

東京大学情報基盤センター

利用成果報告書

提出日：平成 28 年 4 月 26 日

申込課題名	高精度特性予測による新規デバイス材料開発				
企 業 名	株式会社富士通研究所				
フリガナ 代表者氏名		印	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	48 ノード	利用期間	平成 27 年 4 月	～	平成 28 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 30 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 年 月 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

将来の産業界における材料・デバイス開発の現場での活用を目指し、大規模計算を必要とする電子(スピン)伝導特性、バンドギャップ、光学特性など、実験と比較可能な材料特性の高精度な定量的予測や材料の成長メカニズム解明を行う技術を開発し、新規デバイス材料開発への適用事例を創出する。

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、局所的な材料、形状、界面が全体の特性に非常に大きく影響するため、経験的なパラメータを必要としない第一原理計算を用いて、大きな領域全体を高速に計算することが重要である。さらに、産業分野におけるデバイス開発では、実験と比較可能な材料特性の高精度な定量的予測も重要である。

3) スーパーコンピューターを利用する必要性

異種物質との界面を含んだ現実に近い構造モデルの特性予測を第一原理計算で行うには、膨大な計算量を必要とする。我々は最大 1000 ノード程度の計算機資源を利用した 3,000 原子規模のナノデバイス構造の高精度電気特性予測の実証計算を目指しており、このためには超並列環境下で動作する高精度バンドギャップ予測機能の開発を FX スパコン上で進めることも必要である。

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)

※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

① 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他)

【高精度電気特性予測の新規 2 次元薄膜材料への拡張】

社内実験グループとタイアップしたガスセンサー開発を推進するため、これまでの炭素材料から新規 2 次元薄膜材料へ高精度電気特性予測の適用範囲を拡張した。特に電気特性予測で重要であるチャネル材料と基板界面の構造において、実験結果を説明するための知見が得られた。サファイア C 面基板上の二硫化モリブデン (MoS_2) 薄膜について、第一原理計算によるモルフォロジー予測を行い、配向が 60 度異なる 2 つの構造 A, B の全エネルギー差は非常に小さく、その値から見積もられる 2 つの三角形島の存在確率比はほぼ 1 であることが分かった。これは、CVD 実験で観測される反対向きの島成長が本質的なものであることを示している。このことから、デバイス特性を向上するためには、サファイア基板であっても異なる表面または他の基板材料を探る必要が有るといふ指針を示した。

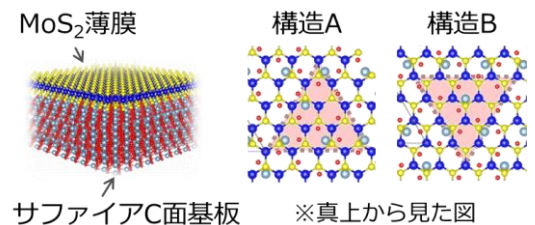


図1: 計算に用いた構造モデル

【高精度バンドギャップ予測手法の導入】

ナノデバイスの電気特性予測において、電気特性予測計算に対応した実験と直接比較可能なバンドギャップを高精度に計算する手法の導入が重要である。今回、そのような方法として modified Becke-Johnson 法を検討し、第一原理計算プログラム OpenMX への実装を進め、動作を確認した。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

- ・ 2 次元薄膜材料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
- ・ シミュレーションによるデバイス研究開発の加速、および試作回数削減によるコスト・環境負荷低減
- ・ 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、スパコン利用の促進

3) その他の成果