

第一原理密度汎関数法計算による半導体材料設計

Semiconductor Materials Design with First-Principles Density Functional

Theory calculations

東大院物工 ○岩田 潤一

Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Junichi Iwata

E-mail: iwata@ap.t.u-tokyo.ac.jp

トランジスタは微細化が進んで長さスケールがナノメートルオーダーに達し、さらなる性能向上を目指すためには従来と異なる設計指針が必要という状況になりつつある。計算機を用いた数値シミュレーションは、この状況において非常に重要な役割を演じると期待される。

ところで、数ナノメートルというサイズは、原子一個からすると非常に大きなスケールであり、直径数 nm、長さ 10 nm 以下の Si ナノワイヤトランジスタのチャンネルに含まれる原子数を数えると、およそ 1 万～10 万原子という数になる。原子一個一個を積み上げてモデルを作り、電子の量子力学的振る舞いをまともに取り扱う、第一原理電子状態計算に基づく数値シミュレーションにおいて、これまで 10 万原子系は計算を断念せざるを得ないサイズであり、1 万原子系はスーパーコンピュータを数ヶ月占有してようやく計算可能というものであった。しかし京コンピュータの登場でこの状況は大きく変わりつつある。

我々はこれまで超並列計算機を有効活用して、大規模な第一原理電子状態計算を実行するコード「RSDFT」の開発に取り組んできた[1]。RSDFT では、密度汎関数法に基づいて Kohn-Sham 方程式を実空間差分法で解く手法を採用している。これにより、超並列計算機で非常に不利となる高速フーリエ変換の使用を避けることができ、通信コストを大幅に抑え、高い計算性能を実現することができる。開発した RSDFT を用いて、京コンピュータ上で 10 万原子からなる Si ナノワイヤの第一原理電子状態計算の性能測定を行い、その結果、55,296 ノード (442,368 コア、7.07 PFLOPS) のリソースを用いて 40%～60%の演算性能を達成し、一週間程度で収束した電子状態を得ることが可能であることがわかった。また Si ナノワイヤの 1 万～4 万原子程度の系であれば、1000～4000 ノードという小規模なリソースを用いて 1～2 日で収束した電子状態が得ることができた。これは、このサイズの系であれば、ルーチンワークとして第一原理シミュレーションが実行可能となったことを示している。これらの京コンピュータ上での RSDFT の計算結果により、我々は 2011 年度 ACM Gordon Bell 賞最高性能賞を受賞した[2]。

本講演では、これまで開発を行ってきた第一原理計算コード RSDFT の概要、およびこれを用いた Si ナノワイヤの電子状態計算、さらに進んで第一原理計算による半導体デバイス設計の可能性と現状取り組んでいる試みについて紹介する。

[1] J.-I. Iwata *et al.*, J. Comp. Phys. 229, 2339 (2010).

[2] Y. Hasegawa *et al.*, Proceedings of SC'11, 1, ACM, NY, USA (2011).