

# Siナノワイヤのバンド構造解析

大規模第一原理シミュレーションで次世代技術を予言したい

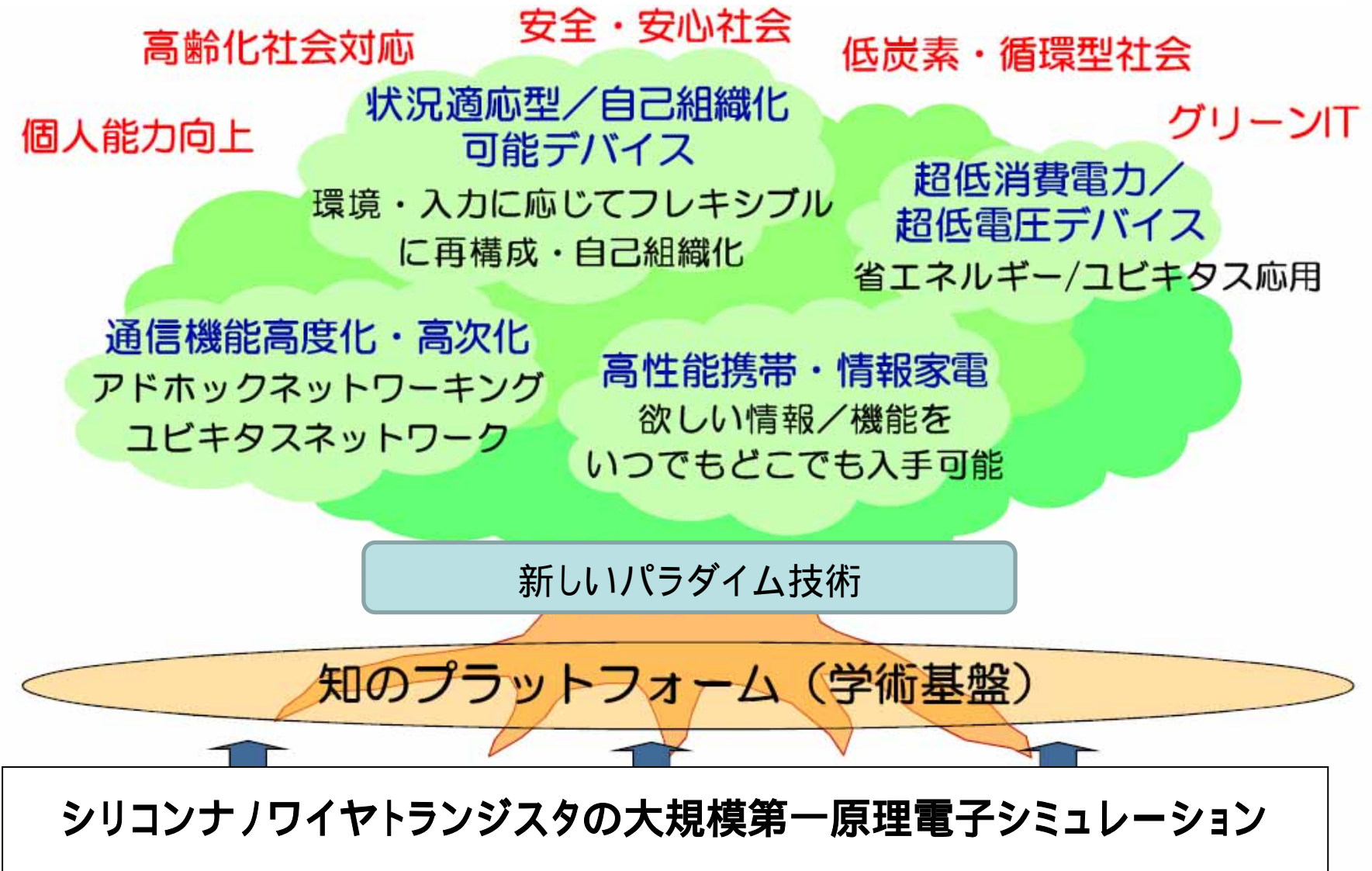
筑波大学大学院数理物質科学研究科 & 計算科学研究センター  
白石賢二

共同研究者  
筑波大学計算科学研究センター  
岩田潤一

東京大学工学系研究科  
押山淳

東京工業大学  
李映勳、角嶋邦之、パールハット アハメト、名取研二、岩井洋

# 大規模第一原理計算で次世代技術を预言する



# 内容

## 研究背景

1. 次世代技術を支える新構造トランジスタ（とくにシリコンナノワイヤ）
2. 量子力学的トランジスタ解析(大規模第一原理計算)の必要性

## 成果

3. 超並列計算機向け第一原理電子状態計算プログラム「RSDFT」の開発とシリコンナノワイヤーのバンド構造計算(一万数千原子系)
4. 次世代スパコンによる将来デバイスの設計指針獲得に向けて
5. まとめ



次世代スパコン(神戸) 完成予想図

# 読賣新聞

2009年(平成21年)

11月2日月曜日

本社 〒100-8055 東京都千代田区大手町1-7-1 電話(03)3242-1111(代) www.yomiuri.co.jp

## PC省エネ

\* NECが企業向けソフト

「パソコン」は過去3か月間にパソコンがどう使われたか、利用者の行動パターンをキーボードやマウスの動きから記憶・学習する。午前に開かれる定例会議や営業マンが外回りしている時間など利用者がパソコンを使っていない時間を把握。そうした時間帯になると電源を入れたままの状態ならば自動的に「スタンバイ」や「休止状態」に切り替えてムダな電力を使わないようにする仕組みだ。

ソフトはパソコン1台単位で組み込み、1台ずつの消費電力や電力料金、温室効果ガス排出量などのデータ一元管理できる。部や課全社的な排出量の削減目標などを設定、達成できそうにない場合は、社員のパソコンに注意を促すメッセージを出す。自治体や企業で行った実証実験では消費電力が2割超削減できたという。価格は1000台を導入した場合でも年間96万円。1台からでも受け付ける。

**温室ガス排出量  
オフィス44%の増**  
オフィスなど業務部門の温室効果ガス排出量は2007年度で2.4億トと国内全体の18%、産業部門の

・温室効果ガス排出量(2007年)

オフィス(PC) 18%  
工場 35%

・2025年、オフィス(PC等)の消費電力量の試算  
現在の5倍

2025年にはオフィス(PC)からの温室効果ガス排出量は工場のそれを上回る可能性がある

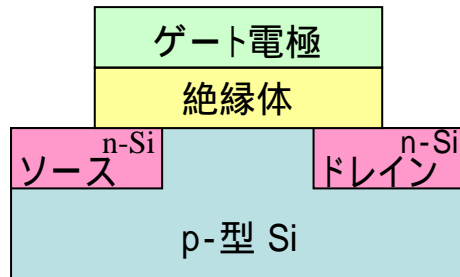
LSIの省電力化は環境問題に直結している

35%を大幅に下回る。しかし、伸び率は90年度比44%増と最大だ。鳩山首相が掲げる排出量削減の目標「20年までに90年比25%減」を達成するには業務部門での大幅な削減が不可欠だ。政府はIT(情報技術)を駆使して家電や情報機器の省エネ化を進める「グリーンIT」を提唱。NECが開発したソフトのように機器の消費電力量を可視化し、使用者に節約を促す対策も重視している。だが、オフィスのパソコン需要は増大すると見られ、25年にはIT機器の消費電力量が現在の5倍になるとの試算もある。

新

# 1. 次世代技術を支える新構造トランジスタ

従来型(プレーナ型)FET(電界効果トランジスタ)

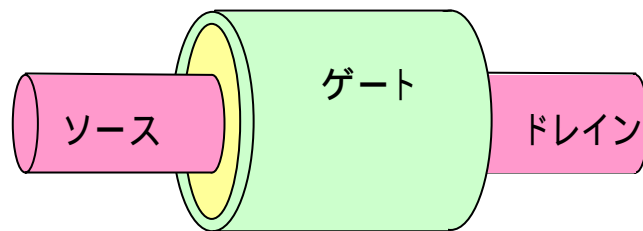


これまでLSIの高性能化・省電力化・高集積化はFET(電界効果トランジスタ)の微細化によって実現されていた

しかしながら微細化を押し進めるLSIの発展は2020~2030年に終焉を迎えると予想されている。

**微細化に伴い漏れ電流増大 LSIの消費電力の大きな部分**

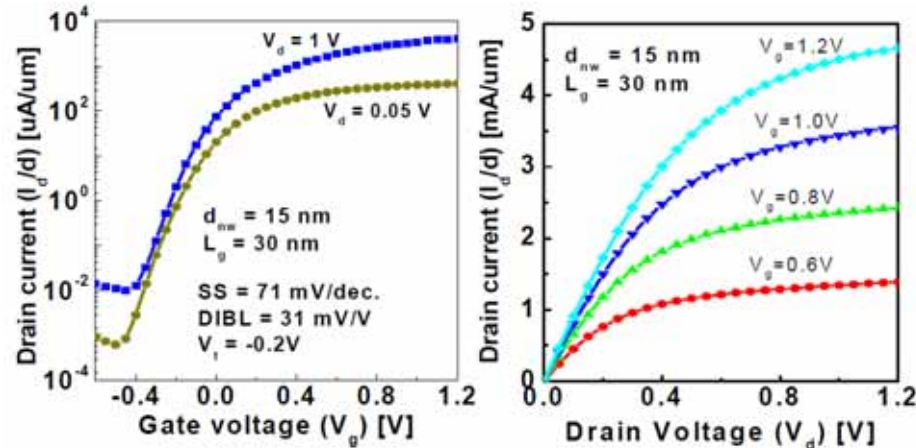
漏れ電流抑制のため新しい構造のトランジスタが模索されている。  
中でもシリコンナノワイヤFETは究極の構造であると有力視されている。



ナノ:量子力学に支配される世界

シリコンナノワイヤFETの解析・設計には量子力学的第一原理計算が不可欠

# シリコンナノワイヤFET



(Samsung, IEDM Technical Digest 2005)

漏れ電流抑制(低消費電力)はもちろん、  
非常に良好なデバイス特性も示す

微細化終焉後の電子デバイス  
として有望視されている

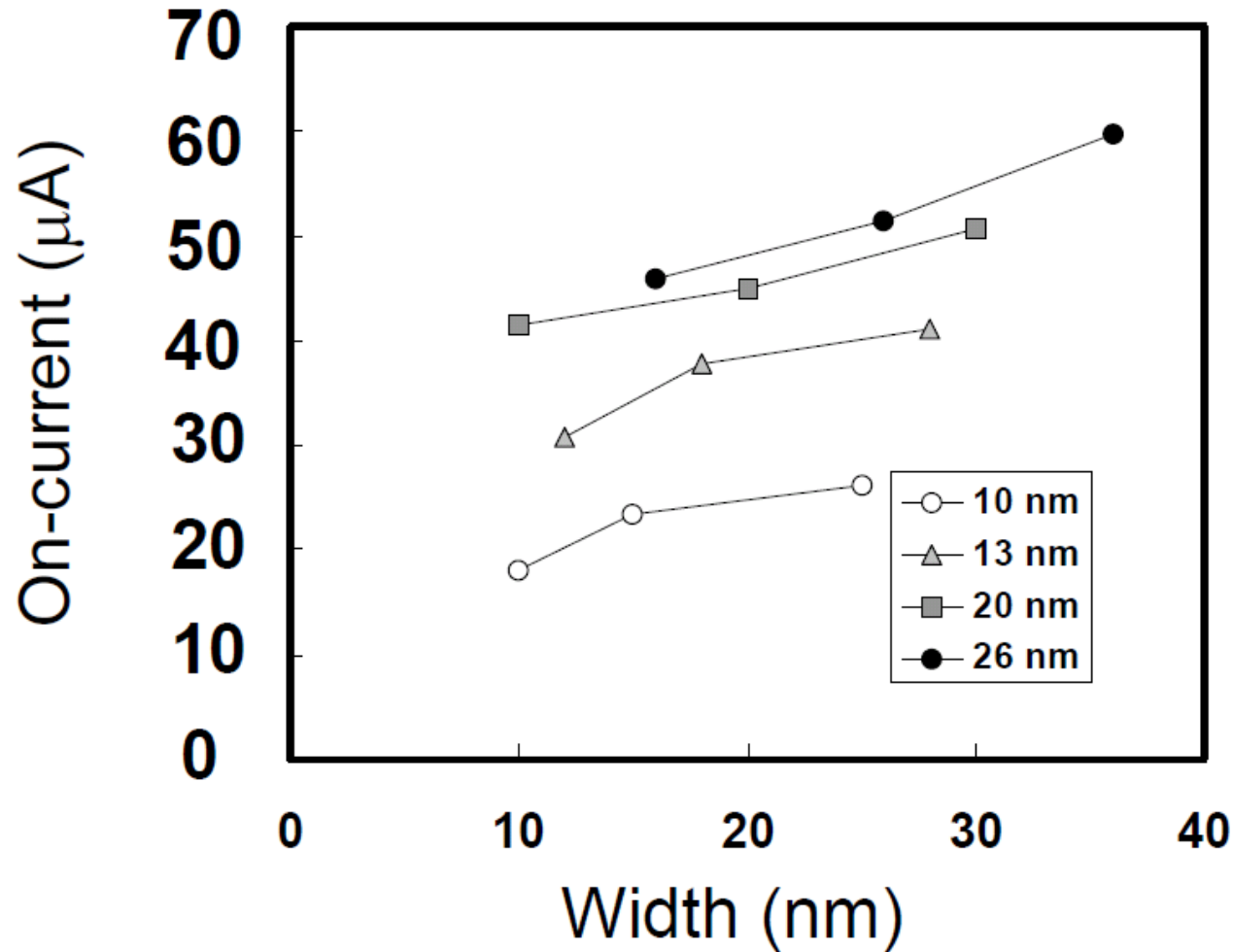
ただし「微細化」すれば高性能化・省電力化・高集積化が実現されるという、  
これまでのようなシンプルなデバイス設計指針が存在しない



量子力学的シミュレーションに基づくデバイス設計指針の作成

大規模第一原理計算が必要不可欠な中核技術

# 岩井グループの最新の結果 高いION電流の物理起源は未説明



ナノワイヤFETの実験結果

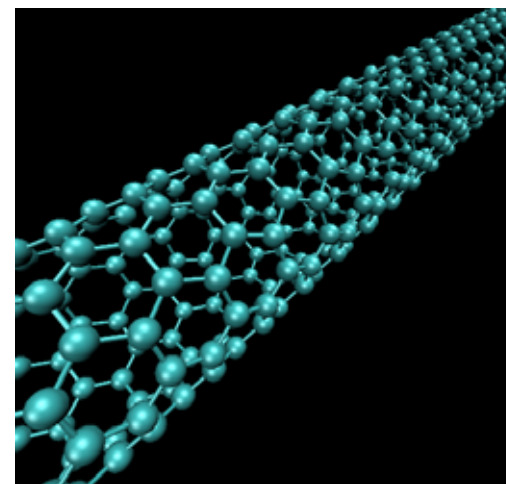
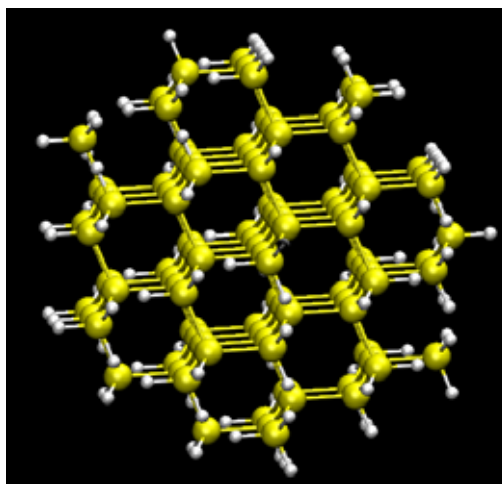
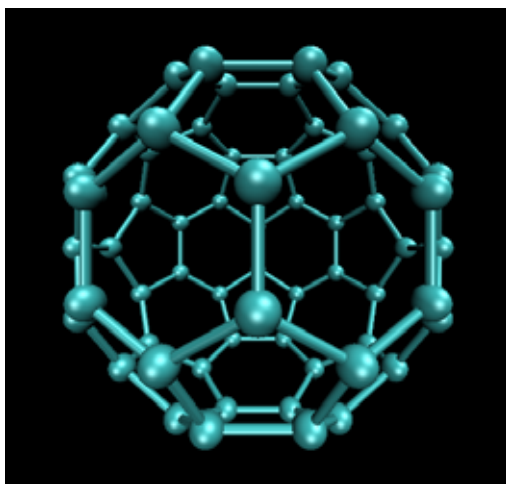
## 2. 量子力学的トランジスタ解析における (大規模第一原理計算)の必要性

電子の運動を支配する量子力学の基礎原理以外の仮定を置かず、  
物質の様々な性質を解き明かす手法

実際の計算には密度汎関数理論 (W. Kohn, 1998年ノーベル化学賞) を用いる

$$\text{コーン・シャム方程式} \quad \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

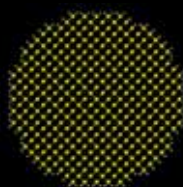
現状では100原子 ~ 1000原子程度のシステムが日常的に気軽に扱えるサイズである





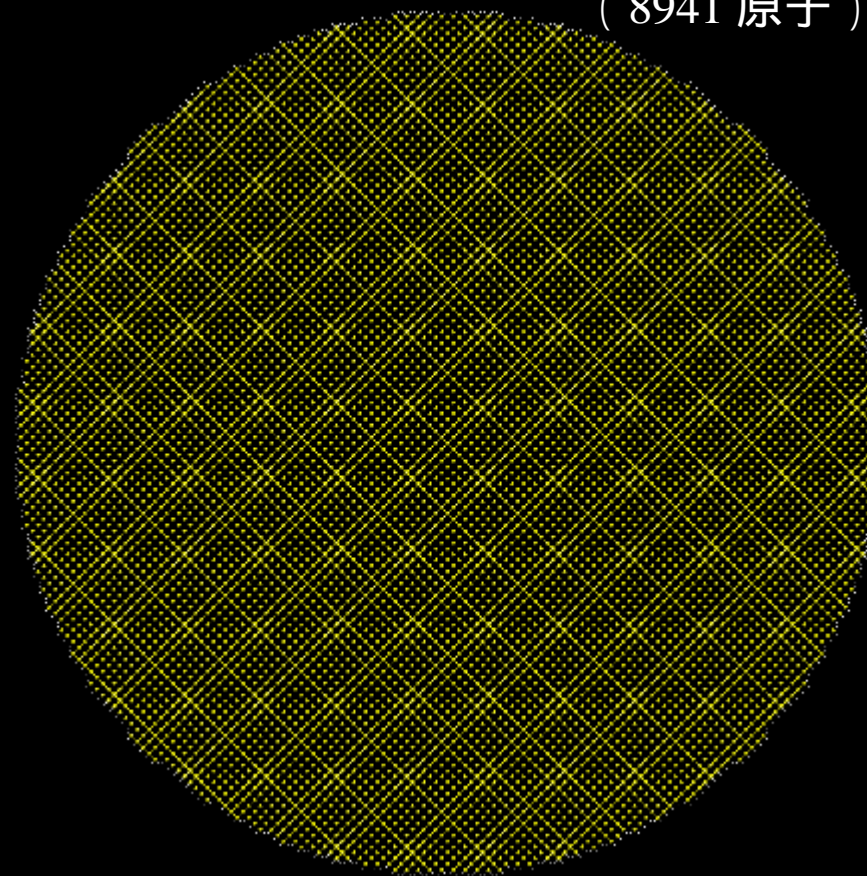
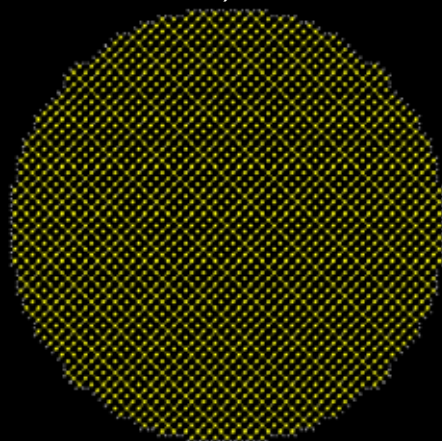
シリコンナノワイヤの第一原理計算 ナノ( $10^{-9}$ )メートルという極微の世界でも原子数は莫大

断面直径 4 nm  
( 425 原子 )



断面直径 20 nm  
( 8941 原子 )

断面直径 10 nm  
( 2341 原子 )

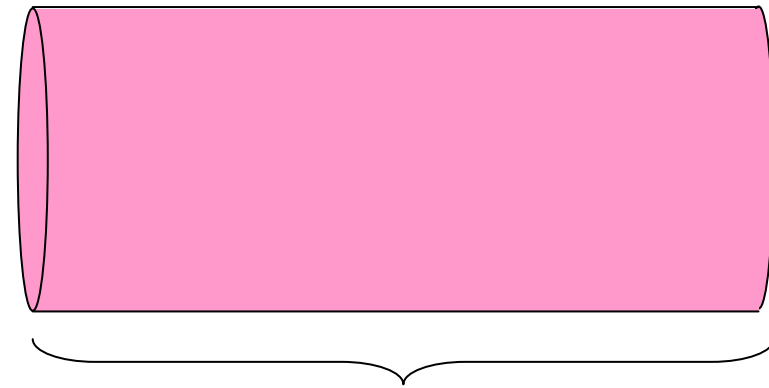


断面サイズ10 nm ~ 20 nm 辺りが  
実用になると目されている

# どの程度の大きさまで必要か？

シリコンナノワイヤ

断面径サイズ  
10 nm ~ 20 nm



長さ 10 nm 以下 (ゲート長)

モデル原子数

直径 10 nm : 2000原子 ~ 46,000原子

直径 20 nm : 8900原子 ~ 178,000原子

このサイズですら、これまで第一原理電子状態計算は不可能であった  
今回我々はこれを可能にした。

さらに次世代スパコンができれば実デバイスサイズのシリコンナノワイヤほとんど全てをカバーできる

### 3. 超並列計算機向け第一原理電子状態計算プログラム「RSDFT」の開発とシリコンナノワイヤーのバンド構造計算(一万数千原子系)

PACS-CS = Parallel-Array Computer System for Computational Sciences



筑波大学計算科学研究センター1F

超並列クラスタ PACS-CS  
ボード



ノード台数	:	2560
CPU	:	Intel LV Xeon EM64T 2.8GHz, 1MB L2 cache
メモリ	:	2 GB/ノード
ネットワーク	:	3次元ハイパークロスバー網
リンクバンド幅	:	単方向 250 MB/s ~ 750 MB/s(3次元同時転送時)
理論ピーク性能	:	14.3 TFLOPS

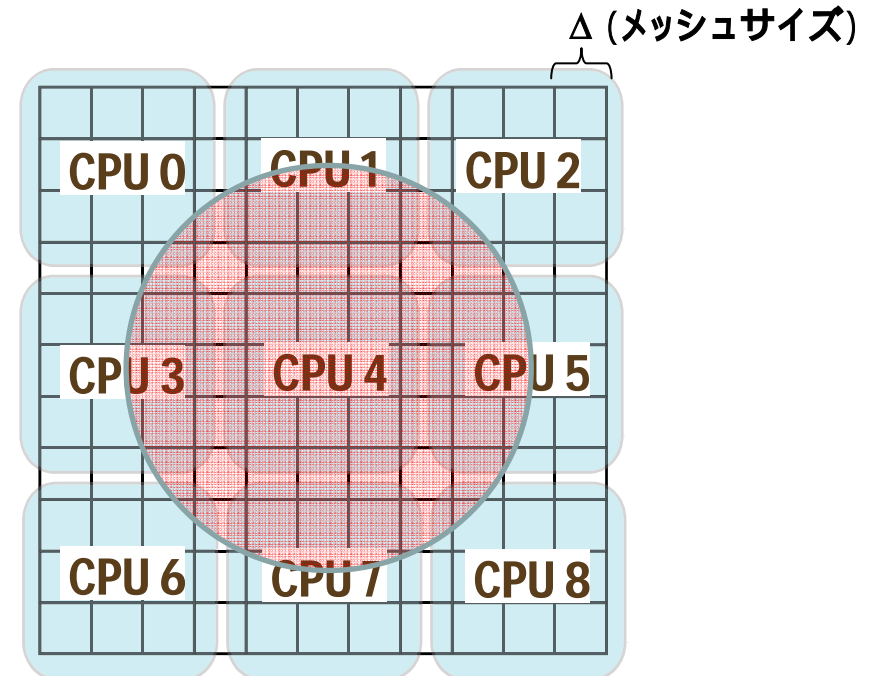
# 超並列計算機を駆使する第一原理計算プログラム RSDFT の開発

( Real-Space Density-Functional Theory )

最先端の超並列計算機的能力を最大限引き出すようなプログラムの開発

計算機工学の最新成果を実装し、1万原子を超える大規模計算を実現

□空間をCPUの数だけの小領域に分割して並列化



# 新アルゴリズムの構築

$O(N^3)$ の演算(プログラム中最も重い演算)は、ピークに近い性能で実行可能

グラムシュミット直交化の計算時間と演算性能

	Time (sec)	GFLOPS/node
Old algorithm	661	0.70
New algorithm	111	4.30

PACS-CSの理論ピーク性能 = 5.6 GFLOPS/ノード

最も重い計算部分はピーク8~9割の性能が出せるアルゴリズム  
(奇跡的な実行性能)

グラムシュミット直交化のアルゴリズム

$$\psi'_1 = \psi_1$$

$$\psi'_2 = \psi_2 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_2 \rangle$$

$$\psi'_3 = \psi_3 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_3 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_3 \rangle$$

$$\psi'_4 = \psi_4 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_4 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_4 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_4 \rangle$$

$$\psi'_5 = \psi_5 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_5 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_5 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_5 \rangle - \psi'_4 \langle \psi'_4 | \psi_5 \rangle$$

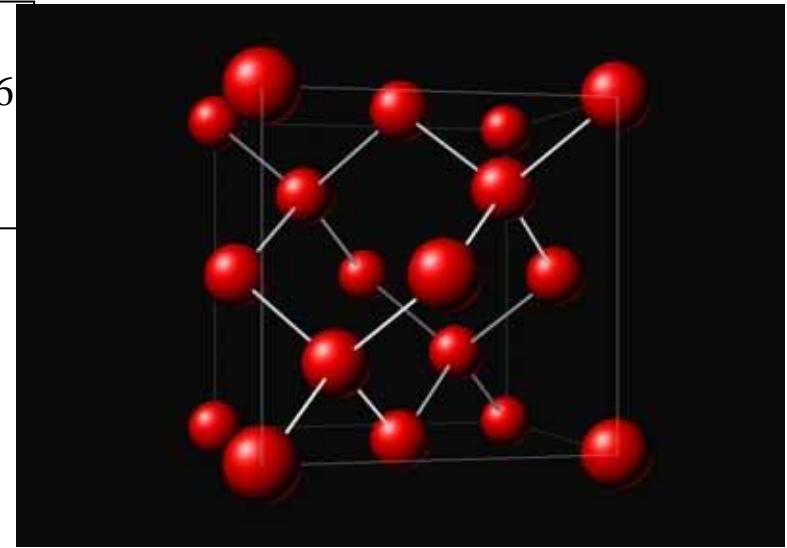
$$\psi'_6 = \psi_6 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_6 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_6 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_6 \rangle - \psi'_4 \langle \psi'_4 | \psi_6 \rangle - \psi'_5 \langle \psi'_5 | \psi_6 \rangle$$

計算をまとめて実行すると  
行列 × 行列 の形で処理できる  
(現在の計算機が最も速く処理できる演算)

T. Yokozawa, D. Takahashi, T. Boku  
and M. Sato, (PMAA'06), (2006)

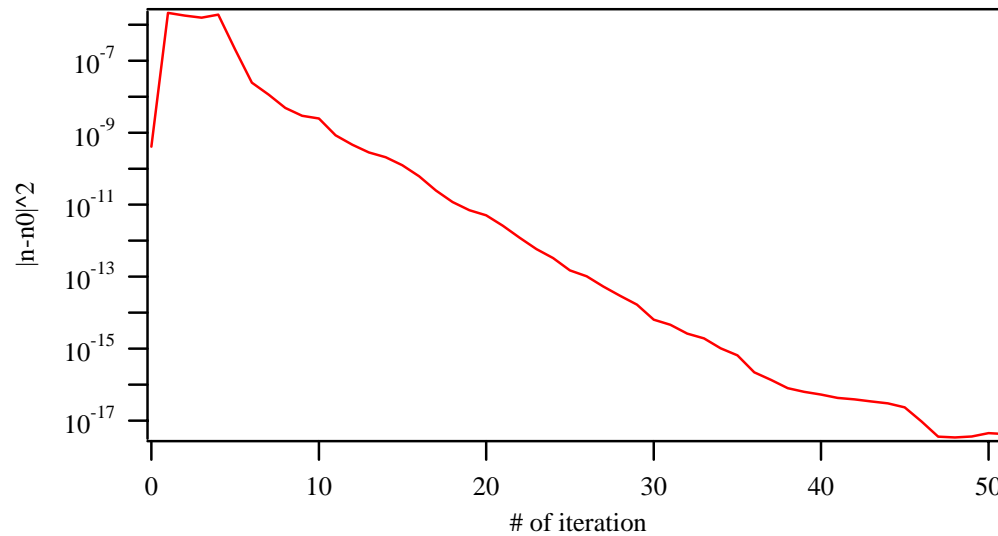
# バルク Si (4096原子)

# of atoms : 4096  
 Grid points :  $96^3 = 884736$   
 # of WF : 8196  
 # of CPU : 256



8 × 8 × 8倍のセル

## 反復計算の収束性



FLOPS = 1秒間に何回演算を行ったか

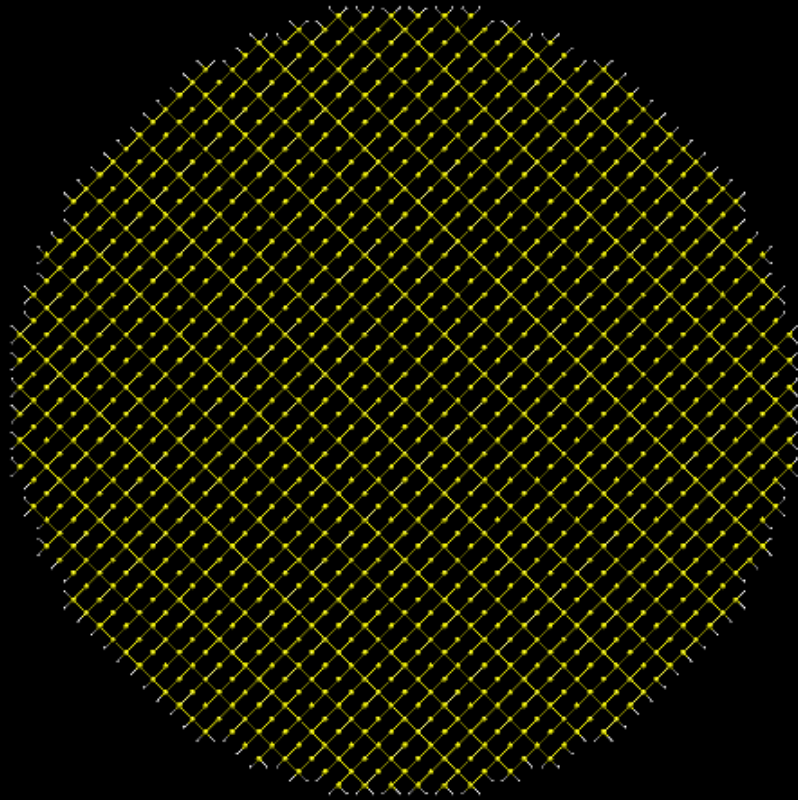
## 1反復当たりの計算時間と演算性能 (×50反復で全計算時間)

	Time (sec)	GFLOPS/node
Subspace diag $O(N^3)$	312	2.27
Gram-Schmidt直交化 $O(N^3)$	140	3.50
Conjugate-Gradient $O(N^2)$	305	0.788
TOTAL	777	1.54

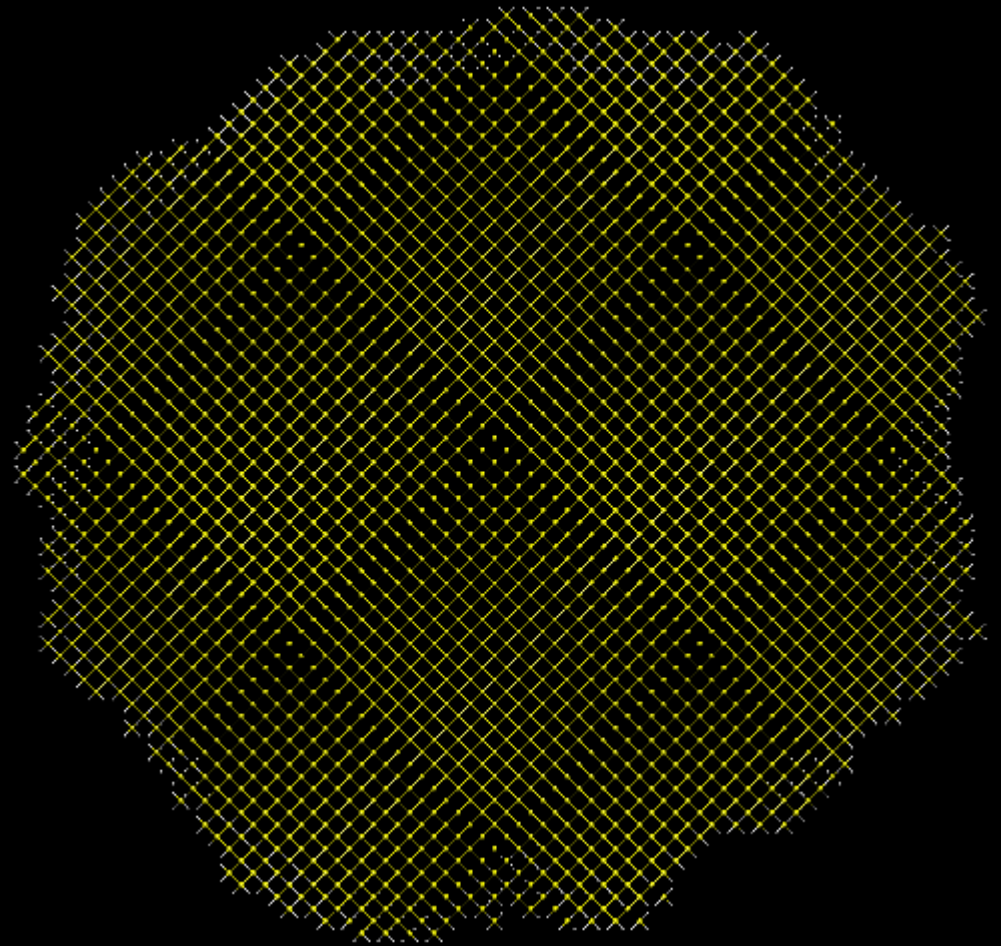
理論ピーク性能 : 5.6GFLOPS/node

# シリコンナノワイヤの電子状態計算

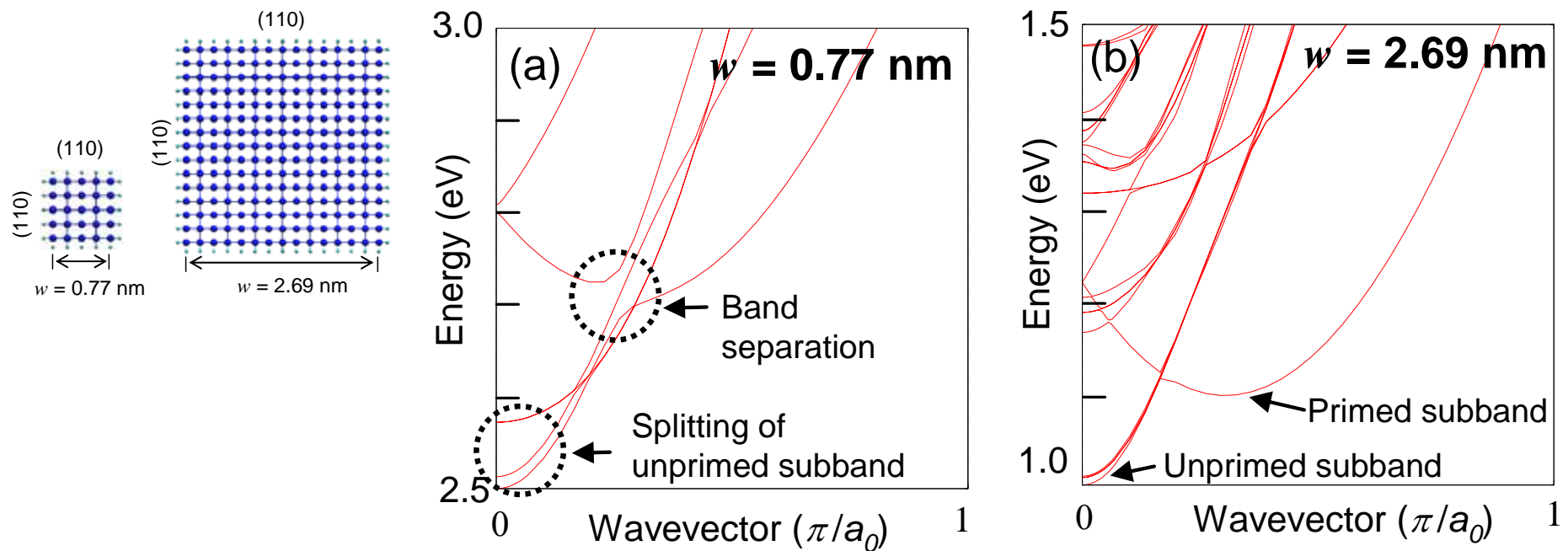
断面径8nm  
長さ0.5 nm (1525原子)



平均径10nm + 表面乱れ  
長さ3 nm (14,366原子)



# シリコンナノワイヤのバンド構造



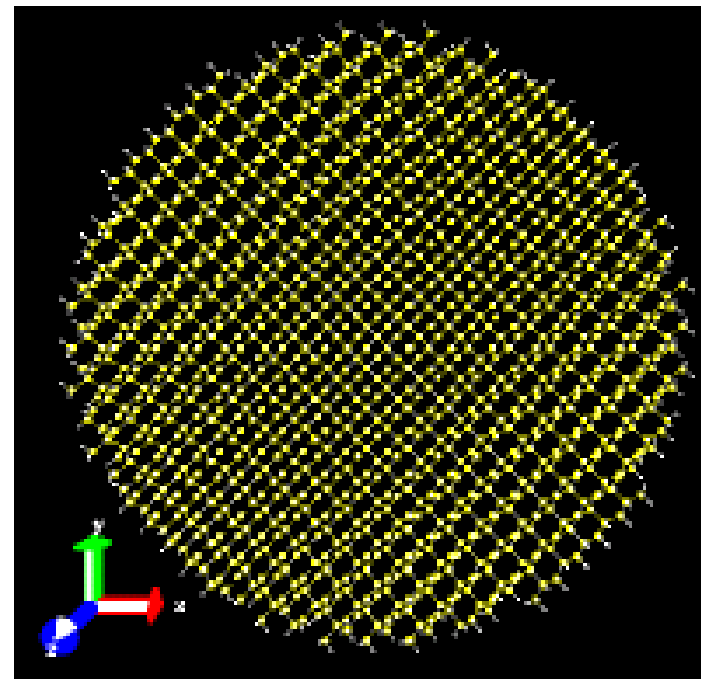
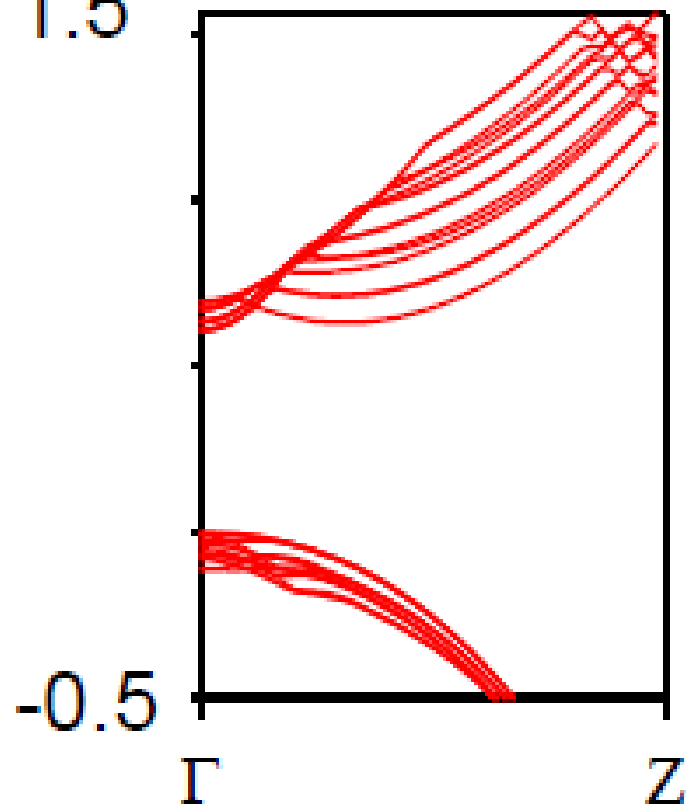
Band structures of [100] SiNWs with  $w$  of (a) 0.77 and (b) 2.69 nm.

Lee et al. JAP submitted



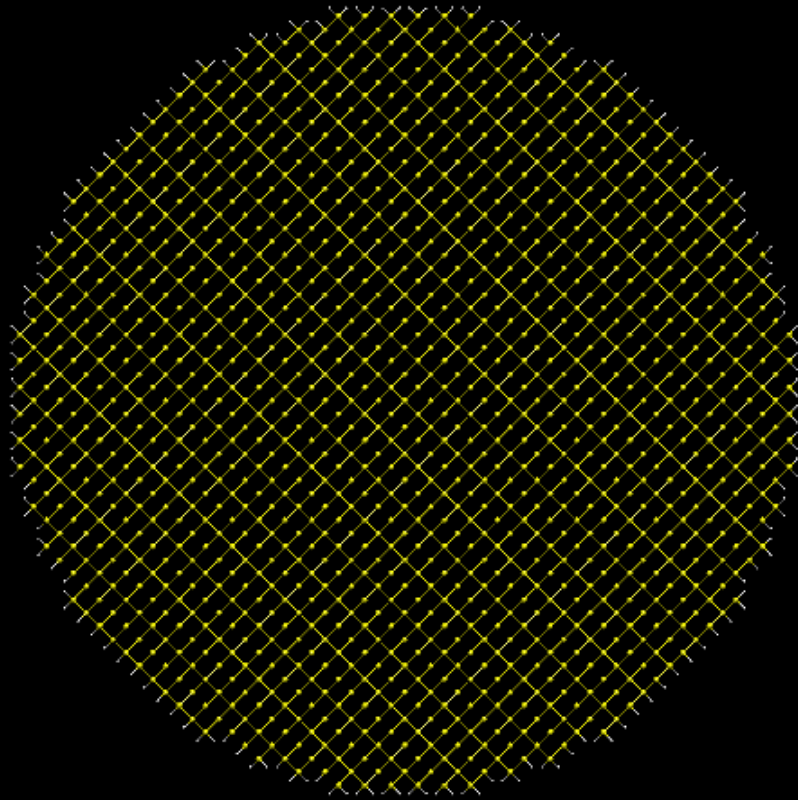
# シリコンナノワイヤーバンド構造(大きなもの)

1.5 eV 径8nmの電子構造計算結果

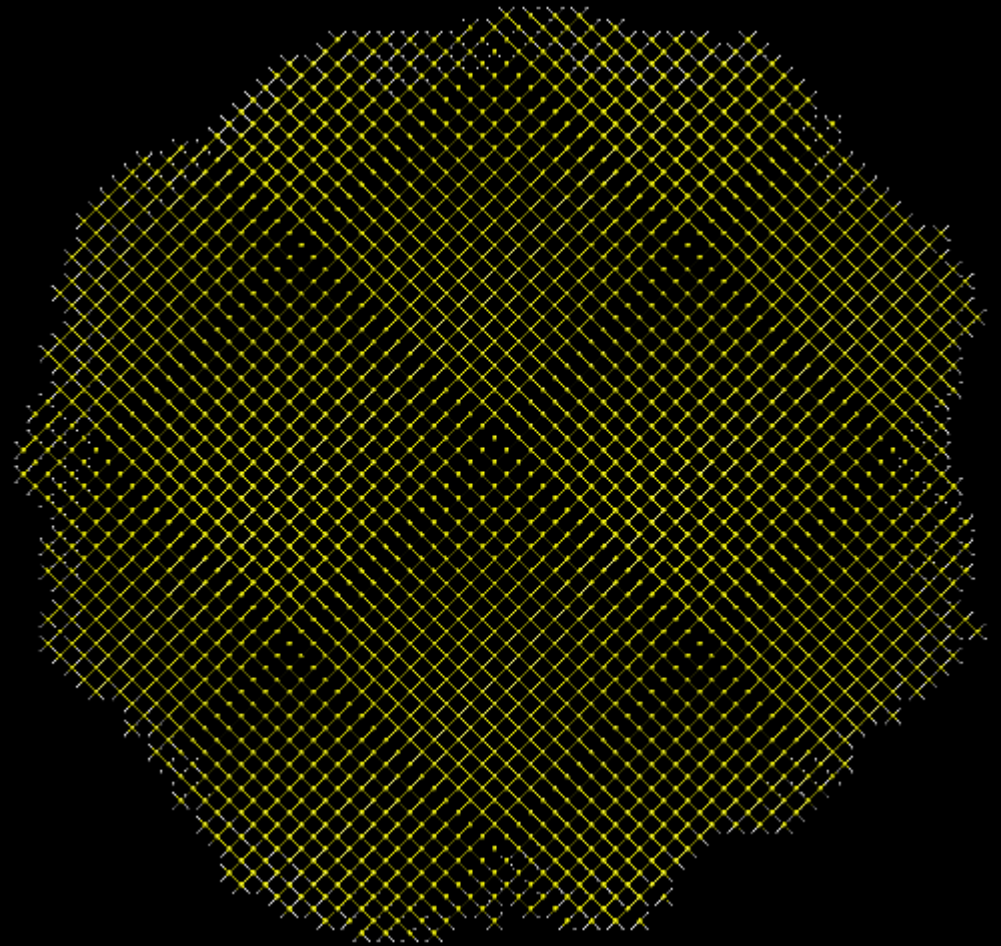


# シリコンナノワイヤの電子状態計算

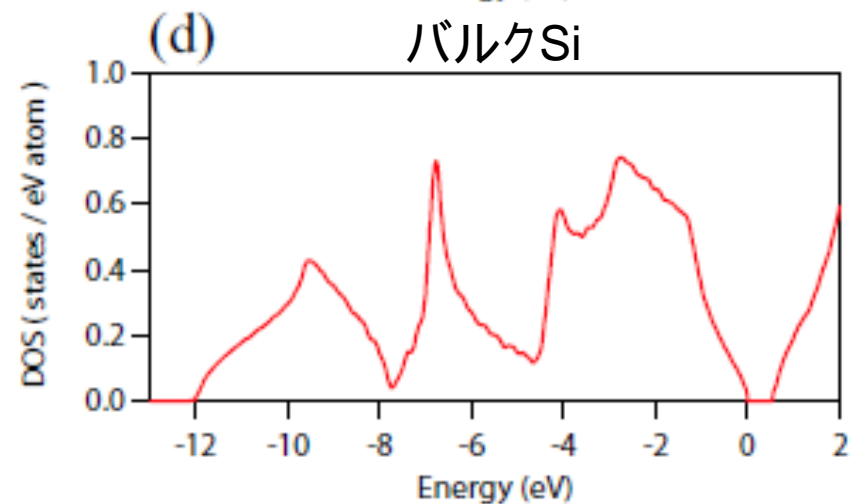
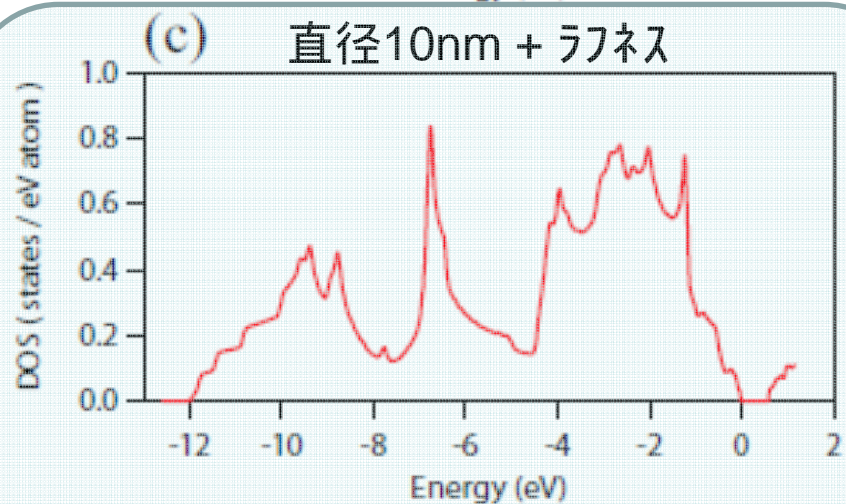
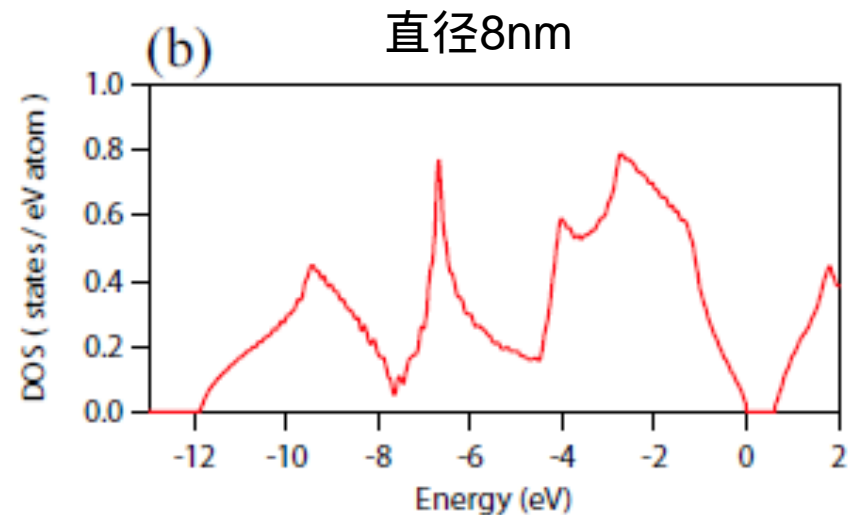
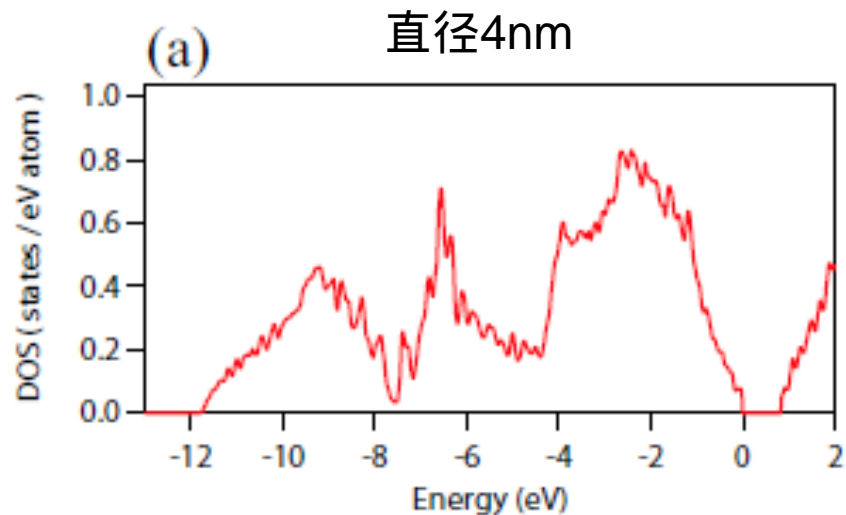
断面径8nm  
長さ0.5 nm (1525原子)



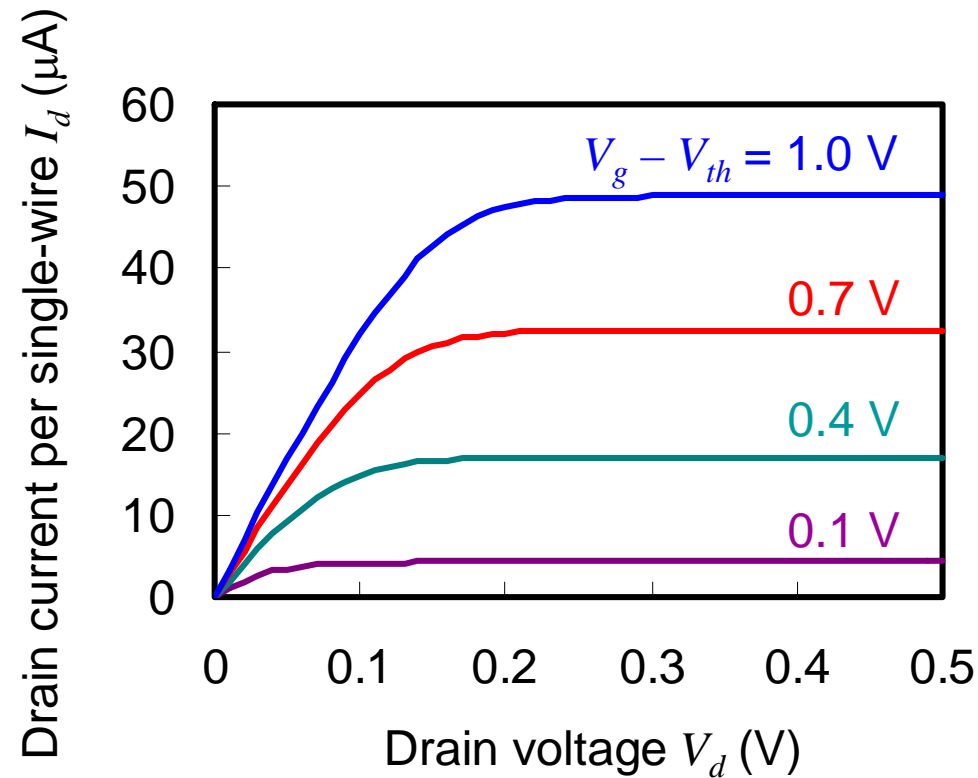
平均径10nm + 表面乱れ  
長さ3 nm (14,366原子)



# 世界最大の第一原理電子状態計算で得られた シリコンナノワイヤの電子状態密度



# ナノワイヤFETのI-V特性 (第一原理バンド計算より)



名取公式を用いた第一原理計算に基づく  $I_d$ - $V_d$  特性  
( $T = 300 \text{ K}$ ,  $d=2.69$ ).

Lee et al. JAP submitted

# 4. 次世代スパコンによる将来デバイスの設計指針獲得に向けて

## 次世代スーパーコンピュータ戦略分野

- ◎ 次世代スーパーコンピュータで、社会的・学術的に大きなブレイクスルーが期待できる分野を厳選
- ◎ 当該分野の利用を重点的・優先的に実施
- ◎ 今後速やかに各戦略分野の研究開発を牽引する「戦略機関」を公募

### 分野1

#### 予測する生命科学・医療および創薬基盤

ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。

### 分野2

#### 新物質・エネルギー創成

物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。

### 分野3

#### 防災・減災に資する地球変動予測

高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。

### 分野4

#### 次世代ものづくり

先端的要素技術の創成～組み合わせ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。

### 分野5

#### 物質と宇宙の起源と構造

物質の究極的微小構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。

# 各分野で期待される成果の例

予測する生命科学・医療および創薬基盤

## 新薬の開発

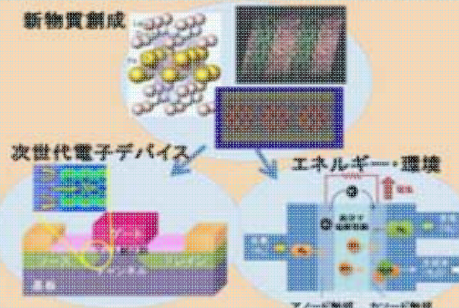


生体分子から細胞、臓器、全身にわたる多階層の生命現象を予測し、副作用のない革新的な医薬品が開発できる。

新物質・エネルギー創成

## 新デバイスとエネルギーの開発

新物質・新現象の探索を基盤とし、次世代電子デバイス開発の指針を与え、クリーンエネルギーの生成の高効率化に資する。



防災・減災に資する地球変動予測

## 台風の進路や集中豪雨の予測



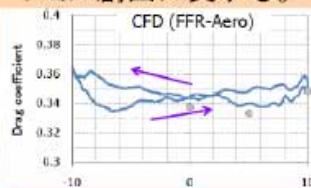
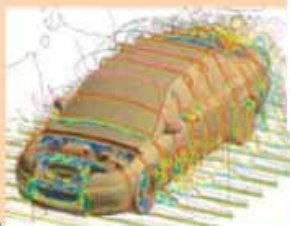
NICAMIによる全球3.5kmシミュレーション

全球雲解像モデルにより台風の進路や集中豪雨の高精度予測が可能となり、効果的な防災・減災対策に資する。

次世代ものづくり

## 設計プロセスの革新

独創的要素技術の創造、組合せ最適化、丸ごと性能評価を可能とし、ものづくりプロセスの革新とイノベーション創出に資する。



非定常空力・振動連成解析による、低空気抵抗、低揺動車の開発

物質と宇宙の起源と構造

## 物質の起源と宇宙の構造形成



ビッグバンに始まる宇宙において、極微の素粒子から元素合成、そして星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を統一的に解明する。

戦略機関代表  
東大物性研

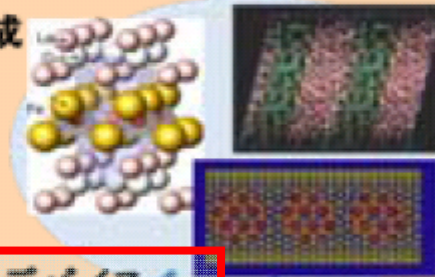
# 次世代スパコン： 次世代デバイスは重要テーマとなっている

## 新物質・エネルギー創成

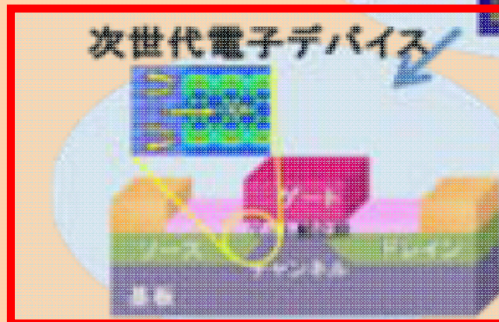
### 新デバイスとエネルギーの開発

新物質・新現象の探索を基盤とし、次世代電子デバイス開発の指針を与え、クリーンエネルギーの生成の高効率化に資する。

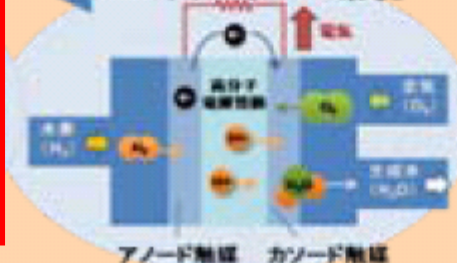
新物質創成



次世代電子デバイス



エネルギー・環境



# 次世代スパコンへの展開

14.3 TFLOPS =  $14.3 \times 10^{12}$  FLOPS (PACS-CS)

10 PFLOPS =  $10.0 \times 10^{15}$  FLOPS (次世代スパコン)

スパコン性能1000倍      原子数10倍の計算が可能！

数万原子～十萬原子の計算が可能

実デバイスサイズ(直径10nm～20nm、ゲート長10nm～5nm?)  
の原子数が次世代スパコンでカバーできることになる！

半導体デバイス設計指針を計算機シミュレーションで与えるという  
新たな可能性が拓ける！



**大規模第一原理計算は次世代の科学技術立国  
日本を支える中核技術となると考えられる**



# 5. まとめ

- 量子力学の基礎原理のみに立脚したシミュレーション規模を従来の10～100倍規模にすることに成功し、シリコンナノワイヤのバンド構造のサイズ依存性を体系的に考察した。
- 本計算技術を用いて一万原子以上から構成されるシリコンナノワイヤのバンド構造解析に成功した。(世界最大規模の第一原理計算)
- 次世代スパコンを用いれば、実デバイスサイズのバンド構造計算、さらにはI-V特性まで予言することは可能である。
- スーパーコンピューターによる量子力学的第一原理シミュレーションが新しいデバイス設計を支え、将来の社会基盤を支える中核技術となると予想される。