



# 大阪大学サイバーメディアセンター 計算機利用ニュース

Vol. 5 No. 2 2010.3  
第9号

Cybermedia Center, Osaka University



吹田本館

## 大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

主なサービス内容	係・連絡先等	月～金	土・日・祝日
----------	--------	-----	--------

### ・開館時間（吹田本館）

センター見学の申込	情報推進部情報企画課 総務係（1F） 電話 06-6879-8804 soumu@cmc.osaka-u.ac.jp	8:30～12:15	閉
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（1F） 電話 06-6879-8980,8981 kaikei@cmc.osaka-u.ac.jp		
利用案内受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用者講習会受付、広報、 計算機マニュアル・図書の閲覧、貸出	情報推進部情報企画課 情報企画班（1F） 電話 06-6879-8807,8808 usersv@cmc.osaka-u.ac.jp	13:00～17:15	館
利用方法問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館2F） 電話 06-6879-8812,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

### ・サービス時間

スーパーコンピュータ、PCクラスタ等	オンラインサービス 24時間365日（注）
--------------------	-----------------------

（注）障害の発生等により、予告なしにサービスを中止することがあります。  
計画停電・定期保守によりサービスを停止することがありますが、この場合はホームページに掲載します。

### ・大規模計算機システムURL

大規模計算機システムホームページ	<a href="http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp">http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp</a>
大規模計算機システムポータル （スーパーコンピュータ等についての情報を提供 しています。マニュアルの閲覧、パスワード の変更などが行えます。）	<a href="https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp">https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp</a>

### ・利用相談

プログラム、センターの利用に関する 質問・相談	利用相談を電子メールで受付けます。 <b>E-mail: <a href="mailto:hpc-support@hpc.cmc.osaka-u.ac.jp">hpc-support@hpc.cmc.osaka-u.ac.jp</a></b>  に質問・相談をお寄せください。  ※お問い合わせの際には、利用者番号をお申し出ください。
----------------------------	--

大規模計算機システム

# 利用者報告

【論 文】

- Q C D相転移現象の研究 ----- 3  
野中 千穂 名古屋大学大学院理学研究科
- 計算機マテリアルデザイン先端研究事例 ―抵抗変化メモリの動作原理の解明に向けて―  
金属電極層／遷移金属酸化物層界面における構造変化に関する解析評価 ----- 6  
岸 浩文 笠井 秀明 大阪大学大学院工学研究科

# QCD 相転移現象の研究

野中千穂

名古屋大学大学院理学研究科

## 1 QCD 相図理解へむけて

QCD 相転移現象の解明は素粒子論と原子核理論の重要な課題の一つである。通常ではクォークやグルーオンはハドロンの中に閉じ込められており、系はハドロンで記述される。高温・高密度下になると、今度はクォークやグルーオンが系の自由度となる。これは QCD の漸近的自由性 (2004 年ノーベル物理学賞) から予想された新しい物質相であり、クォーク・グルーオンプラズマ (QGP) と呼ばれる。この QCD 相転移現象をめぐる理論、実験双方からの研究が精力的になされてきた。

理論においては格子 QCD といった第一原理計算、有効理論からの研究がめざましい。最近の理論研究の成果から、QCD 相図にはハドロン相-QGP 相といった単なる 2 つの相間の相転移を超えたもっと豊かな物理が存在することがわかってきている。

実験では 1980 年代より一連の高エネルギー重イオン衝突実験が行われてきた。特に 2000 年より米国・ブルックヘブン国立研究所で稼働した初めての衝突型加速器、Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) では大きな成果と進展があった。その一つが Strongly coupled (interacting) QGP (sQGP) 生成の成功である。この新しい知見を得るに至った背景には理論の実験結果理解の成功が大きい。Color Glass Condensate (CGC)、ジェットのエネルギ損失、相対論的流体模型、リコンビネーション模型が RHIC での sQGP 生成成功の結論に至った主となる理論根拠であった。

このような状況の中私は QCD 相転移現象の解明を目指しさまざまな角度からのアプローチを試みてきた。一つは高エネルギー重イオン衝突実験理解を中心とした現象論からの QCD 相図の理解、そして QCD の第一原理計算である格子 QCD を用いた有限密度領域の研究そしてハドロンの QCD からの理解を目指したスカラー中間子の研究である。最近ではさらに格子 QCD 計算によって高エネルギー重イオン衝突における現象論的模型の確固としたインプットを得る研究も開始している。ここでは阪大核物理研究センターの全国共同利用におけるスーパーコンピュータ SX を用いて

得ることのできた研究成果について簡単に述べる。

## 2 高エネルギー重イオン衝突実験

QCD と高エネルギー重イオン衝突実験の理解を結びつけるためには現象論的な模型が必要とされている。現在、RHIC での sQGP 生成の成功以来、高エネルギー重イオン衝突実験のダイナミクスを記述できる最も現実的な現象論的模型として相対論的流体模型に注目が集まっている。私は RHIC が稼働する数年前に行われた CERN における SPS での高エネルギー重イオン衝突実験の粒子の集団運動、非対称なフローの実験結果に注目し、その実験解析に必要な (3+1) 次元の相対論的流体模型を構築した [1]。当時の相対論的流体模型は円筒対称性などの対称性を仮定したり、Bjorken の解を採用していたため、非対称なフローの解析には不十分であり、(3+1) 次元の相対論的流体模型の構築は非対称のフローの現実的な解析、実験結果理解にはなくてはならないものであった。さらに RHIC における sQGP 生成の成功によりそれまで現象論的模型の一つにすぎなかった相対論的流体模型が脚光を浴びることになった。相対論的流体模型では、相対論的流体方程式を解く必要があるが、解く際には状態方程式が必要である。この状態方程式を通じて高エネルギー重イオン衝突実験で実現している QCD 相転移現象を直接調べていくことが可能となる (図 1)。

この (3+1) 次元相対論的流体模型を軸に、ハドロンをベースにしたイベントジェネレーターを組み合わせることによって、さらに現実的な模型を構築した [2]。さらにこの模型を用いてジェットと媒質の相互作用の研究へと発展している [3]。

## 3 有限密度下でのハドロンの性質

QCD 相図理解において高温度・低密度領域においては、高エネルギー重イオン衝突実験が稼働し実験と理論の双方からの研究という理想的な状況が実現している。しかしながら低温度・高密度領域は重イオン衝突

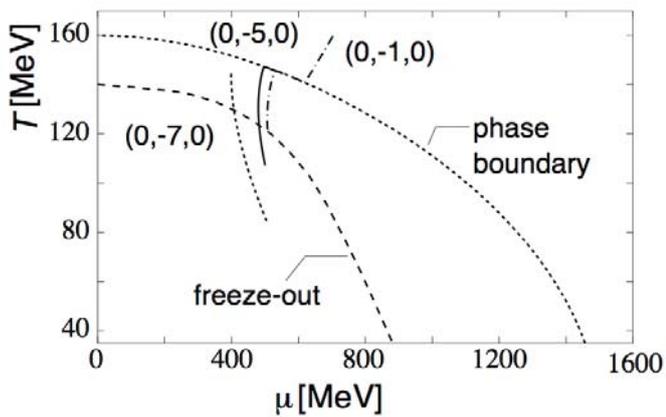


図 1: 流体素片中における温度と化学ポテンシャルの変化の様子と QCD 相図 [1]。ここでは一次相転移を仮定している。

実験の稼働が待たれる状況にあり、理論側からカラー超伝導状態や LOFF 相など様々な可能性が論じられているにすぎない。さらに QCD の第一原理計算である格子 QCD であっても、有限密度下では符号問題のために通常のモンテカルロ法が使用することができないという困難さが存在する。そのために格子 QCD では様々な工夫がなされてきた。クォークの行列式の化学ポテンシャルによる Taylor 展開、あるいは、符号問題のない 2 カラー QCD、アイソスピン化学ポテンシャルや虚数化学ポテンシャルなどの計算が行われてきている [4]。我々は 2 カラー QCD において有限化学ポテンシャル下におけるハドロンの質量の振る舞いを詳細に調べた。ここでベクター中間子が有限化学ポテンシャル下において質量が軽くなるということを格子 QCD 計算により初めて見出した (図 2) [5]。

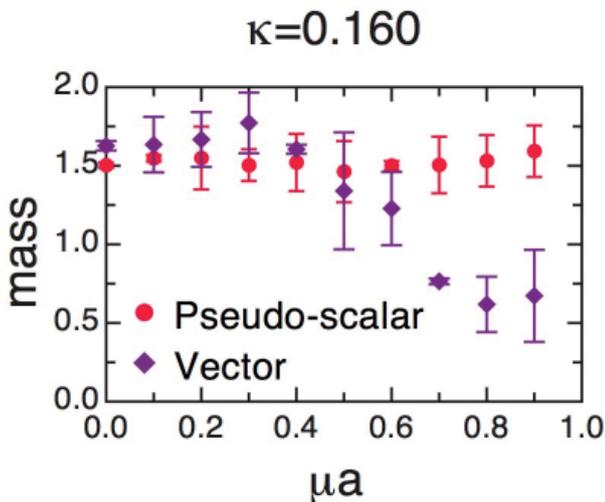


図 2: 有限密度下でのベクター中間子の質量の振る舞い。

## 4 エキゾチックハドロン

QCD 相図を理解する上でハドロンの構造の理解は重要であると思われる。1990 年代後半ごろから始まった  $\pi$  中間子・ $\pi$  中間子散乱実験の再解析 [7] によって  $\sigma$  中間子の存在が再認識されるにいたった。しかしこの  $\sigma$  中間子の質量 ( $\sim 600$  MeV) は非相対論的クォーク模型では説明することができない。そのため  $\sigma$  中間子の構造としてクォーク 4 体、 $\pi$ - $\pi$  分子構造、あるいはグルーボールとしての存在可能性などが議論されている。さらにクォーク 4 体、5 体の可能性のある新しいハドロン、エキゾチックハドロンの発見が今やハドロンスペクトロスコピーは新しい局面を迎えている [6]。

このような状況において我々は QCD の第一原理計算である格子 QCD を用い、スカラー中間子である  $\sigma$  中間子の研究を開始した。まず  $\sigma$  中間子の演算子として  $\bar{q}q$  で記述された演算子を用意した。この演算子から得られる  $\sigma$  中間子のプロパゲーターには非結合ダイアグラムが存在しこれを評価することで、質量 600 MeV 程度の軽い  $\sigma$  を説明できることがわかった [8]。この研究の開始の時点では  $\sigma$  中間子の存在を疑う風潮もまだあったが、この数年の間に数々の新しいハドロンの発見や研究成果があり状況が劇的に一変したことは興味深い。さらに最近発見された同じくスカラー中間子である  $\kappa$  中間子についての解析を行った [8, 9]。この中間子も 800 MeV 程度という軽い質量結果が得られている。しかし我々の結果は  $\sim 1.7$  GeV 程度となり残念ながら実験値に近づくことはできなかった。この理由の一つに  $\kappa$  には、 $\sigma$  中間子に存在した非結合ダイアグラムが存在しない、ということが考えられる。 $\kappa$  については現在さらに現実的な計算を遂行中である。

## 5 おわりに

阪大核物理研究センターの全国共同利用におけるスーパーコンピューター SX は利用申請こそ必要であるが、比較的自由に使用することが可能であるので、これまでに私自身の研究の様々な側面、段階で使用している。特に研究成果をあらかじめ予想することが難しい新しい研究の計算や、テスト計算の際に真っ先に阪大スーパーコンピューターの利用を検討している。また外川さんからの利用者に対するお知らせやメンテナンス、問題があった際の早急な対応に大変助かっていると同時に、信頼をもって使用が可能になっていることも強調したい。計算機を使用するにあたり共同研究者の方から利用者のためのウェブページがもう少し

充実していると使用しやすいのでは？というような要望があったことも申し添える。このように自由に使用可能であるので、大規模な計算機が手近にないグループあるいは結論が予想できない新しく挑戦的な計算を始める際には大変有用であると思われる。今後もこのような運用をして下さることを切に希望している。

## 参考文献

- [1] C. Nonaka, E. Honda, and S. Muroya, *Eur. Phys. J.* **C17**, 663 (2000).
- [2] C. Nonaka, S. A. Bass, *Phys. Rev. C* **75**, 014902 (2007).
- [3] S. A. Bass, C. Gale, A. Majumder, C. Nonaka, G.-Y. Qin, T. Renk, J. Ruppert, *Phys. Rev. C* **79**, 024901 (2009); G.-Y. Qin, J. Ruppert, S. Turbide, C. Gale, C. Nonaka, S. A. Bass, *Phys. Rev. C* **76**, 064907 (2007); A. Majumder, C. Nonaka, S. A. Bass, *Phys. Rev. C* **76**, 041902 (2007); T. Renk, J. Ruppert, C. Nonaka, S. A. Bass, *Phys. Rev. C* **75**, 031902 (2007).
- [4] See e.g. S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, T. Takaishi, *Prog. Theor. Phys.* **110**, 615 (2003).
- [5] S. Muroya, A. Nakamura and C. Nonaka, *Phys. Lett.* **B551**, 205 (2003).
- [6] T. Nakano, et al., LEPS Collaboration, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 012002. , For reviews, see C. Quigg, *PoS HEP2005* (2006) 400; E.S. Swanson, *Phys. Rep.* **429** (2006) 243.
- [7] For example, see Possible existence of the sigma-meson and its implications to hadron physics, KEK Proceedings 2000-4, *Soryushiron Kenkyu* (Kyoto) **102** (2001) E1.
- [8] Scalar Collaboration: T. Kunihiro, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi, and H. Wada, *Phys. Rev.* **D 70**, 034504 (2004) .
- [9] Scalar Collaboration: T. Kunihiro, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi, and H. Wada, *Phys. Lett.* **B 652**, 250 (2007).

計算機マテリアルデザイン先端研究事例  
— 抵抗変化メモリの動作原理の解明に向けて —  
金属電極層／遷移金属酸化物層界面における構造変化に関する解析評価

岸浩史，笠井秀明  
大阪大学大学院工学研究科

## 1. はじめに

抵抗変化メモリデバイスの研究開発は、NEDO プロジェクト（ナノテク・先端部材実用化研究開発／遷移金属酸化物を用いた超大容量不揮発性メモリとその極微細加工プロセスに関する研究開発）として平成 17 年度に開始した。シャープ株式会社，株式会社アルバック，独立行政法人産業技術総合研究所，国立大学法人大阪大学（産学官連携，代表者：秋永広幸博士（独立行政法人産業技術総合研究所 ナノ電子デバイス研究センター所属））が参画した。ステージ I（3 年間）が終了し，ステージ II（2 年間）の最終年度に突入している。

大阪大学は量子シミュレーションによる計算機マテリアルデザイン (Computational materials Design : CMD<sup>®</sup>)<sup>[1,2]</sup>を担当し，原子核と電子の世界から，抵抗変化メモリデバイスの動作メカニズムの解明につながる研究成果を挙げている。近い将来，デバイスの信頼性保証を与えることとなり，ビジネス展開を現実化させると考えている。本稿では，計算機マテリアルデザイン先端研究事例として，NEDO プロジェクトにおいて実施中の抵抗変化メモリデバイスの研究について紹介

する。まず次節では，我々が提唱している計算機マテリアルデザインという研究手法について紹介しよう。

## 2. 計算機マテリアルデザイン

21 世紀に入り科学技術の進歩は目覚ましく，これまで未来絵巻として描かれていた新規デバイスや新規物質が次々と開発されている。その一方では，従来手法では解決できないような問題も浮上してきている。ナノテクノロジーの発展は目を見張るばかりだが，新規デバイス開発がナノメートルオーダーやそれ以下の微細領域に及ぶにつれ，量子効果を考慮しなければならなくなっている。また，効率良く新規物質を開発するためには，計算機シミュレーションで予測してから実験を行う必要がある。このような状況において，今日，量子力学に基づき，実験に頼らない高信頼性シミュレーションが求められている。

これらの要望に応える計算手法である第一原理計算は，量子力学から導かれる密度汎関数理論<sup>[3,4]</sup>に基づいており，実験値等の経験的パラメータに頼らない物性予測が可能である。第一原理計算手法の開発と，最近の計算機性能の飛躍的な発展により，第

一原理を根幹とした計算機マテリアルデザインが現実性を増しており、この計算機マテリアルデザインによる知的設計が産業へ応用展開されることが期待される。計算機マテリアルデザインによる先行特許出願についても、その戦力的重要性が高まるものとして期待される。(2005年出版の「計算機マテリアルデザイン入門」より、文献1)

5年を経過して、まさに、その通りだと実感している。この計算機マテリアルデザインについて説明しよう。図1には計算機マテリアルデザインエンジンを示す。先ず、望む物性をもつ候補となる物質を構築し、その構造に基づいて量子シミュレーションを行う(量子シミュレーション)。その結果からこの物質が持つ物性やその発現機構を定量的に評価する(物理機構の演繹)。そして、その定量的評価に基づいて、より望ましい物性を発現するであろう仮想物質を推

論し(仮想物質の推論)、その仮想物質が望む物性をもつかどうかを検証するために再度量子シミュレーションを行う。ここで望む物性が得られればよし、望む物性が得られない場合は、不発現機構を演繹し、再度、リファイルして仮想物質を推論する。というように、これまでの処理を再帰的に行うことによってより望ましい物質に仮想物質を近づけていく。このような、量子シミュレーションに基盤をおく新規物質の研究開発は、研究開発当初から実際に物質を製造する実験的なアプローチに比べ、設備投資等のコストを計算コストに置き換えることができるといった点で優れていると考えられる。もちろん、計算機マテリアルデザインの解析結果を実験で実証する必要がある。そうすることで新物質・新デバイスが実現される。次節では、計算機マテリアルデザインを用いた抵抗変化メモリデバイスに関する研究について紹介しよう。

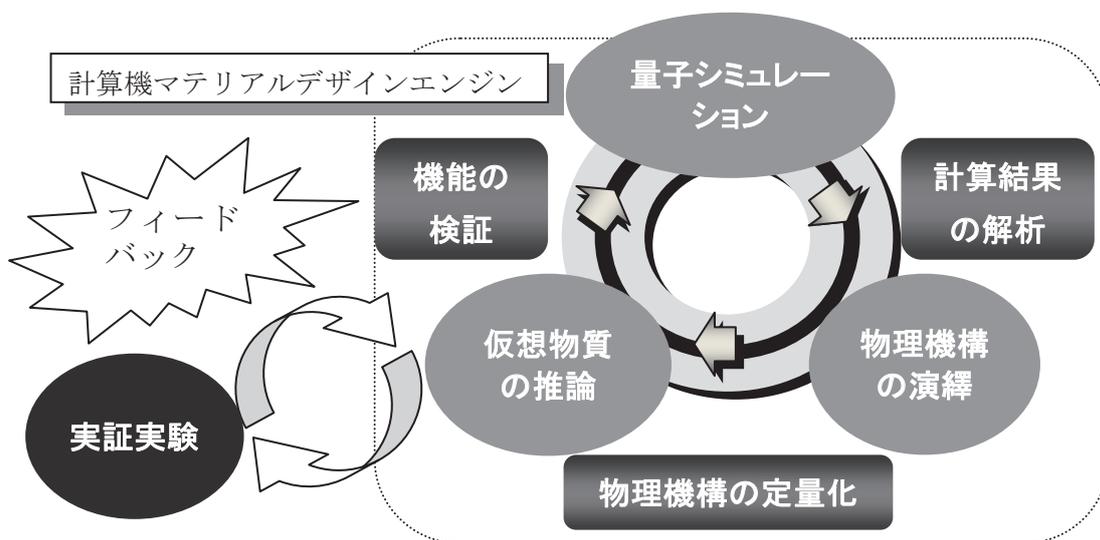


図1 計算機マテリアルデザインエンジンの概要図  
計算機マテリアルデザインエンジンを構成する3つの主要部分(量子シミュレーション、物理機構の演繹、仮想物質の推論)と実証実験との相関性を示す。

### 3. 遷移金属酸化物を用いた抵抗変化メモリデバイス

近年、ナノスケールでのエレクトロニクスデバイスの実現を目指し、機能性酸化物の研究が盛んに行われている。遷移金属酸化物薄膜の研究もその一つであり、大容量不揮発性メモリである Resistance Random Access Memory(ReRAM)<sup>[5-9]</sup>の物質候補として注目を集めている。ReRAMは、遷移金属酸化物層を金属電極層で挟んだサンドイッチ構造をしており、電圧パルスにより物質の抵抗値を不揮発的に変化させて記憶するメモリである。従来のフラッシュメモリと比べ、データの書き換え速度や耐久性において優れている。また、Magnetic Random Access Memory(MRAM)<sup>[10]</sup>、Phase Random Access Memory (PRAM)<sup>[11]</sup>、Ferroelectric Random Access Memory(FRAM)<sup>[12]</sup>に比べて構造が簡易であるため、素子を高密度に構成することが可能である。そのためコンピュータ技術に革新をもたらすものと期待されており、動作原理の解明、最適な物質の評価、さらには劣化要因の検討など様々な研究が行われている。

動作原理の解明を試みる研究においては、陽極の金属電極層と遷移金属酸化物層の界面における反応により抵抗変化が現れる可能性を示唆する研究等も発表されている<sup>[13]</sup>。我々も、理論的見地から ReRAM の動作原理に関する研究を進めており、これまでの研究において、金属電極層と遷移金属酸化物層を用いた構造を対象として、電子

状態の解析を行ってきた。特に、様々な遷移金属酸化物についてバンドギャップや磁気モーメントを評価することで ReRAM に適した構造の指針を検討してきた<sup>[14-17]</sup>。

本研究では、更に研究を進め、金属電極層と遷移金属酸化物層をもつ構造において、電圧印加の状態変化について解析を行う。遷移金属酸化物層には半導体 CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor) プロセスで既に使用されており、工場への導入が容易な物質である CoO を用いる。金属電極層には Ta 電極, W 電極, Hf 電極, Pt 電極, Cu 電極, Au 電極を用いて比較検討を行い、遷移金属酸化物層と金属電極層の界面における状態変化、特に原子の安定構造の違いについて理論的解析を行った。各電極を用いた構造における、電圧を印加していない状態（基底状態）と電圧を印加した状態（占有価電子数を減少させた場合のエネルギー極小状態）で安定的な構造の変化を比較評価し、原子配置の変化について検討した。次節、次々節では用いた電極物質のうち、原子配置の変化が顕著にみられた Ta 電極を用いた構造と、ほとんど原子配置の変化が起こらなかった Pt 電極を用いた構造を比較評価し、その研究成果について紹介しよう。

### 4. 計算手法

計算の対象となる ReRAM の構造として遷移金属酸化物層に CoO(001)構造を採用した(図2参照)。遷移金属酸化物層は NaCl 構造の CoO を4層設け、格子定数の値はバ

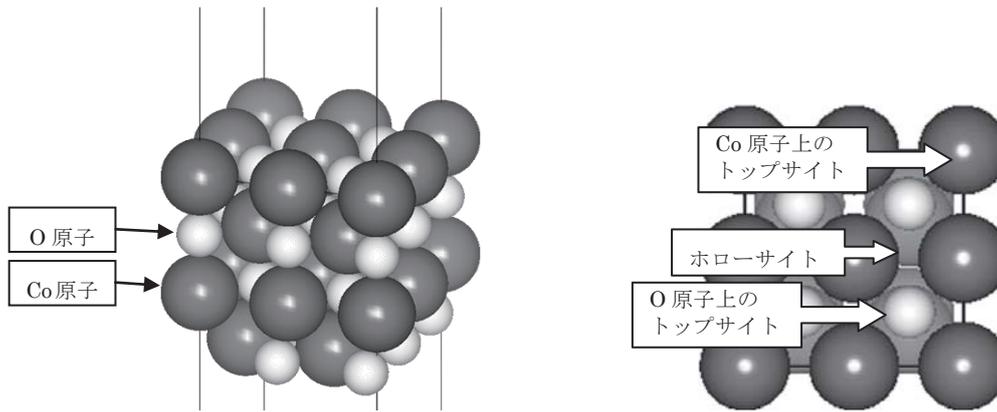


図2 CoOの構造モデル  
CoO(001)表面の構造及びCoO上の金属原子の吸着サイトを示す。

ルクの値を用いた。さらにReRAMの構造、特に陽極界面の構造をモデル化するため、図2のCoO(001)表面にTaもしくはPtを用いた金属電極層を吸着させた。金属電極層の安定的な構造を求めるため、CoO(001)表面上のCo原子上のトップサイト、O原子上のトップサイト及びホローサイトの3種のサイトにTaおよびPtを1層配置し、総エネルギーを比較した。比較した結果を表1に示す。計算結果より、電極層にTaを用いた構造ではO原子上のトップサイトに、電極層にPtを用いた構造ではホローサイトに電極原子が配置される構造が最も安定であることがわかった。

これらの計算で得られた安定的な構造に対して、陽極での印加状態を再現するため、ユニットセル内の占有価電子数を減少させた場合のエネルギー極小状態における安定

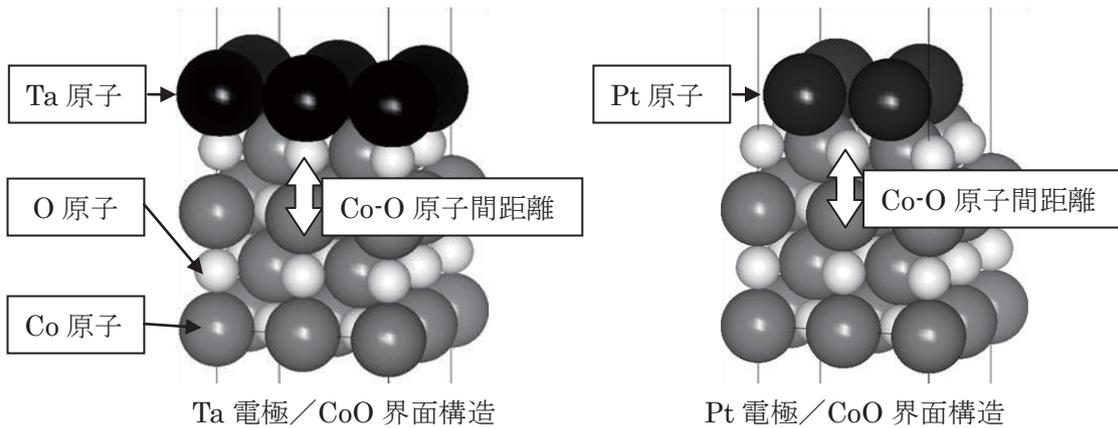
構造を求めた。これは、ReRAMの電圧印加時に一番エネルギーの高い電子が取られ、金属電極層/CoO層界面が正に帯電した状態を仮定している。この計算により再現された電圧印加時の電子状態を原子配置の変化に着目して解析する。特に界面におけるCoO層及び金属電極層の原子の安定構造を考察することで、CoO層の物性変化について検討する。

### 5. 計算結果及び考察

まず、占有価電子数を変化させた場合の原子配置の変化、特に界面のO原子とその下位層のCo原子の原子間距離の変化を図3に示す。Ta電極層を用いた構造ではCo-O原子間距離は2.11Åから2.39Åに変化している。一方、Pt電極層を用いた構造ではCo-O原子間距離は1.93Åから1.95Å

	Co原子上の トップサイト	O原子上の トップサイト	ホローサイト
Ta電極/CoO	+3.544eV	0.000eV	+3.085eV
Pt電極/CoO	+0.074eV	+1.532eV	0.000eV

表1 電極金属原子の各吸着サイトにおける総エネルギーの比較  
Ta電極を用いた構造、Pt電極を用いた構造ともに最も安定的な構造を原点にとり、総エネルギーの差を示す。



	Ta 電極	Pt 電極
Co-O 原子間距離 (電圧印加無)	2.11 Å	1.93 Å
Co-O 原子間距離 (電圧印加有)	2.39 Å	1.95 Å

図3 電圧印加による Co-O 原子間距離変化の比較  
Ta 電極層を用いた構造及び Pt 電極層を用いた構造における電圧印加時の構造変化を示す。

と、ほとんど変化しない。この計算結果の比較から、Ta 電極層を用いた構造では電圧印加時に電極方向に O 原子が引き寄せられ、下位層の Co 原子との原子間距離が広がることが判った。一方 Pt 電極層を用いた構造では、電極方向への O 原子の移動距離は小さいことが判った。この要因を検討するため、電圧印加による Co 原子の価電子数の変化<sup>[18]</sup>を解析した (図 4)。

Ta 電極層を用いた構造では、主に Ta 電極層/CoO 層界面近傍の Co 原子から価電子数が減少しているのに対し、Pt 電極層を用いた構造では、Pt 電極層/CoO 層界面近傍の Co 原子から CoO 内部層の Co 原子までほぼ均等に価電子数が減少することが判った。

電極に Ta を用いた場合、電圧印加によって界面第一層の Co 原子の電子が電極に

引き寄せられ、界面の Co-O 原子間の結合を弱め、その結果 Ta 電極側へ O 原子が移動する。一方電極に Pt を用いた場合は、電圧印加によって電極側に電子が引き寄せられる Co 原子が分散しているため、結果として電極に引き寄せられる界面第一層の電子の変化は少なく、界面における Co 原子周辺でも、Pt 原子及び O 原子との結合が弱まることはなく、Pt 電極側へ O 原子が移動することはないと考えられる。

以上の結果から、Ta 電極を用いた構造では Pt 電極を用いた構造よりも、電圧印加時に電極金属層/CoO 層界面における Co-O 原子間距離が増加しやすいことが判ったが、このことが ReRAM の動作原理にどのように影響を与えるのだろうか。そもそも、電気伝導性の観点からみれば Co は金属的な性質を持つが、O 原子と結合し酸化

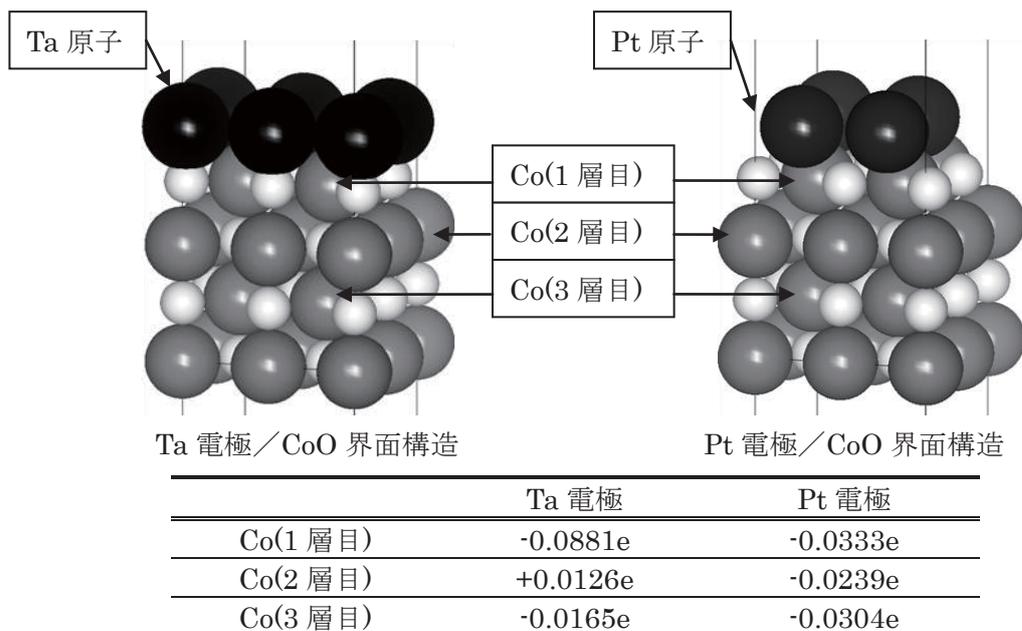


図4 電圧印加による Co 原子の価電子数の変化  
Ta 電極層を用いた構造及び Pt 電極層を用いた構造における電圧印加時の Co 原子の価電子数の変化を示す。正の値は価電子数の増加を示し、負の値は価電子数の減少を示す。

物を形成することで絶縁体的な性質となる。ReRAM における抵抗変化は、この O 原子との相互作用が変化することによって誘起されるのではないだろうか。つまり、Ta 電極を用いた構造では、電圧印加時に電極金属層/CoO 層界面における Co-O 原子間距離が増加しやすく、金属酸化物から金属単体に近づくことで、局所的に絶縁体的な性質から金属的な性質へと変化しているのではないかと推察することができる。一方、Pt 電極を用いた構造では、電圧印加時の電極金属層/CoO 層界面における Co-O 原子間距離の変化が小さく、金属酸化物の構造を保つため、絶縁体的な性質から金属的な性質への変化が起こりづらいと考えられる。

## 6. 結論

本研究では、計算機マテリアルデザインの研究手法を用いて抵抗変化メモリデバイスに関する解析評価を行った。金属電極層と遷移金属酸化物層を用いた構造を対象とし、電圧印加状態を再現して、原子配置の変化と電子状態の変化について解析した。電圧印加時の状態を解析したところ、Ta 電極の場合、安定的な構造として Ta 原子に O 原子が引き寄せられる構造をとることが判った。これは電圧印加時に、界面第一層の電子が電極側に引き寄せられ、界面の Co-O 結合を弱め、その結果局所的に絶縁体的な性質から金属的な性質へと変化していることが推察される。一方 Pt 電極の場合、Pt 原子に O 原子が引き寄せられることはほとんどない。これは、電圧印加による影響が界面から CoO 層内部まで分散し、結果として Co-O 結合が弱まらず、絶縁体的

な性質から金属的性質への変化が起こりづらいことが推察される。

この結果は、実験による結果とよく一致し、その後の研究で、電極金属層/CoO 層界面における酸素原子の挙動の違いが ReRAM のフォーミング電圧に影響があることが判り始めている<sup>[19]</sup>。つまり、Ta 電極を用いた構造では Pt 電極を用いた構造よりも低いフォーミング電圧で絶縁体的性質から金属的性質への変化が起こり易いといった実証実験が報告され始めている。

さて、ここまでの研究で計算機マテリアルデザインエンジンの量子シミュレーション及び物理機構の演繹を行ったことになる。その結果、より望ましい物性を発現する仮想物質の推論の基礎となる指針（電極金属層/CoO 層界面における酸素原子の移動距離の評価）が得られた。Ta 電極を用いた構造で Co-O 原子間距離が約 13% の増加、Pt 電極を用いた構造で Co-O 原子間距離が約 1% の増加と、大きな変化ではないが、この僅かな原子間距離の変化が、CoO の物性を考察する上で非常に重要であると考えられる。この指針に基づいて Ta, Pt 以外の電極物質：W, Hf, Cu, Au についても同様に評価し、W および Hf を電極物質として用いた構造が、電極金属層/CoO 層界面における酸素原子の移動距離の変化が大きく、電極物質として望ましいという結果が得られた。今後、ReRAM の動作原理、特に導電性の変化について研究を進めることで、これまでの研究で得られた仮想物質を、実現性の高い物質に近づけていることを試み

る。

量子シミュレーションを行い、原子スケールで電子状態を評価することで、導電性変化の要因を明らかにし、さらに劣化機構等の阻害要因を見出すことで大容量不揮発性メモリの実現に貢献できることを期待している。

## 謝辞

本論文に記載されている研究は、新エネルギー・産業技術総合開発機構ナノテクノロジープロジェクトにおける受託事業の一部として実施されたものである。本論文に記載されている計算の一部は、大阪大学サイバーメディアセンター、東京大学物性研究所、京都大学基礎物理学研究所の計算機システムを利用したものである。

また、大阪大学大学院工学研究科、精密科学・応用物理学専攻、中西寛助教には本プロジェクトでの計算やデータ解析の実施において、協力をお願いしている。ここに明記し、感謝の意を表す。

## 引用文献

- [1] 笠井秀明, 赤井久純, 吉田博 (編), 「計算機マテリアルデザイン入門」, 大阪大学出版会, 2005 年
- [2] 笠井秀明, 津田宗幸, 「固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計」, 大阪大学出版会, 2008 年
- [3] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136 (1964) B864.

- [4] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* 140 (1965) A1133.
- [5] J. W. Park, J. W. Park, D. Y. Young, and J. K. Lee, *J. Vac. Sci. Technol.*, A23 (2005) 1309.
- [6] S. Seo, M. J. Lee, D. H. Seo, S. K. Choi, D. S. Suh, Y. S. Joung, I. K. Yoo, I. S. Byun, I. R. Hwang, S. H. Kim, and B. H. Park, *Appl. Phys. Lett.*, 86 (2005) 093509.
- [7] S. Seo, M. J. Lee, D. H. Seo, E. J. Jeoung, D. S. Suh, Y. S. Joung, I. K. Yoo, I. R. Hwang, S. H. Kim, I. S. Byun, J. S. Kim, J. S. Choi, and B.H.P ark, *Appl. Phys. Lett.*, 85 (2005) 5655.
- [8] A. Beck, J. G. Bednorz, Ch. Gerber, C. Rossel, and D. Widmer, *Appl. Phys. Lett.*, 77 (2000) 139.
- [9] S. Q. Liu, N. J. Wu, and A. Ignatiev, *Appl. Phys. Lett.*, 76 (2000) 2749.
- [10] R. E. Fontana Jr., and S. R. Hetzler, *J. Appl. Phys.*, 99 (2006) 08N902.
- [11] H. Lee, D. H. Kang, and L. Tran, *Mater. Sci. Eng. B119* (2005) 196.
- [12] Y. Kumura, T. Ozaki, H. Kanaya, O. Hidaka, Y. Shimojo, S. Shuto, Y. Yamada, K. Tomioka, K. Yamakawa, S. Yamazaki, D. Takashima, T. Miyakawa, S. Shiratake, S. Ohtsuki, I. Kunishima, and A. Nitayama, *Solid-State Electron.*, 50 (2006) 606.
- [13] Y. Tamai, H. Shima, H. Muramatsu, H. Akinaga, Y. Hosoi, S. Ohnishi, and N. Awaya, “RRAM Technology for Fast and Low-Power Forming/Switching” Extended Abstracts of the 2008 International Conference on Solid State Devices and Materials, Tsukuba, J-9-3, (2008) 1166.
- [14] H. Kishi, N. Ozawa, M. Y. David, T. A. Roman, N. B. Arboleda Jr., W. A. T. Diño, H. Nakanishi, H. Kasai, F. Takano, H. Shima, and H. Akinaga, *J. Vac. Soc. Jpn.*, 51 (2008) 63.
- [15] H. Kishi, T. Kishi, W. A. Diño, E. Minamitani, H. Akinaga, H. Nakanishi, and H. Kasai, *J. Comput. Theor. Nanosci.* 5 (2008) 1976.
- [16] 笠井秀明, 中西寛, 岸智弥, 特許公開 2008-078509.
- [17] 笠井秀明, 中西寛, 岸智弥, 特許公開 2008-166591.
- [18] BADER CHARGE ANALYSIS <<http://theory.cm.utexas.edu/vtsttools/bader/>>
- [19] 日経産業新聞, 2008年9月26日, 朝刊, 10面

# センター報告

・大規模計算機システムQ&A・LINK集 ----- 17

## 大規模計算機システム Q & A ・ LINK 集

1. パスワード変更をしたいのですが？

<https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/> に Web からアクセスし、ログイン ID、パスワードの入力を行って、新パスワードを指定します。この時、MAC O/S を利用されていれば、Firefox か Netscape でご利用ください。

2. 研究室のパソコンからスパコンを利用したいのですが、どうすれば良いのでしょうか？

下記の URL にスーパーコンピュータ利用入門の講習会資料がありますので、ご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/sx-kiso1.pdf>

3. 大規模計算機システムにログインする方法を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。接続方法がわかります。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/login.html>

4. 大規模計算機システムにファイル転送を行いたいのですが？

WinSCP を使用してファイル転送を行います。下記の URL を参照ください。

[http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/file\\_transfer.html](http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/file_transfer.html)

5. 大規模計算機システムを利用する場合の資格を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。利用資格を知ることができます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shikaku/index.html>

6. 大規模計算機システムの負担金一覧表を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。負担金一覧表がわかります。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/futankin/index.html>

7. 大規模計算機システムの申請関係の情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。申請書及び内容を知ることができます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shinsei/forms.html>

8. 大規模計算機システムの試用制度について知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。制度の申し込み及び内容を知ることができます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/futankin/shiyou.html>

9. 大規模計算機システムのサポート情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。種々の情報等を掲載していますので、ご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/support/inquiry.html> 問合せ先情報

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/support/advisor.html> 利用相談員情報

10. 他の6大学情報基盤センターの情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。他大学情報基盤センターへリンクしています。

<http://www.cmc.osaka-u.ac.jp/j/intro/link.html>

11. Web上のマニュアルを参照できませんか？

下記の URL から大規模計算機システムのポータルにログインするとスーパーコンピュータシステムなどのマニュアル参照することができます。

<https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

# 利用規程等

• 規程関係 -----	21
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程 -----	21
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧 -----	22
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規 -----	23
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規 -----	23
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程 -----	24
ネットワーク専門部会内規 -----	24
• 附表 -----	25
大規模計算機システム ホスト一覧 -----	25
SX-8R、SX-9 及び PC クラスタのジョブクラス一覧 -----	25

## ・ 規程関係

### 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

第1条 この規程は、大阪大学サイバーメディアセンター(以下「センター」という。)が管理・運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーションシステム(以下「大規模計算機システム」という。)の利用に関し必要な事項を定めるものとする。

第2条 大規模計算機システムは、学術研究及び教育等のために利用することができるものとする。

第3条 大規模計算機システムを利用することのできる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員(非常勤講師を含む。)及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生
- (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関(前号に掲げる機関を除く。)で、センターの長(以下「センター長」という。)が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参画している民間企業等に所属し、専ら研究に従事する者
- (7) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

第4条 大規模計算機システムを利用しようとする者は、所定の申請を行い、センター長の承認を受けなければならない。

2 前項の申請は、大規模計算機システム利用の成果が公開できるものでなければならない。

第5条 センター長は、前条第1項による申請を受理し、適当と認めたときは、これを承認し、登録番号を与えるものとする。

2 前項の登録番号の有効期間は、1年以内とする。ただし、当該会計年度を超えることはできない。

第6条 大規模計算機システムの利用につき承認された者(以下「利用者」という。)は、申請書の記載内容に変更を生じた場合は、速やかに所定の手続きを行わなければならない。

第7条 利用者は、第5条第1項に規定する登録番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 利用者は、当該申請に係る利用を終了又は中止したときは、速やかにその旨をセンター長に届け出るとともに、その利用の結果又は経過を所定の計算機利用報告書によりセンター長に報告しなければならない。

2 前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、計算機利用報告書の提出を求めることができる。

第9条 利用者は、研究の成果を論文等により公表するとき

は、当該論文等に大規模計算機システムを利用した旨を明記しなければならない。

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

第11条 前条の利用経費の負担額は、国立大学法人大阪大学諸料金規則に定めるところによる。

第12条 前条の規定にかかわらず、次の各号に掲げる場合については、利用経費の負担を要しない。

- (1) センターの責に帰すべき誤計算があったとき。
- (2) センターが必要とする研究開発等のため、センター長が特に承認したとき。

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

- (1) 学内経費(科学研究費補助金を除く。)の場合にあつては、当該予算の振替による。
- (2) 前号以外の場合にあつては、本学が発する請求書の指定する銀行口座への振込による。

第14条 センター長は、この規程又はこの規程に基づく定め違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生じさせた者があるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることがある。

第15条 この規程に定めるもののほか、大規模計算機システムの利用に関し必要な事項は、センター長が定める。

附 則

- 1 この規程は、平成12年4月1日から施行する。
- 2 大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程(昭和43年9月18日制定)は、廃止する。
- 3 この規程施行前に大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程に基づき、平成12年度の利用承認を受けた利用者にあつては、この規程に基づき利用の登録があつたものとみなす。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年6月19日から施行し、平成14年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成20年4月16日から施行する。

## 大規模計算機システム利用負担額一覧

(国立大学法人大阪大学諸料金規則第3条(17)サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用経費負担額)

区分	計算機資源のシェア値	スーパーコンピュータ				ファイル利用の制限	年間負担額 (後期利用は半額)
		SX-8R		SX-9			
		並列実行CPU数	メモリ制限	並列実行CPU数	メモリ制限		
基本負担額	1	4	16GB	備考11	備考11	50GB	0円(備考7)
	1	4	16GB	備考11	備考11	50GB	1万円
	10	4	32GB	4	256GB	1TB	10万円
	50	8	制限なし	8	512GB	2TB	50万円
	100	制限なし	制限なし	制限なし	制限なし	3TB	100万円
	260	制限なし	制限なし	制限なし	制限なし	4TB	200万円
	450	制限なし	制限なし	制限なし	制限なし	5TB	300万円
ファイル追加オプション	ファイル追加 100GBにつき						1万円
消費税額	上記負担額で算出した合計額に100分の5を乗じて得た額						

### 備考

- 1 基本負担額は年度の最初の登録時に算出する。
- 2 各基本負担額の制限内でスーパーコンピュータ、クラスタシステム、ファイルなど計算機資源を利用できる。
- 3 基本負担額1万円の場合、登録者数は1名とする。その他の場合、登録者数は特に制限を設けない。
- 4 後期(10月～3月)利用の基本負担額及びファイル追加オプションは、年間負担額の半額とする。
- 5 上記の基本負担額以外に50万円単位での申請を1,000万円を上限として受け付ける。その場合のシェア値及びファイル利用の制限の設定については以下のとおりとする。  
 シェア値は、300万円未満が基本負担額の1.3倍、300万円以上が基本負担額の1.5倍とする。  
 ファイル利用の制限は、50万円につき0.5TBを加算する。
- 6 ファイルサーバはファイル使用量の制限内で利用できる。なお、制限値以上の利用は50GB単位での追加オプションとなる。
- 7 別に定める試用制度による利用を認められた者は、基本負担額1万円の場合と同じ資源を、登録のあった月から、前期(4月～9月)3ヶ月間、又は後期(10月～3月)1ヶ月無料で利用できる。ただし、当該会計年度を越えてからの利用はできないものとする。
- 8 大学院の学生が基本負担額1万円で利用する場合、負担額を半額とする優遇措置を受けられる。
- 9 企業利用者は、科学研究費補助金及び共同研究プロジェクトでの利用を除き負担額を3倍の設定とする。
- 10 先端研究施設共用イノベーション創出事業に係る利用期間は四半期単位とする。なお、負担額は前項の年間負担額の1/4とする。
- 11 試用制度及び基本負担額1万円でSX-9を利用する場合、ジョブクラス表のデバッグクラス(DBG9)のみを可能とする。

## 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規

第1条 この内規は、大阪大学サイバーメディアセンター（以下「センター」という。）が管理運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーション（以下「大規模計算機システム」という。）の試用制度を利用するための必要な事項を定める。

第2条 試用制度は、初めてセンターの大規模計算機システムを利用する者（以下「利用者」という。）に一定の期間利用させることによって、同システム利用についての知識の向上と教育研究活動と学習に役立てることを目的とする。

第3条 試用制度を利用することができる者は、次の各号のいずれかに該当するものとする。

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員（非常勤講師を含む。）及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生
- (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関（前号に掲げる機関を除く。）で、センターの長（以下「センター長」という。）が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

第4条 利用者は、所定の申請書により申請し、センター長の承認を得なければならない。ただし、上記の申請はセンターホームページから行えるものとする。

第5条 センター長は、前条の申請について適当と認めた場合は、当該利用番号を与えて承認するものとする。

第6条 利用者の有効期間は、前期（4月～9月）3ヶ月間、又は後期（10月～3月）1ヶ月間とする。ただし、当該会計年度を超えることはできないものとする。

2 基本負担額 10,000 円の場合と同じ計算機資源を利用可能とする。

3 利用有効期間を超えた場合は、強制的に利用を取り消すものとする。

第7条 利用者は、当該利用番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 センター長は、この内規に違反した場合、もしくは氏名等を偽り利用した場合、その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生ぜしめた場合には、当該利用の承認を取り消すことがある。

附 則

この内規は、平成12年11月30日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

## 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規

第1条 大阪大学サイバーメディアセンター（以下「センター」という。）は、センターが管理・運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーション（以下「大規模計算機システム」という。）の共同利用の効果を高め学術研究の発展に資するため、大規模計算機システム利用相談及び指導活動（データベース開発指導を含む。）を行う。2 前項の目的のため、センターに利用相談員（以下「相談員」という。）及び利用指導員（以下「指導員」という。）を置く。

第2条 相談員及び指導員は、共同利用有資格者の中から広報委員会が候補者を推せんし、教授会の議を経てセンター長が委嘱する。

第3条 相談員及び指導員の任期は、4月1日又は10月1日からの1カ年とする。ただし、再任を妨げない。

第4条 相談員は、電子メール等を利用しオンラインで、第1条第1項のセンター利用相談活動を行うものとする。

第5条 指導員は、所属の地区協議会連絡所において、第1条第1項のセンター利用指導活動を行うものとする。

第6条 相談員及び指導員には、センター利用相談及び指導の必要上、計算機利用のために特定の番号を与えることができる。2 前項に係る利用経費の負担額は免除する。

第7条 センターは、相談員及び指導員に対し相談及び指導上必要な資料もしくは情報を提供するものとする。

第8条 センターは、相談員及び指導員に対する研修会並びに研究連絡会等を実施するものとする。

2 前項の企画及び実施に当たっては、広報委員会が企画・立案し、教授会の承認を得るものとする。

第9条 相談員には、第6条第1項の目的以外においても、一定量の大規模計算機システム使用にかかるジョブ優先処理等の特典を与えることができる。

第10条 この内規に定めるもののほか、必要な事項については広報委員会で検討後、教授会の議を経てセンター長が別に定めるものとする。

附 則

この内規は、平成12年11月30日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

## 大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程

第1条 大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会（以下「本会」という。）は、大阪大学サイバーメディアセンターが管理・運用する共同利用・共同利用拠点のスーパーコンピュータシステム、コンピュータシステム及び関連するネットワーク（以下「大規模計算機システム等」という。）の利用を希望し、本会に所属するものの利便をはかることを目的とする。

第2条 本会の事務局を大阪大学サイバーメディアセンター内に置く。

第3条 本会は、大阪、和歌山、奈良、兵庫、岡山、香川、愛媛、高知及び徳島の9府県内にある連絡所をもって会員とする。

2 上記以外で、理事会が特に認めた連絡所は会員とすることができる。

第4条 連絡所を設けようとするものは、責任者を定め、連絡所登録申請書を本会事務局へ提出し、理事会の承認を受けなければならない。

2 前項の連絡所の廃止をするものは、連絡所廃止届を本会事務局へ提出しなければならない。

3 連絡所の責任者は、その連絡所に所属し、大規模計算機システム等を利用するものを代表して、必要な事務を処理する。

第5条 本会は、第1条に示された目的を達成するため、次の事業を行う。

- 一 会員の登録承認
- 二 大阪大学サイバーメディアセンターと会員間の連絡及び調整
- 三 他の地区協議会との事務連絡及び情報交換
- 四 その他理事会が必要と認めた事項

第6条 本会に会長1名、理事若干名の役員を置く。

2 本会に幹事若干名を置き、役員を補佐せしめることができる。

3 幹事は、理事会の承認を経て、会長が委嘱する。

第7条 会長は本会を代表し、本会の業務を総括する。

2 会長は理事の互選によって定める。

3 会長の任期は2年とし、再任を妨げない。ただし、任期途中で交代した会長の任期は、前任の会長の残任期とする。

第8条 理事は会員の互選によって定める。

2 理事の任期は2年とし、再任を妨げない。ただし、任期途中で交代した理事の任期は、前任の理事の残任期とする。

第9条 会長は理事会を招集し、その議長となる。

2 理事会は次の事項を審議する。

- 一 連絡所の設置の承認
- 二 事業計画の立案並びに実行
- 三 その他会長が必要と認めた事項

3 理事会は、理事現在数の2分の1以上の出席がなければ開催することができない。ただし、あらかじめ委任状を提出したものは出席者とみなす。

4 理事会の議事は、出席者の過半数をもって決し、可否同数のときは、議長が決する。

第10条 会長は年1回以上総会を招集し、その議長となる。

2 総会は次の事項を審議する。

- 一 本会規程の改廃
- 二 事業報告
- 三 事業計画
- 四 その他理事会が必要と認めた事項

3 総会は、会員現在数の5分の1以上の会員が出席しなければ開催することができない。ただし、あらかじめ委任状を提出したものは出席者とみなす。

4 総会の議事は、出席者の過半数をもって決し、可否同数のときは議長が決する。

第11条 本会は、特定事項の審議等のため、必要に応じて専門部会を置くことができる。

2 専門部会に関し必要な事項は、本会が別に定める。

附 則

この改正は、平成12年10月4日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成14年10月15日から施行し、平成14年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成17年10月14日から施行し、平成17年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成21年10月16日から施行し、平成21年4月1日から適用する。

## ネットワーク専門部会内規

第1条 大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会（以下「第6地区協議会」という。）規程（以下「協議会規程」という。）第11条に規定する専門部会として、ネットワーク専門部会（以下「専門部会」という。）を置く。

第2条 専門部会は、学術研究、教育活動等を支援するネットワークの情報交換等の便宜を図り、地域に貢献することを目的とする。

第3条 専門部会は、次の各号に掲げるものをもって構成する。

- 1 協議会規程第3条に規定する会員
- 2 その他専門部会が必要と認めた者

第4条 専門部会に部会長を置き、第6地区協議会会長が指名する。

2 部会長は、専門部会を招集し、その議長となる。

第5条 専門部会は、通常は年1回、第6地区協議会の開催に併せて開催することとし、必要に応じて開催することができる。

附 則

この内規は、平成14年10月15日から施行し、平成14年4月1日から適用する。

・ 附表

大規模計算機システム ホスト一覧

サーバ名	ホスト名
ログインサーバ※	login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ファイル転送サーバ	ftp.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
Mail サーバ	mail.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp

※スーパーコンピュータなどの演算システムへは、ログインサーバ経由での接続となります。  
(ホスト一覧表には明記していません)

SX-8R、SX-9 及び PC クラスのジョブクラス一覧

スーパーコンピュータと PC クラスのジョブ資源制限値は次のとおりです。

クラス	経過時間		使用 CPU 数		主記憶(GB)	
	既定値(分)	最大値(時間)	既定値	最大値	既定値	最大値
DBG	1(1分)	1(10分)	1	4	1	16
SX8F(SXF)	1	24	1	8	1	120
SX8L(SXL)	1	120	1	32	1	1000
SX8L(届出制)	1	240	1	64	1	2000
DBG9	1(1分)	1(10分)	1	4	1	128
SX9	1	24	1	64	1	4000
SX9(届出制)	1	240	1	128	1	8000
PCC	1	720(4CPU まで)	4	128	16GB/ノード	
		120(16CPU まで)				
		24(128CPU まで)				

(注)DBG クラス、経過時間の括弧内の数字は CPU 時間の既定値と最大値です。

# 募 集

・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について ----- 29

## 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

センターでは、大規模計算機システムを利用して研究したことを主体とする内容の広報誌の発行を予定しています（年2回）。この広報誌に掲載する次の内容の記事を募集しますので、皆様のご投稿をお待ちします。

1. 随筆
2. 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発の紹介
3. プログラムの実例と解説
4. その他、広報誌に掲載するにふさわしいもの

\* 投稿いただいた方には、掲載した広報誌5部を進呈いたします。

### 【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
  - ・ ページ設定（Microsoft Word2003 の設定です。）
    - ・ 用紙サイズ A4 縦
    - ・ 1 ページの文字数と行数：行数 50、行送り 18.2pt、1 頁 2 段書き
    - ・ フォント 本文 MS 明朝 10Point  
題名 MS ゴシック 14Point、  
執筆者氏名 MS 明朝 10Point、なお、姓と名の間及び機関と学部と専攻名の間は半角スペースを入れる。
    - ・ 余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
    - ・ その他 セクションの開始位置：次のページから開始  
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm  
垂直方向の配置：上寄せ
  - ・ 文字等の設定
    - ・ 年は西暦で記述する。
    - ・ 数字、英字は半角（書式：times new roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
    - ・ 文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧は全角
    - ・ 日本語文中の句読点は半角の“、” “。”を使用せず、全て全角の“、” “。”とする。
2. Microsoft Word2003 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、pdf ファイルに変換してください。
3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。  
usersv@cmc.osaka-u.ac.jp  
なお、送信の際、件名を「計算機利用ニュース原稿」と入力くださるようお願いいたします。
4. 原稿ファイルの容量が10MBを超える場合は、CD-R等の電子媒体に記録のうえ以下の送付先にお送りください。

### 【原稿の送付先】

〒567-0047

大阪府茨木市美穂ヶ丘5-1 大阪大学情報推進部情報企画課情報企画班

### 【注意事項】

1. お送りいただいた原稿を掲載する際、原稿の修正をお願いすることがありますのでご了承ください。
2. 提出いただいた原稿は、サイバーメディアセンターのホームページにて公開いたしますので、ご了承ください。

広報委員会委員

小田中 紳 二 (委員長、大阪大学サイバーメディアセンター)  
藤 堅 正 (近畿大学理工学部)  
豊 永 昌 彦 (高知大学理学部)  
前 迫 孝 憲 (大阪大学大学院人間科学研究科)  
養 老 真 一 (大阪大学大学院法学研究科)  
小 郷 直 言 (大阪大学大学院経済学研究科)  
阿 部 浩 和 (大阪大学サイバーメディアセンター)  
清 川 清 (大阪大学サイバーメディアセンター)  
竹 蓋 順 子 (大阪大学サイバーメディアセンター)  
時 田 恵一郎 (大阪大学サイバーメディアセンター)  
馬 場 健 一 (大阪大学サイバーメディアセンター)

大阪大学サイバーメディアセンター

計算機利用ニュース 2009年度 Vol.5 No.2

2010年3月発行

編集者 大阪大学サイバーメディアセンター  
広報委員会

発行者 大阪府茨木市美穂ヶ丘5-1 (〒567-0047)  
大阪大学サイバーメディアセンター  
Cybermedia Center, Osaka University  
Tel: 06-6879-8808  
URL: <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/>

印刷所 大阪市福島区玉川3-6-4  
阪東印刷紙器工業所

# 目 次

大規模計算機システム利用者報告 …………… 1	大阪大学サイバーメディアセンター
【論 文】	大規模計算機システム試用制度利用内規 …… 23
・ QCD相転移現象の研究	大阪大学サイバーメディアセンター
野中 千穂 …………… 3	大規模計算機システム利用相談員指導員内規 … 23
・ 計算機マテリアルデザイン先端研究事例	大型計算機利用大阪地区（第6地区）
—抵抗変化メモリの動作原理の解明に向けて—	協議会規程 …………… 24
金属電極層／遷移金属酸化物層界面における構造	ネットワーク専門部会内規 …………… 24
変化に関する解析評価	・ 附表 …………… 25
岸 浩史、笠井 秀明 …………… 6	大規模計算機システム ホスト一覧 …… 25
センター報告 …………… 15	SX-8R、SX-9及びPCクラスタの
・ 大規模計算機システムQ&A・LINK集 …… 17	ジョブクラス一覧 …………… 25
利用規程等 …………… 19	募 集 …………… 27
・ 規程関係 …………… 21	・ 大規模計算機システムを利用して行った
大阪大学サイバーメディアセンター	研究・開発等の記事の募集について …… 29
大規模計算機システム利用規程 …………… 21	
大阪大学サイバーメディアセンター	
大規模計算機システム利用負担額一覧 …… 22	

(お願い)

このニュースは、本センター利用者（利用登録者）の皆様にご配布しています。

お近くの研究者・大学院生の方にも、このニュースをご回覧くださるようお願い申し上げます。