

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

(一財)高度情報科学技術研究機構 副主任研究員 中村 賢

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。わが国も 2002 年に「地球シミュレータ」、2011 年には 10 ペタフロップスの「京」など世界トップ級の高速計算機を開発し、気候変動、先端科学、ものづくり等の大規模シミュレーションの技術力の向上を各国に先駆けて図ってきた。これに対し、2012 年米国は京を上回る 20 ペタフロップスの「Titan」を開発し、世界トップの座を日本から奪還し、さらに 2022 年ごろを目途に新世代のエクサフロップス級の超高速計算機の開発を進めている状況である。このため、エクサフロップス級の超高速計算機の開発は米国、日本、中国などの次なる熾烈な開発競争になっている。

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、逆に電力を消耗し、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嵌まり込んだ。

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。

こうした状況の下、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、マツカイ結晶等の複合構造においては量子効果を含むバリス

テイク電子伝導性、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として応用性の高い特性が明らかになって来た。

そこで、本研究では、複雑且つ微細な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、新奇ナノ炭素の複合構造から極低電力、超高速性、低コスト、低資源制約の新量子デバイス概念を複数、創案し、それらの特性から実現可能性を評価する。また、大規模シミュレーションモデル等の活用法を取り纏め、今後、産学界での新型デバイスの設計研究等に役立てる。さらには、国際競争力の高い新世代の高性能スパコン開発プロジェクトに資することを目的とする。

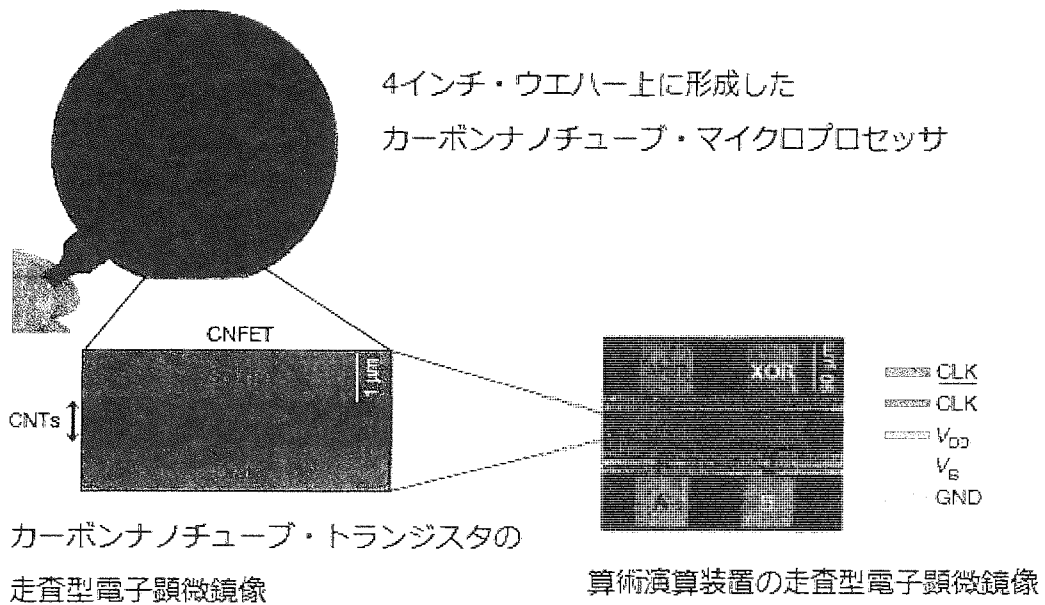
調査は、初めに近年の新奇ナノ炭素の複合構造からなる新量子デバイスの研究開発動向に焦点を当て進めた。ITRS(国際半導体ロードマップ)では、CNT やグラフェン等の新規ナノ炭素技術は、Si テクノロジーを継ぐ技術として位置づけられており、新規量子デバイス開発において最も重要な技術である。しかし CNT を利用したナノ量子デバイスには、CNT の位置やその精度、カイラリティ、伝導度、直径、単層・多層、エネルギーバンドギャップなどを制御し成長させる製造プロセスがいまだ未発展である等の課題がある。また、グラフェン開発においては、適切な基板上に大面積のグラフェン膜をエピタキシャル成長させる適当なプロセスが無く、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も、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。

以上の調査結果を基に、欧米、中国の動きに先んじるべく、日本が得意分野である新奇ナノ炭素技術をベースとした量子デバイスの「戦略的な研究開発計画」について、約 10 年程度の開発期間を想定する計画を立案した。

新奇ナノ炭素による量子デバイス技術は、情報化社会発展の基盤である半導体技術の根幹である Si テクノロジーを継ぐ技術である。日本が得意な大規模計算資源を利用する大規模高速シミ

ユレーションによりナノスケールの持つ多くの可能性を先行的独走的に利用し、情報化、医療、食糧、エネルギー等のあらゆる基本的な領域で革新的進歩を起こせる技術競争力を得ることが必要である。新奇ナノ炭素による日本において固有な、また世界にも貢献できる新しい技術を開発し、より豊かな社会創成へ貢献できることになる。



米スタンフォード大学の科学者チームによって製作されたカーボンナノチューブコンピュータ