

# 大規模シミュレーションを活用した新奇ナノ炭素による量子デバイスの創案に関する調査研究

## Survey Research on Development of Future Nano-Carbon Quantum Devices through Large-scale Simulations

一般財団法人高度情報科学技術研究機構  
中村 賢、荒木 拓海、手島 正吾

これまでコンピュータやインターネットの発展はシリコンデバイスの微細化による高速化によって支えられてきた。しかしシリコンデバイスは特性面で理論値限界に近づいている。こうした状況の下、ナノ炭素による量子デバイスがシリコンデバイスの後継として期待されている。そこで昨年度、新技術振興渡辺記念会より科学技術調査研究助成を受け、ナノ炭素による量子デバイス開発の動向調査を実施した。調査は初めに近年の新奇ナノ炭素の複合構造からなる新量子デバイスの研究開発動向に焦点を当て進めた。次に量子効果の把握が可能な大規模シミュレーションを試行的に活用し、新奇ナノ炭素による量子デバイスの実現可能性を評価した。本誌ではその内容の一部を紹介する。

### 1. はじめに

これまでRIST東京事業所では、大学との共同研究によりスパコンプロジェクトでソフトの開発および大規模高速化、企業との共同研究によりナノ分野では次世代デバイス・新素材のシミュレーション先行研究など、スパコンを活用したシミュレーション技術、応用分野で、活動を続けている。

昨年度、新技術振興渡辺記念会より科学技術調査研究助成を受け、次世代の量子デバイス開発の調査研究を実施したので、その内容の一部を本誌で紹介する。

米国、欧州、中国等は、大規模な先端科学シミュレーションが自国の科学技術、産業の国際競争力の向上に効果があることに注目し、近年、各国ともに戦略的な国家基盤技術として高性能スパコンを導入しその利用環境の整備を急速に図っている。しかし、超高速スパコン開発は、近年、大きな技術課題に直面している。具体的には、微細化による性能、集積度、電力効率の向上を図ってきたプロセッサにおいては、トランジスタのゲート

幅が数ナノメートルの微細化限界に近づき、トンネル量子効果による漏洩電流、電力消費の増大、高温化のために、ムーアの法則に沿った性能の伸びは期待できなくなった。このため、これを補って演算の高速処理性を向上させるため、プロセッサの大規模な並列処理に活路を求め、いまや約百万個から数億個程度の並列状態に至ろうとしている。このため、各プロセッサ間のデータ通信、メモリとのデータ転送等において、逆に電力を消費し、さらに数学的にも難しい複雑なアルゴリズムを利用者に要求するジレンマに陥り込んだ。

こうした状況から抜け出すためには、わが国は独創的な新プロセッサ開発を図り、国際競争力の強い新世代の高性能スパコンの開発を進める必要がある。新世代スパコンの技術要求度の高い新プロセッサを開発するためには、その基本となる低コスト、低電力、超高速応答性、ナノスケールの微細化を有する独創的な新しいデバイス、例えば、量子効果を含む超高速スイッチ性能を有する新量子デバ

イスを創案することが必要である。新しい量子デバイス開発においては、従前のシリコン系技術基盤に捉われず、且つ中国、韓国等にキャッチアップされ難い非シリコン系の特異な新奇材料の活用がポイントとなる。既に、2012年、IBMは先行的にシリコンでは限界といわれるゲート幅10ナノメートル以下のプロセッサをカーボンナノチューブで実現する開発を開始している。

わが国が得意とするナノテク分野においては、最近、量子的に興味深い電子特性を発現する新奇ナノ炭素の構造の存在がシミュレーション研究から明らかになってきた。例えば、ナノチューブ、グラフェン、等の複合構造においては量子効果を含むバリスティック電子伝導性、選択的な経路の電子伝導、形状選択による半導体的な電子状態の設定など新しい量子デバイスの候補となりうる、応用性の高い特性が得られている。

調査研究の一環として、RISTでは、基礎研究として、ナノ炭素複合構造体のバリスティック電子伝導性特性を大規模シミュレーションを活用して、分析・評価を実施したのでこれらを紹介し、最後に全体のまとめを述べる。

## 2. 量子デバイスの調査研究

ITRSの資料 (<http://semicon.jeita.or.jp/STRJ/ITRS/2011/>) から、近年のナノ炭素デバイスに関する研究開発や課題を調べた。ITRSは2年ごとに世界の半導体に係わる研究者や企業が参画し作成する、研究開発から実用までのロードマップである。このロードマップを基に、世界の研究者から企業までが膨大な費用の掛かる半導体関連の研究開発を効率的に実施している。特に量子デバイスに係わる章は、新探究デバイスと新探究材料の章である。

ITRSでは、情報処理技術の基盤である半導体技術を今後もスケール可能とする有力な候補として「炭素を基盤とするナノエレクト

ロニクス」を選んでいる。MOSFETに用いるカーボンナノチューブやグラフェンの開発には集中的な研究が必要であるが、それらはCMOSを超えた新しい情報処理のパラダイムの発見につながる基盤技術や科学的な知見を与えることになる。

炭素を基盤とするナノエレクトロニクスの領域は2つの関連したトピック（カーボンナノチューブとグラフェン）に分けることができる。

カーボンナノチューブは、 $sp^2$ 軌道で結合した炭素原子からなる層が単層ないし多層のカイラリティの異なる柱状構造を形成することで、金属的ないし半導体的特性を示す。カーボンナノチューブのMOSFET応用に関する研究では、カーボンナノチューブがかなりの距離にわたって弾道的な伝導特性を示す優れた電子伝導特性を有することが示されている。柱状のカーボンナノチューブを縦型MOSFETに用いることで、「ゲートオールアラウンド（ゲートをベースで囲う構造）」というトランジスタの理想的なMOSFET構造を実現でき、それによりチャネルの静電状態の理想的な制御を実現できる。これにより、短チャネル効果（DIBL：縮小化による電流の漏れ）を最小にできる。カーボンナノチューブはまた、60mV/decよりも小さいサブスレッショルドスロープを実現可能なバンド間トンネルMOSFETにも適用可能であり、低消費電力動作に繋がる。しかし、CNT-MOSFETの主要な課題は、位置やその精度、カイラリティ、伝導度、直径、単層・多層、エネルギーバンドギャップなどを制御しての成長プロセスが無いことである。

グラフェンは、 $sp^2$ 軌道で結合した炭素原子が単一の平面層を形成する。グラフェンナノリボンは、カーボンナノチューブを縦にカットして開いた $sp^2$ 軌道で結合した炭素原子からなる単一原子層リボンないし平面と見ることができる。CNT MOSFET同様、グラ

フェンナノリボンMOSFETは、アナログやRF应用到に適した弾道的電子輸送特性と優れたMOSFET特性を示す。しかしながら、カーボンナノチューブでは、必要な $I_{on}$ 電流を得るために複数のCNT MOSFETを平行に結合する必要があるのに対して、GNR MOSFETでは、その幅を拡げることにより必要な $I_{on}$ 電流を達成できるというメリットがある。グラフェンは、このほかにも疑似スピンや有効電荷質量ゼロと言った新しい物理現象を示し、これらを利用することで、情報処理における独立した新しい電荷移動型のパラダイムを実現できるかも知れない。グラフェン開発における主要な課題は、適切な基板上に大面積のグラフェン膜をエピタキシャル成長させる適当なプロセスが無いことである。また、MOSFETのチャネルを原理的にオフできないことはGNR MOSFETをデジタルロジック素子として用いることを現状では不可能にしており、主要な課題となっている。

### 3. 量子デバイス研究を促進する大規模シミュレーション

近年、半導体結晶成長技術と微細加工技術の急速な進歩により、1次元材料の中には、そのスケール長が電子の平均自由行程と同程度の大きさの線材が作れるまでになった。中でもカーボンナノチューブなどのナノ炭素構造体は、数nmという微細な構造を持ち、ナノエレクトロニクス素子への応用が期待されている。しかし、非常に微細な構造のために取り扱いが困難であり、特に電子デバイスへの応用に必要な加工の指針及び電気抵抗などの物性値を高い精度で実験から知ることは難しい。こうした点で設計・加工の指針や構造特有の量子伝導特性を評価できるシミュレーションの役割は非常に重要となってくる。

量子デバイス研究を加速的に進歩させるためには、大規模シミュレーションを活用し、

量子論的効果を適切に導入する、新しいモデル・解析法・アルゴリズムが必要である。そして、エクサスケールの超大規模高速計算機はさらに研究を加速させる助けとなるであろう。

RIST東京事業所では、これまでに、新奇ナノ炭素材料分野において大規模シミュレーションを活用して、国内外の研究チームと意見交換、討論を重ね、主に国内については信州大学の遠藤教授、また米国、欧州等についてはナノチューブの国際学会 (International Conference on the Science and Application of Nanotubes) のサテライト会議であるCCNT (Computational Challenges and Tools for Nanotubes) を通じて、ミシガン州立大学のトマネク先生と意見交換、研究開発を続けてきた (写真はCCTN、2013年6月開



催、タリン・エストニアにおいて)。

RISTではナノ炭素の新奇構造のカーボンナノチューブとグラフェンの融合体などを対象として次世代量子デバイスになりうる材料に対し、計算手法の開発、コード開発、応用研究などを幾つか試みた。そこでは、構造特有の量子伝導特性、状態密度などを評価しつつ、新量子デバイスとしての可能性の評価や設計の指針を探索してきた。以下でそれらを紹介する。

#### 3.1 シミュレーション

CNTトランジスタの時代に先駆けて、



RISTではカーボンナノチューブだけではなく、カーボンナノチューブとグラフェンの融合構造体などを対象としたシミュレーションを行った。その結果、ナノ炭素構造のデバイスを創案する場合は、伝導に重要な寄与を果たす $\pi$ 電子をどのように操作するかが重要となることが分かってきた。このことからシミュレーションは新規量子デバイスの設計指針、検討に非常に有用であると言える。

今回シミュレーションに用いた計算コードはQuantum EspressoとWANNIER90である。Quantum Espressoはトリエステ大学で開発された第一原理計算コードで、平面波を基底とした擬ポテンシャル法を用いている。このQuantum Espressoはナノ炭素構造体の電子状態の計算やナノチューブとグラフェンの融合体などの構造緩和に用いた。また、このQuantum Espressoの電子状態の計算結果から、Tight-binding 模型を自動的に構築するコードがWANNIER90である。WANNIER90はインペリアル・カレッジ・ロンドン (ICL)、オックスフォード大学等で共同開発されたコードであり、このコードで構築されるTight-binding 模型の基底関数はMaximally Localized Wannier Functions (MLWF) と呼ばれる。MLWFは近接原子の波動関数の重なりや共有結合を取り込んだ空間的に局在した軌道である。また、MLWFの中心位置は電子分布の平均位置を表し、化学結合に関する知見を得るのも容易である。

Quantum Espressoで計算される電子状態は電子系にエネルギーが流れ込まない平衡状態を扱っている。一方、デバイスのように伝導特性を評価する場合は、エネルギー状態の異なる電極が取り付けられ、電子の移動が発生し、外部とのエネルギーのやり取りが生じる非平衡状態を取り扱う必要がある。この非平衡状態での電子状態と伝導計算を記述する手法として、非平衡Green関数法がある。非平衡グリーン関数法ではコンダクタンスはグ

リーン関数によって表される。グリーン関数はハミルトニアン行列を使って計算されるが、WANNIER90ではこのハミルトニアンとして、第一原理計算の結果から自動的に構築されるTight-binding模型のハミルトニアンを使用する。今回のシミュレーションの手順としてはQuantum Espressoで構造緩和、電子状態 (波動関数) により情報を得て、それらの情報を使ってWANNIER90で伝導の計算をすることとなる。

## 3.2 カーボンナノチューブ、グラフェンの伝導特性

### 3.2.1. カーボンナノチューブ (5, 5)

ナノ炭素構造体の伝導特性を見る前に、まず初めに伝導に寄与する電子がどのような状態にあるのかをカーボンナノチューブ (CNT) を例にとって見る。例として (5, 5) の螺旋度を持つCNTに対して、Quantum Espressoから得られるMLWFを基底としたTight-binding 模型を構築した。CNT (5, 5) に対するMLWFの計算では第一原理計算としてC原子100個のスーパーセルで計算を行い、このBloch関数 (波動関数) の情報から、MLWFの初期軌道としてC原子の位置に100個のpz軌道、C-Cボンドの中心に150個のs軌道の計250個のMLWFを選択して計算を行った。これらの初期軌道から局在化の計算を行ったところ、最終的なMLWFとして次の図1に示す二つの特徴的な形が得られる。図1の(a)はC-Cボンドに中心を持つMLWFであり、これは $\sigma$ 結合を表す軌道である。一方、図1の(b)はC原子の位置に中心を持つMLWFであり、 $\pi$ 軌道を表す。ただし、この $\pi$ 軌道は隣接するC原子方向にわずかに伸びた形をしている。 $\sigma$ 軌道のエネルギー準位 (ハミルトニアンの対角部分) は非常に深い位置 ( $E \sim -11.38$  eV) にあり、飛び移り積分は隣接する $\sigma$ 軌道間で大きい値 ( $t \sim 2$  eV) をとるので結合力が強い。それに対し $\pi$ 軌

道は軌道のエネルギー準位が浅く ( $E \sim -2.78$  eV)、結合 $\pi$ バンドと反結合 $\pi^*$ バンドを形成する。

このようにCNTにはCNT自身の骨格を形成するのに必要な $\sigma$ 軌道とある程度自由に動くことができる $\pi$ 軌道の二種類の軌道が存在する。 $\sigma$ 軌道はCNTの骨格を成すために電子が完全に詰まっており、左右の電極に電位差を与えた際の伝導への寄与は小さい。逆に $\pi$ 軌道は電子が部分的にしか詰まっていない

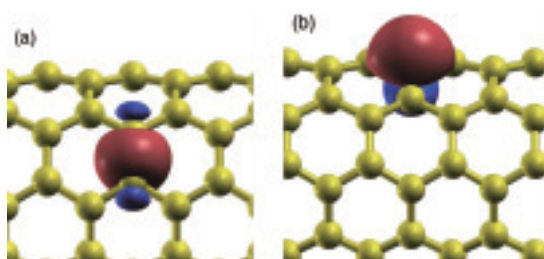


図1：CNT (5, 5) の電子状態から得られたMLWF；(a)は $\sigma$ 軌道を表し、(b)は $\pi$ 軌道を表す

ので、伝導にメインに寄与することになる。

次にこの二種類の軌道に対して得られたハミルトニアンを用いて伝導の計算を行う。電極部分はCNT(5, 5)が無限に長いとして、バルク状態での計算を行った。コンダクタンスを計算する中央領域として炭素原子20個分のユニットセルのCNTをとり、電極部分としてはユニットセル3個分を各左右の電極にとっている。ユニットセルには全部で50個のMLWFが存在し、それぞれ30個の $\sigma$ 軌道、20個の $\pi$ 軌道が存在する。

図2はその時の状態密度 (Density of State : DOS) である。黒線はフェルミエネルギーを表しており、この線より低いエネルギーには電子が完全に詰まっている。フェルミエネルギーを挟んで左右に状態のピークがあるが、これは $\pi$ 軌道による結合 $\pi$ バンドと反結合 $\pi^*$ バンドに由来するピークである。フェルミエネルギー付近ではDOSは定数の

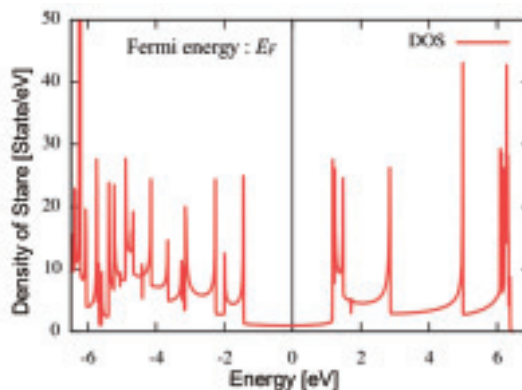


図2：CNT (5, 5) の状態密度 (Density of State : DOS)

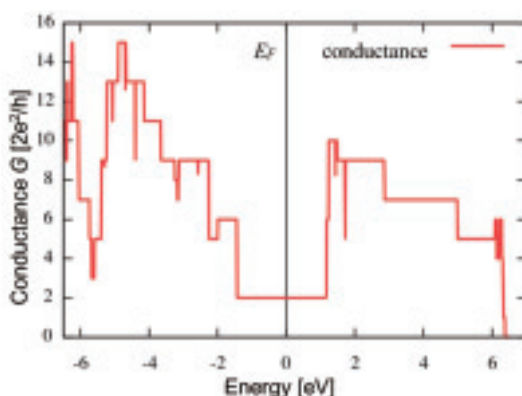


図3：CNT(5, 5) のコンダクタンス

ようにフラットな形をしており、それを反映して図3のコンダクタンスもフェルミエネルギー付近で一定値をとる。

### 3.2.2. カーボンナノチューブ (5, 0)

次に同じCNTでも螺旋度の異なるCNT (5, 0) について計算を行った。CNTは長さが短い場合、伝導はバリスティック伝導となるが、そのCNTの炭素原子一個を他の元素 (Si もしくはCu) で置き換えた場合の伝導の影響をみる (図4)。炭素原子のみのCNT (5, 0) のコンダクタンスは赤線、炭素原子一個をSi もしくはCuで置き換えた場合のコンダクタンスをそれぞれ緑線、青線で図5に示した。

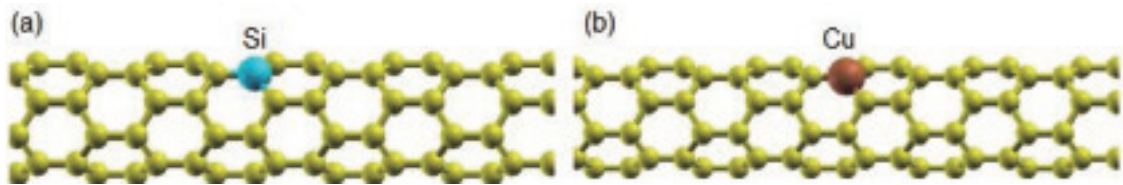


図4：炭素原子1個をSiあるいはCu原子に置き換えたCNT(5, 0)。(a)はSi、(b)はCu。

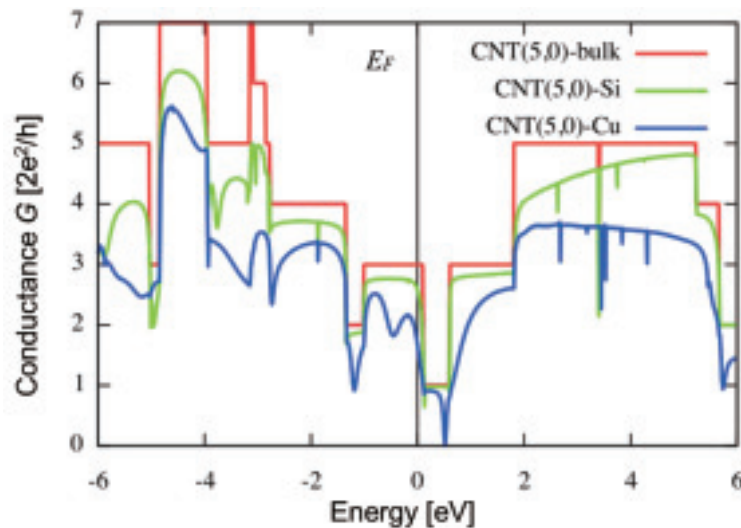


図5：CNT(5, 0)のバルク状態でのコンダクタンス、CNT(5, 0)の炭素原子1個をSiもしくはCuに置き換えた場合のコンダクタンス。黒線はフェルミエネルギーを表す。

図5の結果をみると炭素原子のみのバルク状態のCNT(5, 0)のコンダクタンスが一番高いことが分かる。炭素原子をSi, Cuに置き換えた場合、コンダクタンスは低下する。これは伝導の経路となっていた炭素の $\pi$ 軌道が、Siの $\pi$ 軌道もしくはCuの3d、4s軌道で置き換わった影響である。Siは炭素と同じ14族の原子であり、炭素単体のCNTと同様に $\sigma$ 軌道と $\pi$ 軌道を形成する。しかしSiの $\pi$ 軌道は炭素の $\pi$ 軌道よりもエネルギーが高いため、結果としてコンダクタンスは低下する。またTiに関してはよりエネルギーの高い4s、3d軌道に置き換わっているのですからさらにコンダクタンスが低下することとなる。このようにCNT自身の炭素原子を置き換えてしまうとバリスティック伝導は崩れ、伝導度の低下を招く。ゆえに新奇ナノ炭素融合構造を設計

しようとする場合にはナノ炭素構造体の炭素原子を置き換えず、金属原子等でナノ炭素構造体同士を接合していく必要があると考えられる。

### 3.2.3. グラフェンナノリボン

単層グラフェンを特定のパターンに切り取ったグラフェンナノリボンについて計算を行った。今回計算を行ったのは、リボンの幅を $N$ として、 $N=4$ のジグザグ型グラフェンナノリボンを一つの水素で水素終端した構造である(図6)。このグラフェンナノリボンのバンド構造、状態密度、コンダクタンスの計算結果を図7に示す。

水素終端したジグザグ型のグラフェンナノリボンのバンド構造はフェルミエネルギー付近にフラットなバンドが存在する。これを反

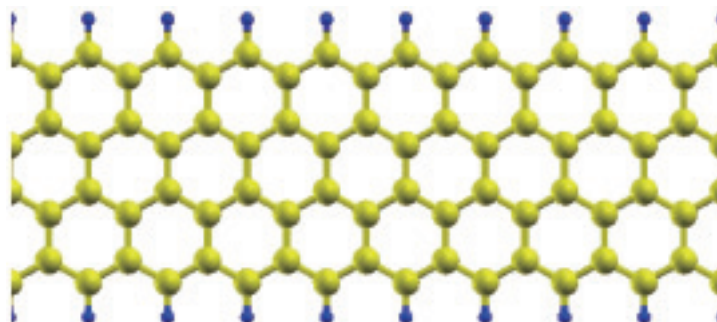


図6：水素終端したジグザグ型のグラフェンナノリボン（リボン幅：N=4）

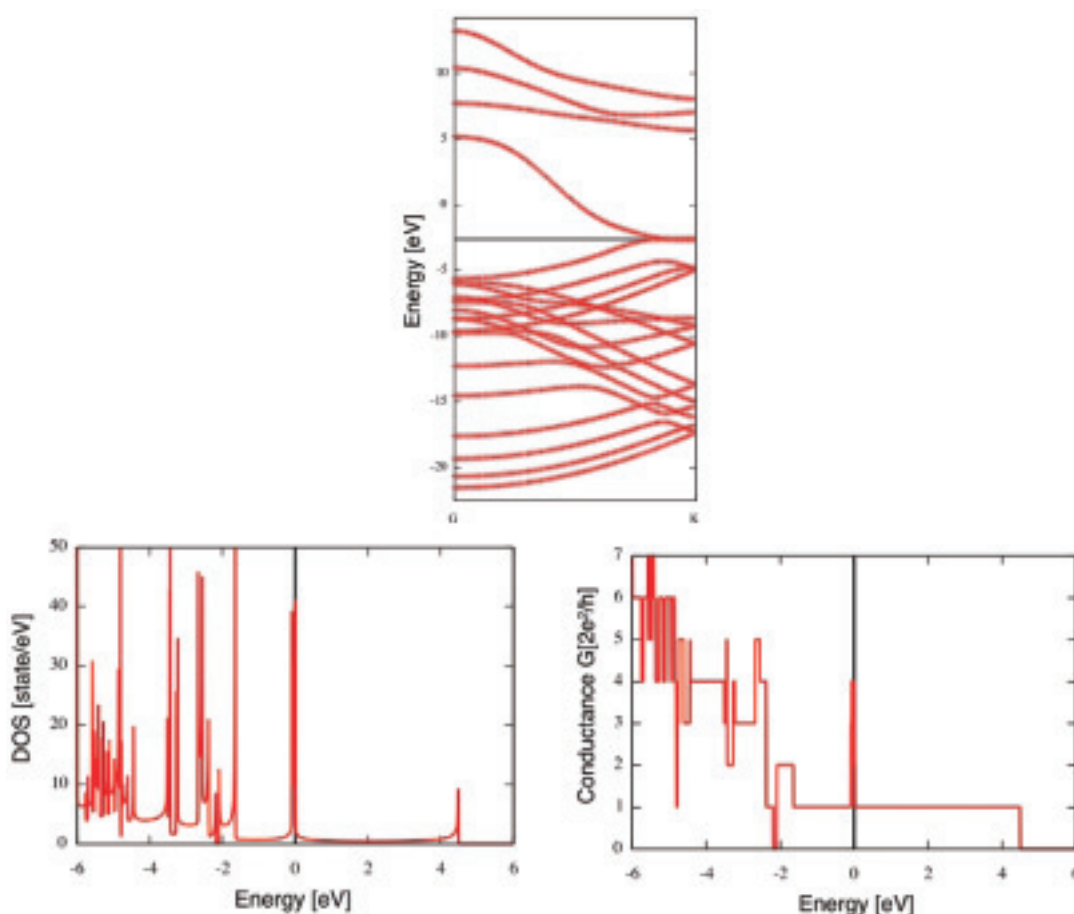


図7：水素終端したジグザグ型のグラフェンナノリボン（リボン幅：N=4）のバンド構造（上図）、状態密度（下左図）、コンダクタンス（下右図）。黒線はフェルミエネルギーを表す（状態密度とコンダクタンスは0 eVをフェルミエネルギーとしている）。

映して状態密度、コンダクタンス共にフェルミエネルギーのところにピークが現れる。

### 3.3. 新奇ナノ炭素融合構造

#### 3.3.1. CNT(5,5)とグラフェンナノリボン(N=4)の融合構造

カーボンナノチューブとグラフェンの融合構造の新量子デバイスの探索としてCNT(5,5)と水素終端したジグザグ型のグラフェ



ンナノリボン（幅 $N=4$ ）の伝導特性のシミュレーションを試みた。

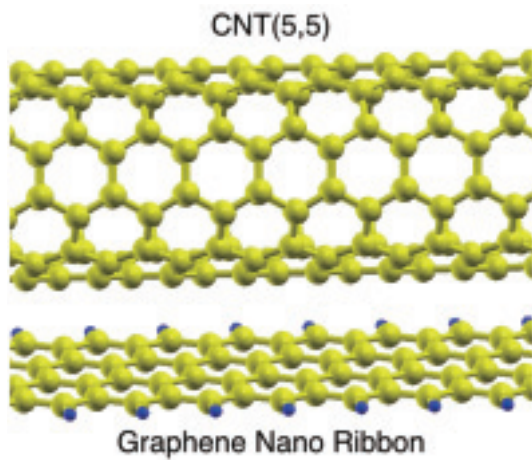


図8：CNT(5, 5)とグラフェンナノリボンによる構造緩和結果

まず初めにCNT(5, 5)をグラフェンナノリボンのすぐ近くの直上に置き、構造緩和をしたところ、CNT(5, 5)はグラフェンナノリボンから離れ、図8のような構造をとり安定化した。この結果から、ナノ炭素構造体同士は $\pi$ 軌道のみで炭素原子が接合することはなく、炭素原子接合した融合構造をつくるにはナノ炭素構造体の骨格を形成する $\sigma$ 結合が必要になることが分かる。

この得られた安定構造からの状態密度及びコンダクタンスが図9である。状態密度とコンダクタンス共にフェルミエネルギー近傍にピークがあり、フェルミエネルギーを挟んで左右にまたピークが現れている。この左右のピークに関しては図2と図3のCNT(5, 5)の状態密度とコンダクタンスに由来したものである。またフェルミエネルギー近傍のピークは図7のグラフェンナノリボンに由来するものである。左右のピークの間コンダクタンスの値が、図3と図7のCNT(5, 5)とグラフェンナノリボンのコンダクタンスを足した値にほぼ一致している。これよりCNT(5, 5)とグラフェンナノリボンに別々に電流が流れるように思われるが、フェルミエネルギー近傍のピークがグラフェンナノリボンの場合と比べて、幅が広がっており、コンダクタンスはわずかに改善されている。これはCNT(5, 5)とグラフェンナノリボンの $\pi$ 電子の間での電子の飛び移りがあるためである。

### 3.3.2. CNT(5, 5) とグラフェンナノリボンの金属 (Cu, Ti) 接合

前節でCNT(5, 5)とジグザグ型のグラフェンナノリボン融合させた場合の伝導特性をシミュレーションした。その際、CNT(5, 5)と

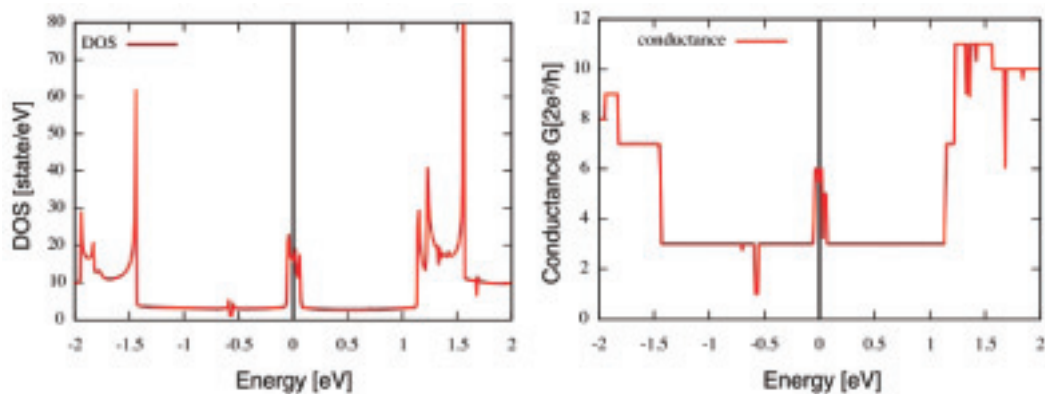


図9：CNT(5, 5)とグラフェンナノリボンを合わせた系の状態密度（左図）とコンダクタンス（右図）。黒線はフェルミエネルギーを表す。



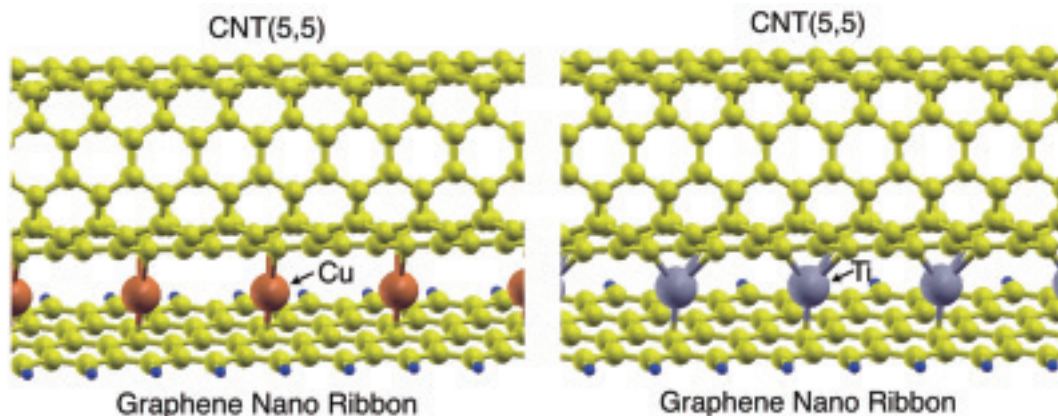


図10：CNT(5, 5)とグラフェンナノリボンの金属結合（構造緩和）。  
左図はCuによる金属結合、右図はTiによる金属接合の安定化構造。

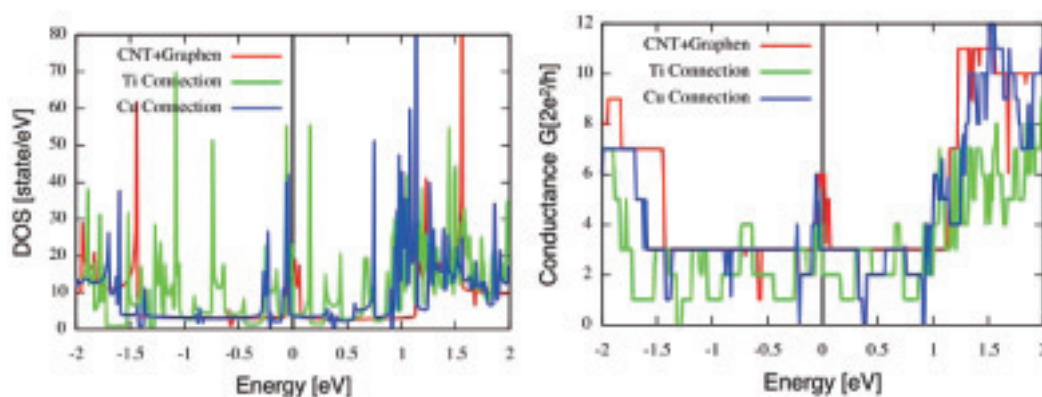


図11：CNT(5, 5)とグラフェンナノリボンを金属接合(Cu, Ti)した場合の状態密度（左図）とコンダクタンス（右図）。それぞれ赤線は接合なしの状態、緑線はTi接合、青線はCu接合を表す。

グラフェンナノリボンはお互いの $\pi$ 軌道を通して電子をやり取りしている。この $\pi$ 軌道間の電子のやり取りを補助する為に金属原子を使ってCNT(5, 5)とグラフェンナノリボンを接合し、伝導特性のシミュレーションを行った。接合金属にはCuとTiを用いた。

CuとTi原子を用いてCNT(5, 5)とグラフェンナノリボンを接合した際の安定構造の結果が図10である。Cu、Ti共にCNT(5, 5)とグラフェンナノリボンに吸着しており、接合されている。

これらの安定構造から得られた伝導特性は図11のようになる。比較の為に接合しない場合の結果も載せた。コンダクタンスはCu、Ti共に接合しない場合よりも低下している。

これは本来接合がない場合に伝導に寄与している $\pi$ 電子がCuないしTiとの結合に使われてしまうためと考えられる。またコンダクタンスの低下はCuよりもTiの方が大きい。これはCuの最外殻の価電子が4s電子一個であり、結合に必要な $\pi$ 電子が少なくすむからである。一方、Tiの場合は価電子として4s軌道と3d軌道の電子があり、より多くの $\pi$ 電子が結合に必要で伝導に寄与できる $\pi$ 電子の数が少なくなるのでCuよりもコンダクタンスが低下することになる。

### 3.4 シミュレーションによる新量子デバイスの検討及び課題

これまでの結果から分かるように、ナノ炭

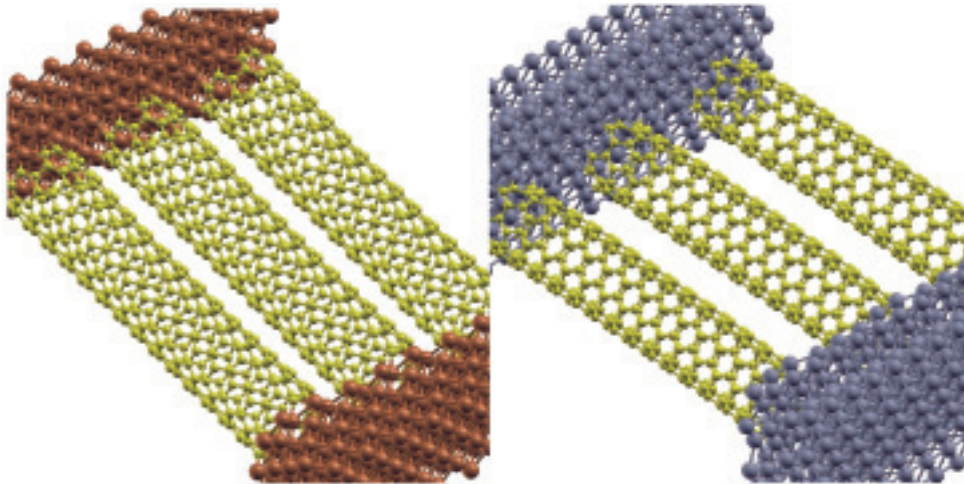


図12：電極としてCuとTiを選択した場合の安定構造

素構造のデバイスを創案する場合は、伝導に重要な寄与を果たす $\pi$ 電子をどのように操作するかが重要となる。特にシミュレーションから得られた結果、伝導度の高い新奇ナノ炭素融合構造を創案するには、ナノ炭素構造体間の $\pi$ 電子- $\pi$ 電子間の結合を崩さずに接合するか、接合せず $\pi$ 電子- $\pi$ 電子の結合をそのまま使うのが良いことが分かった。CuないしTiは電流の流れる領域にある炭素構造体に吸着すると伝導度は低下するが、固体を形成すると自由電子が数多く存在するので電極として使用するのに適している。図12は例として計算したCuの(001)面とTiの(0001)面を切り出した電極とCNT(5,5)による安定構造の計算結果である。

この例のようにシミュレーションは電極がナノ炭素構造体の伝導にどのような影響を及ぼすか、つまり伝導に有利な電極の選択の指針を与えることができる。この例の計算ではCNTの長さとして約3nmの長さ(約300原子)であるが、現在デバイス等に望まれる長さは $\mu\text{m}$ のオーダーであり、数千のオーダーの炭素原子から成るCNTとCuやTiから成る電極部分の問題を解かなければならない。特にこの $\mu\text{m}$ からnmの間の有限長のCNTの問題はバリステック伝導から準バリステック伝導そして拡散伝導へ移り変わる領域であ

り、シミュレーションとしてデバイスを評価する場合に非常に重要な問題となってくる。ただ上述したように、この問題を解くには数千原子オーダーであり、通常DFT計算では原子数の三乗に比例する計算量なので大規模シミュレーションが必要となる。これらの問題に関しては、精度を保ちつつ計算量を減じることが可能なモデル、アルゴリズムの開発が課題となる。

以上の調査の結果、現在、新規ナノ炭素による量子デバイス技術の研究開発は急速に進展しているものの、2013年9月に発表された世界最初のCNTコンピュータは、素子数が178個で1950年代のシリコン半導体のレベルである。従って、シリコン半導体の60年以上におよぶ発展を量子デバイスでも緊急に達成する必要があるが、初期の段階からデバイス全体を開発することは困難で効率が悪い。そのため、初めに、配置(ワイヤリング、被服)、接合そして集積技術という主要課題の解決に集中した研究開発が効果的であると考えられる。

#### 4. まとめ

調査は、初めに近年の新奇ナノ炭素の複合構造からなる新量子デバイスの研究開発動向に焦点を当て進めた。ITRS(国際半導体ロー

ドマップ)では、CNTやグラフェン等の新規ナノ炭素技術は、Siテクノロジーを継ぐ技術として位置づけられており、新規量子デバイス開発において最も重要な技術である。しかしCNTを利用したナノ量子デバイスには、CNTの位置やその精度、カイラリティ、伝導度、直径、単層・多層、エネルギーバンドギャップなどを制御し成長させる製造プロセスがいまだ未発展である等の課題がある。また、グラフェン開発においては、適切な基板上に大面積のグラフェン膜をエピタキシャル成長させる適当なプロセスが無く、また、バンドギャップがゼロであることからMOSFETのチャンネルを原理的にオフできないためMOSFETをデジタルロジック素子として用いることが現状では不可能である等の課題がある。一方、これら課題の解決へ向けた研究開発では、CNTの整列の必要のないデバイスアーキテクチャ、金属・半導体CNTの選別法、グラフェンのリボン化によるバンドギャップ生成制御法等が急速に進んでいる。さらに、CNTコンピュータも実際に稼働を始めた。このように近年の新奇ナノ炭素をベースとした量子デバイス技術は、材料作成、量

子デバイス化、それらを集積・総合した応用機器まで広い範囲で実用化へ向けて研究開発が急速に進展している。

次に、これらの動向を踏まえ、大規模シミュレーションを試行的に活用し、新奇ナノ炭素の複合構造・機能の新量子デバイス概念を複数創案し、それらの実現可能性や課題を調べた。その結果、例えばCNTとグラフェンの複合構造により伝導度の向上の傾向が見られる等、新規量子デバイス実現の可能性が見えてきた。一方、CNTとグラフェンの複合構造を構成する場合、お互いが分離し易く、またCNTとグラフェンをTiやCu等の電極へ接続しようとするとその接合部で原子構造が乱れ伝導度を下げる等の課題とその原因も見えてきた。このように、これら課題に対してシミュレーションは効率的に問題解決の方向性を示すことができると考えている。

これまで以上に信頼性のある、社会に貢献できるシミュレーション手法を推し進めるためには、今後も計算モデルの改良・開発、大規模超並列手法の開発を進めながら、エクサ級計算機の登場を期待するところである。