

ものづくり分野

サブミクロン物性における
計算機マテリアルデザイン

大阪大学大学院理学研究科

赤井久純

次世代スパコンとものづくり

- ものづくりに必要な視点
 - 工業化社会から知識社会への変革
 - 社会調和
 - 100年先を視る先見性:基礎科学
- ものづくりに必要な方向性
 - シミュレーションからデザインへ
 - ナノからサブミクロンへ
 - 多階層連結:ナノから宇宙まで
- 次世代スパコンによって実現

作る前に
考える

考え方

道具

シミュレーションからデザインへ

- シミュレーションは効率の良い情報収集手法
- しかしそれだけでは新しい創造はない
- シミュレーションを高度に使いこなすことによって新しいものを創造することが重要
- 高度なシミュレーションを多数回行うことによってデザインが可能になる： 機構解明とフィードバックループ
- 計算機の中での物質・デバイスの創成
- ナノシミュレーションからナノデザインへ



計算機マテリアルデザイン

計算機マテリアルデザインとは

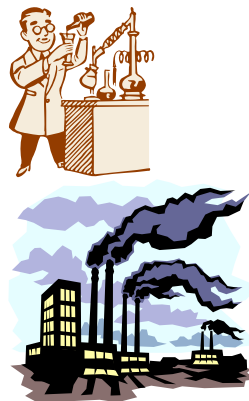
21世紀の錬金術—自由自在に物質創成

計算機上の仮想実験室において

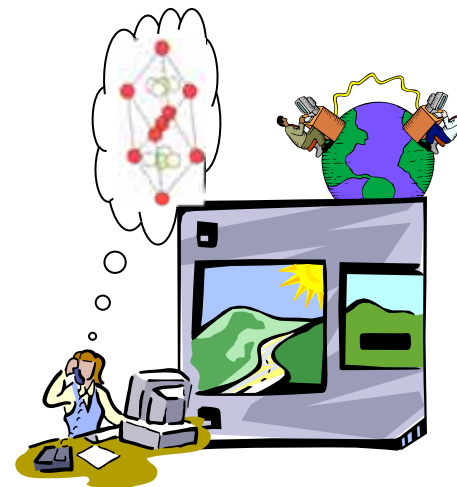
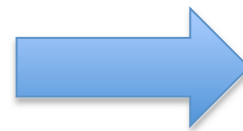
- 環境調和材料(窒化物、酸化物等)
- 高効率エネルギー変換材料(太陽電池・燃料電池材料、超伝導材料等)
- 安全・安心のためのセンサー材料(スピントロニクス材料等)
- 生体調和材料(人工関節、人工骨、歯科材料等)

等を効率良く、環境に負荷をかけず開発することのできる手法

計算機マテリアルデザイン(CMD[®])によって実現



従来型材料開発



計算機マテリアルデザイン

量子シミュレーションと量子デザイン

量子デザイン

量子デザイン実現の方法

量子シミュレーション

主要部は量子シミュレーション

機能の検証

計算結果の解析

材料デザインエンジン

仮想物質の推論

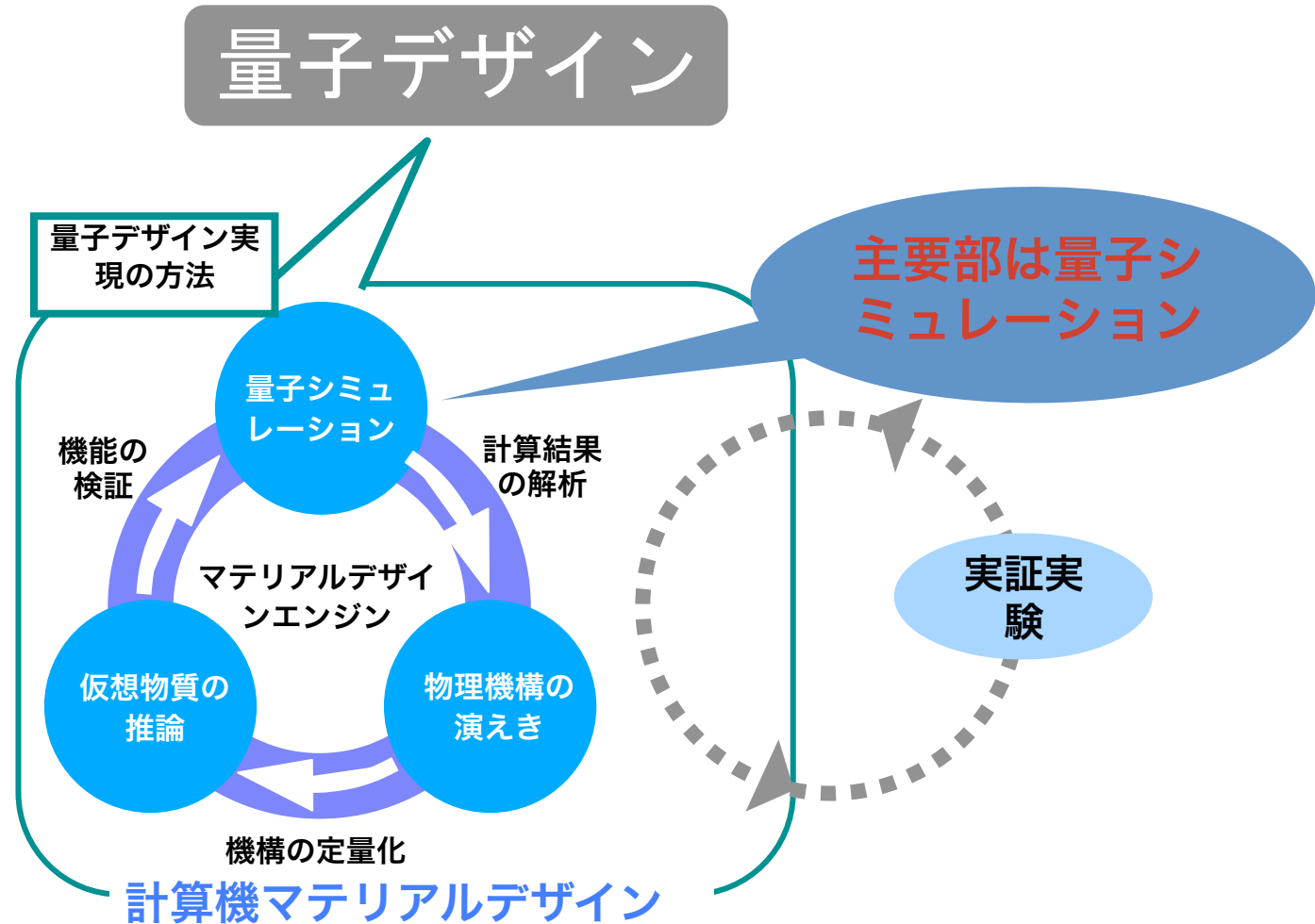
物理機構の演えき

実証実験

機構の定量化

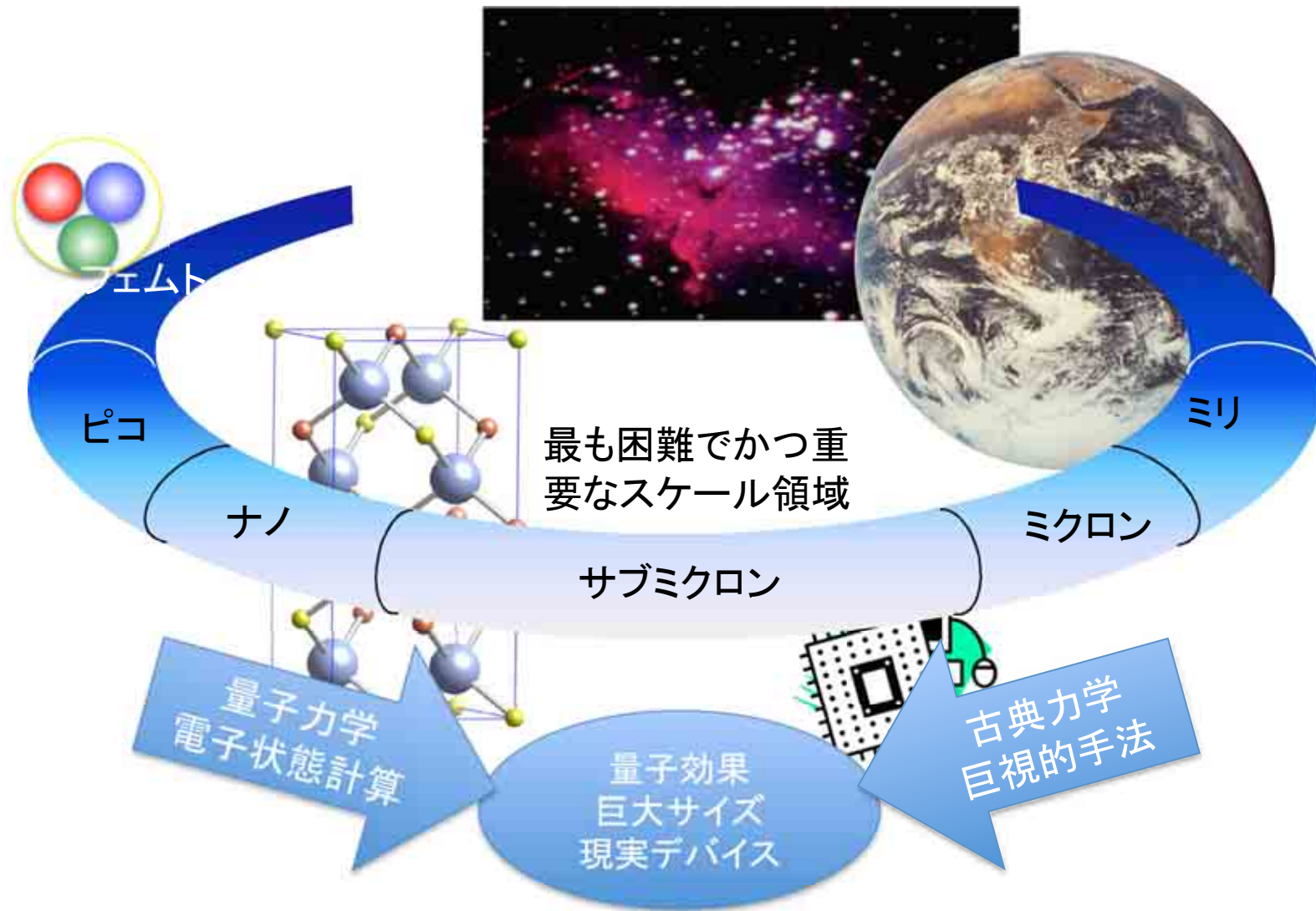
計算機材料デザイン

計算機材料デザインエンジンは3つの過程からなる



ターゲット 「サブミクロン物性」

サブミクロンサイズ構造の丸ごとシミュレーションとデザイン



なぜ重要か

- 現実のデバイスはサブミクロンサイズにおいて機能
- 表面・界面における触媒作用、化学反応、ナノダイナミクスの舞台はサブミクロンの世界
- 自己組織化はナノ析出がサブミクロンサイズにわたって出現することにより機能化する

サブミクロンで何が問題か

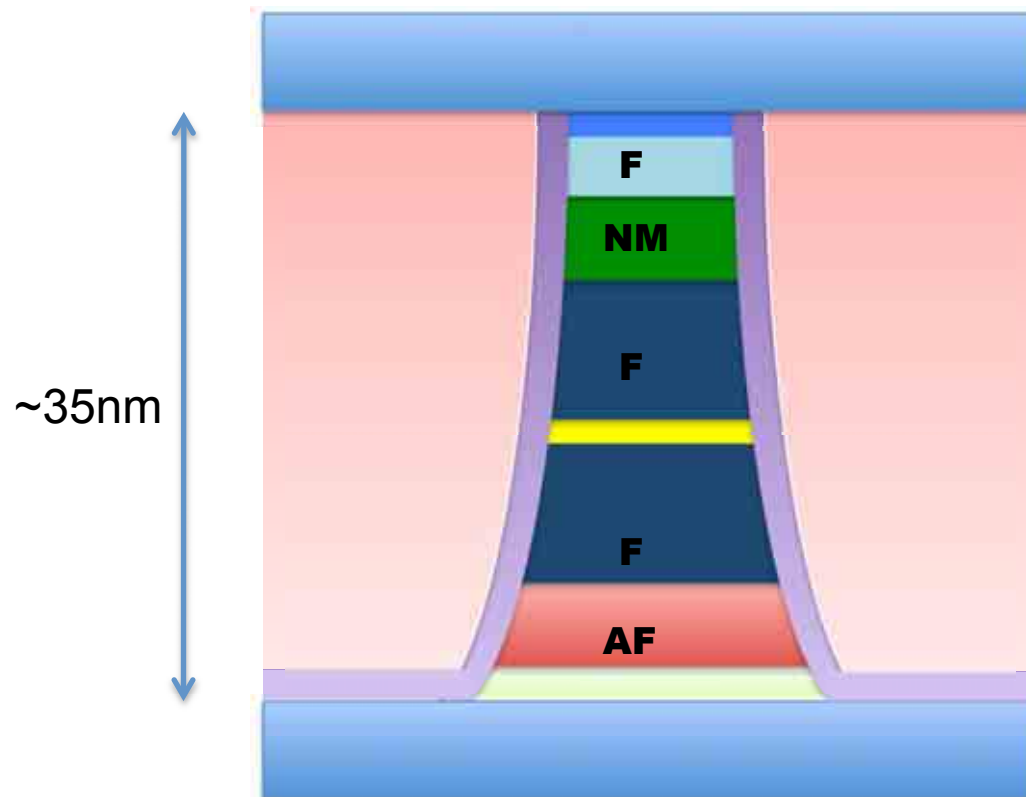
- 量子効果が重要で古典力学からの延長で議論できない
- 巨大サイズのために従来の第一原理計算が困難である
- シミュレーション技術の蓄積はあり、サブミクロンサイズのシミュレーションも試みられている
- しかし、サブミクロンデザインは次世代スパコンによる超大規模計算によってのみ可能になる



デザインはシミュレーションの逆問題 → きわめて困難な問題

チャレンジの例1

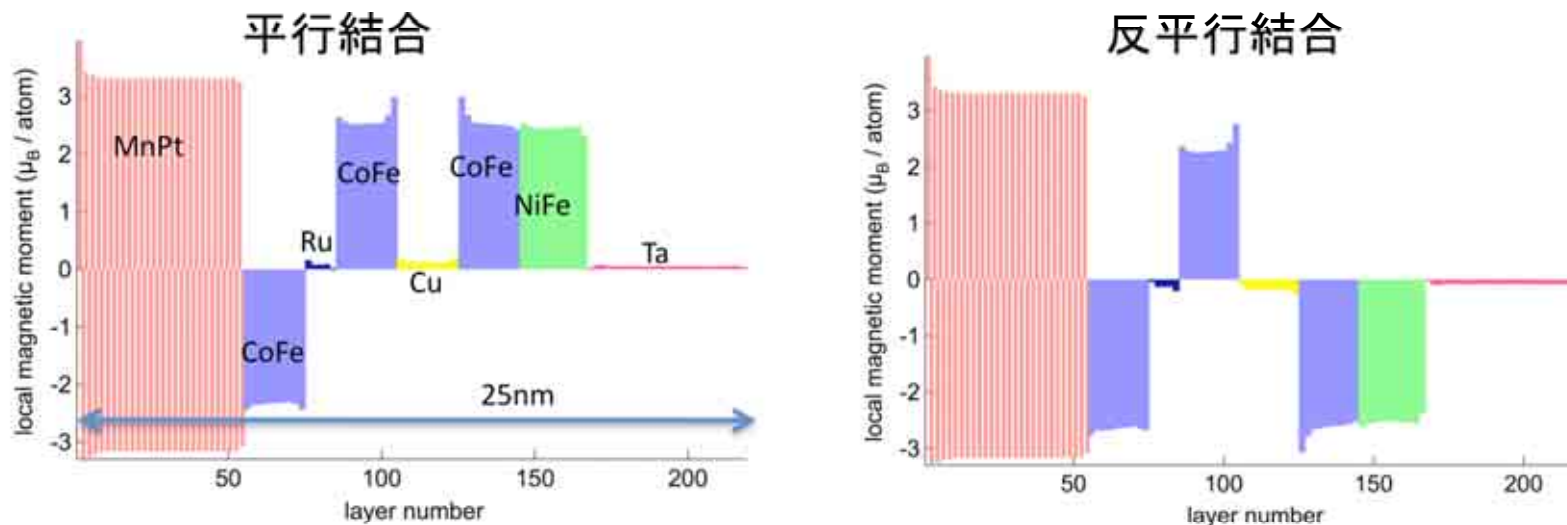
デバイスのまるごとシミュレーション



現実のppr GMR素子

現状と将来への展望

例えば、膜厚25ナノ(218層)のGMR素子の丸ごと計算が遮蔽KKR法を用いて実施されている。2次元方向へは周期性を仮定。

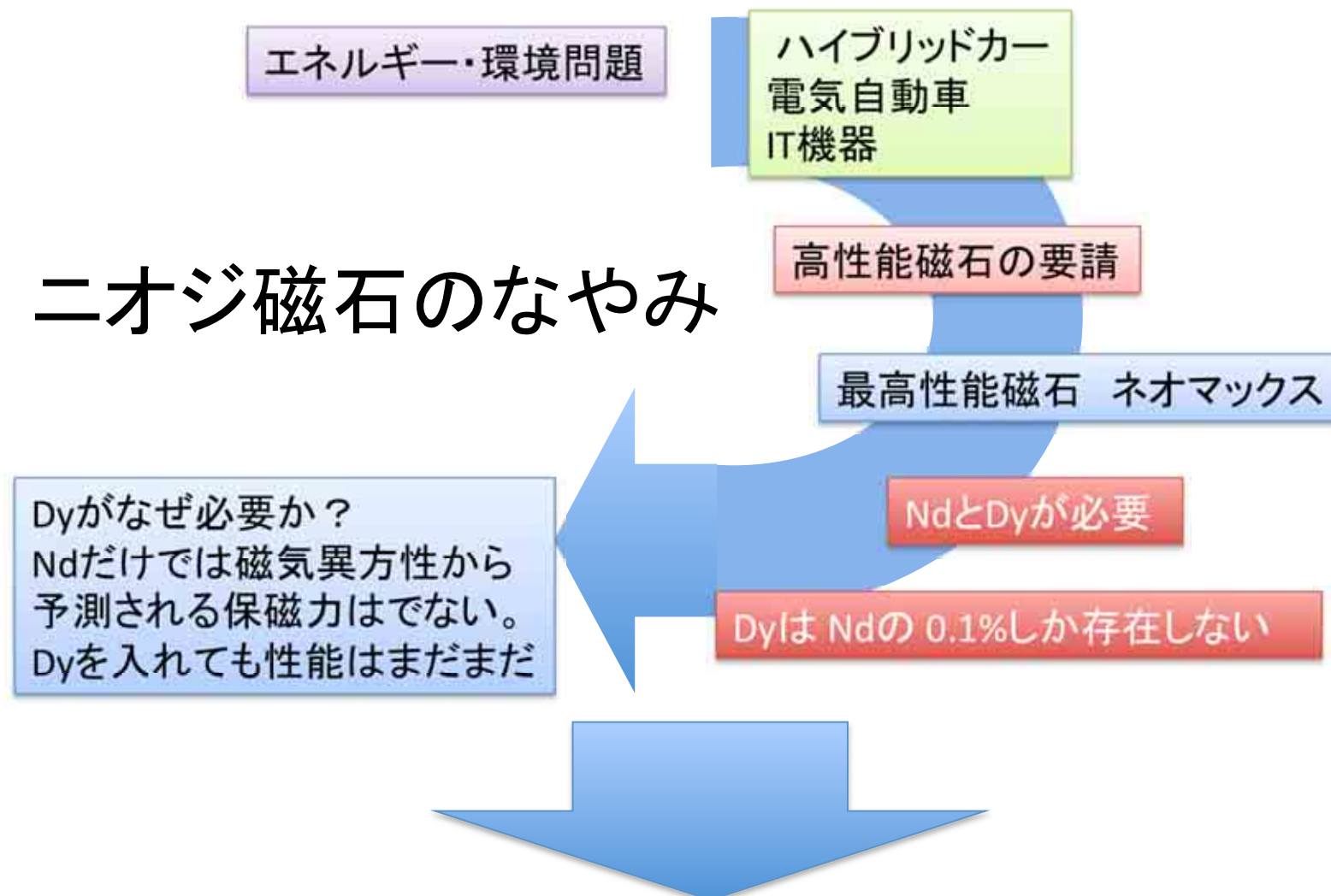


1次元方向にオーダーN、2次元方向に超並列が有効。次世代スパコンで現実デバイスの丸ごとシミュレーション・デザインが可能。

サブミクロンサイズにおいて発現する物性、機能は現実デバイスにおいて重要であるのみならず、基礎科学にとっても問題の宝庫である。

チャレンジの例2

ニオジ磁石のなやみ

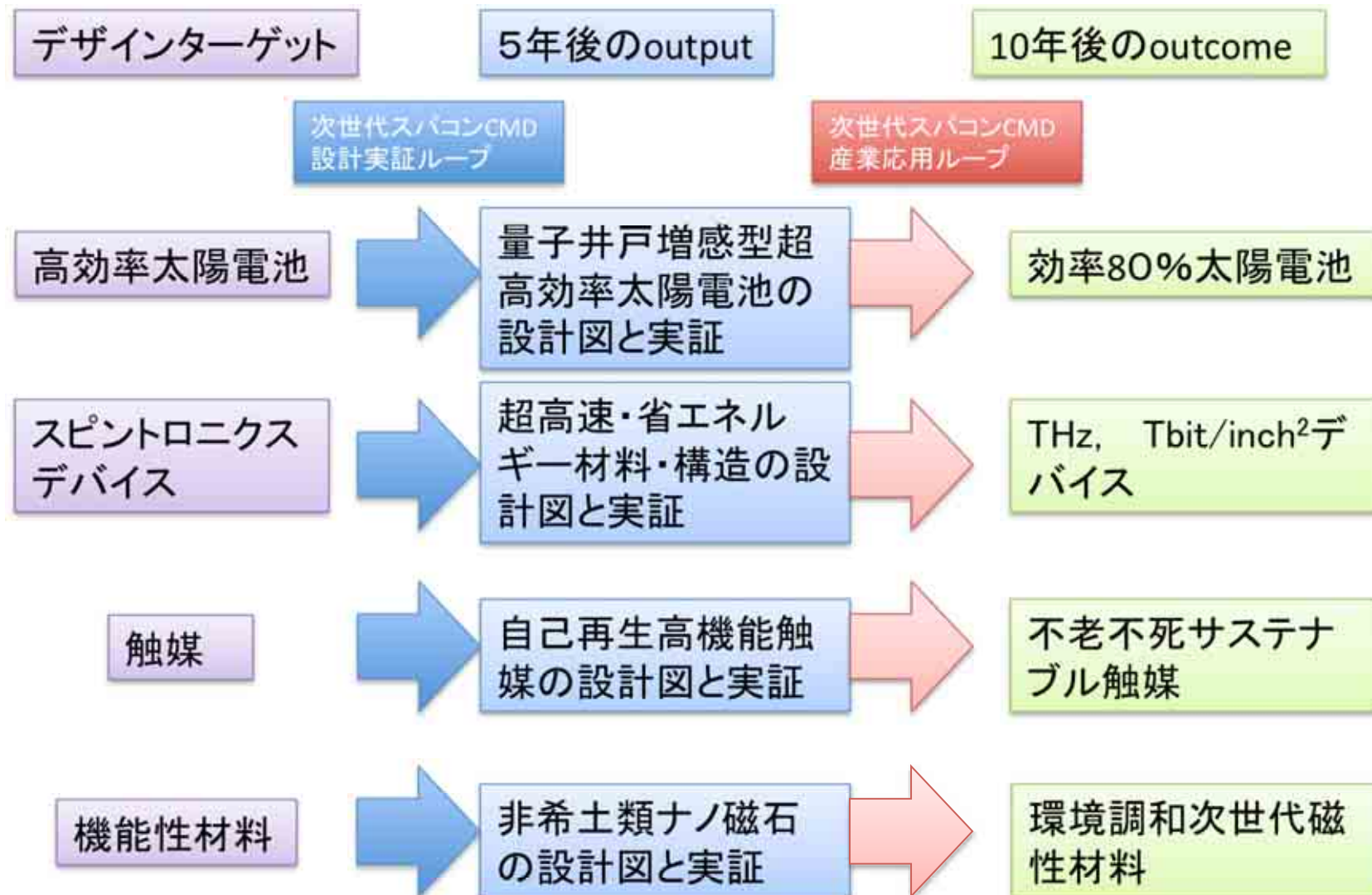


次世代スパコンによって微粒子永久磁石をデザイン

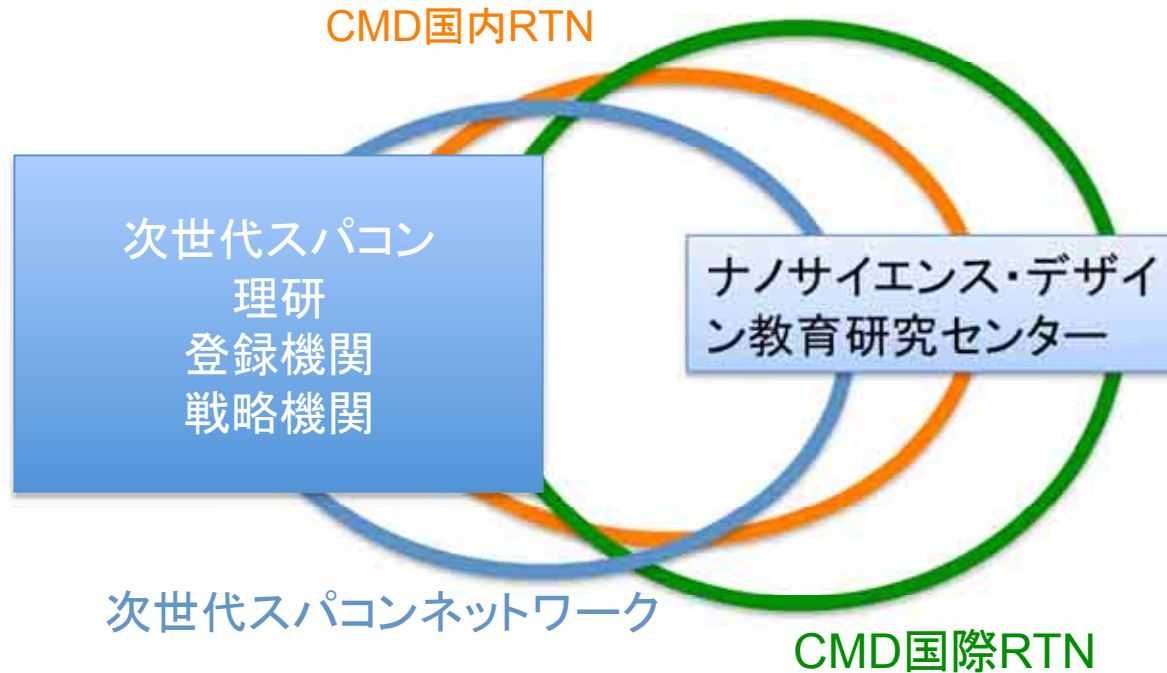
分野サーベイ

- ふさわしい問題の存在
- 研究推進の体制はあるか
 - 研究実績(潜在能力)
 - 組織、人
 - 普及・公開と教育
- 分野として
 - 基礎科学の側面
 - 産業応用

計算機マテリアルデザイン分野



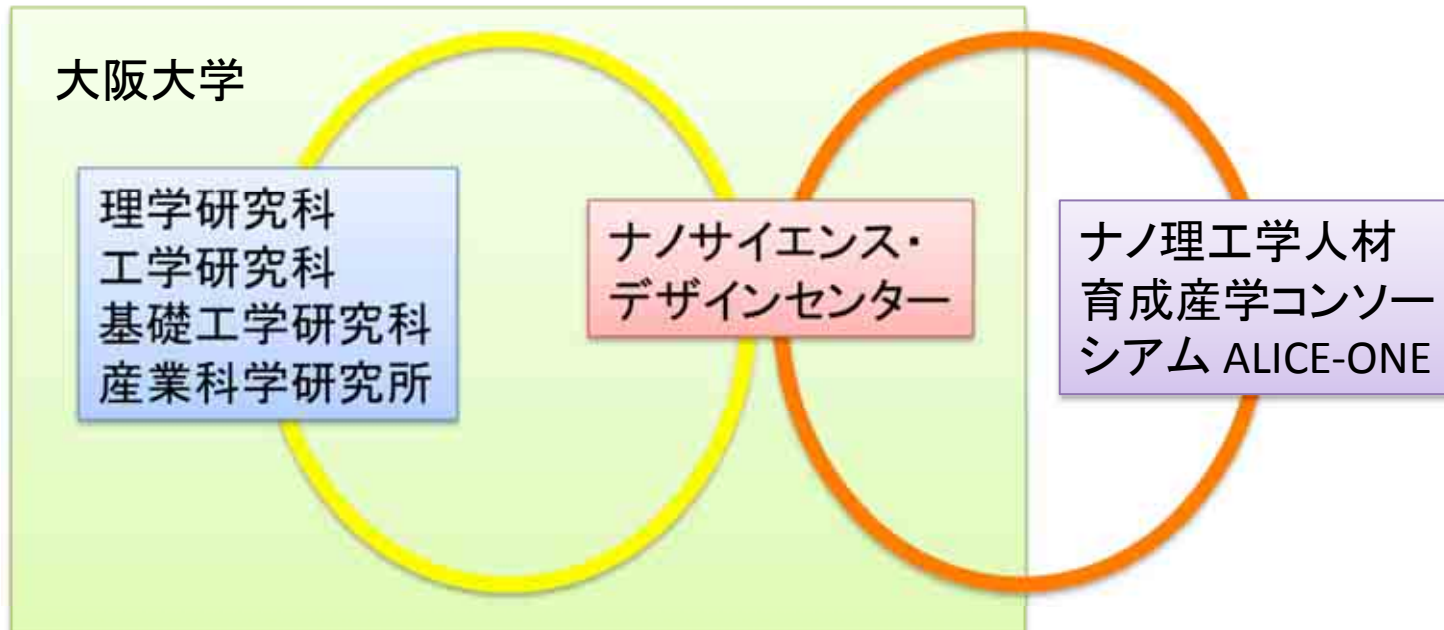
可能な研究体制はあるか？



RTN: リサーチ・トレーニング・ネットワーク
(研究と人と教育のネットワーク)

ナノサイエンス・デザイン教育研究センター

2008年12月1日発足



- センター教員のCMD研究に関する実績
 - 100回以上のサイテーションのあるCMD論文11件
 - 40回以上のサイテーションのある最近のCMD論文多数
 - CMD特許出願・登録129件
 - 延べ14回の5日間合宿型チュートリアルコースの実施、延べ535人が参加
 - 5年間にわたって社会人教育(大学院通年10単位コース)を実施

計算機マテリアルデザイン分野

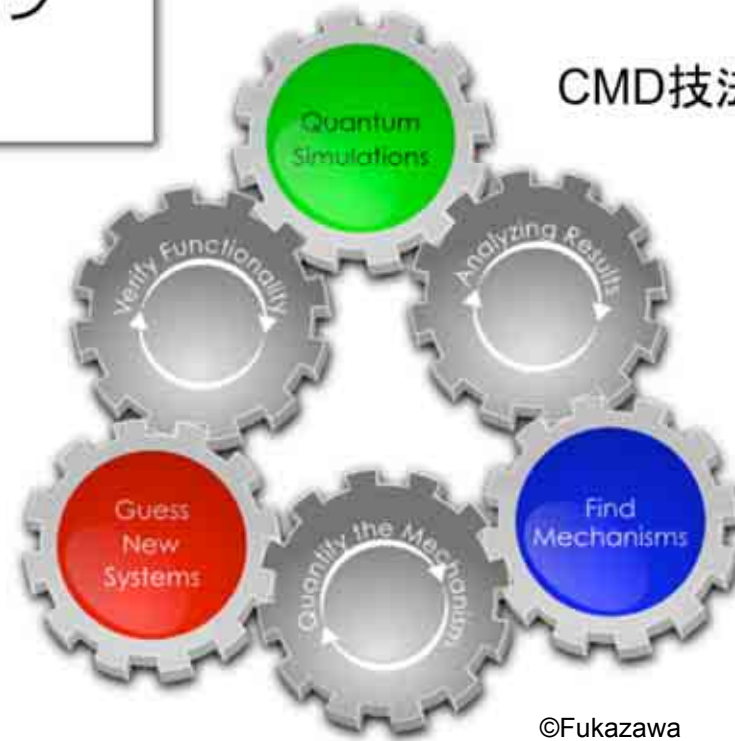
以下時間が許すかぎり

- オリジナルソフトウェアパッケージ
- 現状と5年後のoutput
- 人材育成(大学院教育と社会人教育)
- ソフトウェアの公開と普及
- 知財管理のしくみづくり

CMD-Pack

計算機マテリアルデザイン
統合パッケージ

CMD技法



高速大規模KKR-CPA
MACHIKANNEYAMA

第一原理MD
OSAKA

表面界面分子シミュレータ
STATE-senri

表面界面ナノ構造反応
NANIWA

高精度FLAPWコード
HiLAPW

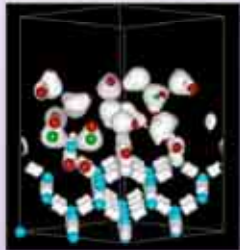
実空間差分法に基づく電子状態・輸送特性計算コード

本研究グループ独自開発の第一原理計算手法
(**実空間差分法**に基づく計算手法)



実空間差分法に関する専門書
(Imperial College Press, 2005)

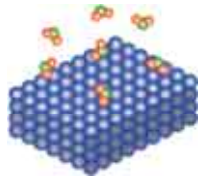
金螺旋原子鎖による
ナノソレノイドの発見
(Phys. Rev. Lett., 2005)



水分子のみによる
表面加工現象の発見
(精密工学会誌, 2005)

大規模モデル用第一原理シミュレーターの開発
第一原理デバイスシミュレーターの開発

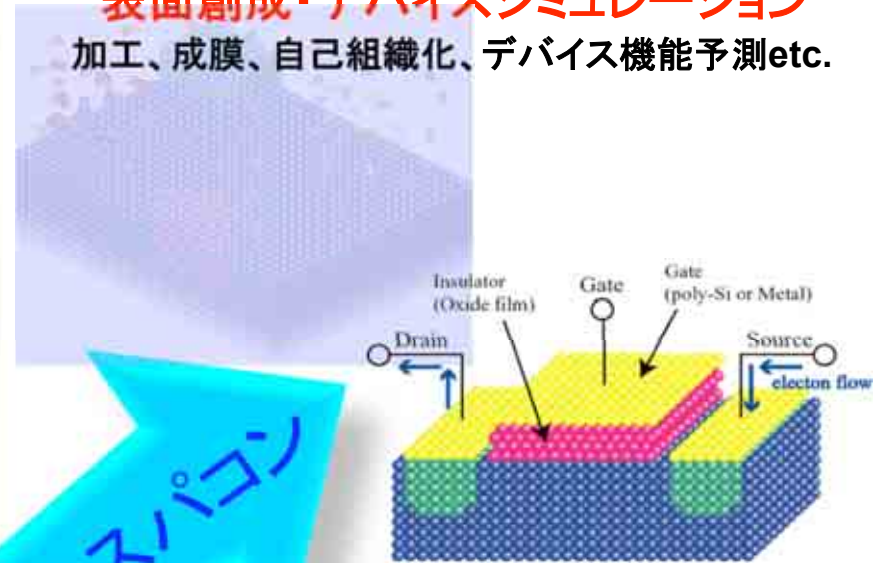
従来の第一原理計算
モデルの大きさが限られる



大規模モデルによる

表面創成・デバイスシミュレーション

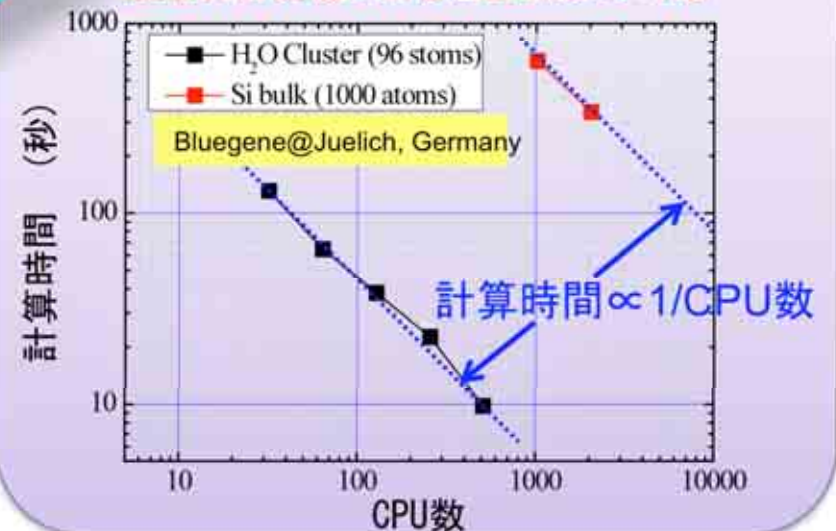
加工、成膜、自己組織化、デバイス機能予測etc.



次世代スパコン

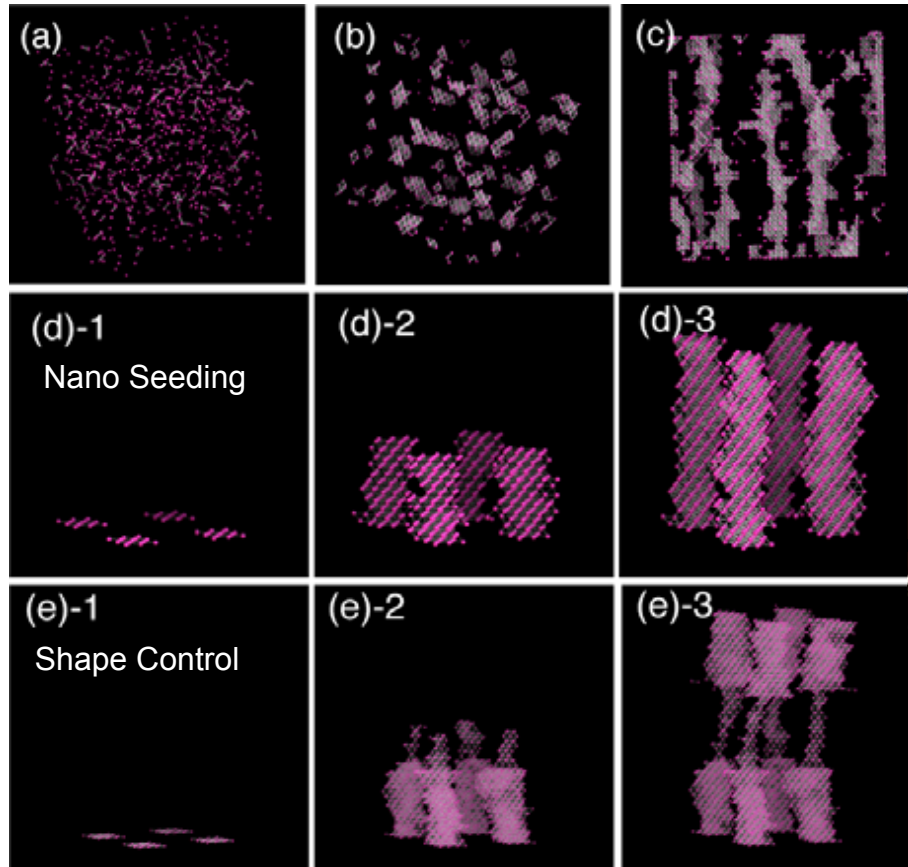
本手法の特徴

超並列計算機による高速計算が可能



現状：スピノーダル・ナノテクノロジー

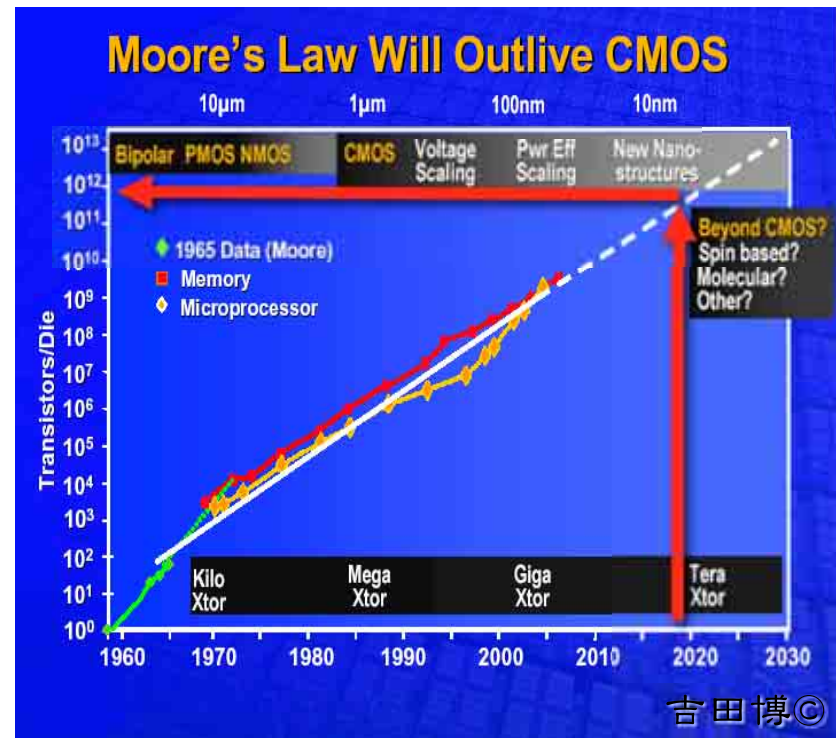
●第一原理計算によるスピノーダル・ナノ分解を利用した高温強磁性半導体のデザインと実証が可能である。



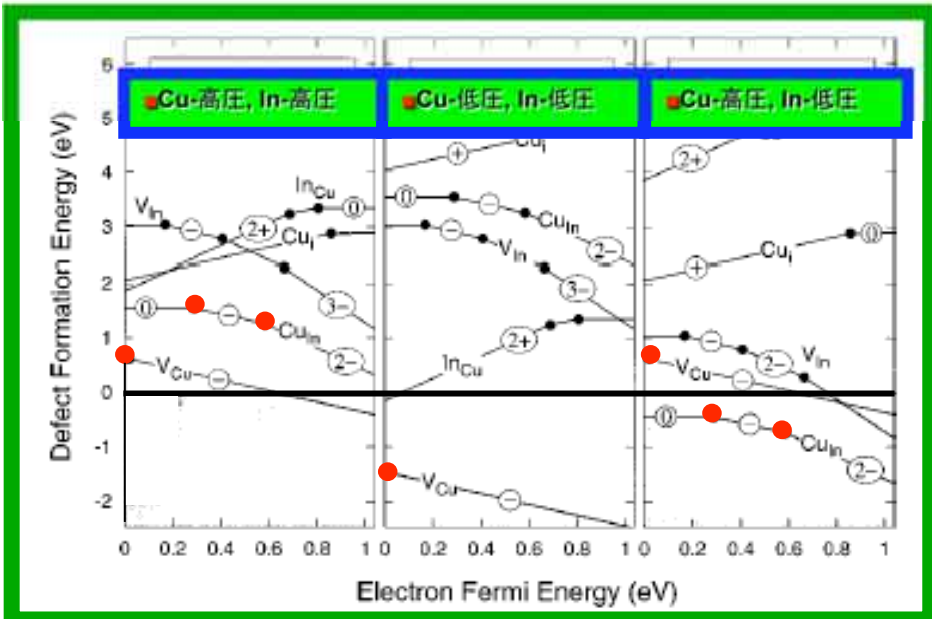
特許登録 米国, 欧州, 日本, 韓国, 中国, 台湾 CMOS-Free MRAM, H. Katayama-Yoshida, K. Sato : Japan-Patent: JP 3571034, USA-Patent : US 7164180 B2, EU-Patent: EP-1548832A1, Taiwan-Patent: 第1262593号, 磁阻層機存取存儲機装置, Korea-Patent : KP-0557387

将来展望：半導体ナノスピントロニクスデバイスのデザインと実証が可能になる。(Beyond CMOS)

●次世代スパコンによるナノスピンドYNAMIXとデバイス機能デザインにより、THz, Tbit/inch²超高密度, 不揮発性の新しいクラスのスピンロニクスがデザインに基づいて実証される。
●デザインと実証による半導体ナノスピントロニクスの応用開発が可能になる。



現状：太陽電池の欠陥出現予測と自己修復法
●CuInSe₂太陽電池における結晶成長条件制御による欠陥生成法と欠陥の自己修復法デザインが可能



将来展望：不老不死の自己組織化超効率太陽電池のデザインと実現

●トップダウン（リソグラフィ）とボトムアップ（自己組織化）ナノテクノロジーの融合により、安価で、不老不死の超効率太陽電池がデザイン実証される。

●自己組織化によるナノ超構造量子ドット増感による超効率太陽電池がデザインされ、実証される。

自己組織化によるナノ超構造増感型の不老不死の超効率太陽電池

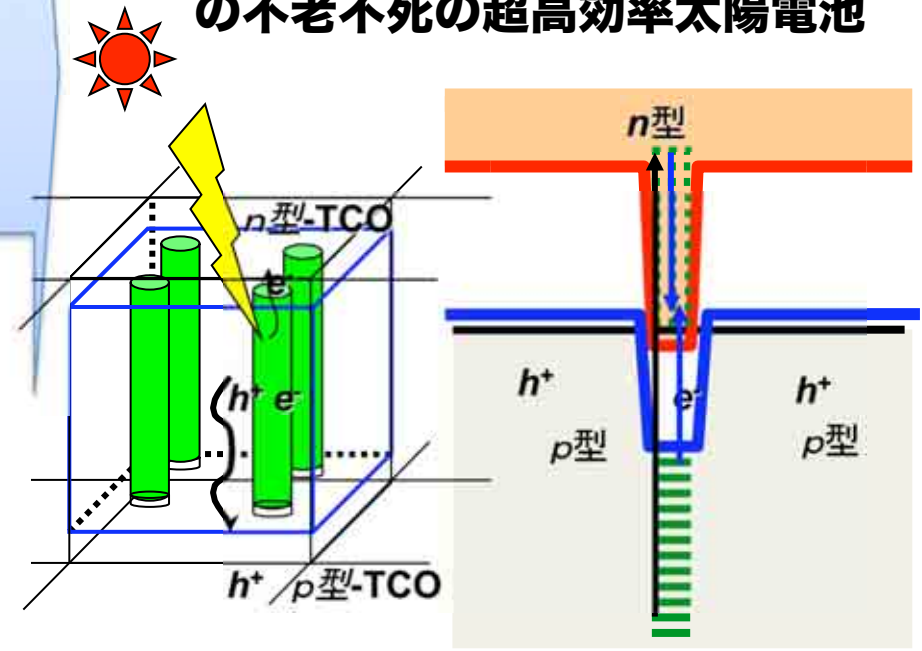
(a) Single pair of $Cu_{In}^{2-} + 2Cu_i^+$

(b) Single pair of $2V_{Cu} + In_{Cu}^{2+}$

Solar cell type	CIGS
Dimensions	1,417 x 791 x 37mm
Max output	125W*
Production scale	100kW
Module conversion efficiency	About 11%
Rated discharge voltage	280V
Max output voltage	215V
Manufacturing technology	Selenium evaporation
Price	¥57,500

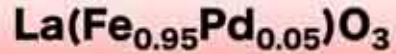
* Measured at AM1.5 (solar light zenith angle 48°), insolation 1kW/m², temperature 25°C.

欠陥を自己修復するCuInSe₂太陽電池

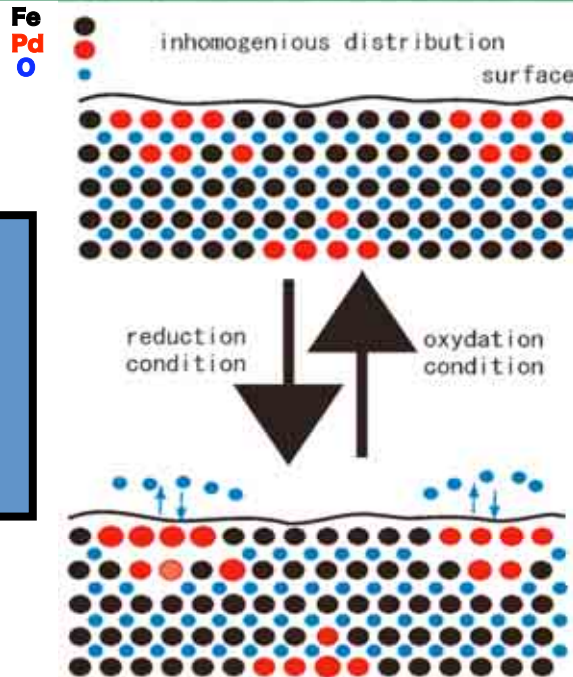
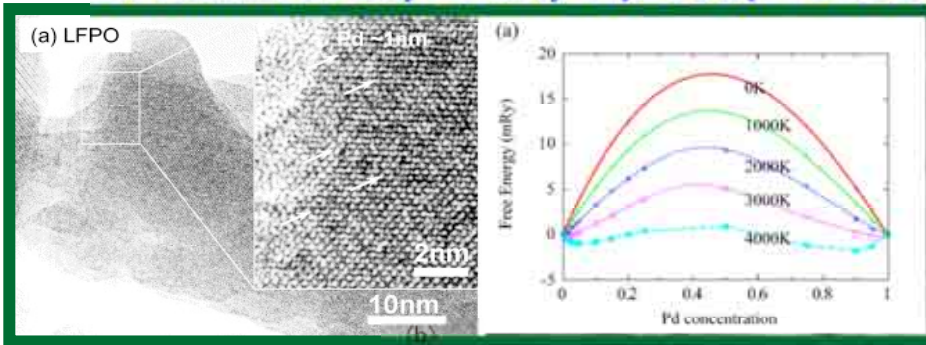


**現状：貴金属を含むインテリジェント自動車
用排気ガス触媒の自己再生機能の解明**

●ペロブスカイト型自動車排気ガス用触媒に
おける劣化回避と自己再生機能の解明が可能



H. Kizaki et al., *APEX*, 1 (2008) 104001.



[酸化反応]
 $\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2$
[酸化反応]
 $\text{HC} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CO}$
[還元反応]
 $\text{NO}_x \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}_2$

**将来展望：自己再生する不老不死の
脱貴金属ナノ粒子自己形成触媒がデ
ザインに基づいて実証される。**

●貴金属を用いない、安価・高効率・不老
不死のナノ触媒をデザインで実証。

●スピノーダル分解によるナノダイナミッ
クスと自己組織化によるナノ触媒の反応機
構と創製法をデザインで実証。

