

ナノデバイス開発におけるナノシミュレーションの必要性

・微細化

異種材料が近接

→ 界面領域増大、

各種相互作用増大

数個の欠陥が信頼性に影響

量子効果の顕在化

ダイレクトトンネリング

電子の波動性

局所化

不純物ゆらぎ

→ 連続性（従来モデル）の破綻

“濃度” という概念はもはや使えない

・新規材料導入

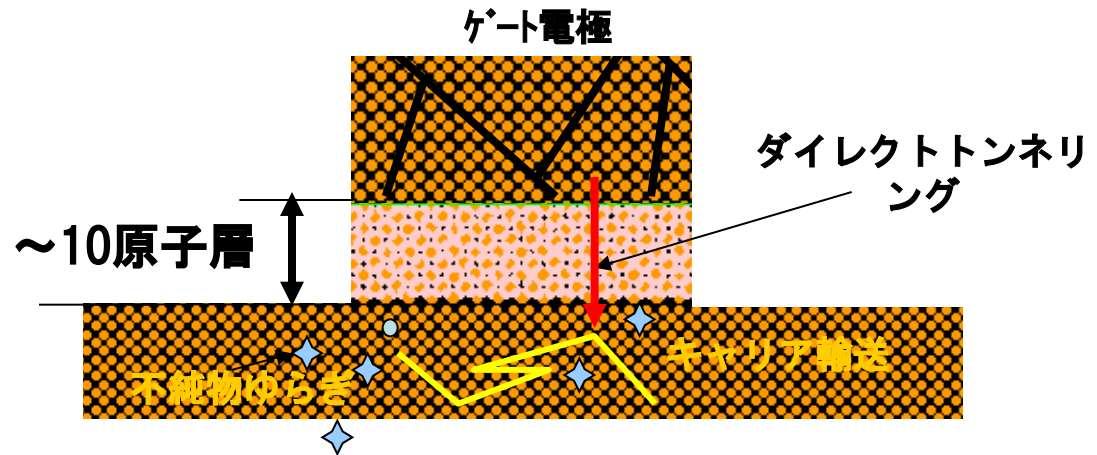
ゲート電極：Poly-Si → 金属

ゲート絶縁膜：SiO₂系 → high-k材料

配線：Cu → カーボンナノチューブ？

チャネル：Si → Ge, GaAs...？？

MOS (Metal-Oxide-Semiconductor)構造



シミュレーションによる
理解、モデル化

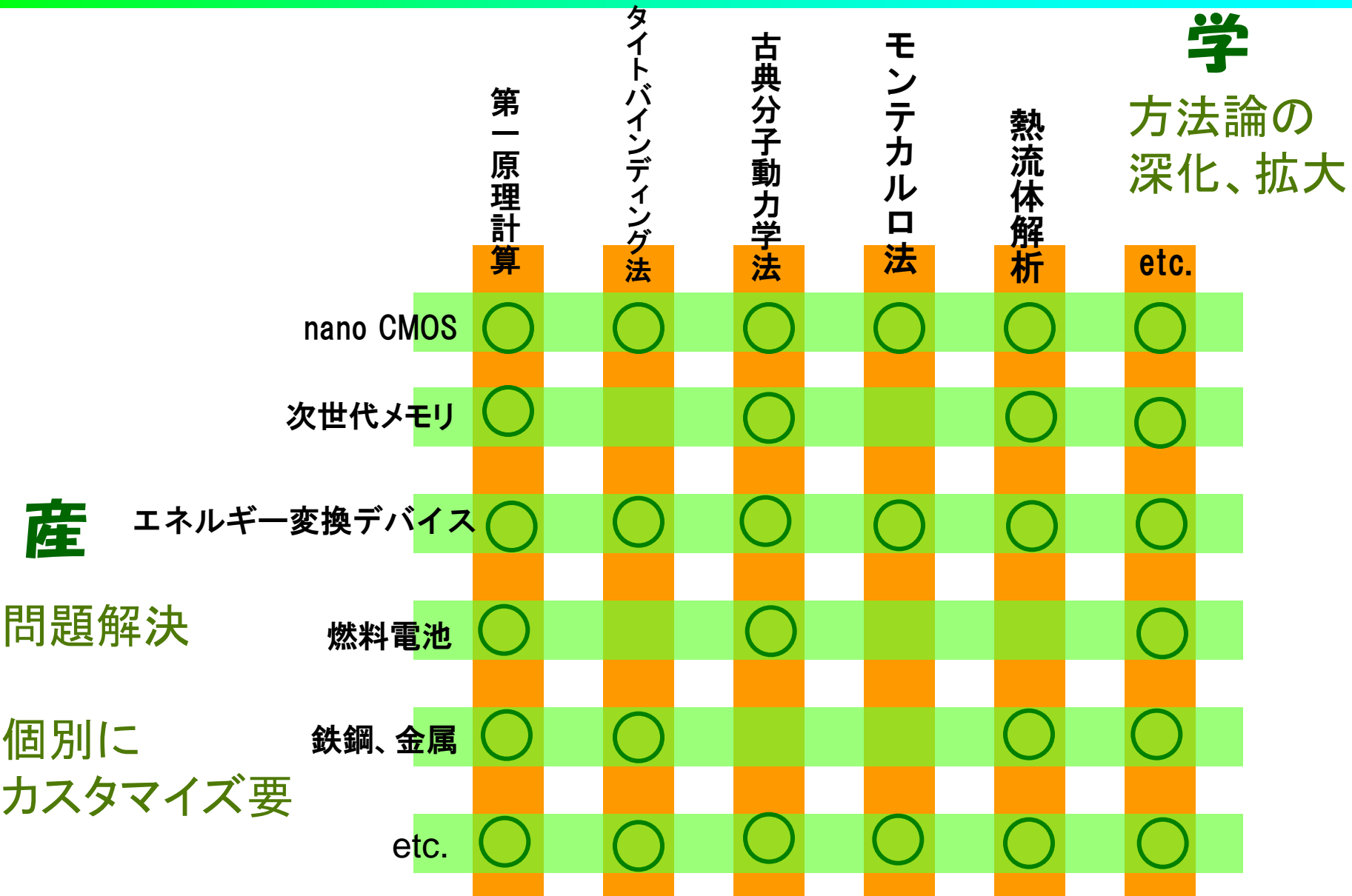
特性・限界予測、制御法探索

“ものづくり” 応用で考慮すべき点(ナノ分野)

“ものづくり”（産業応用）では、

- “時間”が重要.
- シミュレーションは問題解決手段の一つ.
時間、予算、人員、設備などの制約の中で、
最適な手段（実験・シミュレーション）を選択.
- 一般に階層の異なる複数のシミュレーション手法が必要.
分野ごとのカスタマイズも必要.
例）ナノデバイス開発：
第一原理計算、古典分子動力学、
モンテカルロ法、熱・電磁解析...
- 開発技術者へのシミュレーション利用技術の浸透が更に必要.

産業利用のイメージ ~手法の縦糸、応用分野の横糸~



次世代スーパーコンピュータへの期待

① 大規模/高精度シミュレーション主体の先導的研究

何年か後には、次世代スパコンクラスコンピュータを
一般研究者・技術者が日常的に利用する時代が
→ 産業利用への準備が必要

並列化、結果解析、可視化など関連技術の課題抽出と解決

② モデル化、簡略化のための大規模/高精度シミュレーション

産業利用へ向けた下方展開（高速化）

例）大規模な第一原理計算に裏打ちされたモデリング

③ ものづくりの基盤部分へのインパクト

長期的課題の解決、標準化

例）バンドギャップ、バンドオフセットなどの高精度予測
のための標準手法の確立

④ 拠点における人材育成

複数のシミュレーション手法の使いこなし

シミュレーションの素養をもった研究・技術者

新規シミュレーション分野の開拓

“次世代ものづくり”での産学連携、それぞれの役割

