

# EP4B ナノ構造エレクトロニクス

研究室HP <http://www2.kobe-u.ac.jp/~tomoono/index.html>

スーパーコンピュータを使った表面・界面における物理現象の解明・予測と  
新たな物理現象を利用した次世代マテリアル・デバイス開発

## メンバー

小野倫也、植本光治、古島弥来、赤松孝則

## 研究内容

本研究室では、物質の電子状態や伝導特性を量子力学の第一原理に基づいて高精度に計算でき、最先端のスーパーコンピュータで大規模計算を実現できる計算手法の開発を行っています。また、開発した第一原理計算コードを用いた大規模シミュレーションにより、表面や界面で起こる物理現象の解明と予測を行います。さらに、発見した物理現象をデバイスに応用する研究にも取り組むとともに、計算科学的手法によるデバイスデザイン技術の構築を推進します。

## 研究テーマ

- ポスト京コンピュータで実行するデバイス機能予測シミュレータの開発・改良
- 既存のデバイス機能予測シミュレータへの機能追加(スピン、光、フォノンなど)
- 次世代パワーエレ用MOSの界面原子構造解析とキャリア移動予測ならびに高機能界面のデザイン
- 2次元系材料を用いたスピントロニクスデバイス用界面構造の設計
- 金属・分子界面の原子構造解析と電子移動予測
- 強誘電体薄膜の外部電場応答解析

## 進行中の研究プロジェクト

科学研究費補助金、日本学術振興会研究拠点形成事業、科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業

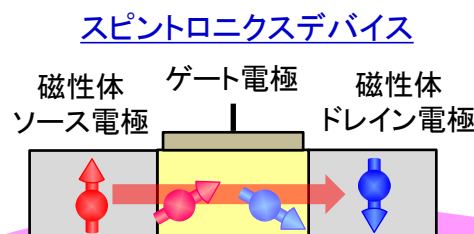
## 共同研究

北海道大学、東北大学、筑波大学、民間企業等

電子の振る舞いを予測する  
新たな計算方法の開発

- 実空間差分法
- 電気伝導特性計算法
- 密度汎関数理論(DFT)
- Beyond DFT
- ...

開発した計算コードを用いた新機能マテリアル・デバイス設計



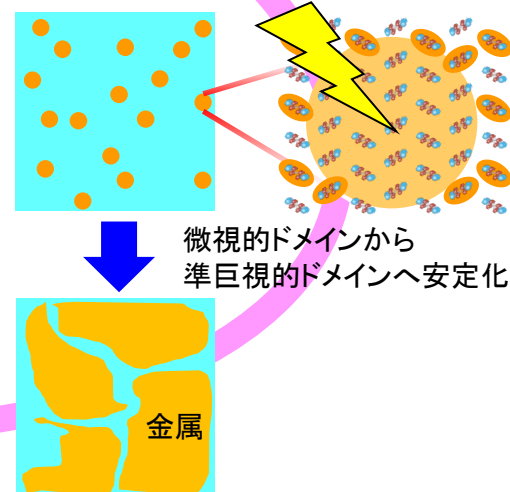
次世代電子デバイス



精度と規模を両立させた  
第一原理計算コードの開発

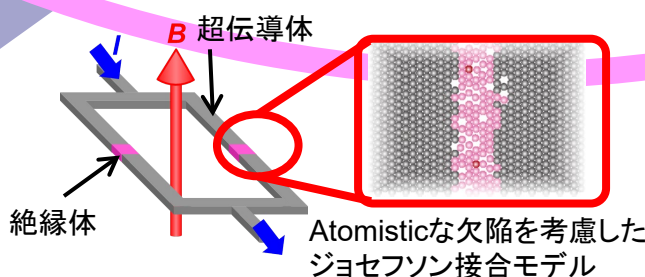
高精度計算  
手法の開発

光誘起相転移を利用したデバイス



大規模計算  
への挑戦

量子コンピュータ用量子ビット



スパコン用数値計算アルゴリズム  
開発と高速化チューニング

- シフト共役勾配法
- 大規模固有値問題
- 並列計算
- GPU
- 量子コンピュータ
- ...