

平成 16 年 9 月 21 日

各 位

会 社 名 サイバネットシステム株式会社  
代表者の役職氏名 代表取締役社長 井 上 恵 久  
( 東証第一部 コード番号 : 4 3 1 2 )  
問 い 合 せ 先 広 報 室 勝 又 一 徳  
電 話 番 号 0 3 - 5 9 7 8 - 5 4 0 4

## サイバネットシステム、分子スケールエレクトロニクス向け 第一原理計算によるナノシミュレーションプログラム

### “*The Atomistix Virtual NanoLab®*” の国内販売開始

～ 有機エレクトロニクス・分子デバイス設計ソリューション～

サイバネットシステム株式会社（東証第一部上場 本社：東京、資本金：9 億 9500 万円、代表取締役社長：井上 恵久、以下「サイバネットシステム」）は、デンマーク王国 Atomistix 社（デンマーク王国 コペンハーゲン、社長兼最高経営責任者：トーマス・マグナソン、以下「アトミスティックス社」）が開発・販売・サポートする分子スケールエレクトロニクス向けナノシミュレーションプログラム“*The Atomistix Virtual NanoLab®*”（アトミスティックス・バーチャル・ナノラボ）の国内販売を 2004 年 9 月 21 日（火）より開始することをお知らせいたします。

20 世紀の中心産業であった半導体は微細加工による集積化に邁進してきましたが、最近各方面の研究者から微細加工の物理的な限界が指摘され始めています。このような高集積化の限界を打破するものと期待されている研究の一つに「分子エレクトロニクス」があります。1974 年にアピラムとラトナーによって提唱された単一分子デバイスによる「分子整流器」が分子・ナノエレクトロデバイス研究の契機となり、現在では各国で「分子エレクトロニクス」に関する実験・研究が進んでいます。

#### 【*The Atomistix Virtual NanoLab®* の特徴と機能】

アトミスティックス社の *The Atomistix Virtual NanoLab®* は第一原理計算と呼ばれる手法で近似を最小に抑えた量子理論に基づくナノシミュレーションプログラムです。このアプロー

チは、実験データを変数として与えることが無いため、理論上非常に正確な計算を行ないません。一方で膨大な計算量をこなす必要があるため、効率的なアルゴリズムと豊富なコンピュータ資源を必要とする、チャレンジングで高度なコンピュータ集約技術とも言えます。

また *The Atomistix Virtual NanoLab®* の最もユニークな点は、単一原子周辺の電子状態や軌道のみならずナノ構造の電子輸送も計算し可視化できることです。つまり、例えば、電極と有機分子の接合界面の電子状態と電子輸送を計算することにより電極部分を含めた大規模な系の電流電圧特性を理論計算で算出できるのです。この背景には、電子輸送理論と呼ばれる理論があり、現在も活発に研究されています。 *The Atomistix Virtual NanoLab®* は、この高度な利用技術・ノウハウを要求する科学技術計算を PC 環境で、理論計算の専門家以外にも利用できるようにユーザーフレンドリーな商用化製品としてリリースされました。製品は、モデル入力用の GUI モジュール "Ibuild(アイビルド)"、計算モジュール "I solve(アイソルブ)" (旧称 TranSIESTA-C(トランシエスタ-シー))" と可視化モジュール "Iview(アイビュー)" の 3 モジュールで構成され提供されています。

*The Atomistix Virtual NanoLab®* について更にお知りになりたい方は、サイバネットシステムの下記ホームページをご参照ください。

<http://cybernet.co.jp/nanotech/atomistix/>

#### 【ユーザの声】

アトミスティックス社のユーザーグループは先端の公的研究機関、企業の研究所などにより形成されています。そのひとつに Northwestern University (ノースウエスタン大学) のマーク・ラトナー教授の研究室を挙げることができます。マーク・ラトナー教授は分子エレクトロニクスの提唱者であり、理論化学者の中でも最も論文引用件数の多い研究者の一人です。

“コヒーレントな分子接合における輸送計算は、分子エレクトロニクスの重要な研究テーマになっている。 *The Atomistix Virtual NanoLab®* はこのような計算プログラムの中で最も利用しやすく、また機能の拡張性も高く、ユーザーフレンドリーであると言える。 - マーク・ラトナー -”

#### 【市場】

ナノテクノロジーのエレクトロニクス関連分野の研究の多くは、ナノシミュレーションを使用した計算よりも実験が主流です。しかしながら、大規模な系での理論研究や実験が進みつつある現在では、実験に拘わる科学者およびエンジニアは効率的なナノシミュレーションツール無しにナノスケールの設計および開発を充分に行うことができません。

ジョージア大学の H.F.Schaeffer (H.F.シャエファー) 教授の報告によれば、ナノシミュレーション業界はナノテクノロジー全般の成長率よりも急速に発展することが期待されています。2000 年では全ての研究開発費の 15% 程度であったシミュレーションのコストが 2035

年までにその総額の50%まで増加するとの見解もあります。

アトミスティックス社の提供する *The Atomistix Virtual NanoLab®* のコアモジュール、“Isolve = 旧称 TranSIEATA-C” は、既に200を超える研究グループでの利用実績があり、またアトミスティックス社では先端科学者や企業と、特に電気・半導体分野で様々な共同研究を行っています。

#### 【対応プラットフォーム】

- Windows2000, WindowsXP
- Linux Kernel 2.4.8 以上 (詳細は別途お問い合わせ下さい。)
- Sun Solaris 2.9
- SGI IRIX 6.5

#### 【価格】

一般価格 年間レンタル料金 ¥3,000,000 より(消費税別)  
(アカデミック価格も用意しております。価格に関する詳細は別途お問い合わせ下さい。)

#### 【初年度販売目標】

50本

#### 【特別紹介セミナー 開催】

サイバネットシステム ではアトミスティックス社副社長 カート・ストックプロ博士が10月下旬に来日するのに合わせ、特別紹介セミナーを開催する予定です。セミナー開催日等の詳細につきましては、下記の当社ホームページ/アトミスティックス社サイトにてお知らせいたします。

<http://www.cybernet.co.jp/nanotech/atomistix/>

#### アトミスティックス社について

アトミスティックス社は2003年11月に量子物理学とナノテクノロジーの世界的な研究機関であるデンマーク王国 ニールス・ボーア研究所 (Niels Bohr Institute : <http://www.nbi.dk/>) との産学連携により、同研究所内に設立されました。アトミスティックス社の使命は、ユニークかつ正確で信頼できる最先端の“ナノシミュレーション プログラム”を提供することです。アトミスティックス社の提唱する“ナノシミュレーション”とはナノスケールの系における電子状態と電子輸送の計算とシミュレーションをすることで、新しいナノスケールのデバイスの設計や擬似実験を可能にする技術です。

*The Atomistix Virtual NanoLab®*の原型は、コペンハーゲン大学ナノ・サイエンスセンター、

デンマーク工科大学マイクロエレクトロニクス センター やカナダ・マクギール大学ラザフォード研究所など先進科学研究機関における 10 年間にわたる国際的な研究の成果で生まれた "TranSIESTA" と呼ばれるプログラムです。(Physical Review Letters ・ JACS 他学術掲載多数) アトミスティックス社では この "TranSIESTA" を製品改良・拡張・メンテナンスを行ないユーザーフレンドリーな統合プログラム "The Atomistix Virtual NanoLab®" として提供しています。また個別企業とコンサルティングサービスや共同研究も活発に行なっています。

#### 社長及び主要開発メンバーについて

- ・ 社長兼最高経営責任者 Dr, Thomas Magnussen (トーマス・マグナソン博士) について  
デンマーク工科大学 物理化学部にて博士号を取得し、その後渡仏。INSED より MBA 学位を取得した後はビジネス分野で活躍。IBM・NCR などで 20 年以上のキャリアを積み、アメリカ・ヨーロッパにて数々のベンチャー企業の育成・経営に尽力しました。2004 年よりアトミスティックス社の最高経営責任者に就任。
- ・ Dr, Kurt Stokbro (カート・ストックブロ博士) < 副社長 >  
デンマーク工科大学にて物理化学分野で博士号を取得。現ニールス・ボーア研究所 教授。TranSIESTA コンソーシアム共同創立者。専門は分子エレクトロニクス構造理論・数値的計算モデリング。
- ・ Dr, Hong Guo (ホン・グオ博士) < 最高科学責任者 >  
<http://www.physics.mcgill.ca/~guo/Welcome.html>  
マクギール大学にて物理学博士号取得。現カナダ McGill University の物理学部教授、香港大学物理学部 名誉教授。The Oak Ridge National laboratory 客員研究員。McDCAL シンポジウムの創立者。専門はメソスコピック系・ナノスコピック系の電子輸送理論、ナノ材料。
- ・ Dr, Jeremy Taylor (ジェレミー・テラー博士) < 最高技術責任者 >  
カナダ McGill University にて 物理学博士号取得。McDCAL の主開発者、TranSIESTA の副開発者。専門は量子力学的散乱状態と電子輸送のアルゴリズム開発。

<http://www.atomistix.com/>

#### サイバネットシステム株式会社について

当社は、科学技術計算分野、特に C A E 関連の多岐にわたる先端的なソフトウェアソリューションサービスの提供を行なっております。電気機器、輸送用機器、機械、精密機器、教育・研究機関など様々な業種及び適用分野におけるソフトウェア、教育サービス、技術サポート、コンサルティング等を提供しております。構造解析、音響解析、機構解析、制御系解析、通信システム解析、信号処理、光学設計、照明解析、高周波回路解析など多様かつ世界的レベルの C A E ソフトウェアを取扱い、様々な顧客ニーズに対応しております。

サイバネットシステムでは、新規アプリケーション開拓の一つとして、ナノテクノロジー分野に対しても C A E ソフトウェアの投入、技術サポートの拡大を目指していきます。

<http://www.cybernet.co.jp/>

---

この件に関するお問い合わせ  
サイバネットシステム株式会社

内容についての問い合わせ

新事業推進室

担当 / 廣瀬 涉至

〒112-0012 東京都文京区大塚 2 丁目 9 番 3 号 住友不動産音羽ビル 2F

TEL.03-5978-5676 FAX.03-5978-6081

E-MAIL:atomistix-info@cybernet.co.jp

報道の方は

広報室 / 勝又, 松代

〒112-0012 東京都文京区大塚 2-15-6 ニッセイ音羽ビル

TEL.03-5978-5404 FAX.03-5978-5441

E-MAIL:irquery@cybernet.co.jp