

シリコン中原子空孔の量子状態シミュレーション

著者	齋藤 峯雄
著者別表示	Saito Mineo
雑誌名	平成24(2012)年度 科学研究費補助金 新学術領域研究(研究領域提案型) 研究実績の概要
巻	2011-04-01 2013-03-31
ページ	3p.
発行年	2018-03-28
URL	http://doi.org/10.24517/00060112



[◀ Back to previous page](#)

シリコン中原子空孔の量子状態シミュレーション

Publicly

Project Area	Materials Design through Computics: Complex Correlation and Non-equilibrium Dynamics	All ▾
Project/Area Number	23104505	
Research Category	Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas (Research in a proposed research area)	
Allocation Type	Single-year Grants	
Review Section	Science and Engineering	
Research Institution	Kanazawa University	
Principal Investigator	斎藤 肇雄 金沢大学, 数物科学系, 教授 (60377398)	
Project Period (FY)	2011-04-01 – 2013-03-31	
Project Status	Completed (Fiscal Year 2012)	
Budget Amount *help	¥3,900,000 (Direct Cost: ¥3,000,000, Indirect Cost: ¥900,000) Fiscal Year 2012: ¥1,950,000 (Direct Cost: ¥1,500,000, Indirect Cost: ¥450,000) Fiscal Year 2011: ¥1,950,000 (Direct Cost: ¥1,500,000, Indirect Cost: ¥450,000)	
Keywords	シリコン / 原子空孔 / 第一原理計算 / 十原子空孔 / 超音波実験 / 密度汎関数法 / 計算科学	
Outline of Annual Research Achievements	本研究では、シリコン原子空孔に関する研究を行った。はじめに、原子空孔のモデル化において用いられるスーパーセル近似の妥当性を調べ、単原子空孔においては、十分に大きなスーパーセルを用いた計算でないと、定性的に誤った結果を与えることを示した。これは、原子空孔周辺の原子が原子空孔中心に向い緩和するため、原子空孔間の距離が短い小さいスーパーセル近似では、格子緩和の影響を十分に考慮できなくなるからである事がわかった。また、融点近傍における単原子空孔の濃度を正確に見積もるため、振動エントロピーの効果を検討した計算を行った。その結果、エントロピーの効果により、単原子空孔の濃度は4.6倍増加する事が分かった。これまでの研究から、極低温における超音波実験で観測されるソフト化を引き起こす欠陥の候補として、10原子空孔が最有力である事を明らかにした。最終年度においては、中性の電荷状態でソフト化の磁場依存性が小さい原因を研究した。その結果、10原子空孔では、4個のダングリングボンド間に反強磁性的相互作用が存在することが分かり、ソフト化で観測される特異な磁性構造を説明できる可能性を示した。最後に原子空孔を観測する有力な実験手法である、陽電子実験手法の解析のため、陽電子寿命を計算する手法を開発した。本研究では、とくにスピン分極した系の寿命を密度汎関数法に基づいて計算するコードを開発した。強磁性体に関する計算結果は、実験結果と矛盾しない事を示し、計算の信頼性を確立した。	
Research Progress Status	24年度が最終年度であるため、記入しない。	
Strategy for Future Research Activity	24年度が最終年度であるため、記入しない。	

Report (2 results)

2012 Annual Research Report

2011 Annual Research Report

Research Products (50 results)

	All	2013	2012	2011	Other
	All	Journal Article	Presentation	Remarks	
[Journal Article] Rashba Effect on the Structure of the Bi One-Bilayer Film: Fully Relativistic First-Principles Calculation					2013 ▾
[Journal Article] First-Principles Calculations of Hydrogen Monomers and Dimers Adsorbed in Graphene and Carbon Nanotubes					2013 ▾
[Journal Article] First-Principles Calculations of Adatom-Vacancy Pairs on the Graphene					2012 ▾
[Journal Article] Edge States of Bi Nanoribbons on Bi Substrates: First-Principles Density Functional Study					2012 ▾
[Journal Article] First-Principles Calculations of Hydrogen and Hydrogen-Vacancy Pairs in Graphene					2011 ▾
[Journal Article] First-Principles Calculation of the Interlayer Distance of the Two-Layer Graphene					2011 ▾
[Presentation] First-principles calculations of atomic hydrogen adsorption in carbon nanomaterials					2013 ▾

[Presentation] PbTiO ₃ 薄膜へのキャリアドープとRashba効果の第一原理計算	2013	▼
[Presentation] First-principles calculations of positron lifetimes for ferromagnetic materials	2013	▼
[Presentation] Bi多層膜におけるフェルミ面とスピン構造の第一原理計算：膜厚依存性	2013	▼
[Presentation] TiO ₂ 表面におけるPCBMの電子状態計算	2013	▼
[Presentation] シリセン不純物の第一原理計算	2013	▼
[Presentation] ペロフスカイト型磁性体/強誘電体界面の第一原理計算	2013	▼
[Presentation] 第一原理計算に基づいたCa ₃ CoMnO ₆ の電気磁気相図の理論	2012	▼
[Presentation] Lifetimes of spin-polarized positrons: First-principles study	2012	▼
[Presentation] 強誘電体におけるラッシュバ効果の第一原理計算	2012	▼
[Presentation] First-Principles Calculations of Hydrogen Adsorbed in Carbon Nano materials	2012	▼
[Presentation] 反転対称性の破れたBi多層薄膜の第一原理計算	2012	▼
[Presentation] Electronic Structures of Adatom-vacancy Pair Defects in Nano-carbon Materials	2012	▼
[Presentation] First-principles calculations of hydrogen impurities in nano-carbon materials	2012	▼
[Presentation] 多層グラフェン/Ni(111)のRashba効果と電気伝導の第一原理計算	2012	▼
[Presentation] 第一原理計算によるBi薄膜のRashba効果の解析	2012	▼
[Presentation] First-Principles Study of Rashba Effect in the Graphene on Ni(111)	2012	▼
[Presentation] First-principles calculation of magnetism in graphene nanoribbons	2011	▼
[Presentation] Rashba effect of Bi(001) film	2011	▼
[Presentation] Hydrogen impurities in graphenes and carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] Rashba effect of Bi(001) structure	2011	▼
[Presentation] Ca ₃ CoMnO ₆ における三角格子の交換相互作用と電気分極の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] グラフェン・ナノチューブ上の固有欠陥における第一原理計算	2011	▼
[Presentation] First-principles calculations of hydrogen dimers in graphene and carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-principles calculation of healing of adatom-vacancy pair on carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] Magnetism and Transport Property of Graphene on Substrates	2011	▼
[Presentation] Fully relativistic calculation of Bi(001) films without inversion symmetry	2011	▼
[Presentation] Spin-Polarized Electronic States and Rashba Effect in the Graphene on Ni(111)	2011	▼
[Presentation] Magnetism and Transport Property of Graphene on Substrates	2011	▼
[Presentation] Edge state of zigzag Bi Nanoribbon and Bi substrate	2011	▼
[Presentation] グラフェン・ナノチューブにおけるアダトム関連欠陥の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] First-principles study of healing of adatom-vacancy pair in carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-principles calculation of the interlayer distance of the two-layer graphene	2011	▼
[Presentation] シリコン中10原子空孔の特異な電子構造	2011	▼
[Presentation] Ca ₃ CoMnO ₆ の三角格子における磁気秩序と電気分極の第一原理計算	2011	▼

[Presentation] カーボンナノチューブの電気伝導の第一原理計算:水素不純物と磁性電極の影響	2011	▼
[Presentation] 磁性電極を用いたグラフェンにおける伝導特性の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] ナノカーボン材料のナノシミュレーション	2011	▼
[Presentation] First-Principles Calculations of Hydrogen Impurities in Graphenes and Carbon Nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-Principles Calculations of Defects in Graphenes and Carbon Nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-principles calculation of adatom-vacancy pair on carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-Principles Calculations of Di-Hydrogen on Graphene	2011	▼
[Presentation] カーボンナノチューブにおける電気伝導の第一原理計算:水素吸着の効果	2011	▼
[Remarks] 計算物性研究室		▼

URL:

Published: 2011-04-05 Modified: 2018-03-28