

# 東京大学情報基盤センター

## 利用成果報告書

提出日：平成 26 年 6 月 20 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		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	24 ノード	利用期間	平成 25 年 4 月 ～ 平成 26 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 28 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

【大規模電子伝導・電子状態計算】界面構造を含んで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し、データベースとの連携などをも含むしくみを開発し、材料開発・探索に適用する。

### 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）

#### 【大規模電子伝導・電子状態計算】

##### （ 1. 計算科学）

シリコン LSI はその微細化による性能向上が限界に近付きつつあり、高移動度が期待されるグラフェンをはじめとするナノカーボン材料などをトランジスタのチャンネルに利用する研究が進められている。将来のナノデバイス開発を支援するため、グラフェンをチャンネルとするデバイス構造の電気特性を第一原理計算により予測するシミュレーションを実施した。今年度は第一原理計算による電気特性予測計算の規模を 1,000 原子から 3,000 原子に規模を拡張することで構造モデルに絶縁膜および基板を含める計算を可能にし、その影響を明らかにした。

#### 【高速スクリーニング】

##### （ 2. コンピュータ・サイエンス）

同種の計算を自動的に実行するマルチジョブ手法は、産業応用に適した大規模計算機のもうひとつの効率的利用法であると考えている。これまでに、大量の独立な計算を自動的に実施するプログラムを実装し、今年度にはデータベースとの連携や計算結果の評価・判断・ジョブの再投入などを含むモニタリングの機能を追加することで、各元素の結合エネルギーを一回の投入作業で自動的に取得するしくみを構築することに成功した。

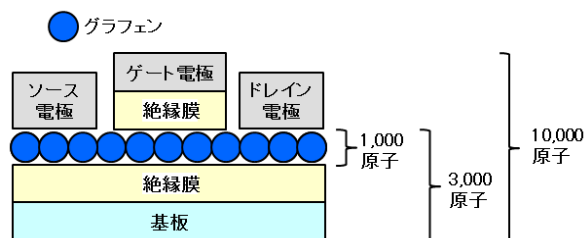


図 1: グラフェントランジスタの模式図

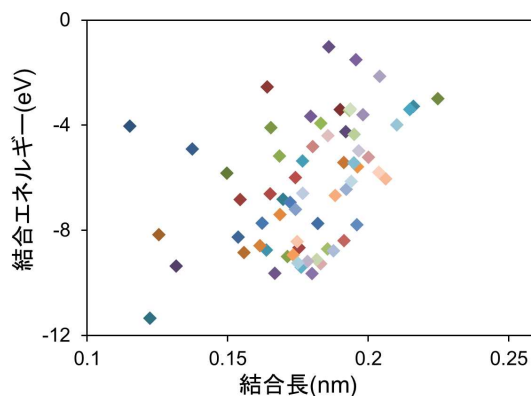


図 2: 自動的に所得された各元素間の結合長に対する結合エネルギーの例。

### 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