

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 原子論から始まる統合シミュレータの開発

2. 研究代表者： 森 伸也（大阪大学大学院工学研究科 准教授）

3. 研究概要

本研究では、ナノスケール CMOS デバイスのチャネル特性を第一原理計算で記述するための学術基盤を確立し、材料選択・デバイス構造設計支援のための汎用的な統合シミュレータを開発する。具体的には、以下のテーマを推進する。

- (1) 新しい計算アルゴリズム (R 行列理論) に基づいた、原子論的電子輸送シミュレータの開発
- (2) フォノン輸送モデリングと連続体・粒子モデルに基づく量子輸送シミュレータの開発
- (3) 弾道・準弾道コンパクトモデルの開発
- (4) ナノ CMOS プロセスシミュレータ開発および、(1) ～ (3) の統合化による回路シミュレータとの接続

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

原子論に基づく量子シミュレータを始めとするそれぞれの個別シミュレータの開発が概ね計画通りに進捗している。R 行列手法による原子論計算の高速度化をベースに、それぞれのコンポーネントを高精度化して統合しても、少ないコア数の計算機で実現できることはインパクトが大きい。多様な計算モデルをグループに適切に分担し、原著論文数も多く、IEDM など著名な学会でも採択されるなど、注目成果を出していることは評価できる。

4-2. 今後の研究に向けて

それぞれの計算モデルの妥当性の検証を進めるために、TCAD との連携やデバイス開発ユーザとの協力関係を築くことが今後ますます重要になる。個別シミュレータの計算時間の短縮と高精度化の両面を睨んで、かつ、各シミュレータ間の接続形式を定め、統合化の意味・インパクトを明確にして実証して欲しい。

4-3. 総合的評価

量子論に基づいたシミュレータを統合化する試みは世界的にユニークであり、ナノワイヤ・縦型トランジスタなどの次世代デバイス設計の効率化に寄与することが期待できる。幅広く活用されるよう普及活動の方策についても検討して欲しい。