

ナノ表面数値解析システム

佐々木 成朗*

System of numerical analysis of nano-scale surface

Naruo SASAKI*

1. ナノ表面数値解析システム

「プロジェクト 1 人にやさしい次世代無機材料の開発と評価」において特に「ナノ材料表面の解析」の課題を遂行するため、本プロジェクトでは「ナノ表面数値解析システム」を購入し、2004 年度から稼働している。材料表面の解析には、最低数百～数万原子を含む分子動力学計算が必要となるが、ナノ表面数値解析システムはこの要望に耐え得るものである。

本稿では本システムの特徴、及びその使用目的について説明する。

2. 本システムの特徴と選定理由

「ナノ表面数値解析システム」の本体は NEC 製 SX-6i・デスクサイドモデル と呼ばれるスーパーコンピュータである。

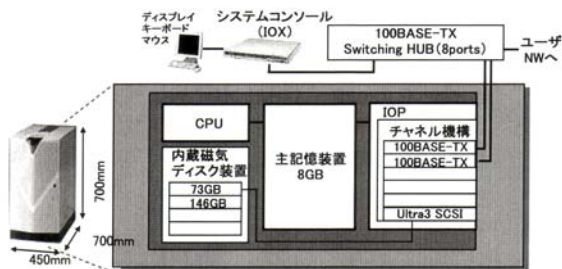


図1 SX-6iのハードウェア構成

本システムは1CPUのベクトル型計算機であるが、以下のようなメリットがある。

2.1 CPU 速度

CPUあたりの最大理論性能が8GFLOPS以上あること。実効性能としてLinpackTPP (n=1000) で、1CPUあたり7.5GFLOPS以上あること。

2.2 転送速度

理論データ転送能力が32GB/s以上であり、GFLOPSあたりでは4GB/s以上の理論データ転送能力を有していること。STREAM (COPY) でCPU当たり27GB/s以上を有していること。

2.3 設置効率

設置効率に優れたデスクサイドタイプであること。基本筐体(本体系筐体)の外形寸法は、突起物を除き 巾450mm×高さ700mm×奥行き700mmである。

2.4 消費電力関連

AC電源: 単相 100~120VV±10% (平行2極アース付)

基本消費電力 1.0KVA

最大消費電力 1.2KVA

従って、UPSを含めても最大1.8kVA以内に収まること。

2.5 その他

- ・ベクトル型計算機であること。
- ・チェックポイントリスタート機能を有していること。
- ・コストパフォーマンスが良いこと。

以上の各メリットのそれぞれを凌駕する他社のスパコンはあるが、全てを満たしているマシンは殆ど存在しない。従って本システムは非常にバランスの取れた高性能機種と言える。従って時間的にも空間的にも制約のある本ハイテクセンタープロジェクトにおける研究遂行上、現段階では最もコストパフォーマンスが高い機種であると判断した。

3. 本システムの使用目的

物体がナノメートルサイズの大きになると摩擦・凝着の効果が大きくなる。ナノテクノロジーにおいて

*成蹊大学理工学部物質生命理工学科助教授 (Associate Professor, Dept. of Materials and Life Science)
E-mail: naruo@st.seikei.ac.jp

これらの効果を制御、抑制する事が最重要課題の一つと言って良い¹⁾。

本プロジェクトでは、試料表面に吸着したナノサイズのクラスターや原子・分子が受ける摩擦力や、ナノ表面の安定構造を、密度汎関数法や分子動力学法による数値計算を用いて求める必要がある。そこでナノ表面数値解析システムを使用する。

本システムの適用例として、探針-表面系の構造計算が挙げられる。これは原子間力顕微鏡と呼ばれるナノサイズのプローブ法を考えるために必要なモデル系であるが、小規模探針-表面系において、予備計算の結果、市販のワークステーションを数～10 倍程度上回る計算速度を確認出来た(図 2)。

その後プログラムのデバッグが終了し、原子数が数千個～数万個オーダーの大規模探針-表面系の計算に取り掛かっており(図 3)、本システムのメリットであるベクトル計算を効率良く遂行出来る事を確認している。

今後は半導体表面を物理的に解析する馬場研、生体表面などを化学的に解析する工藤研と協力して、本システムを駆使して本プロジェクトを積極的に推進していく予定である。

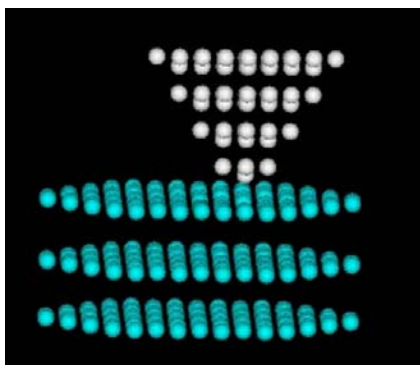


図 2 小規模探針-表面系のモデル

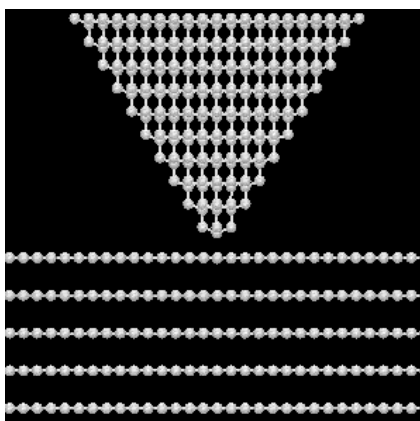


図 3 大規模探針-表面系のモデル

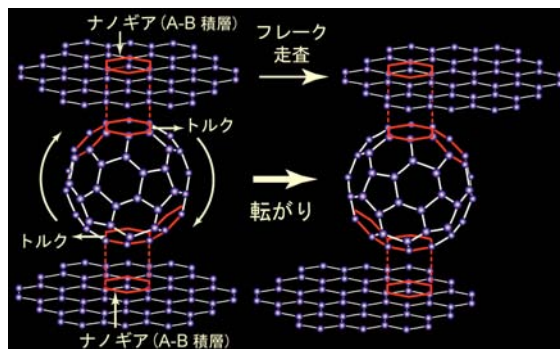


図 4 筆者が提案した C_{60} 分子ベアリング²⁾⁻³⁾の概念図。NEC の使用事例で紹介されている。

また、本プロジェクトの目的の一つである低摩擦機構の研究に関連して、筆者はフラーレン C_{60} の分子ベアリングシステムの概念を世界に先駆けて提案している²⁾⁻³⁾が、その概念図(図 4)を SX シリーズの使用事例として用いたいとの打診が(株)NEC よりあったので、快諾した。

本図はこれまでに(株)NEC によって学会や学会誌、NEC のホームページなど多くの場所で使用されており、本プロジェクトの宣伝になる事が期待される⁴⁾⁻⁶⁾。

参考文献

- 1) 佐々木成朗 「実現への期待高まる摩擦ゼロの超潤滑システム ～ C_{60} とグラファイトの層状カーボン材で発見、環境・エネルギー・経済に多大な波及効果」、日経ナノビジネス 2005 年 4 月 11 日号, 先端技術レポート pp.18-21 (2005 年 4 月)。
- 2) N. Sasaki, K. Miura, "Key Issues of Nanotribology for Successful Nanofabrication -From Basis to C_{60} Molecular Bearings", Jpn. J. of Appl. Phys. **43**, pp.4486～4491 (2004 年 7 月)
- 3) K. Miura, S. Kayima, N. Sasaki, " C_{60} Molecular Bearings", Phys. Rev. Lett. **90**, pp.0555091～0555094 (2003 年 2 月)
- 4) パネル発表「SX-8i 主な応用分野： C_{60} 分子ベアリングの超潤滑機構シミュレーションモデル」 日本物理学会 2005 年秋季大会 付設機器展示会 NEC の HPC 製品紹介(2005 年 9 月 19 日～9 月 22 日)
- 5) 主な事例：「 C_{60} 分子ベアリングの超潤滑機構シミュレーションモデル」 NEC スーパーコンピュータ SX シリーズの HP (<http://www.sw.nec.co.jp/hpc/sx8/product/appli.html>) で紹介中。
- 6) 「 C_{60} 分子ベアリングの動力学シミュレーションモデル」 NEC スーパーコンピュータ SX シリーズの広告ページ, 日本物理学会誌 59 巻 11 月号 p.A-5 (2004 年 11 月)