

スパコンによる大規模な 電気特性シミュレーションに成功

新しいナノデバイス開発が大きく前進

①ナノ

10億分の1を表す単位。ナノメートル (nm) は1メートルの10億分の1。DNA分子の直径は2ナノメートル程度。

半導体デバイスの性能を高める微細化が限界に近づきつつあるなか、ナノ^①メートル規模の新しい材料の利用が盛んに研究されています。富士通研究所は、スパコン (スーパーコンピュータ) の効率的利用により、新しいナノデバイス設計に必要となる原子1,000個レベルの電気特性シミュレーションに成功しました。

半導体デバイスのサイズは 「ナノメートル」規模へ

半導体デバイスの高速化や低消費電力化は、デバイスのサイズを微細化することで実現されてきました。しかしそのサイズはナノメートル規模に到達しており、シリコンや銅といった従来材料のままではさらなる微細化は難しいと考えられています。そこで、ナノテクノロジー^②を用い、DNAやたんぱく質と同等サイズのナノ材料を使ってデバイスの性能向上を図ろうとする研究が盛んに行われています。

代表的なナノ材料に、鉛筆の芯 (黒鉛) やダイヤモンドと同じ炭素原子で構成されているナノカーボン^③があります。ナノメートル規模の構造を持つことで、例えば、半導体デバイスのチャンネル (電流の通り道) に使用されるシリコンの200倍以上の電子移動度^④、配線に使用される銅の1,000倍の電流密度耐性^⑤等、従来材料にはない優れた性質を備えます。

ナノデバイス設計に不可欠な 大規模シミュレーション

ナノ材料を使用して全く新しいナノデバイスを開発する際、計算機上のシミュレーションによって電気特性を予測することができ

れば、実際に実験を行うよりも開発期間とコストを削減できます。しかしナノメートル規模では、原子本来の特性に加え、原子配置のわずかな違いによっても電気特性が大きく変わるため、他の実験データや経験的パラメータ^⑥を基に計算する経験的手法のシミュレーションを適用できません。

そのため、量子力学の基本法則から物質の性質を計算する「第一原理計算」により、原子の種類と配置だけを用いるシミュレーションが不可欠となりますが、計算量が膨大です。これまで第一原理計算による電気特性シミュレーションで可能な原子構造は数百個レベルにとどまり、ナノデバイス設計に必要な1,000個レベルを実現できていませんでした。

原子1,000個レベルの電気特性 シミュレーションに成功

かねてナノデバイス設計に取り組んでいた富士通研究所は、北陸先端科学技術大学院大学との共同研究により、新しいナノデバイス設計を可能にする大規模計算に成功しました。

(1) ハイブリッド並列処理を採用した スパコンによる超高速計算

計算機には、名古屋大学情報基盤センター

②ナノテクノロジー

原子や分子の配列をナノ規模で自在に制御してデバイスに使用し、産業に活用する技術。

③ナノカーボン

ナノカーボンには、炭素原子が六角形の網の目状に並んだシート状のグラフェン (厚さ1ナノメートル)、グラフェンを円筒形にしたカーボンナノチューブ (直径は1-10ナノメートル) 等がある。

④電子移動度

電界をかけたときの電子の移動のしやすさ。

⑤電流密度耐性

高密度の電流を流しても、その物質が構造的に安定でいられること。

⑥パラメータ

ソフトウェアやプログラムの実行時に外部から与える情報。

のスーパーコンピュータ「FX1^⑦」を使用。「京（けい）^⑧」のコンセプトを取り入れた「FX1」上で、ハイブリッド並列処理^⑨に最適化された第一原理計算プログラム^⑩を実行し、膨大な計算量と計算メモリを必要とする原子 1,000 個レベルの電気特性シミュレーションを実現しました。

(2) シミュレーション手順の最適化による 繰り返し回数的大幅軽減

今回初めて原子 1,000 個レベルの計算が可能になったことで、これまで生じなかった様々な問題が発生しました。

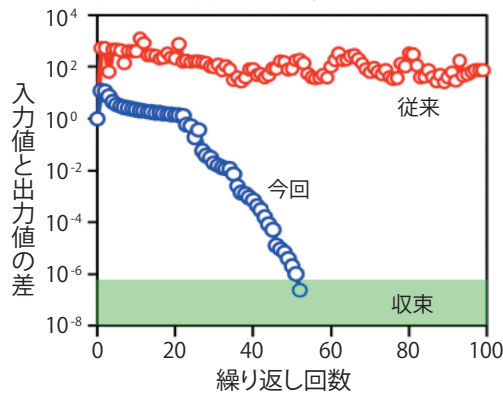
電気特性シミュレーションでは、原子の種類と構造を入力値として電気特性を調べ、得られた出力値をもとに次の入力値を更新する、という手順を繰り返すことで、答えを導き出します。この時、小規模な計算の場合はプログラムを繰り返し実行していけばほどなく計算は収束していきませんが、大規模な計算の場合はわずかな入力値の違いで計算結果が大きく変わり、なかなか答えに到達しません。そこで、プログラムに与える入力値や更新法を適切に調整するための工夫が必要になります。

これらを改良した結果、原子 1,000 個レベルの計算を確実に短時間で完了させることに成功し（図 1）、電気特性を約 3 日間で得ることができるようになりました。

仮想ものづくりへの貢献に向けて

ナノカーボンに限らず、シリコンや有機

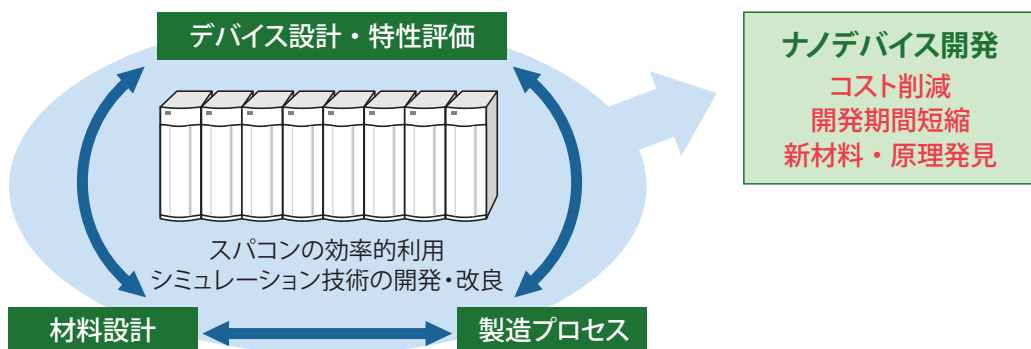
■ 図1 電気特性シミュレーションのプログラム及び運用法の改良による効果



物、あるいは化合物等、新しいナノデバイスの設計に本技術を適用することにより、例えばチャンネル材料や形を変えたり、接合方法を変えたりといったことが、計算機上で可能になり、ナノデバイス設計の早期実現が期待できます。

スーパーコンピュータはいまや、宇宙、環境、生命科学といった基礎研究の分野に限らず、医療、防災、金融工学、ものづくりに至るあらゆる研究開発において不可欠となってきました。富士通研究所では、今回ご紹介したナノデバイスの他にも、電池素材をはじめとするエネルギー関連素材の研究に本技術を適用しています。また今後は、存在していない材料を仮想的に開発し、その製造プロセスをもコンピュータシミュレーションによって得られるような技術の研究開発に取り組み、「ものを作らないものづくり（仮想ものづくり）」の実現を目指していきます（図2）。

■ 図2 大規模シミュレーションで広がる「仮想ものづくり」



⑦ FX1

富士通製クアッドコア CPU SPARC64™VIIプロセッサを採用した高性能テクニカルコンピューティングサーバ。本技術の電気特性シミュレーションには、名古屋大学に導入のシステムの1/3（4コア×256ノード=1024コア）を利用。

⑧ 京（けい）

独立行政法人理化学研究所が2010年7月から利用している「次世代スーパーコンピュータ」の愛称。「京」は、10ペタ（10の16乗）を表す万進法の単位。

⑨ ハイブリッド並列処理

プロセス並列とプロセス内の共有メモリ（マルチスレッド）並列を併用する並列処理方法。高速計算処理に加え、データ通信量及びメモリを大幅に削減できる。

⑩ 第一原理計算プログラム

本技術の第一原理計算プログラムは北陸先端科学技術大学院大学が開発した「OpenMX（Open source package for Material eXplorer）」。GNUライセンスに基づいて公開中。