

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24年 6月 11日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009～2011

課題番号：21510133

研究課題名（和文）

ナノ構造体電気伝導特性シミュレーションプログラムの開発と低消費電力回路の設計

研究課題名（英文）

Development of Nano-device simulator and application to low-power circuit

研究代表者

広瀬 喜久治 (HIROSE KIKUJI)

大阪大学・大学院工学研究科・特任教授

研究者番号：10073892

研究成果の概要（和文）：

超高速電子デバイスの動作特性を解析するための基本計算ソフトウェアとして時間依存第一原理シミュレーション法に基づく解析プログラムを作成した。ルールウェイアルゴリズムによるセルフコンシステント計算とともに非局所項を含むノルム保存擬ポテンシャルを組み込み、高速高精度計算を実現した。周期的電磁場に対する応答特性を解析した。

研究成果の概要（英文）：Development of time-dependent first-principles electronic structure simulation program is performed for analysis of high speed electronic devices. The ruleway algorithm and the norm-conserving pseudopotential method are implemented into the program for high speed and high precision calculation. By testing the response of electronic structure of an atom or a molecule and observing the resonance of electronic structure with the input electronic field, the validity of the program is evaluated.

交付決定額

（金額単位：円）

|        | 直接経費      | 間接経費      | 合計        |
|--------|-----------|-----------|-----------|
| 2009年度 | 1,500,000 | 450,000   | 1,950,000 |
| 2010年度 | 1,000,000 | 300,000   | 1,300,000 |
| 2011年度 | 1,000,000 | 300,000   | 1,300,000 |
| 年度     |           |           |           |
| 年度     |           |           |           |
| 総計     | 3,500,000 | 1,050,000 | 4,550,000 |

研究分野：ナノデバイスシミュレーション

科研費の分科・細目：複合新領域 ナノ・マイクロ科学

キーワード：時間依存密度汎関数法,実空間差分法,鈴木トロッター公式,ルールウェイアルゴリズム

## 1. 研究開始当初の背景

CMOS LSI 回路の微細化が進み、現在（当時）ではプロセスルールは 45nm にまで到達しており、加工技術の限界（原子のサイズ）に近づきつつある。したがって、開発は体積当たりの高集積化を目指したチップ積層化にシフトしはじめている。現在の積層デバイス開発では、モバイル用途向けの小型化・低消

費電力化が先行しているが、それに加えてチップ間通信による信号遅延の削減により高速化も期待できる。ところが、サーバーや科学技術計算のための CPU などのハイエンド集積回路においては、多量の発熱を冷却する機構が必要で、積層化による集積が困難であるため、なお消費電力を下げる努力を必要としている。リーク電流など無駄な消費電力は

高誘電体ゲート絶縁膜や配線層低誘電体など新材料の開発などにより低減されつつある。しかし、MOS トランジスタの ON/OFF 充放電電流による電力消費は回路の動作に不可避であり、消費電力の下限と考えられている。動作速度も数~数十 GHz になってきており ps オーダーもしくはさらに短い時間領域での挙動が重要となってきた。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、(1)ナノ構造体の電気伝導特性を解析するプログラムを開発すること、(2)そのプログラムを用いたシミュレーションで、CMOS LSI 回路の ON/OFF により生じる動的消費エネルギーを回収し発熱低減と省エネルギーの両方を達成するためのナノ電子回路を設計することである。

## 3. 研究の方法

インパルスレスポンス法によるナノ構造体の電気伝導計算手法[8]を基に、50nm 程度のサイズの回路の電気伝導特性を、量子効果を含めて解析するためのプログラムを作成する。このプログラムを用いたシミュレーションにより、エネルギートランスファー・回生回路を設計するとともに、CMOS 回路に要求される仕様 (ON 抵抗値、温度、チャネルや配線の材料など) を明らかにする。

## 4. 研究成果

時間依存シュレディンガー方程式に基づいて数十原子からなる系の電子状態の時間発展計算を目指したプログラム作成を行った。プログラムは時間発展計算に鈴木・トロッター公式による高精度毛さん方を適用した。またレールウェイアルゴリズムによりセルフコンシステント計算を実現した。これらによりタイムステップが比較的長くてもノルムが保存する高精度計算が実現できている。また、原子核ポテンシャルを表すのにノルム保存擬ポテンシャルを用いることにより、波動関数のデータ量増加を抑制しつつ高精度計算を実現した。このプログラムを原子・分子系に適用し周期的電場を加えることにより生じる電子状態の応答を調べることにより、本プログラムの動作を検証した。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 4 件)

1. Masashi Kojo and Kikuji Hirose, Biorthogonal linear-scaling approach for the transcorrelated method,

Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 6 2567 (2009).

2. H.Goto, S.Aiba, T.Suzuki, and K.Hirose, Electron-Transport Simulations of Finite-Biased Jellium Nanowires by the Impulse-Response Method, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 6 2656 (2009)
3. H. Goto, T. Yamashiki, S. Saito and K. Hirose, Direct Minimization of Energy Functional for Few-Body Electron Systems, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience (2009), Volume 6, Number 12, December 2009, pp. 2576-2582(7).
4. Masashi Kojo and Kikuji Hirose, First-principles path-integral renormalization-group method for Coulombic many-body systems, Phys. Rev. A 80, 042515 (2009).

[学会発表] (計 24 件)

1. Akira Sasaki, Kikuji Hirose, and Hidekazu Goto, Electron-electron correlation energy calculations by superposition of non-orthogonal Slater determinants, The 6th Japan-Sweden Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-VI) P-2, Nov.23-26, 2011, Ishikawa.
2. Akira Sasaki, Kikuji Hirose, and Hidekazu Goto, Essentially Exact Groundstate Energy Calculations by Superposition of Non-Orthogonal Slater Determinants
3. 7th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, PII-49, Nov.10-11, 2011, Osaka.
4. K. Inagaki, K. Hirose, Y. Morikawa, and K. Yasutake, First-Principles Analysis on Si(001) Etching with Hydrogen Radicals, Fourth International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology 3. 4, Oct. 31-Nov.2, 2011, Osaka.
5. A. Sasaki, K. Hirose, and H. Goto, Electron-Electron Correlation Energy Calculations by Superposition of Non-Orthogonal Slater Determinants P25, Fourth International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, Oct. 31-Nov.2, 2011,

- Osaka.
6. 江上喜幸, 広瀬喜久治, グラフエンにおける動的電子輸送プロセスの第一原理研究, 日本物理学会第 67 回年次大会 24pSB-7, 2012. 3. 24-27, Nishinomiya.
  7. 佐々木 晃, 三長 裕, 広瀬喜久治, 後藤英和, 非直交基底による多電子状態計算手法の開発, 分子科学討論会 2P104, 2011. 9. 20-23, 札幌市.
  8. 佐々木晃, 広瀬喜久治, 後藤英和, 非直交基底による多電子状態計算手法の開発, 理論化学討論会 2P24, 2011. 5. 12-14, 岡山市.
  9. 佐々木晃, 広瀬喜久治, 後藤英和, 非直交基底による電子相関エネルギーの高精度計算手法, 日本物理学会 2011 年年次大会 28aPS-21, 2011. 3. 25-28 新潟市.
  10. Akira Sasaki, Kikuji Hirose and Hidekazu Goto, Electronic Structure of Quantum Dots: Direct Energy Minimization Approach, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, PSI-67, May 30- June 4, 2010, Osaka.
  11. A. Sasaki K. Hirose and H. Goto, Electron-Electron Interactions in Few-Electron Quantum Dots: Direct Energy Minimization Approach, Third International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, P43, November 24, 2010, Osaka.
  12. M. Kojo and K. Hirose, Role of Correlation Effects in Many-Electron System: Toward Overcoming Unreliability Problems of Density Functional Theory, Third International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, P78, November 24, 2010, Osaka.
  13. M. Kojo and K. Hirose, Role of Correlation Effects in Many-Electron System: Toward Overcoming Unreliability Problems of Density Functional Theory, Third International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology 3. 4, November 25, 2010, Osaka, Japan
  14. 稲垣耕司, 第一原理分子動力学シミュレーションによる固体表面現象の解析, 第 1 回表面物理若手勉強会, 2010 年 11 月 7 日, 吹田市.
  15. H. Goto and K. Hirose, Direct Energy Minimization of Few-Body Electron Systems in the Real-Space Finite-Difference Scheme, 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium Nano-Advanced Materials Design - From Nano-Structure to Nano-Functionality -, P2-23, September 1-3, 2009, Osaka.
  16. Kouji Inagaki, Ryota Kanai, Kikuji Hirose, and Kiyoshi Yasutake, First-principles molecular-dynamics analysis on hydrogen coverage in chemical vapor deposition of silicon thin film, The 12th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN12) P24, October 26-28, 2009, Beijing, China.
  17. S. Sahara, K. Hirose and H. Goto, Electron transport through nanostructures in magnetic fields: A practical scheme in the real-space finite-difference Formalism Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology P41, November 25-26, 2009, Osaka.
  18. K. Inagaki, R. Kasai, K. Hirose and K. Yasutake, First-principles molecular-dynamics simulation of reaction in CVD Si epitaxial thin film growth process -hydrogen coverage dependence on incident radical temperature-, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology P42, November 25-26, 2009, Osaka.
  19. M. Kojo and K. Hirose, Nonadiabatic first-principles calculations coupled with correlation effects, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology P45, November 25-26, 2009, Osaka.
  20. H. Goto and K. Hirose, Electronic structure of quantum dots: Direct energy minimization in the real-space finite-difference scheme, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology P46, November 25-26, 2009, Osaka.
  21. 古山健介、稲垣耕司、広瀬喜久治、後藤英和, 第一原理計算による色素増感型太陽電池の新色素設計手法のためのプログラム開発, 日本物理学会 2009 年秋季大会 28aPS-29, 2009 9 月 25 日-28 日, 熊本市.
  22. 佐原翔太、広瀬喜久治、後藤英和, Impulse-Response 法によるナノ構造体の電子輸送シミュレーション IV, 日本物理学会 2009 年秋季大会 28aPS-21,

2009年9月25日-28日, 熊本市.

23. 古城仁士、広瀬喜久治, PIRG法に基づくクローン多体系の第一原理計算手法の開発, 日本物理学会 2009年秋季大会 27pQF-8, 2009年9月25日-28日, 熊本市.
24. 後藤英和, 電子・原子・分子の世界のコンピュータシミュレーション(招待講演), 第21回中国四国伝熱セミナー 概要集 pp16-27, 2009.9.25-26, 愛媛.  
[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

広瀬 喜久治 (HIROSE KIKUJI)  
大阪大学・大学院工学研究科・特任教授  
研究者番号: 10073892

### (2) 研究分担者

後藤 英和 (GOTOU HIDEKAZU)  
大阪大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 80170463

稲垣 耕司 (INAGAKI KOUJI)  
大阪大学・大学院工学研究科・助教  
研究者番号: 50273579