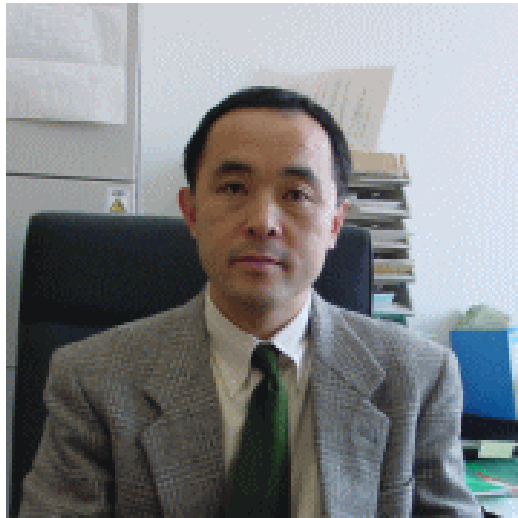


プロフィール

押山 淳(おしやま あつし)



【現職】

東京大学工学系研究科物理工学専攻 教授

【略歴】

1981年: 東京大学理学系物理学専攻博士課程修了

1981年～1983年: 東大理学部物理助手

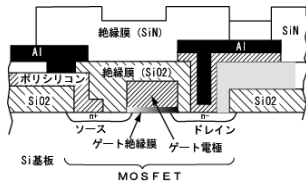
1983年～1985年: IBM Watson Res Center 研究員

1985年～1995年: NEC Res Lab 研究員

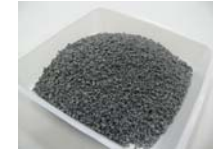
1995年～2007年: 筑波大学教授(物理学系)

2007年～現在: 東京大学教授

研究分野は、計算物質科学、物性物理理論。量子論に基づいた計算手法により、実際の物質での現象の解明と予測を狙っている。



計算物性科学と半導体工学



産学独連携の成功事例: (株)半導体先端テクノロジーズ (Selete)におけるHigh-k Net
 計算科学と実験科学の成功事例

➤ ゲート絶縁膜はSiO₂からHigh-k 物質へ: 有力候補はHfO₂
 しかし、Siテクノロジーにとっての未経験物質 ⇒ 非経験的計算の果たす役割大

梅澤、白石他: Appl. Phys. Lett. 2005, 2007

密度汎関数理論による第一原理計算

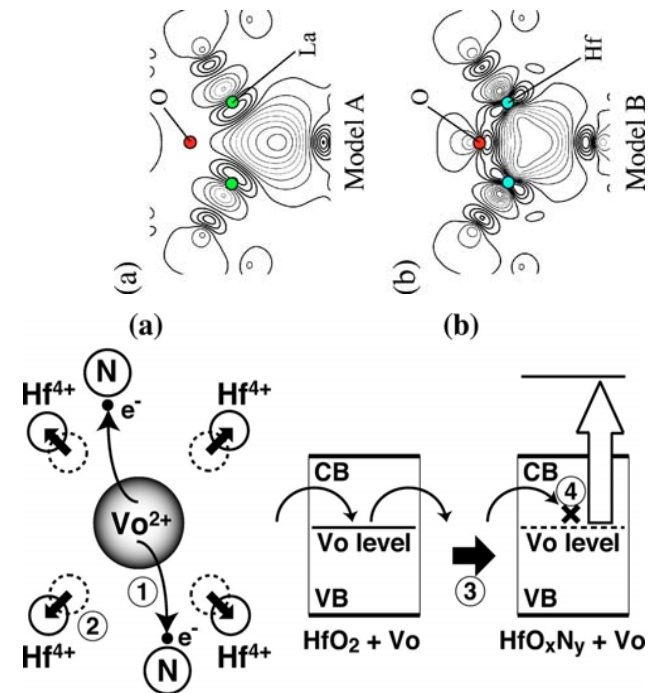
- ✓ 酸素原子空孔の原子構造と電子状態解明
- ✓ 欠陥準位がリーク電流
- ✓ 窒素で癒される
- ✓ ポリシリコン電極は駄目 ⇒ 金属電極
- ✓ ...

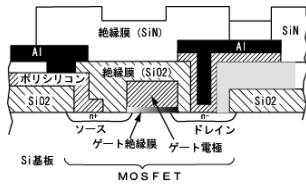
実験科学による実証

- ✓ XPS、CV、...

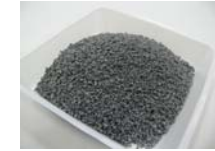
テクノロジーへの貢献

- ✓ 技術動向の先導役





計算物性科学と半導体工学



産学独連携の成功事例：(株)半導体先端テクノロジーズ(Selete)におけるHigh-k Net

計算科学と実験科学の成功事例

➤ ゲート絶縁膜はSiO₂からHigh-k 物質へ： 有力候補
しかし、Si テクノロジーにとっての未経験物質 =

密度汎関数理論による第一原理計算

- ✓ 酸素原子空孔の原子構造と電子状態解
- ✓ 欠陥準位がリーク電流
- ✓ 窒素で癒される
- ✓ ポリシリコン電極は駄目⇒金属電極
- ✓ ...

実験科学による実証

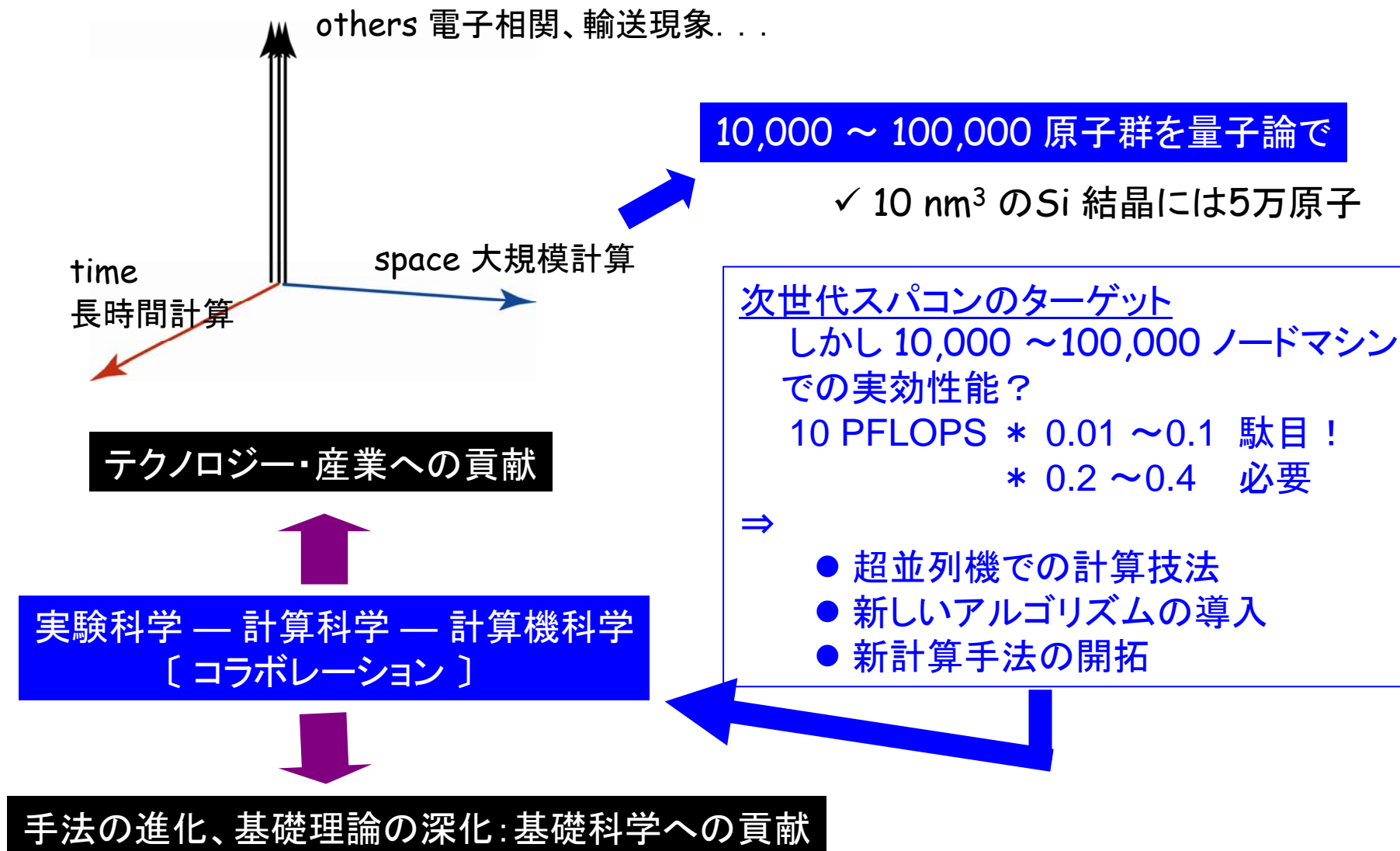
- ✓ XPS、CV、...

テクノロジーへの貢献

- ✓ 技術動向の先導役



計算科学をさらに推進：守備範囲の拡大



計算科学と計算機科学：事例

RSDFT (Real Space Density Functional Theory) on PACS-CS at Tsukuba Univ

comas-dft collaboration: 岩田潤一、高橋大介、朴泰祐、宇川彰、佐藤三久、...

Level 3 -BLASの活用による $O(N^3)$ 演算の高速化

* Gram-Schmidt 規格直交化

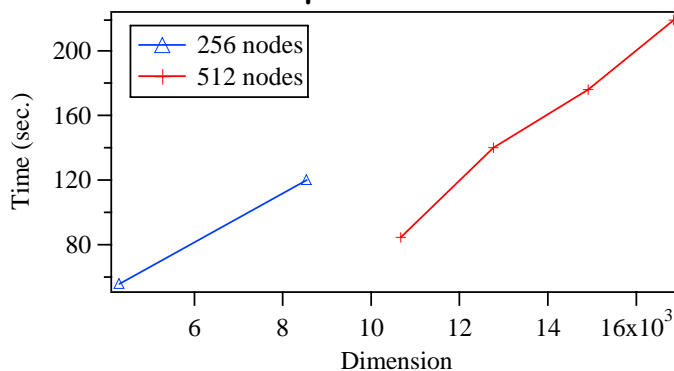
$$\begin{aligned} \psi'_1 &= \psi_1 \\ \psi'_2 &= \psi_2 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_2 \rangle \\ \psi'_3 &= \psi_3 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_3 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_3 \rangle \\ \psi'_4 &= \psi_4 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_4 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_4 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_4 \rangle \\ \psi'_5 &= \psi_5 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_5 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_5 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_5 \rangle - \psi'_4 \langle \psi'_4 | \psi_5 \rangle \\ \psi'_6 &= \psi_6 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_6 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_6 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_6 \rangle - \psi'_4 \langle \psi'_4 | \psi_6 \rangle - \psi'_5 \langle \psi'_5 | \psi_6 \rangle \end{aligned}$$

行列一行列演算に！

512 node での実効性能は
理論ピーク性能の60-80 %

新しいアルゴリズムにより $O(N^3)$ を $O(N)$ に

* Divide and Conquer による行列対角化

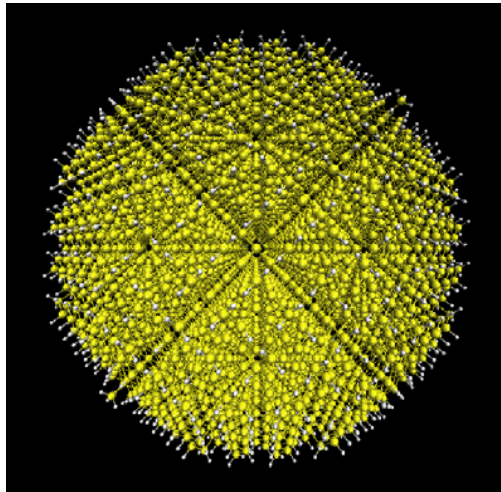


全体でも、実効性能は
理論ピーク性能の
20-30 %



PACS-CS at Tsukuba:
Xeon 5.6 GFLOPS x 2560 nodes
through 3D hyper-network
Peak performance 14.3 TFLOPS

いまや、Si 一万原子電子状態計算が可能

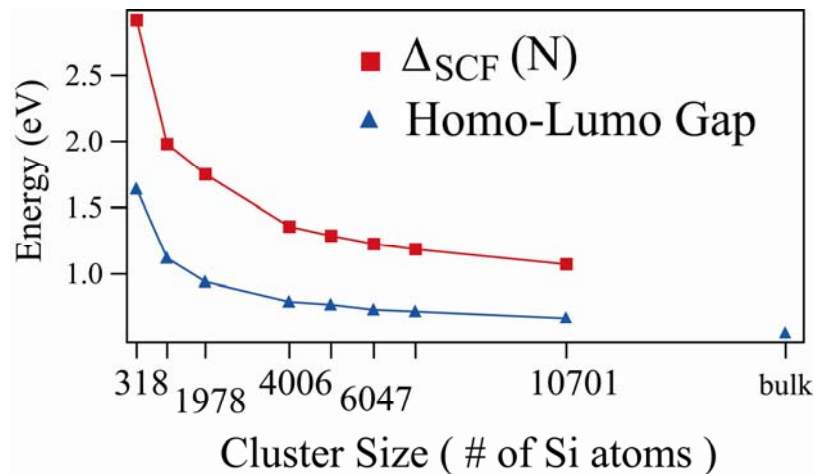


Si ナノドットの電子状態計算

[PACS-CS < 1024 ノード]

ドット直径: 5.6 nm (4006 Si atoms),
5.9 nm (5011 Si atoms),
6.3 nm (6047 Si atoms),
6.7 nm (7055 Si atoms),
7.6 nm (10701 Si atoms).

(実験で作成可能、結果の直接比較可能)



Homo-Lumo Gap

$$\varepsilon_{N+1}(N) - \varepsilon_N(N)$$

is different from

$$\Delta_{\text{SCF}}(N) = E_{\text{ion}} - E_{\text{affinity}}$$

ドットへの電荷のチャージング
エネルギーの直接アセスメント
になっている

計算機を用いた統合科学を支える人材

➤ 大学院レベル

- ✓ 計算物理学、計算化学、計算生物学 + 計算機科学、半導体工学
〔主専攻、副専攻、... Dual degree〕

➤ 若手研究者レベル

- ✓ 1研究室ではなく、大型統合プロジェクトへ参画し、複数分野へのコミット

次世代スパコンプロジェクトを契機として／その中で、

➤ 統合計算科学研究開発機構

cf. 超LSI技術研究組合(76-80)

〔国の研究機構を核とし、産学独からの出向による研究開発組合〕

- ✓ 次世代スパコンでは異分野間コラボによる新しいフェーズの計算科学が必須
- ✓ 現象予測可能な計算手法の開発により、ビジネスチャンスの創出、博士研究員のキャリアパスの創出
実験するより計算: *v-SIMS*、*v-epigrowth*、*v-lithography*、ヴァーチャル・ラボが新計算技法開発とペタコン、エクサコンで可能に！
- ✓ 統合計算科学という新しい分野を若者に対して魅力ある分野に