

# 次世代スパコンへの提言

産業技術総合研究所 計算科学研究部門  
池庄司 民夫（研究部門長）

# 計算科学研究部門

2008.10.1

対象 研究グループ	常勤, ポス ドク	ナノテクノロジー			バイオテ クノロ ジー	シミュ レーショ ン基礎
		構造形 成	化学反 応	材料		
粒子モデリング	8, 3	○		○	○	△
量子モデリング	8, 3		○	○	○	
第一原理シミュ レーション	5, 2		○	○		
基礎解析	4, 2			△		○

合計 29, 14

# プログラム開発・公開 (電子状態)

計算科学研究部門

名称	内容	特徴	開発者
<u>FMO</u> Fragment Molecular Orbital	フラグメント分子 軌道計算 (HF, MP2, LDA, TDDFT等)	フラグメントに分割し、それらのペア も分子軌道計算する。巨大分子系に適 する。種々のプロジェクトの対象に なっている。(GAMESSから公開中)	北浦, Fedorov, 石田ほか
<u>QMAS</u> Quantum MAterial Simulator	平面波基底PAW 法DFT	可搬性がよく高精度な計算が周期系で 可能な標準的な方法である。均一電場 などの外場下での計算など、種々の物 性値計算ができる。	石橋、香 山、田村 ほか
<u>FEMTECK</u> Finite Element Method based Total Energy Calculation Kit	有限要素基底ノル ム保存擬ポテン シャルDFT	高速性を追求しているコードであり、 液体、アモルファス系など(絶縁体)の 計算で高並列化が可能。オーダ(N)法 にも拡張された。周期系における分極 が計算できる。	土田
<u>OpenMX</u> Open source package for Material eXplorer	非直交局在数値基 底DFT	クラスター・分子、結晶・非晶質、金 属などの大規模・高速計算が可能であ り、電子輸送やスピンなど広範な問題 に対応できる。3種類のオーダ(N)法 を含む。GPLで公開中。(開発主体は 北陸先端大に移っている)	尾崎(北陸 先端大)ほ か
<u>STATE</u> Simulation Tool for Atomic sysTEm	平面波基底ウルト ラソフト擬ポテン シャルDFT	最も古くから開発されており、既に多 くの系で使われている。特に表面化学 反応に有効である。(開発主体は大阪 大に移っている)	森川(大阪 大)、 橋本ほか

# 産業応用に必要なこと

電子材料開発→	基盤	高精度	beyond DFT (GW, BS)、等々
エネルギー材料開発→		予測性	イオン伝導度、反応、等々
デバイス開発→		高機能	外場 (電場、磁場、歪み等)、等々
システム開発→		複雑系	まるごとシミュレーション
研究開発→	応用	使いやすさ	
材料、デバイス設計→	設計	実用性	

# 社会的要請分野 (環境・エネルギー、産業技術)

文科省(JST)+経産省(NEDO) 連携  
ナノエレクトロニクス (CREST, 経産省)  
元素戦略 (科研費)、レアメタル (NEDO)

NEDO+企業  
電池 (燃料電池、リチウム電池)  
水素材料 (耐水素材料、水素吸蔵材)

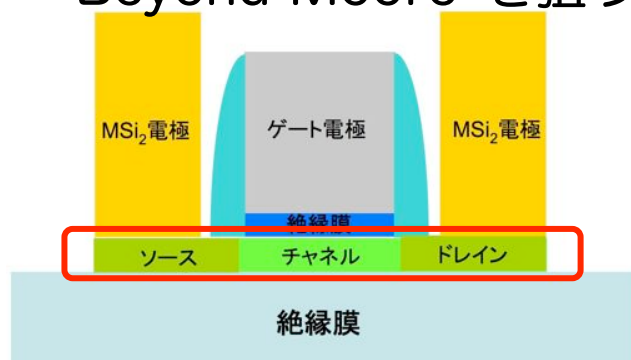
緊急課題  
鉄系超伝導 (JST)  
カーボンアロイ (NEDO)

重要課題  
太陽電池 (固体、湿式)

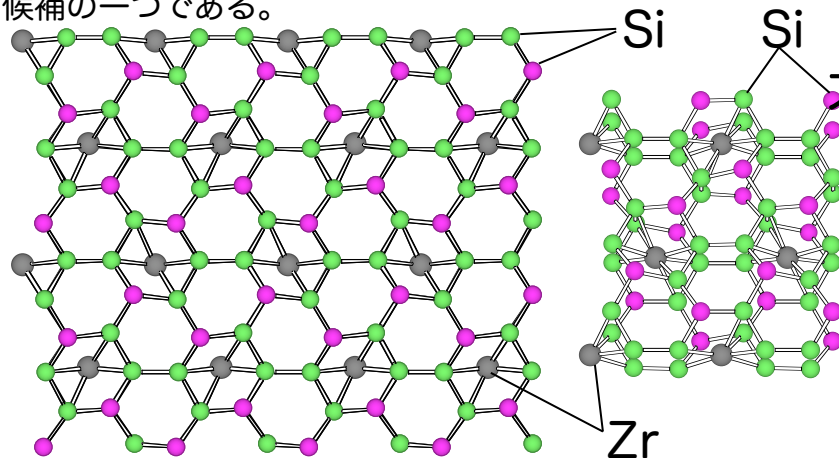
現状の到達点と次世代スパコンでの課題と  
その結果得られるであろう成果を紹介

# ナノエレクトロニクス (機能)

“Beyond Moore”を狙うシリコン系極超薄膜半導体結晶を提案



下記極超薄膜結晶は、SOIの限界を超えることを目指した、ソース、ドレイン、チャネル（赤色の枠で囲んだ領域）用材料の候補の一つである。



第一原理計算で見いだされた、遷移金属シリサイド極超薄膜( $\text{ZrSi}_{12}$ ) $n$ の構造。GGAバンドギャップは約0.3eV。

T. Miyazaki et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **46**, L28-L30 (2007)

## 【現状・問題点】

バンドギャップ (基本的指針)  
通常のDFT計算 → 実験値の1/2 程度

## 【これから】

高精度計算 (GW)  
現状は、小さな系のみ可能

## 【次世代スパコン】

大規模系での正確な見積もり  
1次元、2次元系 (ワイヤ、シート)  
アモルファス → 透明電極  
不純物系 → 新規半導体

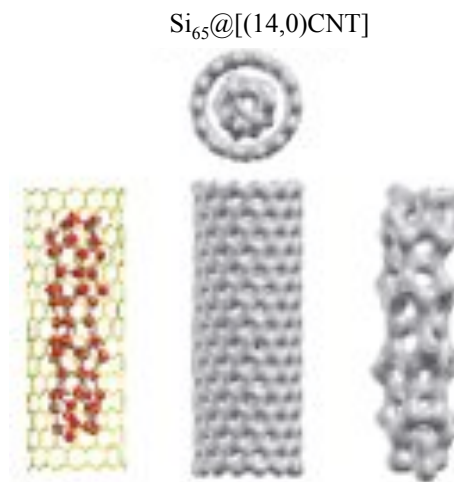


正確な予測に基づくデバイス開発

# ナノエレクトロニクス (構造形成)

機能を実現する微小材料の合成指針

Si wires in CNT



K. Nishio et al., *Phys. Rev. B*, 77, 201401(R) (2008).

## 【目的・背景】

ナノクラスターの生成過程  
自己組織化過程  
複数の構造が生成

## 【現状・問題点】

古典MDでの形成過程シミュレーション  
(ポテンシャル関数の不確かさ)  
統計的な精度 (生成物のばらつき)

## 【次世代スパコン】

第一原理MDによる生成過程  
データ並列的計算



統計的なばらつきを考慮したデバイス開発  
正確な生成過程に基づく合成プロセスの設計

# ナノエレクトロニクス（新デバイス）

## 【目標】

界面の特異的な性質を利用したデバイスを開発する。

## 【現状】

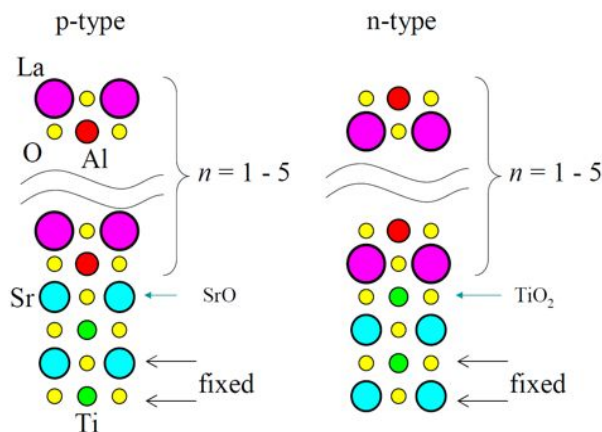
理想的な界面での電氣的、磁氣的性質の予測

## 【次世代スパコン】

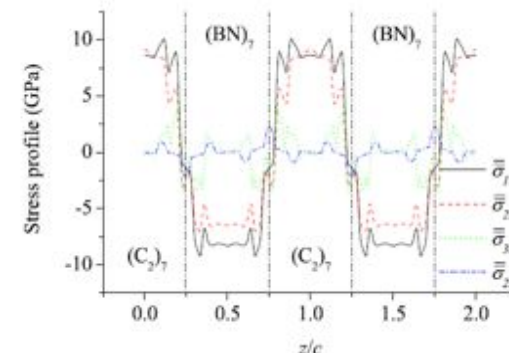
不純物、欠陥を含む系の予測  
（大きなスーパーセルでの計算が必要）



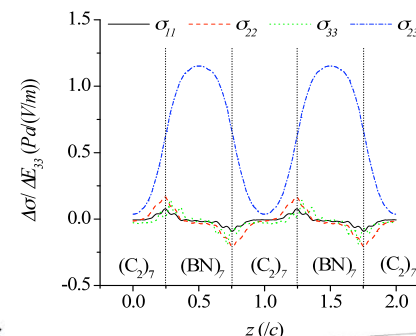
新たなデバイスの特性



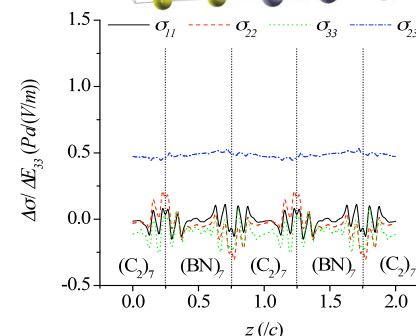
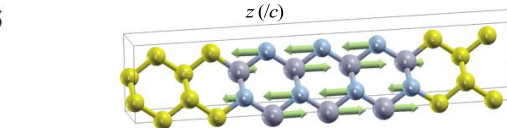
LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>系における極性不連続のスクリーニング機構



超格子での応力分布と電歪



原子位置緩和前



原子位置緩和後



# 電池 (エネルギー・環境技術)

## 【種類とその用途】

水素燃料電池 (長期展望)  
自動車用  
家庭用電源

メタノール燃料電池  
携帯機器

リチウム電池 (緊急の課題)  
電気自動車  
ハイブリッド自動車  
携帯機器

