
次世代ものづくりへの挑戦 ナノデバイス分野

大野 隆央
物質・材料研究機構 計算科学センター

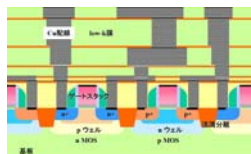
次世代ものづくりへの挑戦： ナノデバイス分野

革新的機能ナノデバイス創成のためのシミュレーション

●次世代半導体ナノデバイス

ロジック、メモリなど

CMOS, 分子エレクトロニクス, スピントロニクス,



情報通信機器



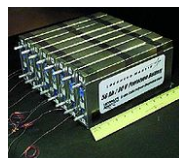
ナノCMOS, CNT配線, 誘電体設計, 有機EL, MRAM, ,

●環境・エネルギー関連デバイス (環境調和型)

エネルギー変換・貯蔵, 環境浄化など

太陽光発電, 光触媒, 人工光合成, 燃料電池, 二次電池, ,

Li二次電池



電気自動車

持続的な発展可能な社会！

ナノ物質の物性・機能の解明 → 新概念の創成 → ナノデバイスのイノベーション実現

新材料要素の探索・デバイス構造の設計

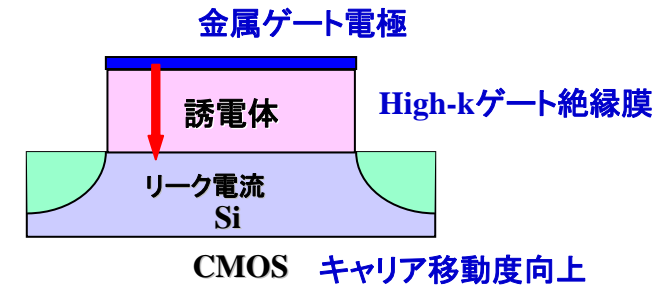
量子シミュレーション(第一原理計算)が必要

(イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発PJ等で開発)

次世代半導体ナノデバイスの課題

More Moore: 極微細化

YEAR OF PRODUCTION	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015
DRAM stagger-contacted Metal 1 (M1) 1/2 Pitch (nm)	65	57	50	45	40	36	32	28	25
MPU/ASIC stagger-contacted Metal 1 (M1) 1/2 Pitch (nm)	68	59	52	45	40	36	32	28	25
Flash Uncontacted Poly Si 1/2 Pitch (nm)	54	45	40	36	32	28	25	23	20
MPU Printed Gate Length (nm)	42	38	34	30	27	24	21	19	17
MPU Physical Gate Length (nm)	25	23	20	18	16	14	13	11	10



More than Moore: 多機能化

Beyond CMOS: 新原理導入 **新機能・新原理探索**
量子伝導、スピン制御など

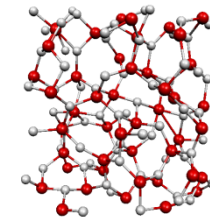
ITRSロードマップ

新探求デバイス: 2005年度版から単独の章として独立

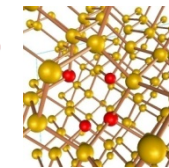
新ロジック: CNT-FET, 分子トランジスタ, スピントランジスタ, など
新メモリ: 強誘電体FETメモリ, 分子メモリ, など

材料探索

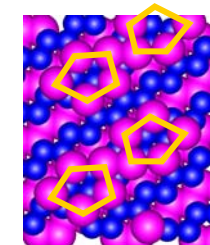
非Si系, 酸化物, 誘電体, 磁性体,
発光材料, 圧電材料, 熱電材料など



非晶質誘電体



欠陥



Si(110)表面構造

界面制御

界面構造、安定性、バンド整列など

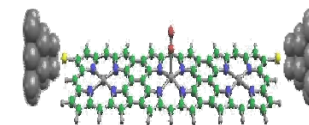
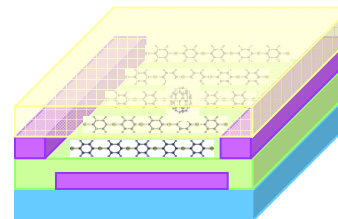
半導体ナノデバイス関連のシミュレーション課題

- ・材料物性の高精度解析: 強相関係、酸化物など
- ・表面・界面特性の解析: 構造安定性、バンド整列など
- ・ナノ物質機能の量子論的解析: 電子・スピン伝導など

次世代ナノデバイス

(有機分子, C₆₀, CNT等も利用)

ナノCMOS, 誘電体設計, CNT配線
有機EL, 分子デバイス, MRAM, ,



環境・エネルギー関連デバイスの課題

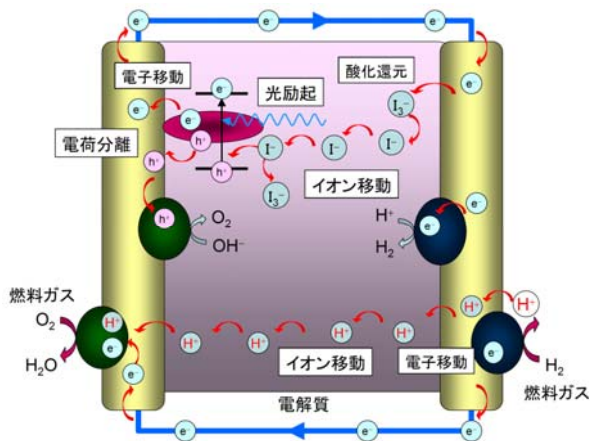
- ・エネルギー変換における全ての要素反応過程はナノスケールで発現
- ・変換システム中のナノ界面で起こる電子・原子の量子的プロセスの理解が不可欠

環境・エネルギー関連のシミュレーション課題

ナノ界面における構造：ヘテロ界面構造、安定性、電子状態
ナノ界面での**電子ダイナミクス**：電子移動、電荷分離、酸化還元
ナノ界面での**原子ダイナミクス**：イオン拡散、触媒反応

燃料電池

- ・電極触媒・水溶液界面での電極反応
- ・固溶界面での電子移動、酸化還元、
- ・電解質界面でのイオン移動



色素増感太陽電池

- ・色素分子の光励起、電荷分離
- ・TiO₂表面・色素分子・電解質界面での電子移動、酸化還元、イオン移動

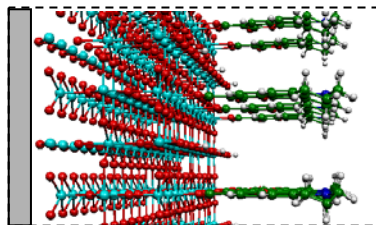
材料探索

色素分子材料, 白金代替触媒,,

界面制御

新機能・新原理探索

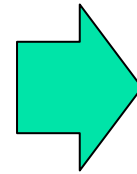
光触媒水分解, 人工光合成,,



ナノデバイス開発：量子シミュレーション

第一原理計算

- ・高精度解析：電子状態、構造
- ・機能解析：物性、応答、反応



ものづくり現場でのニーズ

材料探索

界面制御

新機能・新原理探索

大規模化

次世代スパコン活用

大規模解析

- ・空間：ナノ構造、界面構造（数百原子→数万原子）
- ・組成：物性の最適化（材料設計、多くの自由度）
- ・時間(位相空間)：反応、触媒、自由エネルギー（psec→nsec）

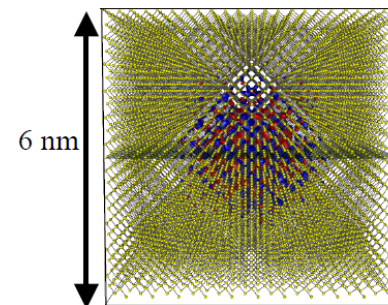
大規模解析： 第一原理計算ソフトの性能

第一原理電子状態解析ソフトPHASEの性能

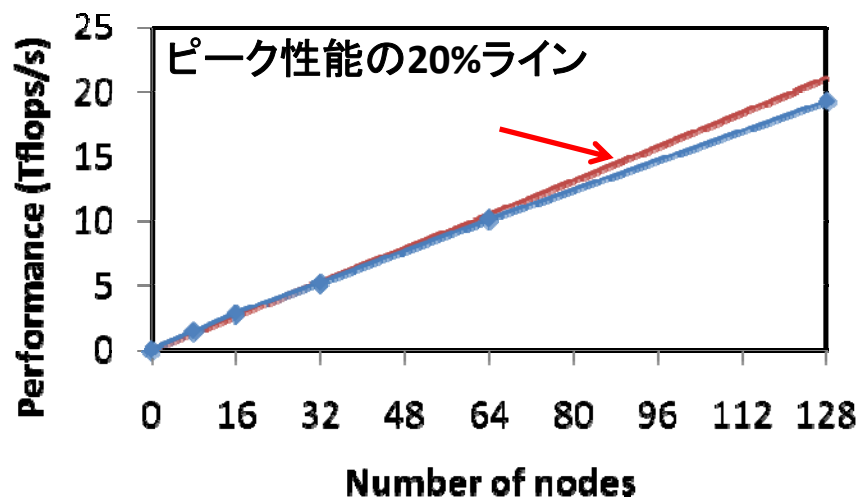
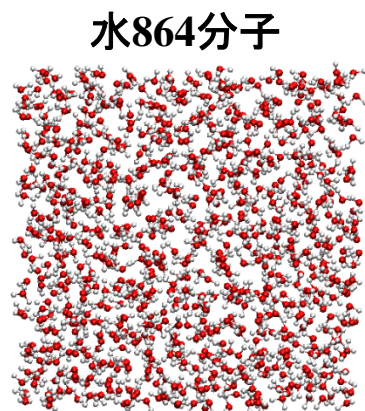
ES利用: Si中の不純物 (**10,648原子**) (2007年9月測定)
 計算条件: NCPP, 16Ry (158万pw基底)
 速度: 512node (4,096cpu), 16.2 TFlops (効率49.4%)

ES2利用: 水864分子 (**2,592原子**) (2009年3月測定)
 計算条件: NCPP, 70Ry
 速度: 128node (1,024cpu), 19.2 TFlops (効率18.3%)

Si中の不純物



地球シミュレータES2構成



計算プロセッサのピーク性能	102.4 Gflops	総プロセッサ数	1280
計算ノードのピーク性能	819.2 Gflops	総計算ノード数	160
計算ノードの主記憶容量	128 GByte	ピーク性能	131 Tflops
計算ノードのCPU数	8	主記憶容量	20 TByte

●プログラムチューニング

計算コアのBLASサブルーチン置換により今後2~3倍程度の性能向上が期待できる。

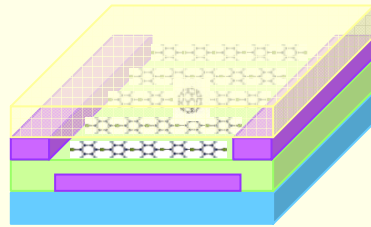
使えるソフトウェアの開発

ものづくり現場で使えるソフトウェアの開発

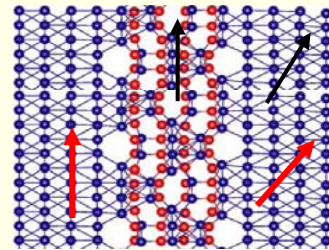
- ・ロバスト性: 安定して結果が得られる.
- ・ユーザー・インターフェース: 入力データ生成、可視化、、
- ・信頼性: 情報の発信・共有、ソフトウェアの維持・管理
(長期的な視野が必要)
- ・問題解決への支援
 - 半導体ナノデバイス: 第一原理計算の結果→TCAD
 - マルチスケールの解析
 - モデル化技術

ナノデバイス創成のためのシミュレーション

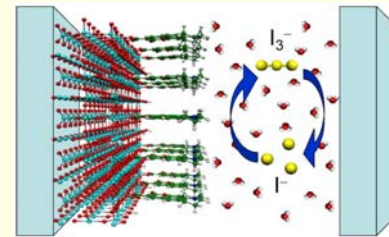
革新的機能ナノデバイス



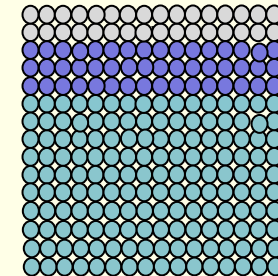
次世代ナノデバイス機能
非Si系材料探索など
材料物性解析
大規模解析(全体解析)



複合デバイス、スピンRAM、
有機ELなどの機能解析
スピン伝導解析
磁気抵抗、スピン反転



色素増感太陽電池など
電子ダイナミクス解析
大規模解析(溶媒効果)



レアメタル代替触媒材料設計、
燃料電池など
原子ダイナミクス解析
化学反応経路探索

ものづくりイノベーションへの貢献

ナノデバイス・イノベーション

高機能材料

次世代高機能デバイス

情報通信デバイス

エネルギー変換デバイス

元素戦略材料