

東京大学情報基盤センター 利用成果報告書

提出日：平成 27 年 4 月 22 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 26 年 4 月 ~ 平成 27 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 29 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		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】界面を含むナノデバイス構造モデルの電気特性を第一原理計算により高精度に予測することで、将来のナノデバイス開発を支援する。【高速スクリーニング】1,000-10,000 程度の同種の計算を材料データベースと連携して自動的に実行するマルチジョブ手法を利用し、材料探索を加速する。

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。また、希少金属の不足、環境問題などから材料選択の困難さはこれまで以上に増しており、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ことで材料探索を加速する、高速スクリーニングへの期待も高まっている。

3) スーパーコンピューターを利用する必要性

第一原理計算は膨大な計算量を必要とする。3,000 原子規模のナノデバイス構造の電気特性予測の実証計算を継続するとともに、ナノデバイス全体(約 10,000 原子)に計算規模拡張を目指す。このためには、最大 1000 ノード程度の計算機資源を利用することにより、並列化技術の開発やプログラムのチューニングを進めることが必要である。高速スクリーニングにおいて、1000 ケース程度のジョブを実行するためにも、最大 1,000 ノード程度の計算機資源が必要である。

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)

【大規模電子伝導計算】

金属電極間にグラフェンが架橋された現実のデバイスに近い大規模構造モデル(図1)について、第一原理計算による高精度な電気特性予測を行った。その結果、電極金属がチタンの場合、金の場合と比較して約10倍電流がよく流れることがわかった(図2)。詳しい解析により、グラフェンと金属電極間の軌道混成の強さが金属の種類によって異なるために、電流値が金属の種類に依存するという、デバイス開発の指針となる知見を得ることが出来た。e-J. Surf. Sci. Nanotech.にて査読論文1件受理(2015.02.03)。

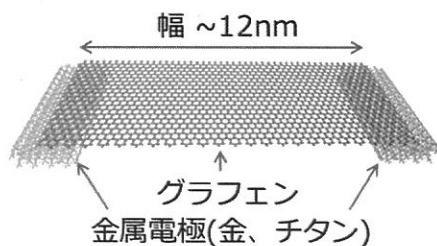


図1: 計算に用いた構造モデル

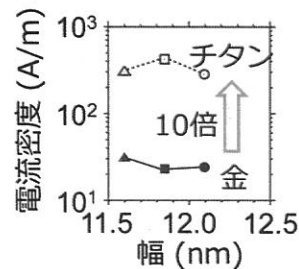


図2: 電気特性予測計算の結果

【高速スクリーニング】

元素・構造データベースの導入、ジョブ制御システムの整備を実施した。

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
- ・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