

---

## 1. 利用の概略

### 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)の成長プロセスシミュレーションと物性評価、デバイス特性予測を利用目的とするGNRの成長プロセスシミュレーションを経て得られた知見を、プロセス設計にフィードバックし、材料開発を効率化する。またGNRを用いたトンネルFETデバイス(GNR-TFET)などの伝導特性予測を行い、GNRデバイスの限界特性を検証することで、GNRデバイスの研究開発を促進する。

### 2) 利用意義(産業利用の観点から)

GNRは接合容量が小さいことを利用した、革新的検波器用ダイオード等への産業応用が期待されているGNR成長のメカニズムはまだ未解明なことも多く、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、速度論的議論を行う必要がある。また基板や電極との界面が、電子状態、デバイス特性に大きく影響するため、理想的な界面の場合の特性を予測しておくことが必要である。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。

### 3) スーパーコンピュータを利用する必要性

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100%最大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。

## 2. 成果の概要

### 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)

※: ]ド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 )

#### 【新規GNRの合成メカニズムの検討】

当社では、金属基板に前駆体分子を真空蒸着して加熱しGNRをボトムアップ合成する技術を開発している。このような手法を用いて、様々な幅をもGNRや、エッジを様々な修飾基で置換したGNRを開発している。ボトムアップ合成メカニズムにはいまだ未解明の部分もあり、前駆体設計の障害となっていた。そのため経験的なパラメータに依らない第一原理計算を用いて、特にエッジに修飾基を付与した場合にGNR合成プロセスがどのように変わるのかを検討し、実験との比較を行った。

#### 【GNRのラマンスペクトルシミュレーション】

前項で述べた新規開発GNRの構造を同定するために、第一原理計算パッケージとしてQuantumEspressoを用いて、フォノン計算とラマンスペクトルシミュレーションを行った。いくつかの構造を仮定してシミュレーションを行い、構造同定につながる結果を得ることができた。

1

#### 【GNR-TFETの伝導特性予測】

GNR-TFETの理想的なデバイス特性の検討を目的として、GNRを電極とする簡易的なモデルで非平衡グリーン関数法に基づく第一原理計算を行った。計算には第一原理計算パッケージOpenMXを用いた。その結果、チャンネル長に依存した電流のトンネリングを確認することができた。

---

## 2) 社会・経済への波及効果の見通し

- ・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材料・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

### 3) その他の成果