における原子層物質の形成可能性、特に DLHC 構造の形成可能性および (TI 形成可能性を含む) 物性探索を行う。
- (2) 形成可能な AB 型二元系原子層物質による超格子構造の検討およびその物性予測を行う。これらの目的を、機械学習等を用いた最適化により可及的速やかに達成して、オクテット AB 型二元系原子層物質における新物質創製および新機能をもつマテリアルデザインの研究地盤を構築することも本研究課題の目的とする。

### 3. 研究の方法

本研究課題では、II-VI 族および III-V 族化合物として対象として取り扱い、密度汎関数 (DFT) 計算および原子間ポテンシャル等の計算科学的手法により以下の検討を行う。

- (1) オクテット AB 型二元系原子層物質の形成可能性
  - (2) 形成可能となるオクテット AB 型原子層物質の物性探索
  - (3) オクテット AB 型二元系原子層ヘテロ構造の形成可能性および物性探索
- 計算はおもに DFT 計算および原子間ポテンシャルを用いる。(2) および (3) において通常の DFT 計算に加え、スピン-軌道相互作用を考慮した DFT 計算およびハイブリッド DFT 計算を実行する。

### 4. 研究成果

- (1) オクテット AB 型二元系原子層物質の形成可能性
- オクテット AB 型二元系材料として 16 種類の材料を対象として、バルク状態で安定となる構造

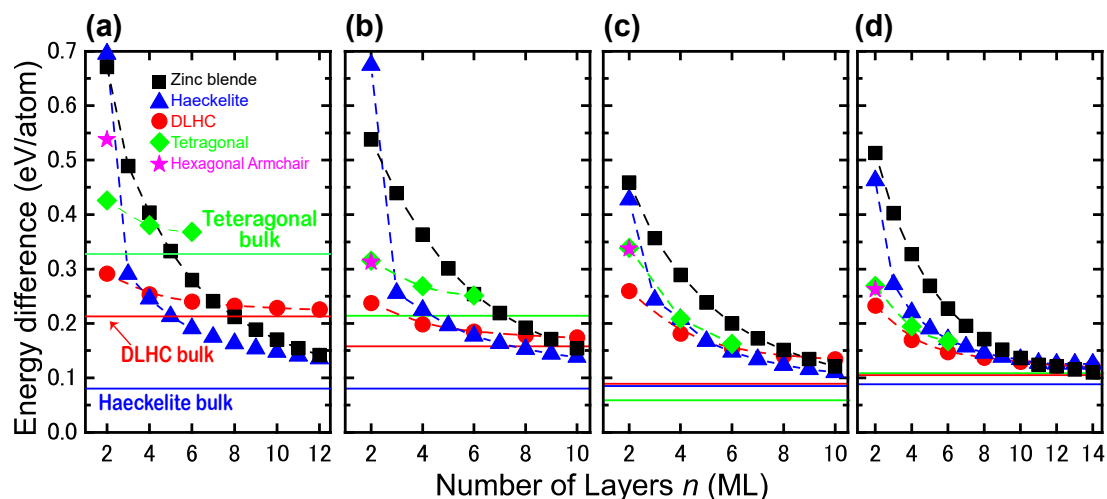


図 1. 閃亜鉛鉱構造を基準とした場合の各種結晶構造の凝集エネルギーの膜厚依存性。DFT 計算によって得られた (a) AlP, (b) AlAs, (c) InSb および (d) AlSb における凝集エネルギー。

(閃亜鉛鉱構造あるいはウルツ鉱構造)に加えて DLHC 構造およびHaeckelite 構造を含む様々な構造を採用し、膜厚の関数としてファンデルワールス相互作用を考慮した DFT 計算により凝集エネルギー計算およびフォノン計算を実行した。図1は凝集エネルギーの膜厚依存性の結果の一部を示したものである。膜厚が薄い場合(2 原子層)においてはどの材料においても DLHC 構造(図1の●)が安定となるのに対して、材料に依存して3~15 原子層以上においては Haeckelite 構造(図1の▲)が安定となる。DLHC 構造の安定化にはイオン性が重要な役割を果たしているものの、イオン性のみでは説明不可能な材料(例えば CdTe)もあり支配因子の抽出には双極子相互作用の解析等により詳細な解析が必要であることを明らかにした。

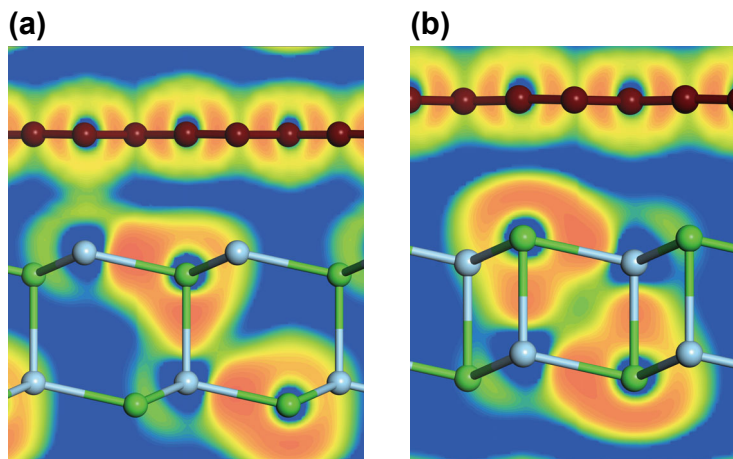


図 2. DFT 計算によって得られた (a)閃亜鉛鉱構造および (b)DLHC 構造のグラフェン/AlAs ヘテロ界面における電子局在

### (2) オクテット AB 型二元系原子層ヘテロ構造の形成可能性および物性探索

オクテット AB 型二元系材料を含むヘテロ構造の形成可能性に関する検討も実行し、グラフェンおよび六方晶 BN とオクテット AB 型二元系材料からなるヘテロ界面の安定構造を決定した。図2は DFT 計算によって得られたグラフェンと AlAs とのヘテロ界面における電子局在関数の断面図を示したものであり、図 2(a)に示す閃亜鉛鉱構造とグラフェンとで化学結合が存在する場合に比べて、図 2(b)に示す顕著な化学結合が存在しない DLHC 構造のほうが安定となる。この場合においても、オクテット AB 型二元系材料はバルク状態での安定構造とは異なる DLHC 構造が安定となり、新たなヘテロ構造が形成する可能性があることが示唆された。さらに、この DLHC 構造におけるヘテロ構造の電子状態解析も行い、グラフェンとのヘテロ構造においてはそれぞれの構成物質のバンド構造の単純な重ね合わせではその電子状態は説明不可能であり、図 3(b)および 3(c)に示すようにヘテロ界面に起因してよりグラフェンのディラックコーンが消失する。一方で、図 3(d)に示す六方晶 BN とのヘテロ界面においては、六方晶 BN の寄与は見出されずフェルミエネルギー近傍での電子状態は主に DLHC 構造のバンド構造を反映する。これは、六方晶 BN のバンドギャップが充分大きく、フェルミエネルギー近傍における状態との軌道混成がほとんど起こらないことに因るものである。

### (3) 各種新規原子層物質の形成可能性の検討

オクテット AB 型二元系材料における原子層物質の形成可能性に加えて、新規原子層物質の探索としてヤヌス原子層(表面と裏面で構成元素が異なる原子層)の形成可能性を検討した。遷移金属ダイカルコゲナイドを対象として、XYZ 型(X は遷移金属、Y および Z はカルコゲン)擬二元系に対して、材料として 9 種類(X=Mo, Cr, W および YZ=SSe, SeTe, STe)を採用してヤヌス原子層および混晶(Y および Z の元素が格子位置にランダムに配置したもの)に対する凝集エネルギー計算を実行した。全ての材料において、混晶での凝集エネルギーがヤヌス原子層のそれに比べ低

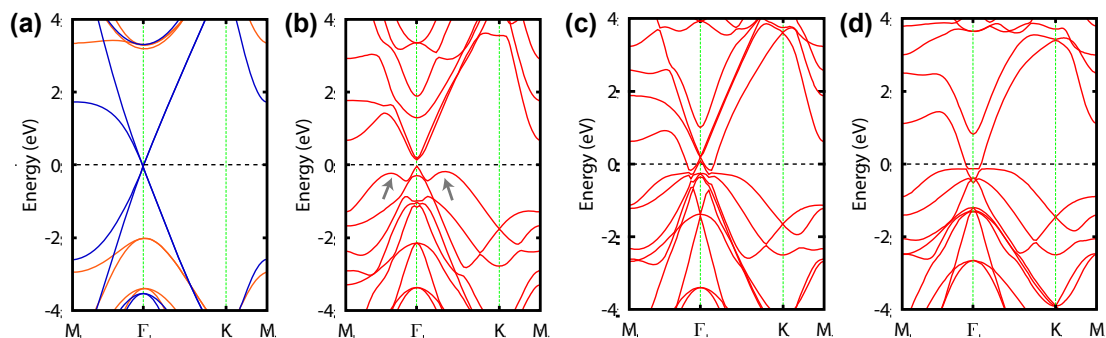


図 3. DFT 計算によって得られた、DLHC 構造となるオクテット AB 型二元系材料/グラフェンヘテロ構造におけるバンド構造。(a)単層グラフェン(青線)および六方晶 BN(赤線)、(b)グラフェン/AlAs、(c) グラフェン/GaAs および(d)六方晶 BN/InAs におけるバンド構造を示す。単層グラフェンおよび六方晶 BN におけるブリルアンゾーンは $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ユニットセルに対するものを示しており、 $1 \times 1$ ユニットセルにおける K 点は $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ユニットセルにおける $\Gamma$ 点に折り畳まれる。

くなり、混晶が安定な原子配置であることが示された。しかしながら、そのエネルギー差は MoSSe、WSSe、CrSSe において小さい ( $\sim 0.01$  eV/f. u.) ことから、作製条件によってはヤヌス原子層が形成可能であると考えられる。実際に MoSSe においては実験的にその作製が報告されており [6]、MoSSe に加えて WSSe および CrSSe においてもヤヌス原子層を取り得ることが示唆された。これらのヤヌス型原子層の安定性は XYZ を構成する際の  $XY_2$  と  $XZ_2$  との格子不整合度に起因しており、格子不整合度の小さい材料系においてヤヌス原子層の作製が可能であることが示された。さらに、DLHC 構造をとるオクテット AB 型二元系材料に対してもヤヌス原子層および混晶に対する凝集エネルギーを計算し、GaPAs (GaP と GaAs の組み合わせ) においてヤヌス原子層が形成可能であることを見出した。これは、DLHC 構造における GaP と GaAs の格子不整合度が比較的小さい ( $\sim 3\%$ ) ことに起因しており、格子不整合度が大きな GaNAs においては混晶が安定となる。

<引用文献>

- [1] P. Tsipas et al.: Appl. Phys. Lett. **103** (2013) 251605.
- [2] Z. Y. A. Balushi et al.: Nature Mater. **15** (2016) 1166.
- [3] M. C. Lucking et al.: Phys. Rev. Lett. **120** (2018) 086101
- [4] A. V. Kolobov et al.: Nano Lett. **16** (2016) 4848.
- [5] T. Ito: J. Appl. Phys. **77** (1995) 4845.
- [6] J. Zhang et al.: ACS Nano **11** (2017) 8192.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計35件（うち査読付論文 35件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Akiyama Toru, Shimizu Tsunashi, Ito Tomonori, Kageshima Hiroyuki, Shiraishi Kenji	4. 巻 723
2. 論文標題 Reaction of nitrous oxide and ammonia molecules at 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> interface: An ab initio study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Surface Science	6. 最初と最後の頁 122102 ~ 122102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2022.122102	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 Hishiki Fumiaki, Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 61
2. 論文標題 Structures and stability of GaN/Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> interfaces: a first-principles study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 065501 ~ 065501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac5e90	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 Ohata Satoshi, Kawamura Takahiro, Akiyama Toru, Usami Shigeyoshi, Imanishi Masayuki, Yoshimura Masashi, Mori Yusuke, Sumi Tomoaki, Takino Junichi	4. 巻 61
2. 論文標題 Influence of oxygen-related defects on the electronic structure of GaN	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 061004 ~ 061004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac6645	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 Sokudo Haruka, Akiyama Toru, Ito Tomonori	4. 巻 62
2. 論文標題 First-principles study for self-limiting growth of GaN layers on AlN(0001) surface	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SC1014 ~ SC1014
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/aca810	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 Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 16
2. 論文標題 Role of charged oxygen vacancies and substrate lattice constraint on structural stability of Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> polymorphs	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 015508 ~ 015508
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acb12e	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 Fujita Shuri, Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 62
2. 論文標題 Effect of lattice constraint on structural stability and miscibility of (Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>3</sub> films: a first-principles study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SC1031 ~ SC1031
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acaef	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 Kobayashi Atsushi, Kihira Shunya, Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Maeda Takuya, Ueno Kohei, Fujioka Hiroshi	4. 巻 5
2. 論文標題 Epitaxial Junction of Inversion Symmetry Breaking AlN and Centrosymmetric NbN: A Polarity Control of Wide-Bandgap AlN	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Applied Electronic Materials	6. 最初と最後の頁 240-246
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.2c01288	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 Kawamura Takahiro, Basaki Kouhei, Korei Akito, Akiyama Toru, Kangawa Yoshihiro	4. 巻 260
2. 論文標題 Bandgap Change in Short Period InN/AlN Superlattices Induced by Lattice Strain	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2200549 ~ 2200549
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202200549	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 Kobayashi Atsushi, Kihira Shunya, Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Maeda Takuya, Ueno Kohei, Fujioka Hiroshi	4. 巻 5
2. 論文標題 Epitaxial Junction of Inversion Symmetry Breaking AlN and Centrosymmetric NbN: A Polarity Control of Wide-Bandgap AlN	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Applied Electronic Materials	6. 最初と最後の頁 240-246
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.2c01288	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 Fujita Shuri, Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 62
2. 論文標題 Effect of lattice constraint on structural stability and miscibility of (Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>3</sub> films: a first-principles study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SC1031 ~ SC1031
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acae5f	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 Kawamura Takahiro, Basaki Kouhei, Korei Akito, Akiyama Toru, Kangawa Yoshihiro	4. 巻 260
2. 論文標題 Bandgap Change in Short Period InN/AlN Superlattices Induced by Lattice Strain	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2200549 ~ 2200549
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202200549	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 Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 16
2. 論文標題 Role of charged oxygen vacancies and substrate lattice constraint on structural stability of Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> polymorphs	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 015508 ~ 015508
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acb12e	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 Sokudo Haruka, Akiyama Toru, Ito Tomonori	4. 巻 62
2. 論文標題 First-principles study for self-limiting growth of GaN layers on AlN(0001) surface	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SC1014 ~ SC1014
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/aca810	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 Ohata Satoshi, Kawamura Takahiro, Akiyama Toru, Usami Shigeyoshi, Imanishi Masayuki, Yoshimura Masashi, Mori Yusuke, Sumi Tomoaki, Takino Junichi	4. 巻 61
2. 論文標題 Influence of oxygen-related defects on the electronic structure of GaN	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 061004 ~ 061004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac6645	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 Hishiki Fumiaki, Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 61
2. 論文標題 Structures and stability of GaN/Ga2O3 interfaces: a first-principles study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 065501 ~ 065501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac5e90	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 Akiyama Toru, Shimizu Tsunashi, Ito Tomonori, Kageshima Hiroyuki, Shiraishi Kenji	4. 巻 723
2. 論文標題 Reaction of nitrous oxide and ammonia molecules at 4H-SiC/SiO2 interface: An ab initio study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Surface Science	6. 最初と最後の頁 122102 ~ 122102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2022.122102	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 Niki Katsuhide, Akiyama Toru, Ito Tomonori	4. 巻 61
2. 論文標題 An ab initio-based approach for the formation of pyramidal inversion domain boundaries in highly Mg-doped GaN	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 055503 ~ 055503
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac5dab	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 Akiyama Toru, Yonemoto Kazuhiro, Hishiki Fumiaki, Ito Tomonori	4. 巻 570
2. 論文標題 Effect of surface structural change on adsorption behavior on InAs wetting layer surface grown on GaAs(001) substrate	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 126233 ~ 126233
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2021.126233	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 Akiyama Toru, Ohka Takumi, Nagai Katsuya, Ito Tomonori	4. 巻 571
2. 論文標題 Effect of step edges on the adsorption behavior on vicinal AlN(0001) surface during metal-organic vapor phase epitaxy: An ab initio study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 126244 ~ 126244
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2021.126244	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 Akiyama Toru, Nakatani Atsutaka, Shimizu Tsunashi, Ohka Takumi, Ito Tomonori	4. 巻 60
2. 論文標題 Effective approach for calculating individual energy of step edges on polar AlN(0001) and GaN(0001) surfaces	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 080701 ~ 080701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac1128	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 Shimizu Tsunashi, Akiyama Toru, Ito Tomonori, Kageshima Hiroyuki, Uematsu Masashi, Shiraishi Kenji	4. 巻 5
2. 論文標題 Ab initio-based approach for the oxidation mechanisms at SiO <sub>2</sub> /4H-SiC interface: Interplay of dry and wet oxidants during interfacial reaction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 114601 ~ 114601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.5.114601	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 Akiyama Toru, Shimizu Tsunashi, Ito Tomonori, Kageshima Hiroyuki, Chokawa Kenta, Shiraishi Kenji	4. 巻 61
2. 論文標題 Ab initio study for orientation dependence of nitrogen incorporation at 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> interfaces	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SH1002 ~ SH1002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac5a96	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 Niki Katsuhide, Akiyama Toru, ITO Tomonori	4. 巻 61
2. 論文標題 An ab initio-based approach for the formation of pyramidal inversion domain boundaries in highly Mg-doped GaN	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac5dab	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 Hishiki Fumiaki, Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, ITO Tomonori	4. 巻 61
2. 論文標題 Structures and stability of GaN/Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> interfaces: a first-principles study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac5e90	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 Ohka Takumi, Akiyama Toru, Pradipto Abdul Muizz, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 20
2. 論文標題 Effect of Step Edges on Adsorption Behavior for GaN(0001) Surfaces during Metalorganic Vapor Phase Epitaxy: An Ab Initio Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 4358 ~ 4365
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.0c00117	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 Seta Yuki, Akiyama Toru, Pradipto Abdul Muizz, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 13
2. 論文標題 Roles of growth kinetics on GaN non-planar facets under metalorganic vapor phase epitaxy condition	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 065505 ~ 065505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab9182	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 Shimizu Tsunashi, Akiyama Toru, Pradipto Abdul-Muizz, Nakamura Kohji, Ito Tomonori, Kageshima Hiroyuki, Uematsu Masashi, Shiraishi Kenji	4. 巻 59
2. 論文標題 Ab initio calculations for the effect of wet oxidation condition on the reaction mechanism at 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> interface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SMMD01 ~ SMMD01
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab85dd	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 Seta Yuki, Pradipto Abdul-Muizz, Akiyama Toru, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 257
2. 論文標題 Equilibrium Morphologies of Faceted GaN under the Metalorganic Vapor Phase Epitaxy Condition: Wulff Construction Using Absolute Surface Energies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 1900523 ~ 1900523
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.201900523	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 Hasegawa Yuya, Akiyama Toru, Pradipto Abdul-Muizz, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 257
2. 論文標題 Effect of Film Thickness on Structural Stability for BAlN and BGaN Alloys: Bond Order Interatomic Potential Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2000205 ~ 2000205
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202000205	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 Kawamura Takahiro, Akiyama Toru, Kitamoto Akira, Imanishi Masayuki, Yoshimura Masashi, Mori Yusuke, Morikawa Yoshitada, Kangawa Yoshihiro, Kakimoto Koichi	4. 巻 549
2. 論文標題 Absolute surface energies of oxygen-adsorbed GaN surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 125868 ~ 125868
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2020.125868	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 Kawamura Takahiro, Fujita Yuma, Hamaji Yuya, Akiyama Toru, Kangawa Yoshihiro, Gorczyca Izabela, Suski Tadeusz, Wierzbowska Maigorzata, Krukowski Stanislaw	4. 巻 257
2. 論文標題 First Principles Calculation of Bandgaps of Al <sub>1-x</sub> In <sub>x</sub> N Alloys and Short Period Al <sub>1-x</sub> In <sub>x</sub> N/Al <sub>1-y</sub> In <sub>y</sub> N Superlattices	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 1900530 ~ 1900530
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.201900530	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 Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 118
2. 論文標題 Computational discovery of stable phases of graphene and h-BN van der Waals heterostructures composed of group III-V binary compounds	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 023101 ~ 023101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0032452	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 Shimizu Tsunashi, Akiyama Toru, Nakamura Kohji, Ito Tomonori, Kageshima Hiroyuki, Uematsu Masashi, Shiraishi Kenji	4. 巻 60
2. 論文標題 Reaction of NO molecule at 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> interface: an ab initio study for the effect of NO annealing after dry oxidation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SBBD10 ~ SBBD10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abdc1	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 Shimizu Tsunashi, Akiyama Toru, Nakamura Kohji, Ito Tomonori, Kageshima Hiroyuki, Uematsu Masashi, Shiraishi Kenji	4. 巻 98
2. 論文標題 Effects of Wet Ambient on Dry Oxidation Processes at 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> Interface: An Ab Initio Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ECS Transactions	6. 最初と最後の頁 37 ~ 46
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/09803.0037ecst	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 Nagai Katsuya, Akiyama Toru, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 98
2. 論文標題 A Simple Approach to Growth Mode of InN and InGaN Thin Films on GaN(0001) Substrate	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ECS Transactions	6. 最初と最後の頁 155 ~ 164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/09806.0155ecst	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34件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 14件)

1. 発表者名 Fumiaki Hishiki, Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, and Tomonori Ito
2. 発表標題 Structures and stability of GaN/Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> interfaces: a first-principles Study
3. 学会等名 2021 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Katsuhide Niki, Toru Akiyama, and Tomonori Ito
2. 発表標題 An ab initio-based approach for the formation of pyramidal inversion domain boundaries in highly Mg-doped GaN
3. 学会等名 2021 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Toru Akiyama, Atsutaka Nakatani, Tsunashi Shimizu, Takumi Ohka, Tomonori Ito
2. 発表標題 Direct approach for calculating individual energy of step edges on polar AlN(0001) and GaN(0001) surfaces using density functional calculations
3. 学会等名 International Conference on Materials and Systems for Sustainability (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Toru Akiyama, Tsunashi Shimizu, Tomonori Ito, Hiroyuki Kageshima, Kenta Chokawa, Kenji Shiraishi
2. 発表標題 Ab initio Study for Orientation Dependence of Nitrogen Incorporation at 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> Interfaces
3. 学会等名 2021 International Workshop on Dielectric Thin Films for Future ULSI Devices: Science and Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Toru Akiyama, T. Shimizu, Tomonori Ito, H. Kageshima, K. Shiraishi
2. 発表標題 Ab initio-based approach for reaction process at 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> interfaces
3. 学会等名 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 日紫喜文昭, 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
2. 発表標題 第一原理計算によるGaN/ Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 界面構造の理論解析
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 仁木克英, 秋山亨, 伊藤智徳
2. 発表標題 界面エネルギー計算に基づく高濃度Mg添加GaNにおけるピラミッド型インバージョンドメイン形成の評価
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 秋山亨, 中谷淳嵩, 清水紀志, 相可拓巳, 伊藤智徳
2. 発表標題 第一原理計算によるAlN(0001)およびGaN(0001)表面でのステップ形成エネルギーの評価
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 秋山亨, 清水紀志, 伊藤智徳, 影嶋博之, 白石賢二
2. 発表標題 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> 界面での窒素取り込みの面方位依存性に関する理論検討
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 仁木克英, 秋山亨, 伊藤智徳
2. 発表標題 窒化物半導体におけるピラミッド型インバージョンドメイン形成の理論解析
3. 学会等名 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 日紫喜文昭, 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
2. 発表標題 GaN(0001)基板上に形成するGa <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 膜の構造安定性の理論解析: 膜厚依存性の検討
3. 学会等名 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 藤田楓理, 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
2. 発表標題 (Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 混晶の構造安定性および混和性に関する理論的検討
3. 学会等名 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 足道悠, 秋山亨, 伊藤智徳
2. 発表標題 第一原理計算に基づくAlN(0001)表面上のGaN層の構造安定性評価
3. 学会等名 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 秋山亨, 清水紀志, 伊藤智徳, 影嶋博之, 白石賢二
2. 発表標題 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> 界面での窒素酸化物およびアンモニアの反応機構の理論的検討
3. 学会等名 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 秋山亨, 清水紀志, 伊藤智徳, 影嶋博之, 白石賢二
2. 発表標題 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> 界面での窒素酸化物およびアンモニアの反応機構の理論的検討
3. 学会等名 電子デバイス界面テクノロジー研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takahiro Kawamura, Kouhei Basaki, Satoshi Ohata, Toru Akiyama, and Yoshihiro Kangawa
2. 発表標題 First-principles calculation of optical properties of III-V nitride semiconductors
3. 学会等名 The 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito
2. 発表標題 Computational prediction for stable structures of graphene van der Waals heterostructures composed of group-III-V compounds
3. 学会等名 Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 秋山亨, 米本和弘, 日紫喜文昭, A. -M. Pradipto, 中村浩次, 伊藤智徳
2. 発表標題 モンテカルロ計算によるGaAs(001)基板上InAsぬれ層の表面構造変化の理論検討
3. 学会等名 2020年第81回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
2. 発表標題 第一原理計算によるIII-V族化合物-グラフェン超格子の構造および電子状態解析
3. 学会等名 2021年第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Toru Akiyama, Yuki Seta, Takumi Ohka, Tomonori Ito
2. 発表標題 Recent progress in computational materials science for III-nitride epitaxial growth: effects of growth kinetics on surface morphologies and nanostructures
3. 学会等名 International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takahiro Kawamura, Akito Korei, Kouhei Basaki, Toru Akiyama, Yoshihiro Kangawa, Izabela Gorczyca, Tadeusz Suski, Maigorzata Wierzbowska, and Stanislaw Krukowski
2. 発表標題 Change of the effective bandgaps of InN/AlN superlattices due to lattice distortion
3. 学会等名 International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Toru Akiyama, Takumi Ohka, Katsuya Nagai, Tomonori Ito
2. 発表標題 Effect of step edges on the adsorption behavior on vicinal AlN(0001) surface during metal-organic vapor phase epitaxy: an ab initio study
3. 学会等名 The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Influence of Lattice Kouhei Basaki, Akito Korei, Takahiro Kawamura, Toru Akiyama, Yoshihiro Kangawa
2. 発表標題 Influence of Lattice Distortion on the Effective Bandgaps of Polar InN/AlN Superlattices
3. 学会等名 The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Haruka Sokudo, Toru Akiyama, and Tomonori Ito
2. 発表標題 First-principles study for self-limiting growth of GaN layers on AlN(0001) surface
3. 学会等名 2022 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shuri Fujita, Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, and Tomonori Ito
2. 発表標題 Effect of lattice constraint on structural stability and miscibility of $(Al_xGa_{1-x})_{203}$ films: A first-principles study
3. 学会等名 2022 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, Tomonori Ito
2. 発表標題 Structural change of Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> induced by charged oxygen vacancies: a first-principles study
3. 学会等名 The 4th International Workshop on Gallium Oxide and Related Materials (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takahiro Kawamura, Toru Akiyama
2. 発表標題 Influence of biaxial strain on bandgaps of $\alpha$ -Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
3. 学会等名 The 4th International Workshop on Gallium Oxide and Related Materials (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林篤, 紀平俊矢, 武田崇仁, 小林正起, 秋山亨, 河村貴宏, 原田尚之, 上野耕平, 藤岡洋
2. 発表標題 AlNに格子整合する六方晶Nb <sub>2</sub> N超伝導体のエピタキシャル成長
3. 学会等名 2022年第83回 応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 河村貴宏, 秋山亨
2. 発表標題 2軸歪みによる $\alpha$ -Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub> のバンドギャップ変化
3. 学会等名 2022年第83回 応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
2. 発表標題 Ga203の構造安定性に対する酸素空孔の影響に関する理論的検討
3. 学会等名 2022年第83回 応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
2. 発表標題 キンクおよびステップを含むAIN(0001)表面の構造安定性および吸着脱離の挙動に関する理論的検討
3. 学会等名 2023年第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 松田隼, 秋山亨, 畠山哲夫, 白石賢二, 中山隆史
2. 発表標題 4H-SiC/SiO <sub>2</sub> 界面におけるバンド配列の面方位依存性に関する理論検討
3. 学会等名 2023年第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 河村貴宏, 秋山亨
2. 発表標題 -Ga203/Al203超格子のバンド構造解析
3. 学会等名 2023年第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
2. 発表標題 キンクおよびステップを含むAIN(0001)表面の構造安定性に関する理論的検討
3. 学会等名 第51回結晶成長国内会議
4. 発表年 2022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
研究協力者	伊藤 智徳  (Ito Tomonori)  (80314136)	三重大学・大学院工学研究科・名誉教授    (14101)	

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		
ポーランド	UNIPRESS		