

# 東京大学情報基盤センター 利用成果報告書

提出日：平成 25 年 4 月 17 日

申込課題名	大規模計算による次世代デバイス材料開発		
企業名	株式会社富士通研究所		
フリガナ 代表者氏名		プロジェクトコード	
部署名		職名	
利用計算機 システム	FX10 スーパーコンピューターシステム		
申込ノード数	24 ノード	利用期間	平成 24 年 10 月 ~ 平成 25 年 3 月
成果公開 (※)	1. 即時公開                      ②. 公開延期 (成果公開予定：平成 27 年 3 月)		

※ 本報告書の内容は原則公開され、センター広報・Web ページに公開されます。ただし、利用者の申出により最大で2年間公開を延期することができます

- 本報告書は、利用期間終了後 1 ヶ月以内に東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チームまでご提出ください。
- 本様式の変更はできません。

受付日	平成 25 年 4 月 19 日	受付印	
-----	------------------	-----	--

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。



## 1. 利用の概略

### 1) 利用目的・内容

【大規模電子伝導計算】数千原子からなる現実のデバイス構造に近い構造モデルの電子伝導特性を第一原理計算により予測する。【高速スクリーニング】1000 程度の同種の計算を自動かつ効率的に、また有機的に制御するしくみを開発し、材料開発に適用する。

### 2) 利用意義（産業利用の観点から）

次世代デバイスが直面するナノスケールの世界では、局所構造や界面が全体に大きく影響するため、経験的パラメータが不要な第一原理計算を用いて、大きな領域を丸ごとかつ高速に計算することが重要である。また、希少金属・環境問題などから材料選択はこれまで以上に困難になっている。元素種などを変えて大量の同種の計算を効率よく実施する大規模並列計算の高速スクリーニングへの適用の期待が高まっている。

### 3) スーパーコンピューターを利用する必要性

第一原理伝導計算には膨大な計算量を必要とするため、高並列計算を利用しプログラムのチューニングや改良を進めることで計算速度を向上し、1000 原子の計算規模を数千原子まで拡大することが必要である。高速スクリーニングでは、それぞれの計算は独立であり通信を必要としないため、大量の独立な計算を自動かつ効率的に有機的に制御するしくみを開発していくことで、大きな並列効率が期待される。

## 2. 成果の概要

### 1) 本利用で得られた成果（成果が得られなかった場合はその理由）

#### 【大規模電子状態・電気伝導計算】

現実のデバイス構造に近い絶縁膜を含む 3000 原子規模の第一原理電子伝導計算用の構造モデル（図 1）を構築した。そのために第一原理  $O(N)$  電子状態計算プログラムを整備し、3000 原子丸ごとの構造安定化計算を行った。今後は、電子伝導計算を実施する。

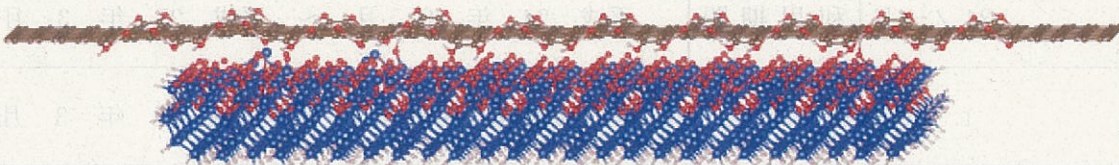


図 1：エッジがヒドロキシル基終端されたアームチェア型グラフェンナノリボンが酸化シリコン絶縁膜上に吸着した構造モデル。全 3120 原子。灰色、赤色、青色、白色球はそれぞれ炭素、酸素、シリコン、水素原子を表す。

#### 【高速スクリーニング】

内製のマルチジョブシステムを実装、FX10 向けに改良することで、システムの動作を確認した。また、1000 ケースまでのマルチジョブについてテスト実証を行い、パラメータを自動的に変えた 1000 ケースのジョブの自動投入、自動終了までを確認した。これを利用して、グラフェン上へのリチウム吸着の実証計算を実施した。今後は、さらにジョブのモニタリングや可視化また統計処理により、個々の計算をより有機的にまた効率的に制御するしくみを検討し、電池電極等の材料開発研究を実施する。

### 2) 社会・経済への波及効果の見通し

グラフェンデバイスなどの新規低消費電力デバイスや低環境負荷材料の開発推進による低環境負荷社会への貢献、また、シミュレーションによる実験の代替えによる研究開発の加速およびコスト・環境負荷低減、さらには、産業界におけるシミュレーションおよび大規模並列計算利用の有用性を実証することによる、コンピュータビジネスの牽引効果を期待する。

### 3) その他の成果