

密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測 第一原理量子論RSDFTコード開発と ナノ構造の新機能

◆概要

次世代テクノロジーを支えるナノ構造体は量子の世界. 量子論に基づく高精度大規模計算により, ナノデバイス構造の電子機能を解明.

◆「京」で得られた成果

- ✓ 密度汎関数法RSDFT(Real Space Density Functional Theory)コードの高速化により, 前人未踏の10万原子量子論計算: Siナノワイヤー-FETの電子状態と電流分布を明らかに

⇒ 2011年ゴードンベル賞受賞

- ✓ RSDFTによる, 次世代パワーデバイス材料, 原子層材料の新電子機能の予測

SiC表面ナノファセットでの磁性発現, 二層グラフェンでの積層捩れによる電子機能制御

京以前の高々1,000原子計算から「京」での高効率(51.9%, 5.48PFLOPS)100,000原子量子論計算へ: 計算物質科学の質的変革

◆「京」の活用

DFTのコーン・シャム方程式解法において, コンピューティクス*アプローチによる先端的並列化とその高速化

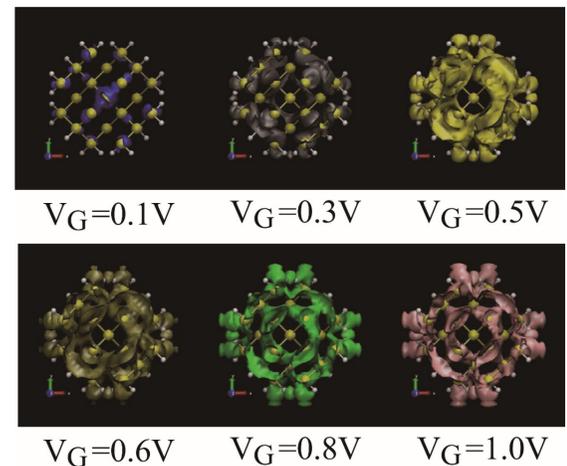
*行列積への変換アルゴリズムによるBLAS3の活用
固有値問題への新アルゴリズム導入*

* コンピューティクス: 物質科学と計算機科学の融合(新学術 <http://computics-material.jp/>)

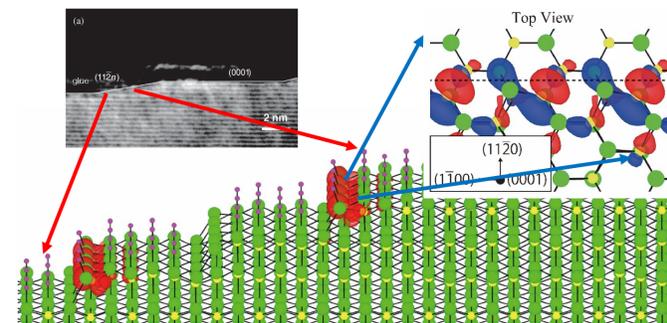
◆将来の展望

空間・時間・精度の3つの軸にそった計算物質科学の進展が科学の地平を広げる

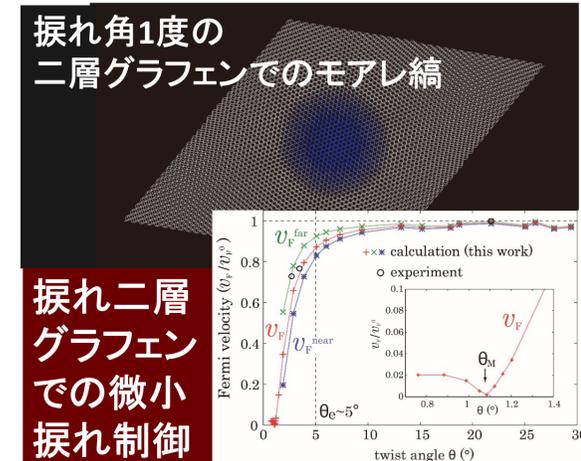
そして, 量子論デバイス・プロセスシミュレーションが新たなものづくりへの道を拓く



ゲート電圧を変えたときのSiナノワイヤー断面の電流分布. これにより, ワイヤ周囲のラフネス散乱の影響が評価できる.



SiCナノファセットの安定構造とエッジに沿った特異な電子状態の発現. 半導体表面でのスピン機能の予測



捩れ二層グラフェンでの微小捩れ制御によるディラック電子の局在と非局在. ナノ捩れによる物性制御の可能性.