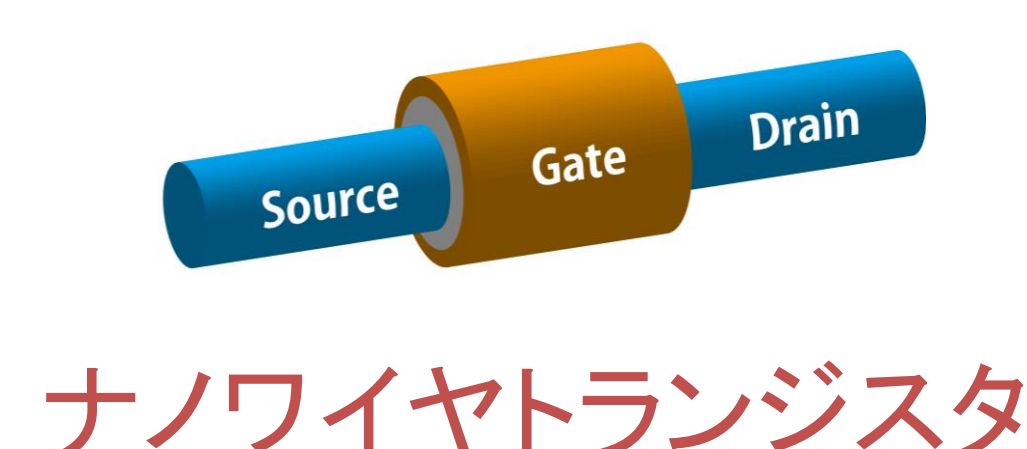


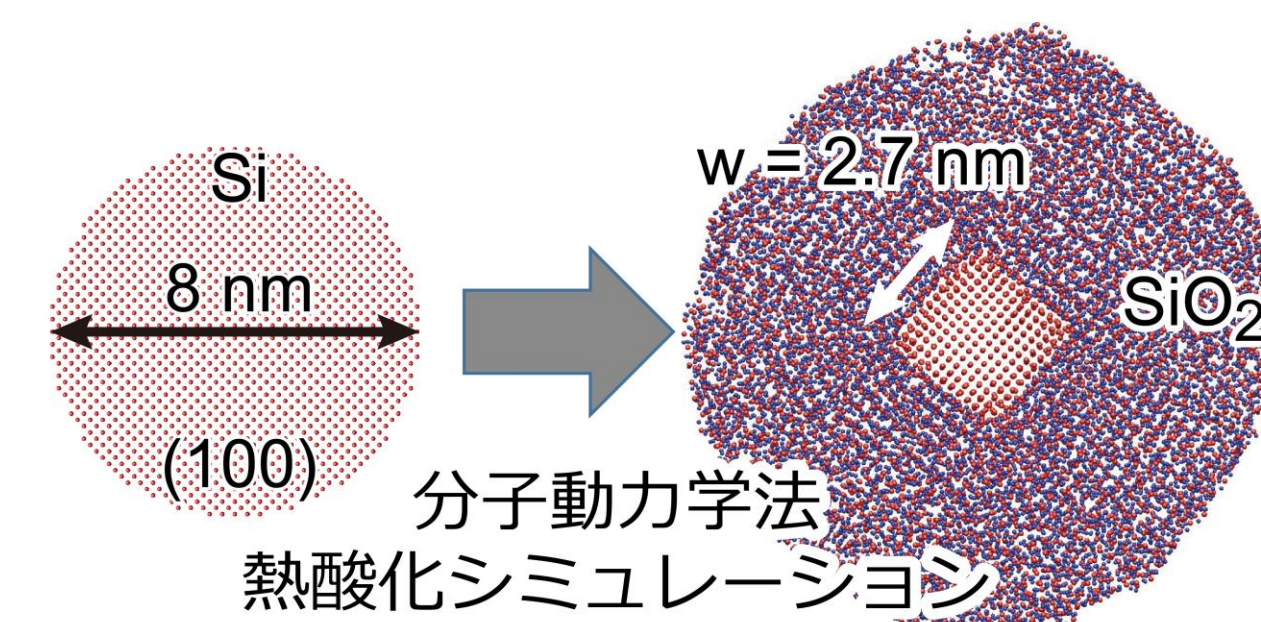
研究目的

ポストシリコンとなる次世代の新材料**ナノワイヤトランジスタ**の性能予測に向けた、スーパーコンピューター支援による**量子輸送デバイスシミュレータ**の開発とその性能評価を研究目的とする。

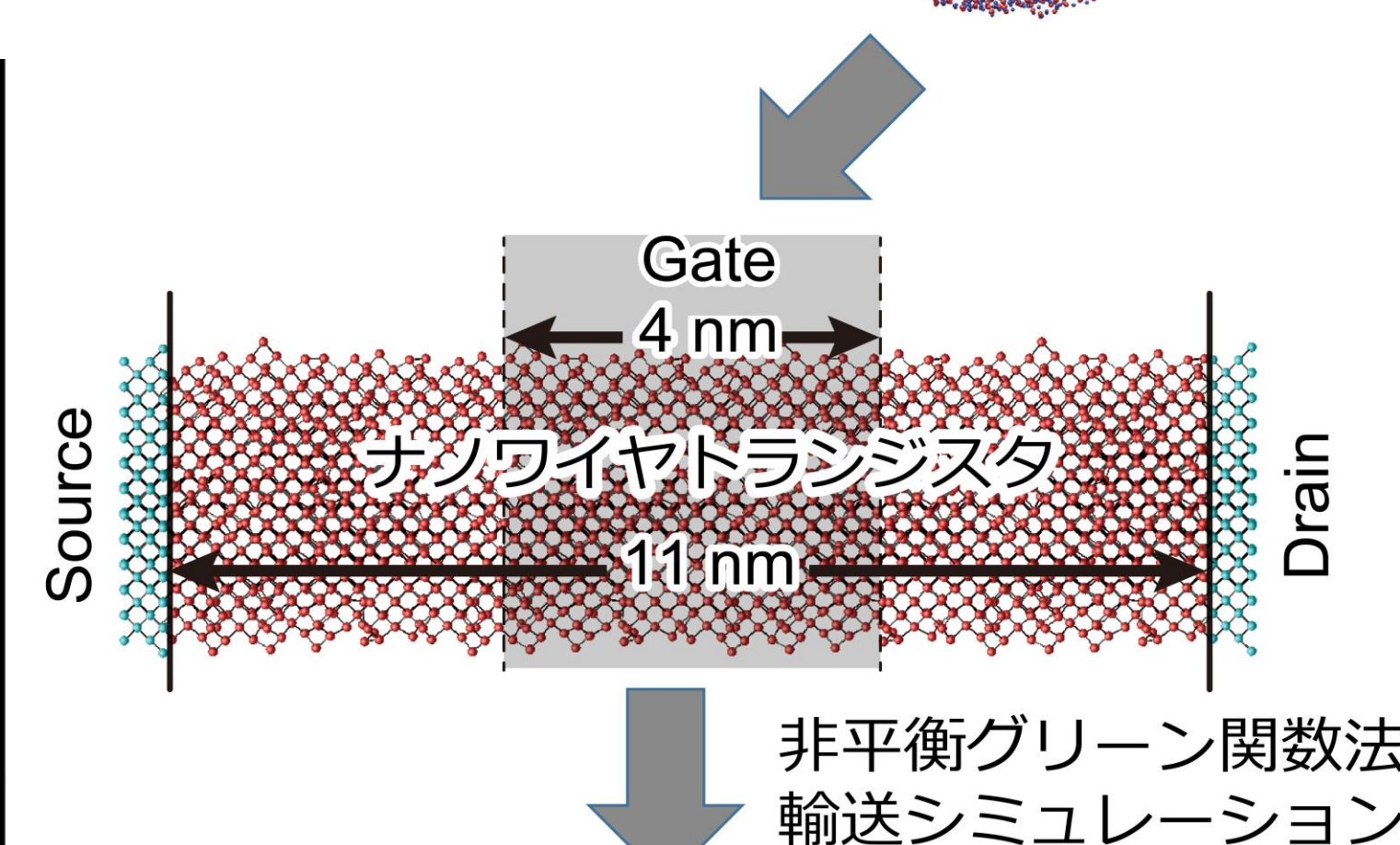
- **ナノワイヤトランジスタ**: 従来型トランジスタでは、ゲート長が短くなると、ゲートの制御性が得られないため、立体構造にする必要がある。その一つにナノワイヤトランジスタがある。
- **量子輸送デバイスシミュレータ**: 電子の輸送方程式とポアソン方程式とを連立させて自己無撞着的に解き、トランジスタ特性を求めるプログラム。



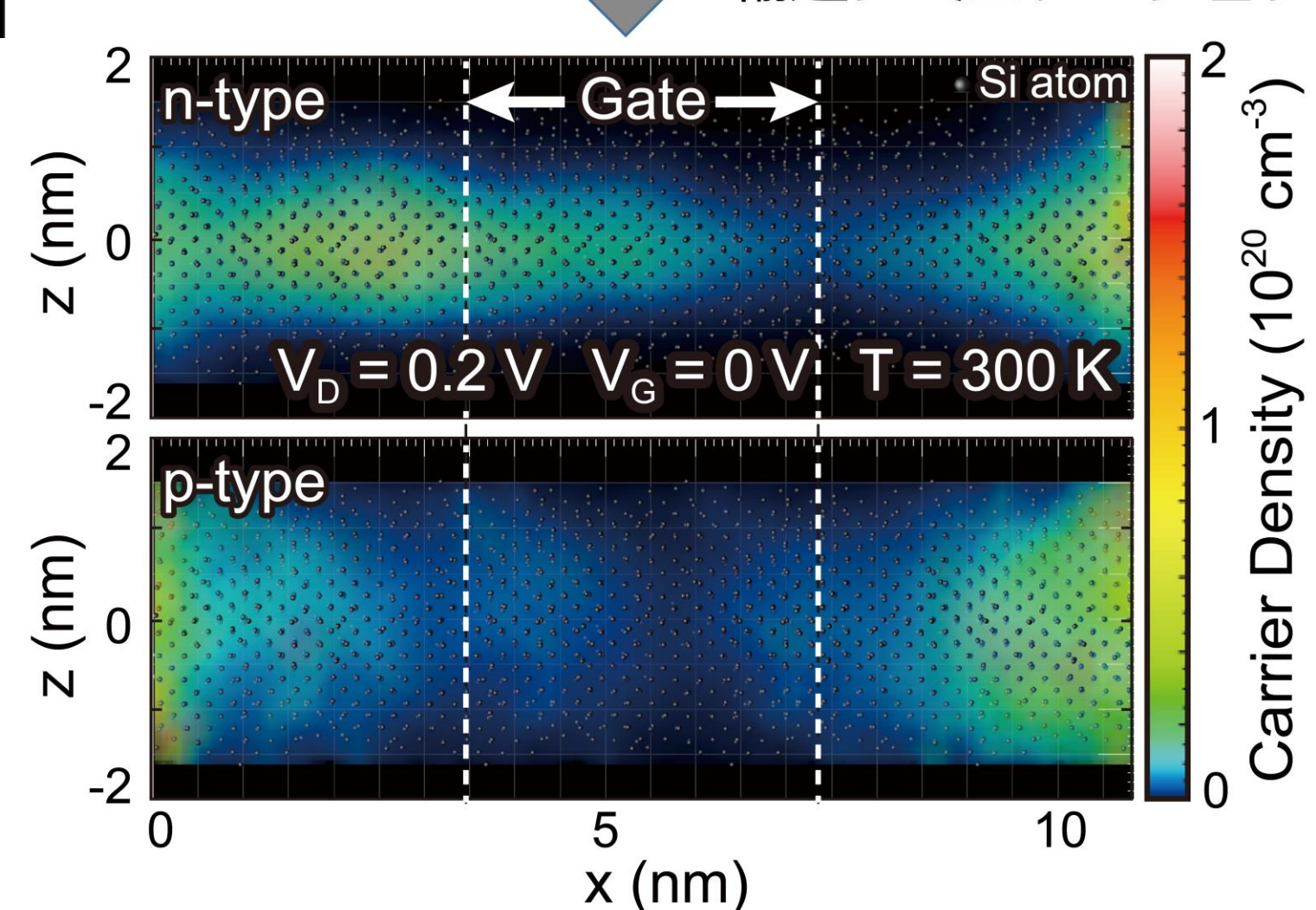
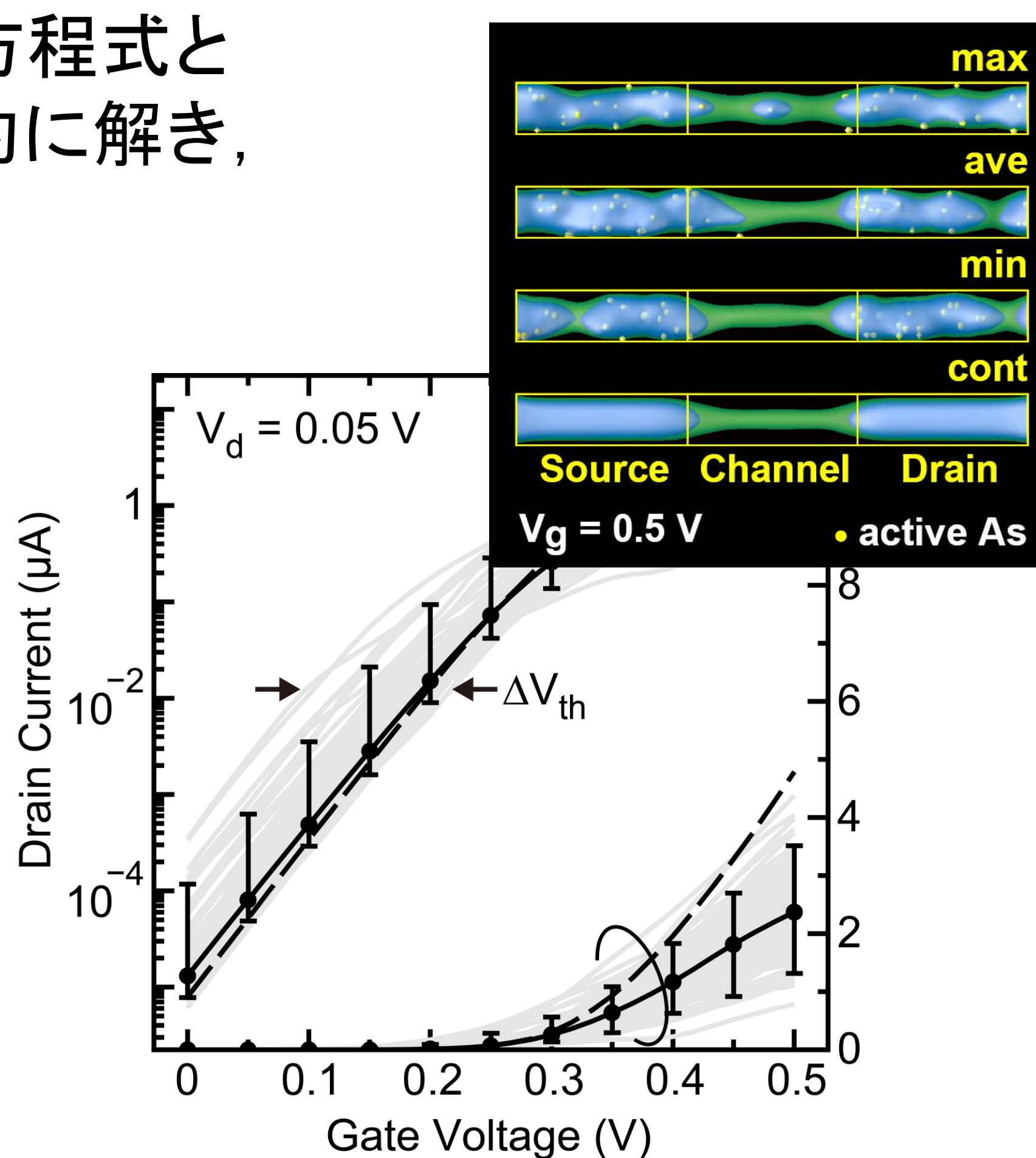
ナノワイヤトランジスタ



分子動力学法
熱酸化シミュレーション



非平衡グリーン関数法
輸送シミュレーション



非平衡グリーン関数法デバイスシミュレーション

原子論から始まる統合シミュレータ: シミュレーション例

研究内容

JST-CRESTプロジェクト「原子論から始まる統合シミュレータの開発」(H21年度～H26年度, 代表者: 森 伸也)において、PCクラスタ上で、MPIおよびOpenMPを用いて、並列に動作する非平衡グリーン関数法に基づく量子輸送デバイスシミュレータを開発した。本研究では、はじめに、

1. JST-CRESTで開発した量子輸送デバイスシミュレータをスーパーコンピューターに移植し、動作チェック・並列計算性能評価を行う。

なお、評価にあたってはポアソン方程式とカップリングした流体モデルも用いる。つぎに、

2. デバイスシミュレーションにおける大規模行列演算の高性能並列計算手法の開発を行い、次世代ナノワイヤトランジスタの大規模量子輸送シミュレーションを実行する。

次世代の新材料デバイスに対して、より柔軟に対応するためには、できるだけ近似に頼らず、第一原理的に計算できるようなプログラムを開発することが望ましい。そこで、

3. 量子輸送デバイスシミュレータと第一原理計算の連成手法を開発する。



森	伸也	大阪大学	研究統括・量子輸送理論
鎌倉	良成	大阪大学	デバイスモデリング
小田中	紳二	大阪大学	数値計算手法
若谷	彰良	甲南大学	高性能計算
美里劫	夏南	大阪大学	非平衡グリーン関数法
鍾	菁廣	大阪大学	並列計算

次世代トランジスタの量子輸送シミュレーション

- ✓ 材料選択
候補となる材料は多数, 選択にはデバイス特性が必要
- ✓ デバイス構造設計
フィン型, ナノワイヤ型, ...