

| |
|---|
| <p>1. 利用の概略</p> |
| <p>1) 利用目的・内容 ナノデバイス材料として期待されるグラフェンナノリボン (GNR) の最適構造の提案、合成メカニズムの解明を目的とする。そのため、GNR の電子状態、デバイス特性、合成メカニズムのシミュレーション、及び高精度かつ大規模なデバイス特性予測に必用な第一原理計算プログラムの整備を行う。特に、様々な幅、エッジ修飾基を持つ GNR の電子状態、及び伝導特性を中心に解析する。また、合成プロセスにおける安定性、反応性の解析も行う。</p> |
| <p>2) 利用意義 (産業利用の観点から) 基板上での GNR 合成や GNR デバイス応用では、局所的な形状、界面が合成メカニズムや電子状態、電気伝導特性に非常に大きく影響するため、経験的なパラメータを必要としない第一原理計算を用いて、大きな領域全体を高速に計算することが重要である。さらに、産業分野におけるデバイス開発では、実験と比較可能な材料特性の高精度な定量的予測も重要である。</p> |
| <p>3) スーパーコンピューターを利用する必要性 デバイス応用を目指した GNR 設計のためには、経験的なパラメータを必要としない第一原理計算を用いて、大きな領域全体を高速かつ高精度に計算することが重要である。これらの計算のためには、最大 1000 ノード程度の計算機資源を利用することにより、並列化技術の開発やプログラムのチューニングを進めることが必要である。しかしながら、このような先端シミュレーションの産業応用は緒についたばかりであり、社内で利用可能なリソースは限られている。</p> |
| <p>2. 成果の概要</p> |
| <p>1) 本利用で得られた成果 (成果が得られなかった場合はその理由) ※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。 (1. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他)</p> |
| <p>【新規 GNR の材料特性予測】 当社では、金属基板上で前駆体分子を加熱して GNR をボトムアップ的に合成する技術を開発しているが、そのような手法を用いて合成可能な新しい GNR としてリボン内にポルフィン環を含んだポルフィリン GNR を新たに提案した。第一原理電子状態計算により、ポルフィリン GNR は、中心金属原子の有無や種類によって容易に電子状態や磁性状態を制御可能であることが分かった。スピントロニクスも含めて様々なデバイスへの応用が期待され、現在、合成に向けた実験を進めている。</p> |
| <p>【GNR 合成メカニズムの解明】 上記の GNR ボトムアップ合成技術において、前駆体分子のエッジ修飾基を工夫することで GNR が配向し、より高いオン電流を示すデバイスが実現できることが実験的に分かった。そこで、GNR が合成中に配向するメカニズムを解明するために、第一原理電子状態計算を行った。その結果、エッジ修飾基のために基板への吸着が弱められ、前駆体分子が比較的長く重合したポリマーだけが基板上に残るため、エッジ修飾のない前駆体から合成した GNR よりも配向しやすくなることがわかった。デバイス応用上重要な知見が得られたため、今後の前駆体設計に役立つことが期待される。</p> |
| <p>【高精度バンドギャップ予測手法の導入】 バンドギャップの高精度予測は第一原理計算によるデバイス開発推進の鍵となる技術である。今年度は、高精度なバンドギャップ予測を可能とする励起状態計算 (GW 近似) を行う第一原理計算パッケージとして QuantumEspresso の導入を貴センターのサポートのもと進めることが出来た。</p> |
| <p>2) 社会・経済への波及効果の見通し</p> <ul style="list-style-type: none"> ・GNR デバイスなどの新規低消費電力デバイスの開発推進による低環境負荷社会への貢献 ・シミュレーションによるデバイス研究開発の加速、および試作回数削減によるコスト・環境負荷低減 ・産業界におけるシミュレーションおよび大規模並列計算利用の有用性を実証することによる、コンピュータビジネスの牽引、スパコン利用の促進 |
| <p>3) その他の成果</p> |

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。