

Cybermedia Center
Osaka University

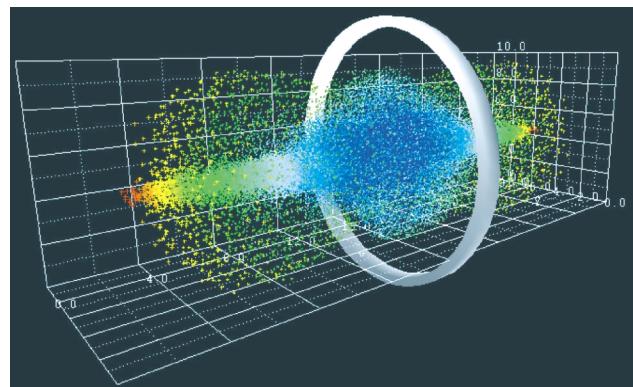
大阪大学サイバーメディアセンター 計算機利用ニュース

Vol. 4 No.1 2008.6
第6号

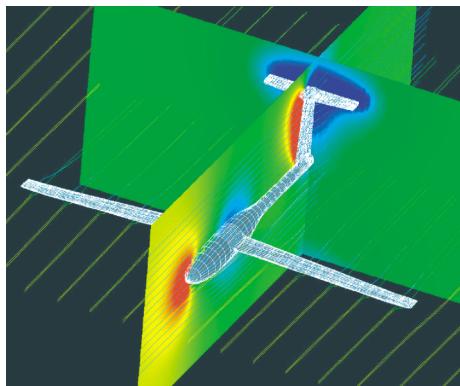
Cybermedia Center, Osaka University



左：「高校生のためのスーパーコンピューティングコンテスト」が
平成20年度文部科学大臣賞を受賞



上：イオン運動のスナップショット
(利用者報告「LPP-EUV光源におけるイオン・デブリ
磁場抑制の3D-PIC シミュレーション」より)



左：IB-FEMによる弾性構造物と流れの相互作用の計算例
(利用者報告「多相流の数値シミュレーション」より)

利 用 案 内

主なサービス内容 (設置機種)	係・室名等	連絡先・電話番号 (大阪大学内から は下4桁が内線番 号となります)	月～金	土・日・ 祝日
--------------------	-------	---	-----	------------

●開館サービス時間

センター利用者の呼出 センター見学の申込等一般受付	情報推進部情報企画課 総務係 soumu@cmc. (吹田本館 1F)	06-6879-8804	8:30～12:15 13:00～17:15	閉 室
会計事務一般	情報推進部情報企画課 会計係 kaikei@cmc. (吹田本館 1F)	06-6879-8810		
利用者受付 利用案内、利用申請、利用者講習会、広報誌の発行、利用負担金、図書の閲覧、貸出	情報推進部情報企画課 情報企画班 usersv@cmc. (吹田本館 1F)	06-6879-8808		
大規模計算機システムの運用・管理、セキュリティに関すること	情報推進部情報基盤課 研究系システム班 system@cmc. (吹田本館 2F)	06-6879-8813		
ネットワークの運用・管理、セキュリティに関すること	情報推進部情報基盤課 研究系システム班 network@cmc. (吹田本館 2F)	06-6879-8816		
プログラムのメール等相談	メール利用相談員 toiawase@cmc. 情報企画班 (吹田本館1F)	Tel : 06-6879-8808 Fax : 06-6879-8814	常時	

●計算機運転サービス時間

オンライン・サービス 〈センター外端末からの利用〉 (注)	終 日 運 転
すべての計算機	

(注) * 平日の17時15分以降及び土曜日・日曜日・祝日は自動運転を行っていますが、障害が発生した場合は、その時点でサービスを中止することがあります。

* スーパーコンピュータは、毎月の第1月曜日8:30～11:00に保守点検のため停止します。

* サービス時間は原則として上記の時間となっていますが、状況によって変更する場合がありますので、ご了承ください。

* E-mailアドレスの末尾にはosaka-u.ac.jpをお付け下さい。

大規模計算機システム 利用者報告

・無衝突衝撃波問題のグローバル多次元流体シミュレーション	-----	3
水田 晃 千葉大学先進科学研究教育センター		
藏満 康浩、加藤 恒彦、坂和 洋一、高部 英明 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター		
・LPP-EUV 光源におけるイオン・デブリ磁場抑制の 3D-PIC シミュレーション	-----	5
沼波 政倫 レーザーエネルギー学研究センター		
・第一原理計算による酸化物触媒の表面物性に関する研究	-----	10
草部 浩一、幾野 佑一、原田 和樹、長柄 一誠 大阪大学大学院基礎工学研究科		
・多相流の数値シミュレーション	-----	14
梶島 岳夫 大阪大学大学院工学研究科		

無衝突衝撃波問題のグローバル多次元流体シミュレーション

水田 晃¹

千葉大学先進科学研究教育センター

藏満康浩、加藤恒彦、坂和洋一、高部英明

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター

はじめに・研究背景

天体プラズマからは陽子等の荷電粒子が加速され、宇宙線として高エネルギー粒子が地球にまで到達している。そのエネルギーは 10^{20} eV という地上の実験では実現が困難な高エネルギー領域にまで伸びている。荷電粒子は銀河間ガスの磁場によってその方向が曲げられてしまうため、直進できずどのような天体が加速場所なのか、加速する物理メカニズムはどのようなものなのかといった基本的な問題が、未解決のまま残されている。

比較的エネルギーの低い 10^{15} eV 以下の宇宙線に関しては銀河系内の超新星残骸から加速されていていると言われている。超新星爆発によって、爆風波が星間空間中に伝搬し、星間ガスとの相互作用によって、衝撃波が形成される。その衝撃波面から宇宙線は加速されている。加速機構としては無衝突衝撃波において、磁場のエネルギーを粒子のエネルギーに転換する加速機構が有力である。衝撃波の強さ、磁場の強度、加速される空間、時間スケール等が、宇宙線のスペクトルに大きく影響する。粒子シミュレーションによって、近年はその詳細が議論されているが、実験的な検証は行われていない。

無衝突衝撃波の形成実験に関してはレーザー生成プラズマを用いて、Bell et al.(1988)によって行われた。この実験では平版固体ターゲットに強度 $\sim 10^{13}$ W/cm² のレーザーを照射し、膨張プラズマを固体障害物にぶつけることで、バウ衝撃波を形成させた。彼らの解析ではマッハ数 2 程度になり、密度、温度の見積りから無衝突衝撃波であると報告された。しかし、これに続く実験はほとんど行われていない。

本研究は将来粒子加速の検証も見込んだ実験を視野に入れた、無衝突衝撃波形成プロジェクト研究の中の理論、シミュレーションを担っている。

グローバルシミュレーションによって、どのようなターゲット形状が好ましいか、どのようなプラズマが形成されるかを調べていく。

グローバル流体シミュレーション

今年度は昨年秋に激光 XII 号で行われた実験の解析に向けて、平版プラスチックターゲットにレーザーを照射した際に、裏面から出るプラズマの膨張を調べた。実験では、膨張をガイドするためにターゲットに金のコーンを取り付けた場合も行われており、その影響も調べた。コーンは膨張プラズマを指向性のあるものとし、ラバールノズルのようにマッハ数の大きい状況を作られれば、より効果的に粒子加速を調べられると期待される。このスキームでは指向性のあるプラズマが生成されることが期待でき、実験室での超音速ジェットの形成も期待できる [2,3,4,5]。

実験のセットアップを図 1 に示す。左側から照射されたレーザーは、500ps, 総エネルギー 450J, スポット径は 300μm である。ターゲット、金コーンのサイズ等は図 1 を参照。

この実験を、レーザーがターゲットに吸収されたとして、初期ターゲットのレーザー照射部分を固体密度の高温プラズマとして近似し、その時間発展を追った。ここでは、コーン無し、コーン前段部分のみ、コーン前後段の 3 つの場合である。計算は軸対称 2 次元を仮定して行った。

結果・議論

まずは、金コーン無しの場合の密度等高図を図 2(a) に示す。加熱されたプラスチックプラズマは音速が 10^7 cm/s 程度になり、ターゲット表面、裏面から大きく膨張する。裏面を突き破る時の慣性とスケールの大きさから、球状の膨張ではなくやや z 軸に指向性のある形状となる。

次に、1 段の金コーンを装着した場合の密度等高図を図 2(b) に示す。横(r) 方向への膨張は金コーン

¹E-mail:mizuta@cfs.chiba-u.ac.jp

ンによって効率良く抑制されるが、コーンの出口で大きく膨張する。

最後に2段の金コーンを装着した場合の結果が図2(c)であるが、これは、先のケースの横の膨張よりも大きくとられており、今回の計算では大差が無かった。

まとめ

無衝突衝撃波形成に関するレーザープラズマ実験のグローバル2次元シミュレーションを行った。現段階では実験で得られた膨張波の速度と若干のずれがあり、実験結果との詳細な比較には至っていない。実験比較に耐えうる計算へ向けてシミュレーション条件を見直す必要がある。改良した計算結果を用いて実験との比較、高マッハ数の無衝突衝撃波生成のために金コーンの形状の最適化を行っていきたい。

参考文献

- [1] A. R. Bell, PRA, **38**, 1363 (1988).
- [2] D. R. Farley, et al., PRL, **83**, 1982 (1999).
- [3] K. Shigemori, et al., PRE, **62**, 8838567 (2000).
- [4] A. Mizuta, et al., ApJ, **567** 635 (2002).
- [5] B. Loupias, et al., PRL, **99**, 265001 (2007).

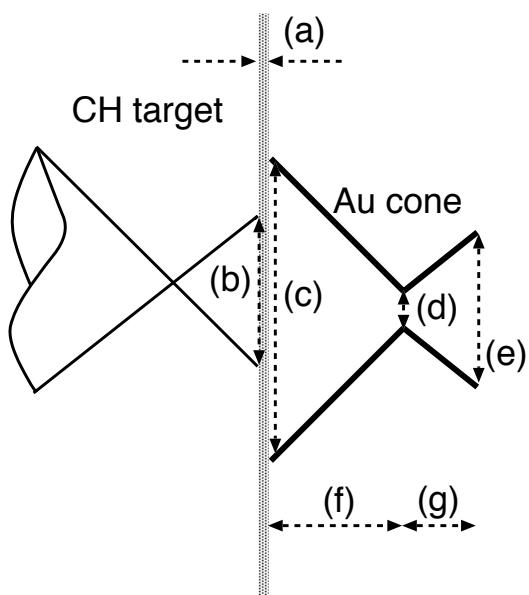


Fig.1 Schematic figure of experimental setup. The distances shown in the figure are (a)10, (b)300, (c)500, (d)10, (e)260, (f)483, and (g)250 μm , respectively.

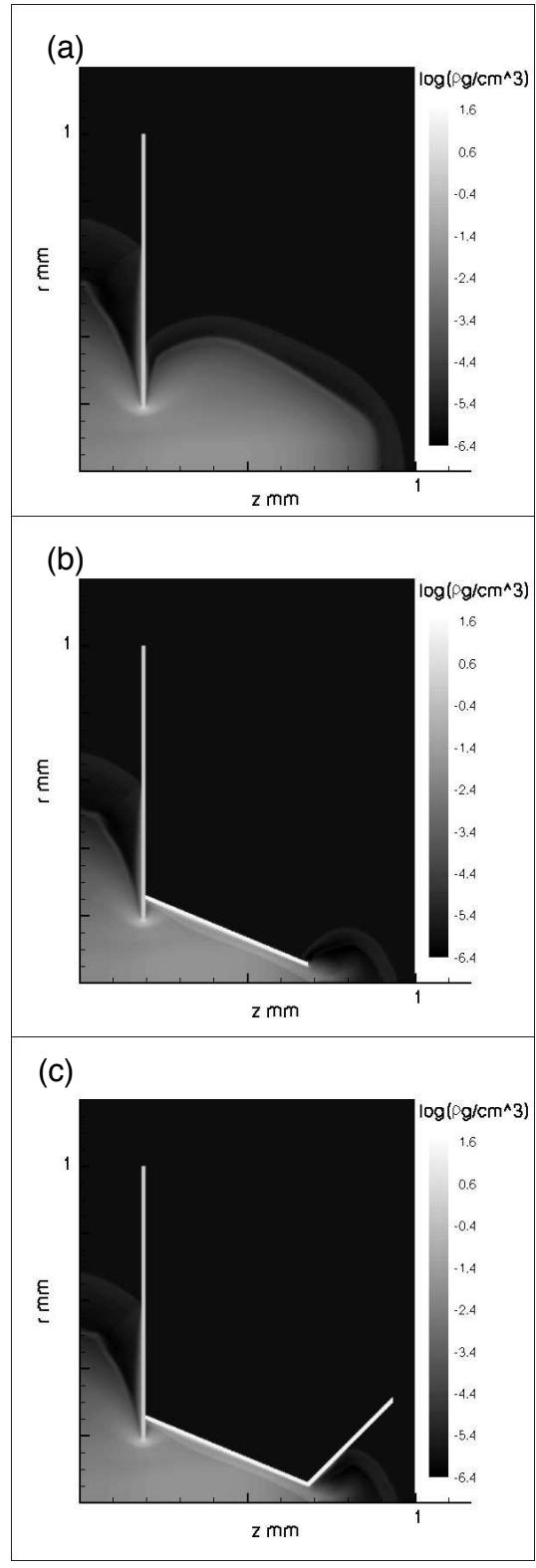


Fig.2 Density contours of the results. (a)without Au cones, (b)with first Au cone, (c)with first and secondary cones. z axis corresponds to cylindrical axis.

LPP-EUV光源におけるイオン・デブリ磁場抑制の 3D-PICシミュレーション

沼波政倫
レーザーエネルギー学研究センター

1 はじめに

半導体集積回路は30年間に渡り「3年で4倍の高集積化が実現される」という所謂ムーアの法則に従って進歩してきた。しかし、従来の光リソグラフィーは液浸露光等の新技術が存在はするが、限界が近づいているのが現状である。さらなる解像度向上に向けては抜本的な技術革新が必要であり、その次世代露光光源として、極端紫外線(EUV)が最も有力な候補として注目を集めている[1]。この光源生成技術としては、放電プラズマによるDPP方式と短パルスレーザーを用いたLPP方式[2]-[8]の双方が熾烈な国際競争の下、活発に開発が進められている。大阪大学レーザーエネルギー学研究センターのグループでは、文部科学省リーディングプロジェクト「極端紫外(EUV)光源開発等の先進半導体製造技術の実用化」の下で、レーザー生成プラズマEUV光源(LPP-EUV)開発を進めてきているが、この光源方式では、スズの固体ターゲットにレーザーを照射しスズの4d-4f遷移による13.5 nmの放射光をMo/Si多層膜ミラーで集光し光源に用いる。しかし、レーザー照射により生成されたプラズマからは多くの高エネルギーイオンが放出され、それらによる集光ミラーの損傷が大きな懸念事項となっている。そこで、外部磁場を印加することでイオンをローレンツ力により装置外部へ誘導しミラーの損傷を防ぐ「磁場シールド」の方法が提案されている。磁場中でのレーザー生成プラズマの膨張運動では、交換不安定性や磁場・プラズマ圧力比依存性など多くのファクターが複合的に関連している。こういった複雑な系でのプラズマ現象を扱うには計算機シミュレーションは必要不可欠である。我々は、この磁場シールドの有効性を確かめるため、サイバーメディアセンターのSX-8Rを用いて、粒子シミュレーション研究(Full-PICシミュレーション)を行った。

2 LPP の膨張とイオンエネルギー

レーザー生成プラズマの膨張過程では、まず電子がレーザーによって熱せられ、真空中に膨張する。次いで膨張電子により形成された電場によってイオンが加速される。このようなイオン加速機構におけるイオンエネルギー分布については、非線形自己相似解が存在することが分かっており、実験結果とも非常に良い一致を見ている[10]。この理論モデルによると、最大のイオンエネルギーは次式で与えられる。

$$E_{\max} \simeq 2\langle Z \rangle T_e \ln \left(\frac{\Lambda^2}{2} / \ln \frac{\Lambda^2}{2} \right), \quad (1)$$

ここで、 $\Lambda = R_0/\lambda_D$ であり、 R_0 はプラズマの初期サイズである。 λ_D は電子デバイ長であり、 $\lambda_D = (\varepsilon_0 k T_e / n_0 e^2)^{1/2}$ で定義される。 $(n_0$ と T_e はそれぞれ初期密度、初期電子温度である。) 図1に、初期密度が一様で、初期温度を電子のみに持たせた($T_e \neq 0, T_i = 0$) 球状プラズマにおける様々な Λ に対してのイオンの最大エネルギーの3D PICシミュレーションによる結果を示す。ここで、電子・イオンの質量比は計算機性能の理由から $m_i/m_e = 100$ としている。上記の理論モデルによる結果(図中の実線)と、PICシミュレーション結果が非常に良く一致していることが分かる。イオンの最大エネルギーは Λ に強く依存しているため、より小さなサイズ、密度のターゲットを用いることでイオンエネルギーを抑制することができる事が分かる。

3 磁場中のイオンの運動

ここでは、シングルコイルによる外部磁場中のレーザー生成プラズマの膨張過程をシミュレートするにあたって、 $\Lambda \simeq 62$ の球状プラズマを考える。初期の磁場圧力とプラズマ圧力の比は、コイル中心において $p_{e0}/p_B = n_0 k T_e / (\mu_0 B_0^2 / 2) \simeq 14$ とする。粒子質量比は前節と同様、 $m_i/m_e = 100$ に

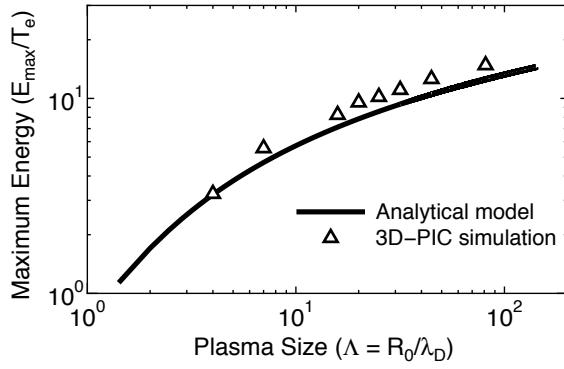


図 1: イオンの最大エネルギーとプラズマサイズ・パラメータ Λ との関係。各点は我々のシミュレーション結果、実線は理論モデルの結果を表す

とし、約 15 万個の $Z = 1$ イオンと電子をコイル中心に均等配置した。

図 2 に時刻 $c_{s0}t/R_0 = 7.8$ におけるイオンの運動のスナップショットを示す。ここで、 c_{s0} はイオン音速である。この結果より、イオンはシングルコイルの作る磁場に沿う形で膨張し、高エネルギーイオンが磁気軸方向に排出されていくことが分かる。図 3 は、同時刻におけるイオンのエネルギースペクトルを磁場に平行方向と垂直方向に分解して示している。垂直方向成分は自由膨張時と比較して強く抑制されている一方で、平行方向成分は増大している。従って、シングルコイル磁場を用いることで、多くのイオンを磁気軸方向に排出し、磁場に垂直方向にはイオンの膨張を抑制できることが分かる。

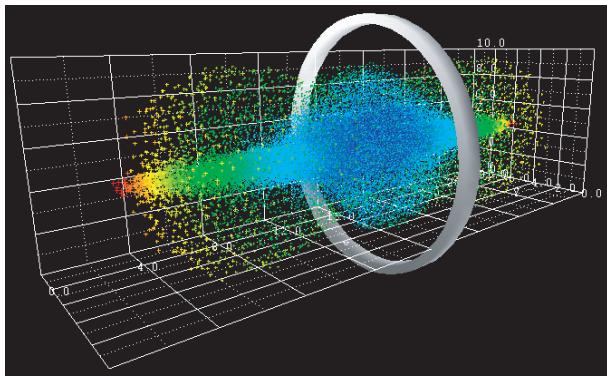


図 2: イオン運動のスナップショット。各点はイオンの位置を示し、リング状の物体はシングルコイルを表す。

次に、コイル中心において磁気軸に沿って距離 $\pm R_0$ のスライスされた領域におけるイオンの径方向分布を図 4 に示す。各色は、コイル中心における磁場強度が $B = 1B_0$, $2B_0$, $3B_0$ の場合の結果を表

している。時刻は、 $B = 1B_0$, $2B_0$, $3B_0$ の場合に對して、それぞれ $c_{s0}t/R_0 = 7.8$, 4.3 , 3.2 のものである。各々の場合において、上で求めた磁場に垂直方向の最大エネルギーから想定される最大の旋回直径(図中の破線)以内にイオン分布は抑えられていることが分かる。最大旋回直径の 90% 以遠に到達するイオンの割合は、 $B = 1B_0$, $2B_0$, $3B_0$ のそれぞれの場合に対して、0.039%, 0.019%, 0.016% であった。従って、径方向分布の観点からもイオンデブリは旋回直径の範囲内に抑制できることが分かる。

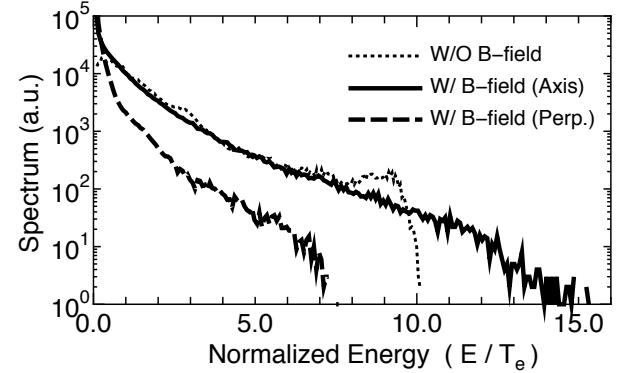


図 3: イオンのエネルギースペクトル。点線は自由膨張の場合のスペクトル、実線・破線はそれぞれ外部磁場がある場合の磁場に平行方向・垂直方向のスペクトルを表す。

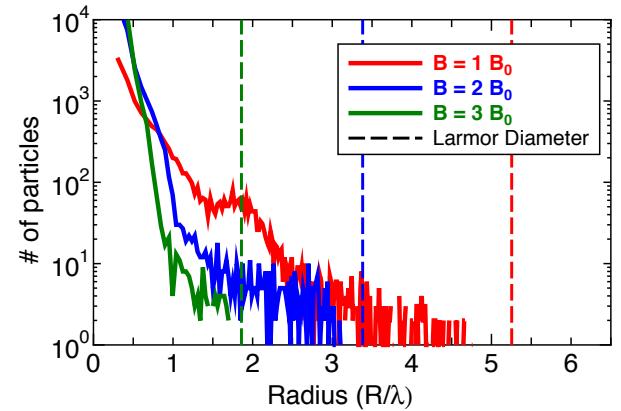


図 4: $B = 1B_0$ (赤色)、 $2B_0$ (青色)、 $3B_0$ (緑色) の場合におけるイオンの径方向分布 破線は、磁場に垂直方向の最大エネルギーから想定される最大の旋回直径を表す。

磁場が存在する場合の荷電粒子の旋回半径は $R_L = \sqrt{2mE}/(ZeB)$ のように質量の平方根に比例するため、電子とイオンは、非常に異なる旋回半径を持つ。レーザー生成プラズマは、まず電子が熱せられて膨張するが、外部磁場が存在すると非

常に小さな半径で旋回運動するため、自由膨張時に比べて電子膨張は強く抑制される。一方、イオンは自由膨張と同様に電子膨張に伴う電場で加速されるが、旋回半径が電子と比較して非常に大きい為に、電子表面を追い越し、真空中へ運動することになる(図5)。従って、今度は内向き電場が形成されイオンは減速に転じることになる。図6に、イオン・電子の規格化平均エネルギーの時間変化を示す。自由膨張の場合と比べて、電子の旋回運動の半周期程度の時刻からイオンエネルギーはその増大を抑制されていく、後に減少に転じることが分かる。

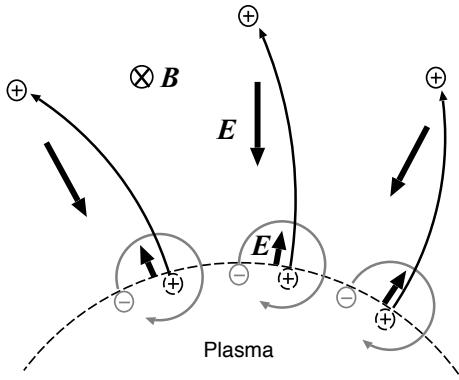


図5: 外部磁場が存在する場合のレーザー生成プラズマの膨張プロセス。まず、熱電子が膨張・旋回運動し、次いでイオンが加速し、電子を追い抜いていく。

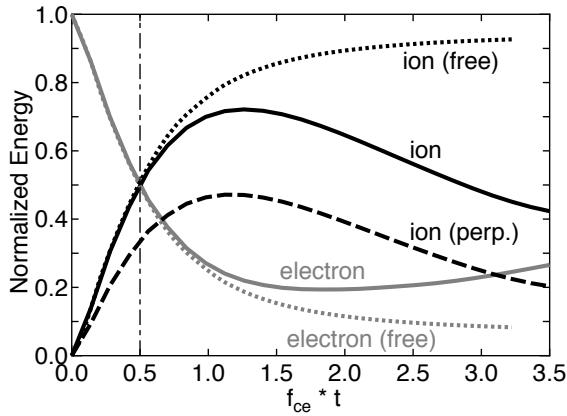


図6: イオン・電子の規格化平均エネルギーの時間変化。実線、点線はそれぞれ、磁場がある場合、無い場合の結果。破線は、磁場に垂直方向のイオンエネルギーを示す。

ここまで、一定の初期電子温度、密度、プラズマサイズの下で解析を進めてきたが、これらの物理量に対するイオンエネルギーの依存性についても調べる。図7に磁場に垂直方向の規格化平均イオンエネ

ルギーと $\beta R_{Le}/R_0$ との関係を示す。ここで、 $\beta = p_{e0}/p_B$ であり、 R_{Le} は電子の初期旋回半径である。この結果により、 $\beta R_{Le}/R_0$ の値が小さくなるにつれて、磁場に垂直方向のイオンエネルギーも減少することが分かる。さらに、 $\beta R_{Le}/R_0 < 30$ の領域に対しては、フィッティング関数 $E_{perp} = a(\beta R_{Le}/R_0)^b$ を得ることができた。ここで、 $a = 1.86 \times 10^{-1}$ 、 $b = 2.47 \times 10^{-1}$ である。実験で用いる典型的なパラメータ領域は破線で示した場所に存在するため、この関数を外挿すると自由膨張と比較してイオンエネルギーが磁場に垂直方向に対して、10%程度まで抑制することができる可能性があることが分かる。

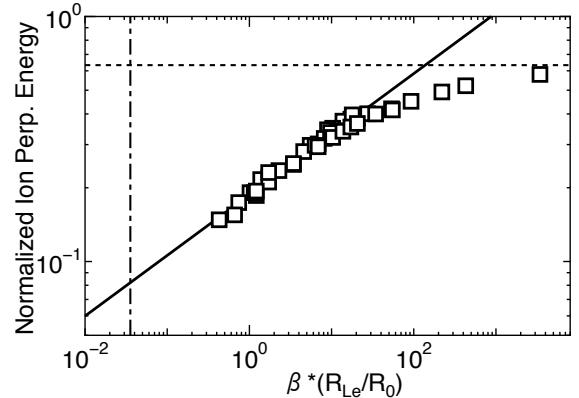


図7: 磁場に垂直方向の規格化平均イオンエネルギーと $\beta R_{Le}/R_0$ との関係。各点は我々のシミュレーション結果、点線は自由膨張時のエネルギー、点破線は実験で用いられる典型的なパラメータ $T_e = 50$ eV、 $n_e = 10^{19}$ cm $^{-3}$ 、 $R_0 = 500$ μm、 $B = 3$ T に対応している。実線は、 $\beta R_{Le}/R_0 < 30$ に対するフィッティング関数。

4 交換不安定性の影響

一般に、磁場中での高圧プラズマの膨張過程では、交換不安定性が生じる [12]。これは、 $R_{Le} < R_0 < R_{Li}$ のスケール関係性を持つレーザー生成プラズマが磁場中で膨張する場合、電子の $E_r \times B$ ドリフト運動によってプラズマ表面で荷電分離が起こり、角度方向電場 E_θ が形成されるために生じる。ここで、電場 E_r は、前述のような真空中へのイオンの運動によって生じた内向き電場である。そこで我々は、イオン空間分布の交換不安定性による影響を調べた。図8は、初期プラズマ中心から距離 $R = 2.5R_0$ と $R = 7.5R_0$ の球殻上に存在するイオン密度分布を示したものである。さらに、コイル中心において磁気軸に沿って $\pm R_0$ の領域で

の、イオン角度分布、及び角度方向電場を図9に示す。ここでは、径方向に内部領域 ($R < R_{\max}$) と外部領域 ($R > R_{\max}$) の2つの領域に分け、評価している。 R_{\max} は、最大のイオン旋回半径である。上記2つの結果から、内部領域では交換不安定性の影響を強く受けている一方で、外部領域では角度方向電場 E_θ が殆ど形成されず、不安定性の影響が現れていないことが分かる。

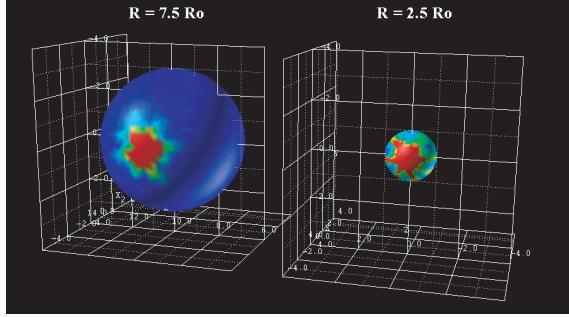


図8: 球殻上におけるイオン密度分布。内部領域 ($R = 2.5 R_0$) では、交換不安定性が強く現れているが、外部領域 ($R = 7.5 R_0$) では殆ど見られない。

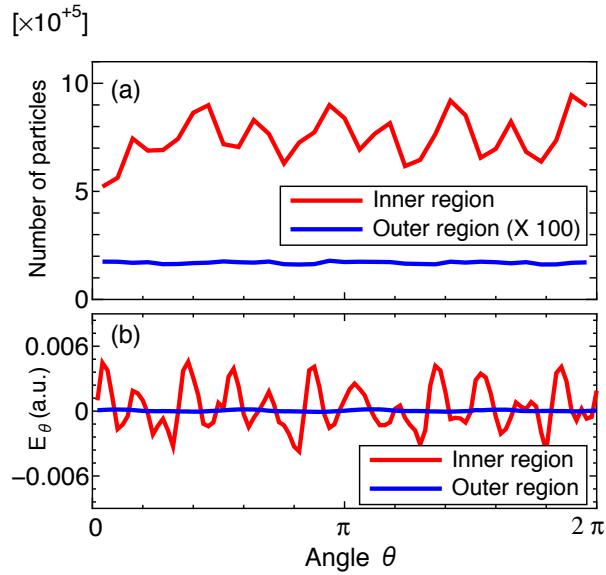


図9: (a) イオンの角度分布、及び(b) 角度方向電場 E_θ 。赤色は外部領域 ($R > R_{\max}$)、青色は内部領域 ($R < R_{\max}$) を示す。外部領域におけるイオン分布は値を100倍にして表示している。

5 まとめ

今回、我々はLPP-EUV光源におけるイオンデブリの磁場シールド技術を評価するため、3D PICシミュレーションにより磁場中のレーザー生成ブ

ラズマの膨張ダイナミクスについて調べた。イオンの最大エネルギーはプラズマサイズと電子デバイ長により決定されることが分かり、低密度で小さなサイズのターゲットを用意することで、イオンエネルギーを抑制できることを見た。さらに、シングルコイル磁場を印加した場合、電子とイオンの旋回半径の違いにより、磁場に垂直方向のイオンエネルギーが強く抑制され、磁力線方向に効率的にイオンを排気できることが分かった。さらにイオンの飛翔距離は、エネルギースペクトルから想定される旋回直径程度に抑えられることも確認した。また、交換不安定性についても解析した結果、内部領域では不安定性の影響を強く受けるものの、集光ミラーが配置される外部領域では、殆ど影響を受けないことを確認した。以上により、LPP-EUV光源におけるイオンデブリの磁場シールド技術は、イオンデブリ問題を解決し得る極めて有効な方法であることが結論付けられた。

謝辞

本研究は文部科学省リーディング・プロジェクト「極端紫外（EUV）光源開発等の先進半導体製造技術の実用化」の下で行われた。また、本稿での計算結果の全てはサイバーメディアセンターのスーパーコンピュータ SX-8R を用いて得られたものである。このような計算機環境を提供して頂いたサイバーメディアセンターの方々、及び、福田優子氏をはじめとする大阪大学レーザーエネルギー学研究センターの高性能計算機室の方々に深く感謝する。

参考文献

- [1] Silfvast W T and Ceglio N M 1993 *Appl. Opt.* **32** 6895
- [2] Jin F and Richardson M 1995 *Appl. Opt.* **34** 5750
- [3] Spitzer R C, et al. 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 2251
- [4] Shimoura A, et al. 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 2026
- [5] Choi I W, et al. 2000 *J. Opt. Soc. Am. B* **17** 1616
- [6] Shimada Y, et al. 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 051501
- [7] Aota T and Tomie T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 015004

- [8] Hayden P, et al. 2005 *Proc. SPIE* **5751** 919
- [9] Esirkepov T Zh 2001 *Comp. Phys. Comm.* **135** 144
- [10] Murakami M and Basko M M 2006 *Phys. Plasmas* **13** 012105
- [11] Murakami M, et al. 2005 *Phys. Plasmas* **12** 062706
- [12] Rosenbluth M N and Longmire C L 1957
Ann. Phys. (N.Y.) **1** 120
- [13] Ripin B H, et al. 1993 *Phys. Fluids B* **5** 3491

第一原理計算による酸化物触媒の表面物性に関する研究

大阪大学大学院基礎工学研究科 草部浩一、幾野佑一、原田和樹、長柄一誠

ペロブスカイト構造をもつ LaFeO_3 薄膜に関する一般化勾配補正近似の範囲での第一原理電子状態計算から仕事関数の評価を行なって、面方位依存性、表面構造依存性を検討した。また、Pd(100)表面上に形成された PdO 薄膜への酸素吸着位置決定を通して、 N_2O 還元に引き続いた CO 酸化プロセスがこの表面上でも進行しうるとする結論を得た。

1. ナノ粒子自己形成触媒に関連した課題

自動車用三元触媒として、従来の貴金属担持型と比較したときに大幅な貴金属使用量の低減が可能となる貴金属固溶ペロブスカイト触媒に注目が集まっている^{1,2)}。この触媒は 2002 年にダイハツ工業によって開発され、直ちに実用化されている Pd 固溶ペロブスカイト型酸化物 $\text{La}(\text{Fe}_{1-x}\text{Pd}_x)\text{O}_3$ を始めとする酸化物触媒を指す。この貴金属使用量を劇的に減少させる新型触媒の機能を理解して、さらに貴金属使用量を究極的にはゼロにまで低減するための、実験的・理論的研究開発が進められている。

この研究開発のためには、ペロブスカイト型三元触媒において現われる、 NO_x 還元、炭化水素酸化、CO 酸化の各反応過程を理解していくことが課題となる。この反応の途中において、貴金属のナノ粒子がペロブスカイト型構造の表面に析出することが実験的に知られている。 NO_x 還元反応にはこの析出したナノ粒子が機能していると考えられている。そこで、ペロブスカイト型三元触媒の理解をするためには、貴金属の表面物性にも着目した研究開発が必要とされるものと考えられる。そして、酸化物特有の表面物性が現われているものと考えられることから、ペロブスカイト構造がもつ表面構造の多様性についても理解を進める必要がある。

そこで、第一ステップとして、我々はこの系の反応に関連して 2 つの理論研究課題を設定して、第一原理シミュレーションによる電子状態と物質構造の決定を基にした研究を行なった。第一のものは、電子系のもつ化学ポテンシャルの表面依存性の評価である。金属表面において、真空準位に相対的な化学ポテンシャルの決定とは、仕事関数の評価である。

基本的な母物質である LaFeO_3 に関する仕事関数の面方位依存性、表面構造依存性の推定を目標とした。次に、Pd の酸化膜を例として NO_x 還元反応と引き続いての CO 酸化反応が起こりうることを示すための PdO 上の酸素吸着問題を取り扱った。

2. 第一原理計算を用いた仕事関数の評価法

仕事関数は、金属中の電子状態を知る上で、光電効果を決定する物理量の一つであるという以上に、基本的な情報を与える物理量の一つである。この量は、真空中に置かれた金属から、一つの電子をある一つの表面から取り出して、真空中にある「無限遠」まで取り出すために要する最低エネルギーである。ただし、この「無限遠」までの距離は、表面の特徴的長さを超えてはいけない³⁾。つまり、仕事関数は表面ごとに特定される物理量であって、バルク系の物理量ではない。密度汎関数理論^{4,5)}に基づいた電子状態計算によれば、原理的に仕事関数の精密評価ができると言え、実際に計算結果と実験値の直接比較が出来る精度での近似計算法が与えられている。表面での酸化・還元反応それぞれに対して最適な表面構造がどのようなものであるかを検討する際にも、気相中の化学種からみた電子親和力やイオン化ポテンシャルの表面依存性に相当するこの仕事関数を一つの指標に用いることが出来る。

密度汎関数法を用いて仕事関数の理論を最初に提出した研究は、密度汎関数法の創始者である W. Kohn とその弟子である N. D. Lang による⁶⁾。彼らはこの中で仕事関数 Φ の決定が本質的に多体問題であることを指摘している。その定義は、

$$\Phi = [\phi(\infty) + E_{N-1}] - E_N$$

である。ここで、 E_N は N 電子系の基底状態エネルギーであり密度汎関数法が直接答えを与えることができる。無限遠での静電ポテンシャル $\phi(\infty)$ の評価は密度汎関数法の計算の途中で行なっている有効ポテンシャルの計算結果から推定できる。上式では、無限遠において電子波は最低のエネルギー $\phi(\infty)$ をもつ状態にあるとして、さらに金属との量子力学的コヒーレンスは持たないと考えている。 E_N や $\phi(\infty)$ 自体は原点の選び方によるが、2 つの自己無撞着状態のエネルギー差である Φ はエネルギー原点の選び方に依らない。 $E_N - E_{N-1}$ は金属では化学ポテンシャル（以下では絶対零度を考慮することにしてフェルミエネルギー E_F と呼ぶ）であり $\Phi = \phi(\infty) - E_F$ と書ける。 N 電子系が孤立系の場合には $I = -(E_N - E_{N-1})$ がイオン化エネルギー、また $A = -(E_{N+1} - E_N)$ が電子親和力に相当する。ここまで、密度汎関数法の計算においても比較的評価値の信頼性が高いものであるが、ただしバルク半導体の場合には $-(A - I)/2$ が半導体ギャップの半分に相当し、局所密度近似した際には評価が難しく、一電子励起状態の評価法が必要となる。特に、遷移金属酸化物の場合には、金属系で精度が高いとされている一般化勾配補正近似 (GGA) を行なっても絶縁体化を表現しきれないことが知られている。しかし、表面構造によるポテンシャル変化を反映する仕事関数には、実際の系の特性が GGA による計算においても定性的な表面構造依存性が反映されると考える。

仕事関数の評価では、金属表面上に発生する表面電気二重層を、フェルミ面効果により決まる金属内部での荷電分布とともに、自己無撞着に決定する必要がある。しかし、そのためには表面から金属深部まで続くフリーデル振動を評価しなければならない。ここではむしろ得られる値は、計算において用いているスラブ層をなす薄膜に対する評価結果であると理解して計算結果を解釈する。また、 $\Phi = \phi(\infty) - E_F$ は収束の速い交換・相關ポテンシャルの寄与を差し引いた有効ポテンシャルによる評価値に極めて近い値として有限のスラブ計算から直ちに求まる⁷⁾ こと

が、真空スラブ層に関する外挿の結果からも確認できるが、真空層に関するこの外挿を取る操作をそれぞれの薄膜に対して行なうことで、仕事関数の収束値を得ることにした。

3. 仕事関数の面方位依存性

我々はこのような方法を用いて、貴金属元素表面の面方位依存性を決定し直した⁷⁾。得られた結果は、以前の計算例⁸⁾と比較した場合に実験値に近い場合もあるが、逆に評価が悪く見える場合もあることが分かった。ここでは、金属層として 5 層の場合に限って真空層に関する収束のみを確認しているが、金属層の厚さに関する変動を評価することで、収束値を得ることが出来ると考えられる。金属表面における仕事関数の面方位依存性には Smoluchowski による電子密度のスムージング効果⁹⁾ が知られている。これは、表面の原子密度が高いほど仕事関数が大きくなり、FCC 構造では (110), (100), (111) の順番に仕事関数が並ぶことを予想させる。再構成表面を作らない元素である Pd, Rh では、確かに仕事関数の評価値がこの順序に並んでいる。

さらに、同様の方法によりペロブスカイト触媒の母物質の一つである LaFeO₃ に対して、 Φ の面方位・表面構造依存性を調べた¹⁰⁾。(Table 1) ただし、実験的にはこの物質は絶縁性であるが、用いた GGA 計算では一種の一電子近似であることを反映して、結果は金属性の表面バンド構造を示していることも、定量性を議論する際には留意しなければならないだろう。また、今回の計算では計算規模の点から非対称スラブを用いざるを得なかった。一部の構造に対する対称スラブでの計算結果との比較によって、さらに誤差が 0.3 eV 程度はあると推定されることにも注意されたい。

得られた結果からは、しかしながら、面方位だけでなくどの面が出ているのかに関する表面構造依存性が極めて顕著であると結論されることには、注目すべきであろう。特に、酸素のみが表面を覆っている場合に、仕事関数が顕著に大きな値をもつことが分かる。また、同じ面方位であっても、表面上に現われている金属の種類によって eV オーダーの変化

が生じうることが見て取れる。

Surface structure	Work function [eV]
(100) : La-O surface	2.4
(100) : Fe-O surface	4.8
(110) : LaFe-O surface	3.3
(110) : O surface	7.0
(111) : La-O surface	4.1
(111) : Fe surface	3.5

Table 1. Theoretical estimation of work functions of surfaces of LaFeO_3 . The values are given by the GGA calculations using the plane-wave expansion method.

ペロブスカイト触媒では、ペロブスカイト構造のBサイトにおいてFeを貴金属により置換して使われている。しかし、母物質自体にも触媒作用があることが実験的に知られている。今回の計算結果は、表面外部の真空領域のポテンシャルに相対的な物質中の電子最高占有軌道のエネルギーが、表面構造に対して敏感に変わること、ステップエッジが生じている場合にはそのエッジに局所電場勾配が強く発生することを予想させることなど、仕事関数という量のみの評価からもこの系の面白い表面反応を推測させるものである。

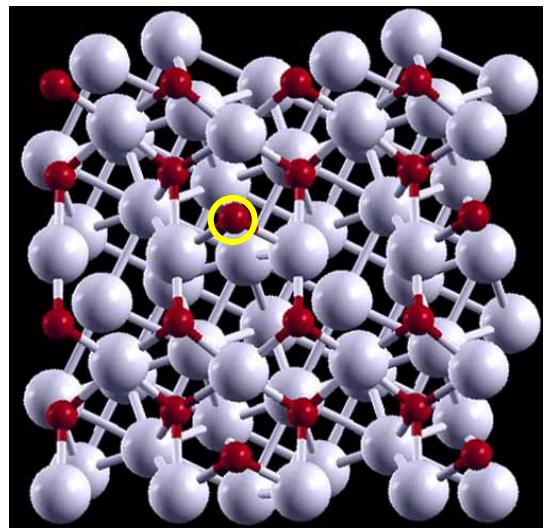
4. Pd酸化膜における酸素吸着

貴金属であるPdはそもそも酸化しにくい金属であるが、特にPd(100)面上に安定なPdO(101)単層膜が形成されることによって、CO酸化に関する触媒効果に変化があり得る。こうした理由から、Pd上の酸化膜に興味が持たれている。¹³⁾そこで、被覆率が1/8の場合に現われる構造として実験的・理論的に同定がされている $(\sqrt{5} \times \sqrt{5})R27^\circ$ 構造を例として、Pd酸化膜上の触媒反応パスを検討することを試みた。

まず、中間状態として、PdO薄膜に原子上酸素が一つ吸着した表面構造の最適化計算を行なった。酸素吸着位置に関して幾つかの初期配置を取って構造最適化計算を平面波基底展開法により行なった結果、Fig. 1に示す2つの構造を得た。ここでは、それらを(a) bridge siteと(b) hollow siteと呼ぶこと

にする。

(a)



(b)

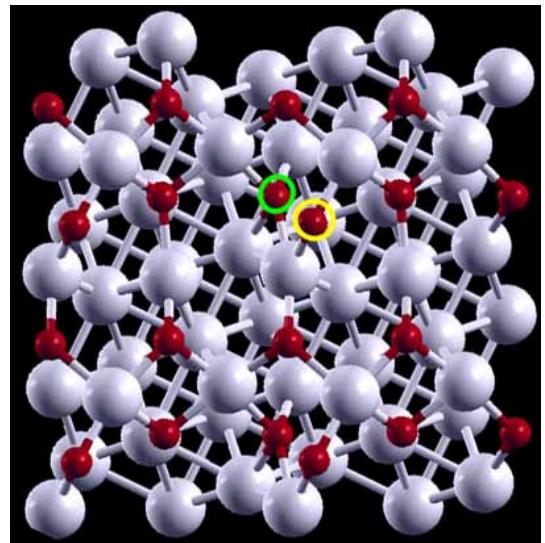
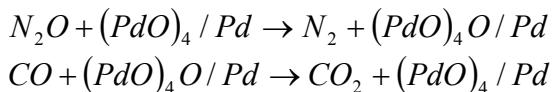


Fig. 1 Optimized atomic positions of an adsorbed oxygen atom on a PdO thin film of a $(\sqrt{5} \times \sqrt{5})R27^\circ$ structure on a PD(100) surface. In (a), the adsorbed oxygen (yellow circled) is at a bridge site, while in (b) the extra oxygen is at a hollow site. In (b), a green-circled atom forms a new bonding with a palladium atom of the Pd substrate.

これらの構造とそのエネルギー比較から、次の解釈が可能である。まず、構造の特徴として、bridge site構造では、もともとのPdO膜上に隣接してある

2つのPd原子を繋ぐ位置に酸素が吸着して結合を形成している。この2つのPdはもとは酸素と2配位で結合していたものであり、構造上は $(\sqrt{5} \times \sqrt{5})R27^\circ$ 構造の単位胞にもう一箇所可能な吸着位置が見いだせる。一方、hollow siteは、4配位のPdと2配位のPdを繋ぐ位置に相当し、ここに余計な酸素が吸着することで、もともと結合を形成していた酸素(Fig. 1(b)の緑色の円で示したもの)の結合を切って、その酸素にはPd基盤に含まれるPdとの結合を新たに形成させる、という効果があることが見て取れる。エネルギー的にはbridge siteが3.9 mRyほど安定となっているため、酸化が進む経路の一つと考えられるhollow site吸着は生じにくいが、十分に発生しうるものであるとも考えられる。

我々は、次のような反応パスを考えることにより、N₂Oからの酸素脱離と、引き続いて起こるCOの酸化が可能であるかを検討した。



これらの反応過程の反応熱をTable 2に示す。反応の活性障壁の推定など今後に残っている検討内容があるが、この結果は、この2つの反応は連続して起こすことによって、自発的に生じうることを示している。ただし、中間状態において、酸素の被覆率が上がり過ぎた場合に、COの供給が同時になければ反応が停止することが考えられる。

Oxygen site	Reduction of N ₂ O [Ry]	Oxidation of CO [Ry]
Bridge	0.096	0.204
Hollow	0.092	0.208

Table 2. Theoretical estimation of reaction energy for N₂O reduction and CO oxidation on a PdO/PD(100) surface.

数値計算には、Quantum-espresso ver 3.0 packageを用いている。¹²⁾本研究の一部は、元素戦略プロジェクト「脱貴金属を目指すナノ粒子自己形成触媒の新規発掘」からの支援を得て実施された。

- 1) Y. Nishihata, J. Mizuki, T. Akao, H. Tanaka, M. Uenishi, M. Kimura, T. Okamoto and N. Hamada, Nature **418**, 164 (2002).
- 2) Y. Nishihata, J. Mizuki, H. Tanaka, M. Uenishi, M. Kimura, J. Phys. Chem. Solids **66**, 274 (2005).
- 3) 塚田捷編：“表面科学シリーズ 2 表面における理論 I 構造と電子状態”（丸善, 1995）.
- 4) P. Hohenberg and W. Kohn: Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- 5) W. Kohn and L. J. Sham: Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- 6) N. D. Lang and W. Kohn: Phys. Rev. B **3**, 1215 (1971).
- 7) Y. Ikuno and K. Kusakabe: to appear in Surf. Sci. Nanotech. (EJ).
- 8) M. Methfessel, D. Hennig, and M. Scheffler: Phys. Rev. B **46**, 4816 (1992).
- 9) R. Smoluchowski: Phys. Rev. **60**, 661 (1941).
- 10) 幾野佑一: 修士論文 (大阪大学, 2008).
- 11) P. Kostelník, et al, Surf. Sci. **601**, 1574 (2007).
- 12) S. Baroni, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, P. Giannozzi, C. Cavazzoni, G. Ballabio, S. Scandolo, G. Chiarotti, P. Focher, A. Pasquarello, K. Laasonen, A. Trave, R. Car, N. Marzari, A. Kokalj: the Quantum-espresso 3.0 (<http://www.pwscf.org/>).

多相流の数値シミュレーション

大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻 梶島 岳夫

1. 緒言

連続相（流体）に分散した多数の粒子を含む多相流の直接数値シミュレーション(Direct Numerical Simulation, DNS)について述べる。本稿では、固体粒子、気泡、液滴の個々の要素を粒子と総称し、それらの集合を連続相に対して分散相と表現する。DNSとは、現象の解明や理論の検証などのため、目的に影響を与えるような物理モデルを使わないで基礎方程式を高精度・高解像度に数値計算することである。

自然界や工業装置に見られる流れの多くは乱流状態であり、粒子群と乱流は様々なスケールにおいて相互作用をもつ。このような分散性の多相乱流に対して、フルスケールで DNS を実施することは計算機性能の制約から困難である。大スケールの流れ場を解くときには、粒子は質点モデルで近似されたり、あるいは数密度分布のような連続体モデルで扱われたりするが、結果はモデルに大きく依存する。一方、全ての粒子周りの流れを解く場合には、扱うことのできる流れ場のスケールがかなり制約される。われわれは、どちらかというと後者の立場から粒子群と流れとの相互作用を理解し、前者の立場で用いるような多相乱流モデルの構築を目指している。

流れの数値計算においては、物体形状に沿って一般曲線座標を設定する境界適合座標法、任意の多角形・多面体で場を埋め尽くす非構造格子法などが発達してきた。しかし、分散した多数の物体に適合する格子を生成するのは容易ではない。さらに、複数の粒子が相対運動する場合や、界面が変形する場合には時間ステップごとに格子を生成し直さなければならぬため計算負荷が増大する。乱流研究では、境界近傍だけでなく全領域で均一な高い解像度を保ちたいという要請もある。われわれは、これらの背景から、効率のよい埋め込み境界(Immersed Boundary, IB)法を開発し、 $O[10^3]$ 個の粒子を含む流れの直接数値シミュレーションを実現した[1,2,3]。

分散相は、媒質流体を介した相互作用により、多

様な集団現象を示す。さらに、ミクロな界面現象が多相流のマクロな挙動に大きな影響を及ぼすことが示唆されている[4]。そのため、われわれの研究グループでは、非球形粒子、可変形性の固体粒子や弾性壁面、気液または液液界面の扱い、液膜を有する固体粒子、固体粒子間の接触および非接触による相互作用力など、様々な機能を付与して応用範囲を広げている。

2. IB-FEM による可変形性物体を含む流れ

流れの流れと固体の変形の相互作用は、航空機翼や橋梁のフラッターなどの工学的问题としても知られており、昆虫や鳥類の飛行、水棲生物の遊泳などの自然現象でも観察される。

流れの中で変形する粒子や構造物を扱う目的に対しては、固体内部に非構造格子を生成し、有限要素法(Finite Element Method, FEM)を適用する。流体と固体の相互作用は、界面において IB 法で用いる運動量交換（体積力）を FEM の境界条件に反映させることにより実現する[4,5,6]。

滑空するグライダーの周りの流れを計算した例を図 1 に示す。機体は弾性構造物として、流体力による変形も考慮されている。図には FEM 要素、主要断面での圧力分布と翼周りの流線が描かれている。

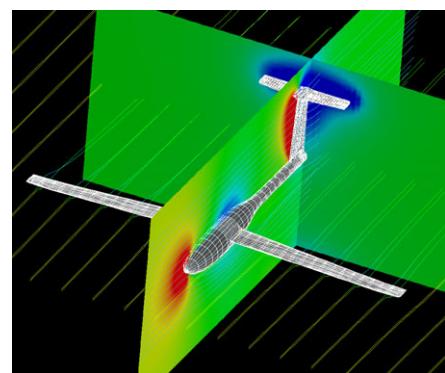


図 1 IB-FEM による弾性構造物と流れの相互作用の計算例

この方法により、多数の非球形かつ可変形粒子による集団現象、可変形粒子が柔軟な流路を通過する

場合の挙動など、多様な流れ場の数値計算が可能となつた。図 2 は、可変形粒子の集団挙動と粒子内部の応力分布[7]について、計算領域の一部を拡大して示したものである。二次元計算なので粒子は円か橢円とし、弾性体としてのヤング率を 3 段階に変えて流動を比較した。粒子形状と柔らかさにより、単独粒子の横滑り運動、複数粒子の接近時の干渉が異なり、これらが集団挙動に大きな影響を及ぼすことが見いだされている。図 3 は、生体内輸送現象などの研究手段として開発している、柔軟壁間を通る弾性粒子の変形のシミュレーション[8]の一例である。

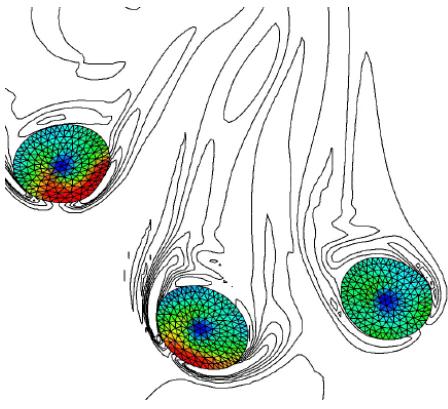


図 2 沈降する弾性粒子群（粒子内部の Mises 応力と粒子周りの渦度分布）

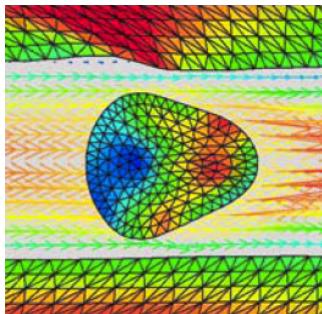


図 3 狹隘な弹性壁間流路を通過する柔軟な粒子（固体内部の Mises 応力と流体の速度）

3. IB-VOF 法による固気液三相流れ

固気液（または固体と不溶性の 2 液体）の三相流は、浮遊選鉱、各種のリアクターから河川や火山など、工学的にも自然界でも広範に観察される。

固体と気泡や液滴、あるいは気液界面の相互作用の数値シミュレーションのため、固体と流体の界面を IB 法、流体間の界面を Volume-of-Fluid (VOF) 法で

扱い、それらを結合する二段階解法を考案した[4,9]。さらに、VOF 法に対して、高解像度の界面再構成法を導入し、精度と安定性を格段に向上させた[10]。その結果、図 4 に示すような、液体中に粒子と気泡を含む三相流の解析が可能となった[10]。粒子と気泡は接触を伴う場合だけではなく、非接触時も介在する液相によって強い相互作用を示す。接触時には、固体粒子の濡れ性の影響も極めて大きい。本計算では界面張力が反映されていないが、その性質を利用する浮遊選鉱などへの適用に際しては極めて重要な課題である。また、図 5 に示すような気液界面と物体の相互作用に対しても、広範な条件での数値シミュレーションが可能となり[11]、高速船や不時着水時の機体など、水面近傍での揚抗力の発生機構の解析などに有用である。

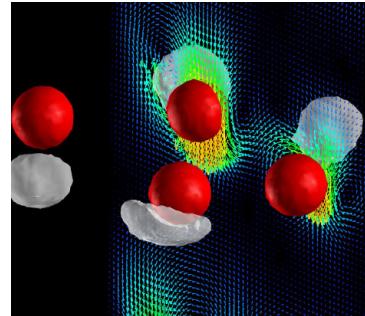


図 4 上昇する気泡群と沈降する粒子群の相互作用とその間の一断面での液相速度

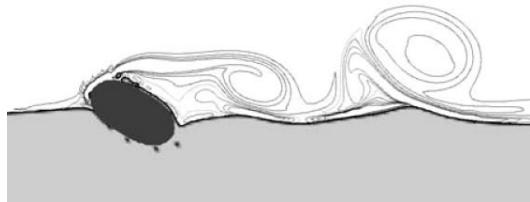


図 5 気液界面を進行する橢円柱による界面の変形、気泡や飛沫の発生と気相の渦度

4. IB-DEM による粒子凝集体の形成

微粒子の凝集・分散および流動は、燃焼場でのすすの形成、化学工学、生体流れ、環境問題に関連して、広範に観察される。上述の IB 法に対して、粒子間相互作用を加え、流れ場の中での凝集体の形成のシミュレーションを行った。粒子間力モデルとして Lennard-Jones 型[12]または van der Waals 型[13]を用

い、接触状態においては離散要素法(Discrete Element Method, DEM)で標準的なバネとダンパーで粒子間力を表現している。図6は、Lennard-Jonesポテンシャルによって相互作用する8個の粒子が落下する様子[12]の一例である。粒子の個数、終端速度のレイノルズ数、ポテンシャルの平衡位置によって、様々な配置パターンをとったり、非定常になったりする。図7は、一様な空間で125個の粒子がvan der Waals力によって凝集体を形成しつつある状態を表している[13]。

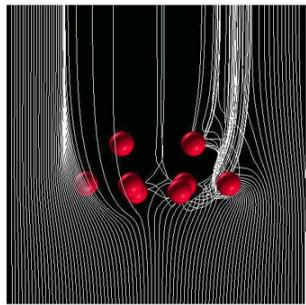


図6 Lennard-Jones型相互作用を伴う8個の粒子群の沈降時における平衡配置と流線

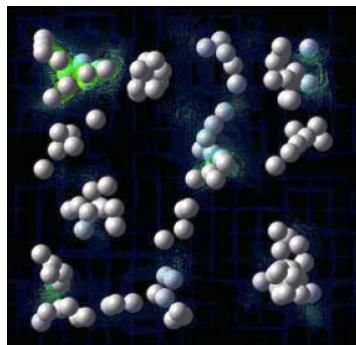


図7 一様な空間で van der Waals 力の作用する125個の粒子群の凝集挙動

5. 結言

分散性多相流や流体-構造連成問題に対して、素過程に対しては人為的なモデルを極力排除した直接数值シミュレーションを実現する方法の開発に関して、筆者らの最近の計算例を紹介した。これらの方法により、構造や分散相間の直接的および流体を介した間接的な非線形相互作用を効率的に扱うことが可能である。また、この方法は相変化、熱および物質移動を伴う現象に対しての拡張性にも優れている。

関連論文

- 1) T. Kajishima, S. Takiguchi, H. Hamasaki and Y. Miyake: JSME International Journal, Ser.B, Vol.44, No.4, pp.526-535, 2001.
- 2) T. Kajishima and S. Takiguchi: International Journal Heat and Fluid Flow, Vol.23, Issue 5, pp.639-646, 2002.
- 3) T. Kajishima: International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol.25, Issue 5, pp.721-728, 2004.
- 4) S. Takeuchi, T. Kajishima, R. Iwata and Y. Yuki: Abstract of IUTAM Symposium on Recent Advances in Multiphase Flow: Numerical & Experimental, Istanbul, Turkey, pp.27-28, 2007.
- 5) Y. Yuki, S. Takeuchi and T. Kajishima: Journal of Fluid Science and Technology, Vol.2, No.1, pp.1-11, 2007.
- 6) S. Takeuchi, Y. Yuki and T. Kajishima: International Conferences on Multiphase Flow, Leipzig, Germany, Paper No. S2_Wed_C_39 (DVD) 2007.
- 7) A. Ueyama, K. Tamura, S. Takeuchi, T. Kajishima: 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, 2008.
- 8) 田村, 上山, 梶島: 日本機械学会関西支部 第83期定期総会講演会 講演論文集, p.4.5, 2008.
- 9) R. Iwata, S. Takeuchi and T. Kajishima: International Conferences on Multiphase Flow, Leipzig, Germany, Paper No. S3_Mon_C_8 (DVD) 2007.
- 10) R. Iwata, S. Takeuchi and T. Kajishima and M. Taniguchi: 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, 2008.
- 11) 谷口, 岩田, 梶島: 日本機械学会関西支部 第83期定期総会講演会 講演論文集, p.4.6, 2008.
- 12) S. Takeuchi, I. Morita and T. Kajishima: Powder Technology, Vol.184, pp.232-240, 2008.
- 13) T. Yukimoto, T. Kajishima, S. Takeuchi: 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, 2008.

センター報告

・2007 年度大規模計算機システム利用者論文、研究成果一覧	-----	19
・「高校生のためのスーパーコンピューティングコンテスト」が	-----	30
平成 20 年度文部科学大臣賞を受賞		
・大規模計算機システム Q&A・リンク集	-----	31
・2008 年度大規模計算機システム利用相談員・指導員一覧	-----	34
・2008 年度大規模計算機システム利用相談員・指導員自己紹介	-----	35

2007年度大規模計算機システム利用者論文、研究成果一覧

この論文、研究成果等一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して2007年4月から2008年3月までに得られた研究成果等について、利用者から報告されたものを一覧として掲載しています。

1 学術雑誌掲載論文

1. Tomoya Ono and Kikuji Hirose: "Real-Space Density-Functional Calculations for Transport Properties of Nanostructures," *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, No. 4, p.840, 2007.
2. Hiroyuki Nakayama, Tomoya Ono, Hidekazu Goto, and Kikuji Hirose: "Electronic structures of peanut-shaped fullerene tubes," *Science and Technology of Advanced Materials*, Vol. 8, p.196, 2007.
3. Kazuchika Iwami, Hidekazu Goto, Kikuji Hirose, and Tomoya Ono: "First-principles study of electronic structure of deformed carbon nanotube," *Science and Technology of Advanced Materials*, Vol. 8, p.200, 2007.
4. Katsuhiro Kutsuki, Tomoya Ono, and Kikuji Hirose: "First-principles study on electronic structure of Si/SiO₂ interface -effect of interface defects on local charge density-," *Science and Technology of Advanced Materials*, Vol. 8, p.204, 2007.
5. Yoshiyuki Egami, Shuichiro Aiba, Kikuji Hirose and Tomoya Ono: "Relationship between geometric structure and conductance oscillation in nanowires," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 19, p.365201, 2007.
6. Tomoya Ono, Katsuhiro Kutsuki, Yoshiyuki Egami, Heiji Watanabe, and Kikuji Hirose: "First-principles study on electronic structures and dielectric properties of Si/SiO₂ interface," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 19, p.365202, 2007.
7. Hidekazu Goto, Tomoya Ono, and Kikuji Hirose: "A path-integration calculation method based on the real-space finite-difference scheme," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 19, p.365205, 2007.
8. Eben Sy Dy, Tanglaw Abat Roman, Yoshiyuki Kubota, Keita Miyamoto, Hideaki Kasai: "Exploring heme-based alternatives for oxygen reduction catalysis in fuel cells –a status report of our first principle calculations," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 19, No. 44, p. 445010(1-12), Nov. 2007.
9. Eben Sy Dy, Hideaki Kasai, Carl Redshaw, Christopher J. Pickett: "A Density Functional Analysis on the Photoelectronic Spectra of Fe-Only Hydrogenase Analogs," *E-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, Vol. 5, pp. 148–151, Dec. 2007.
10. K. H. Lee, J. J. Yu, and Y. Morikawa: "Comparison of localized basis and plane-wave basis for density-functional calculations of organic molecules on metals," *Phys. Rev. B*, Vol. 75, p. 045402-1-5, 2007.
11. M. Kawahara, F. Kawamura, M. Yoshimura, Y. Mori, T. Sasaki, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa: "A First-principles Investigation on the Mechanism of Nitrogen Dissolution in the Na Flux Method," *J. Appl. Phys.*, Vol. 101, p. 066106-1-3, 2007.
12. K. Takeuchi, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa: "First-principles molecular dynamics study of Al/Alq₃ interfaces," *Sci. Tech. Adv. Mater.*, Vol. 8, pp. 191–195, 2007.
13. S. Furui and H. Nakajima: "Correlation of the ghost and the quark in the lattice Landau gauge QCD," *Braz. J. Phys.*, Vol. 37, p. 186, 2007.
14. H. Wada, T. Kunihiro, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka and M. Sekiguchi: "Lattice Study of Low-lying Nonet Scalar Mesons in Quenched Approximation," *Phys. Lett.*, Vol. B652, pp. 250–254, 2007.
15. Y. Koma, M. Koma: "Spin-dependent potentials from lattice QCD," *Nucl. Phys.*, Vol. B769, pp. 79–107, 2007.
16. T. Umeda: "Constant contribution in meson correlators at finite temperature," *Phys. Rev.*, Vol. D75, p. 094502, 2007.
17. Toru Sekido, Katsuya Ishiguro, Yoshiaki Koma, Yoshihiro Mori and Tsuneo Suzuki: "Abelian dominance and the dual Meissner effect in local unitary gauges in SU(2) gluodynamics," *Phys. Rev.*, Vol. D76, p. 031501, 2007.
18. H. Iida, H. Suganuma and T. T. Takahashi: "Scalar-quark systems and chimera hadrons in SU(3)c Lattice QCD," *Phys. Rev.*, Vol. D72, p. 114503, 2007.
19. S. Negishi, H. Matsufuru and T. Onogi: "Scalar-quark systems and chimera hadrons in SU(3)c Lattice QCD," *Prog. Theor. Phys.*, Vol. 117, p. 275, 2007.

20. Y. Nakagawa, A. Nakamura, T. Saito, and H. Toki: "Infrared behavior of the Faddeev-Popov operator in Coulomb gauge QCD," Phys. Rev., Vol. D75, p. 014508, 2007.
21. K. Nawa, H. Suganuma and T. Kojo: "Baryons in Holographic QCD," Phys. Rev., Vol. D75, p. 086003 (24 pages), 2007.
22. K. Nawa, H. Suganuma and T. Kojo: "Baryons in Holographic QCD," Phys. Rev., Vol. D75, p. 086003 (24 pages), 2007.
23. H. Iida, H. Suganuma and T. Takahashi: "Scalar-Quark Systems and Chimera Hadrons in SU(3)c Lattice QCD," Phys. Rev., Vol. D75, p. 114503 (16 pages), 2007.
24. T. Kojo, H. Suganuma and K. Tsumura: "Peristaltic Modes of a Single Vortex in the Abelian Higgs Model," Phys. Rev., Vol. D75, p. 105015 (16 pages), 2007.
25. H. Suganuma, K. Tsumura, N. Ishii and F. Okiharu: "Tetra-Quark Resonances in Lattice QCD," Prog. Theor. Phys. Suppl., Vol. 168, pp. 168–172, 2007.
26. E. Hiyama, H. Suganuma and M. Kamimura: "Four- and Five-Body Scattering Calculations of Exotic Hadron Systems," Prog. Theor. Phys. Suppl., Vol. 168, pp. 101–106, 2007.
27. N. Ishii, T. Doi, M. Oka and H. Suganuma: "Five-Quark Picture of Lambda(1405) in Anisotropic Lattice QCD," Prog. Theor. Phys. Suppl., Vol. 168, pp. 598–601, 2007.
28. K. Nawa, H. Suganuma and T. Kojo: "Brane-induced Skyrmions –Baryons in Holographic QCD," Prog. Theor. Phys. Suppl., Vol. 168, pp. 231–236, 2007.
29. Y. Taniguchi, M. Kimura, Y. Kanada-En 'yo and H. Horiuchi: "Clustering and triaxial deformations of 40Ca," Phys. Rev., Vol. C76, p. 044317, 2007.
30. A. Shibata, S. Kato, K. -I. Kondo, T. Murakami, A. Shibata, T. Shinohara and S. Ito: "Compact lattice formulation of Cho-Faddeev-Niemi decomposition: Gluon mass generation and infrared Abelian dominance," Phys. Lett., Vol. B653, pp. 101–108, 2007.
31. M. Kawahara, F. Kawamura, M. Yoshimura, Y. Mori, T. Sasaki, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa: "A first-principles study on nitrogen solubility in Na flux toward theoretical search for a novel flux for bulk GaN growth," J. Crystal Growth, Vol. 303, pp. 34–36, 2007.
32. T. Taniike, M. Tada, R. Coquet, Y. Morikawa, T. Sasaki, and Y. Iwasawa: "A New Aspect of Heterogeneous Catalysis: Highly Reactive cis-(NO)₂ Dimer and Eley-Rideal Mechanism for NO-CO Reaction on a Co-Dimer/γ-Alumina Catalyst," Chem. Phys. Lett., Vol. 443, pp. 66–70, 2007.
33. S. Masuda, Y. Koide, M. Aoki, and Y. Morikawa: "Local Electronic Properties Induced at the Molecule-Metal Interface," J. Phys. Chem. C, Vol. 111, pp. 11747–11750, 2007.
34. A. Nagoya and Y. Morikawa: "Adsorption state of methylthiolate on the Au(111) surface," J. Phys. Condensed Matter, Vol. 19, p. 365245 , 2007.
35. H. Aizawa, Y. Morikawa, S. Tsuneyuki, K. Fukutani and T. Ohno: "Origin of strange vibrational spectra of NO on Pt(111) surface," e-J. Surf. Sci. and Nanotech., Vol. 5, pp. 122–125, 2007.
36. O. Sugino, I. Hamada, M. Otani, Y. Morikawa, T. Ikeshoji, and Y. Okamoto: "First-principles Molecular Dynamics Simulation of Biased Electrode/Solution Interface," Surf. Sci., Vol. 601, pp. 5237–5240, 2007.
37. M. Otani, I. Hamada, O. Sugino, Y. Morikawa, Y. Okamoto, and T. Ikeshoji: "Electrode Dynamics from First Principles," J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 77, 2007.
38. Y. Nakano, S. Yanagisawa, I. Hamada, and Y. Morikawa: "Theoretical study of vacuum level shift at the C₆H₆/Al(111) interface," Surface and Interface Analysis, in press., 2007.
39. 森川良忠: "TiO₂(110) 表面の化学反応の理論的なアプローチ," 表面科学, Vol. 28, No. 10, pp. 556–560 , 2007.
40. K. Shirai, H. Yamaguchi, and H. Katayama-Yoshida: "Control of Impurity Diffusion in Silicon by IR Laser Excitation," J. Phys.: Condens. Matter, Vol. 19, p. 365207 (7pp), 2007.
41. H. Dekura, K. Shirai, and H. Katayama-Yoshida: "Valence Control of a-rhombohedral Boron by Electronic Doping," J. Phys.: Condens. Matter, Vol. 19, p. 365241 (8pp), 2007.
42. K. Shirai, H. Dekura, and H. Katayama-Yoshida: "Atom relaxation of H in silicon," J. Phys.: Conference Series, Vol. 92, p. 012147 (4p), 2007.
43. J. Ishisada, K. Shirai, H. Dekura, and H. Katayama-Yoshida: "On the elastic softening due to a vacancy in Si," J. Phys.: Conference Series, Vol. 92, p. 012063 (4p), 2007.
44. K. Shirai, H. Yamaguchi, and H. Katayama-Yoshida: "Control of impurity diffusion by IR excitations," Physica B, Vol. 401-402, pp. 682–685, 2007.

45. H. Dekura, K. Shirai, and H. Katayama-Yoshida: “Valence control and metallization of boron by electronic doping,” *Physica B*, Vol. 401-402, pp. 702–705, 2007.
46. K. Matsukawa, K. Shirai, H. Yamaguchi, and H. Katayama-Yoshida: “Diffusion of TM impurities in silicon,” *Physica B*, Vol. 401-402, pp. 151–154, 2007.
47. S. Furui and H. Nakajima: “Infraed features of unquenched lattice Landau gauge QCD,” *Few-Body Systems*, Vol. 40, pp. 101–128, 2006.
48. S. Furui and H. Nakajima: “Unquenched Kogut-Susskind quark propagator in lattice Landau gauge QCD,” *Phys. Rev. D*, Vol. 73, p. 074503, 2006.
49. S. Furui and H. Nakajima: “Effects of the quark field on the ghost propagator of lattice Landau gauge QCD,” *Phys. Rev. D*, Vol. 73, p. 094506, 2006.
50. Y. Koma, M. Koma and H. Wittig: “Nonperturbative determination of the QCD potential at $O(1/m)$,” *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 97, p. 122003, 2006.
51. Y. Koma, M. Koma: “Spin-dependent potentials from lattice QCD,” *Nucl. Phys. B*, in press, 006.
52. O. Takaishi, Ph. de Forcrand: “nonperturbative determination of the QCD potential at $O(1/m)$,” *Phys. Rev. E*, Vol. 73, p. 036706, 2006.
53. T. Inakura, H. Imagawa, Y. Hashimoto, S. Mizutori, M. Yamagami and K. Matsuyanagi: “Mixed representation RPA calculation for octupole excitations on superdeformed states in the ^{40}Ca and neutron-rich sulfur regions,” *Nucl. Phys.*, Vol. A768, pp. 61–79, 2006.
54. H. Iida, T. Doi, N. Ishii, H. Suganuma and K. Tsumura: “Charmonium properties in deconfinement phase in anisotropic lattice QCD,” *Phys. Rev. D*, Vol. 74, p. 074502, 2006.
55. M. Garcia Perez and A. Gonzalez-Arroyo: “Gluino zero-modes for non-trivial holonomy calorons,” *JHEP*, Vol. 0611, p. 091, 2006.
56. K. Yoshida, M. Yamagami, K. Matsuyanagi: “Pairing and continuum effects on low-frequency quadrupole vibrations in deformed Mg isotopes close to the neutron drip line,” *Nucl. Phys.*, Vol. A779, pp. 99–115, 2006.
57. P. de Forcrand and O. Philipsen: “The chiral critical line of $N(f) = 2+1$ QCD at zero and non-zero baryon density,” *JHEP*, Vol. 0701, p. 077, 2007.
58. K. Nawa, H. Suganuma and T. Kojo: “Baryons in Holographic QCD,” *Phys. Rev. D*, in press, 2007.
59. K. Nawa, H. Suganuma and T. Kojo: “Brane-induced Skyrmions –Baryons in Holographic QCD–,” *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, in press, Vol. 168, 007.
60. Tsutomu Ikeno, Takeo Kajishima: “Finite-difference immersed boundary method consistent with,” *Journal of Computational Physics*, Vol. 226, pp. 1485–1508, 2007.
61. Tsutomu Ikeno, Takeo Kajishima: “LES of turbulent flow in subchannel and analysis of driving,” *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol. 2, No. 2, pp. 480–489, 2007.
62. Yohei InoueTakeo Kajishima: “Numerical investigation of turbulent flows in a rotating channel: Transient states after the onset of rotation,” *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol. 2, No. 2, pp. 633–642, 2007.
63. K. Mima, K. A. Tanaka, R. Kodama, T. Johzaki, H. Nagatomo, H. Shiraga, N. Miyanaga, M. Murakami, H. Azechi, M. Nakai, T. Norimatsu, K. Nagai, T. : “Recent results and future prospects of laser fusion research at ILE, Osaka,” *The European Physical Journal D*, Vol. 44, No. 2, pp. 259–264, 2007.
64. T. Kai, T. Kawamura, Y. Inubushi, H. Nishimura, T. Nakamura, T. Johzaki, H. Nagatomo, S. Nakazaki, S. Fujioka, and K. Mima: “Time-dependent x-ray polarization analysis for anisotropic distribution of hot electrons in ultrahigh intensity laser plasmas,” *High Energy Density Physics*, Vol. 3, No. 1-2, p. 131, 2007.
65. S. Guskov, H Azechi, N N Demchenko, V V Demchenko, I Ya Doskoch , M Murakami , H Nagatomo , V B Rozanov , S Sakaiya , R V Stepanov and N V Zmitrenko: “Laser-driven acceleration of a dense matter up to thermo ‘thermonuclear’ velocities,” *Plasma Phys. Control. Fusion*, Vol. 49, No. 10, pp. 1689–1706, 2007.
66. A. Yogo, H. Daido, S. V. Bulanov, K. Nemoto, Y. Oishi, T. Nayuki, T. Fujii, K. Ogura, S. Orimo, A. Sagisaka, J. -L. Ma, T. Zh. Esirkepov, M. : “Laser ion acceleration via control of the near-critical density target,” *Physical Review E*, Vol. 77, No. 1, p. 016401, 2007.
67. Shusuke Oosaki, Setsuko Yajima, Keiichi Kimura: “Strong Molecular Aggregation of Neutral Carriers Bearing Perfluoroalkyl Chains in Liquid-Crystalline Ion-Sensor Membranes,” *Analytical Sciences*, Vol. 23, pp. 963–967 , Mar. 2007.
68. Masahiro Yamamoto , Kohei Kunizawa , Akinori Fujinami , Shigenobu Ogata , and Yoji Shibutani: “Formation of Atomistic Island in Al Film Growth

- by Kinetic Monte Carlo," 日本機械学会論文集 (A編), Vol. 73, No. 728, pp. 490–497, Apr. 2007.
69. N. J. Turner, T. Sano, N. Dziourkevitch: "Turbulent Mixing and the Dead Zone in Protostellar Disks," *Astrophysical Journal*, Vol. 659, No. 1, pp. 729–737, Apr. 2007.
 70. Tsutomu Ikeno, Takeo Kajishima: "Computational model for turbulent flow around a grid spacer," *Nuclear Technology*, Vol. 158, pp. 240–260, May. 2007.
 71. F. Y. Meng, S. Ogata, D. S. Xu, Y. Shibutani, and S. Q. Shi: "Thermal conductivity of au ultra-thin carbon nanotube with an X-shaped junction," *Physical Review B*, Vol. 75, No. 20, p. 205403-1-6, May. 2007.
 72. Junyoung Park, Yoji Shibutani, Masato Wakeda, and Shigenobu Ogata: "Influence of Size and Number of Nanocrystals on Shear Band Formation in Amorphous Alloys," *Materials Transactions*, Vol. 48, No. 5, pp. 1001–1006, May. 2007.
 73. nisimov SI, Zhakhovskii VV, Inogamov NA, Nishihara K, Petrov YV: "Simulation of the expansion of a crystal heated by an ultrashort laser pulse," *Applied Surface Science Applied Surface Science*, Vol. 253, No. 15, pp. 6390–6393, May. 2007.
 74. Tatsufumi NAKAMURA, Hitoshi SAKAGAMI, Tomoyuki JOHZAKI, Hideo NAGATOMO, : "High Energy Electron Generation by Laser-Cone Interaction," *Plasma and Fusion Research*, Vol. 2, pp. 018–019, May. 2007.
 75. Tomohito Tsuru and Yoji Shibutani: "Dislocation Nucleation and Interaction Under Nanoindentation in Single Crystalline Al and Cu," 日本機械学会論文集 (A編), Vol. 73, No. 730, pp. 738–748, June. 2007.
 76. Hiroaki Koga, Takahisa Ohno: "Growth of noble metal nanostructures on the Bi nanoline surface: A first-principles study," *Materials Science & Engineering B*, Vol. 140, No. 3, pp. 160–165, June. 2007.
 77. Shintaro Takeuchi, Yoshihiko Yuki and Takeo Kajishima: "Interaction between multiple deformable particles and a fluid by a coupled finite-element and immersed-boundary technique," *Proc. International Conferences on Multiphase Flow*, Leipzig, Germany, July. 2007.
 78. Ryuichi Iwata, Shintaro Takeuchi and Takeo Kajishima: "Direct numerical simulation of dispersed three-phase flows – VOF-IBM approach for multiple bubble and particle systems –," *Proc. International Conferences on Multiphase Flow*, Leipzig, Germany, July. 2007.
 79. Takashi Ohta, Kazuki Nakamura, Kazuhiko Mizobata, Takeo Kajishima: "DNS of turbulent channel flow with density variation under some conditions of unstable stratification," *Proc. ASME-JSME Thermal Engineering Summer Heat Transfer Conference*, Vancouver, Canada, Vol. HT2007-32061 · CD, July. 2007.
 80. Mohammad Yusoff Shah Tuan Ya, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima: "Immersed boundary and finite element methods approach for interaction of an elastic body and fluid by two-stage correction of velocity and pressure," *Proc. 5th Joint ASME-JSME Fluids Engineering Conference*, San Diego, USA, Vol. FEDSM2007-37160 · CD, July. 2007.
 81. Takeo Kajishima, Takashi Ohta: "LES and DNS of Turbulent Flows in Weakly Compressible Condition," *Proc. 5th Joint ASME-JSME Fluids Engineering Conference*, San Diego, USA, Vol. FEDSM2007-37300 · CD, July. 2007.
 82. Y. Masada, N. Kawanaka, T. Sano, K. Shibata: "Dead Zone Formation and Nonsteady Hyperaccretion in Collapsar Disks: A Possible Origin of Short-Term Variability in the Prompt Emission of," *Astrophysical Journal*, Vol. 663, No. 1, pp. 437–444, July. 2007.
 83. Hiroaki Koga, Takahisa Ohno: "First-principles study of the stability of atomic Ag lines epitaxial to self-assembled Bi nanolines," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 19, No. 26, p. 266213, July. 2007.
 84. 大島翼, 太田貴士, 梶島岳夫: "乱流素過程に及ぼす界面活性剤の効果," 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 37, pp. 1647–1654, Aug. 2007.
 85. Takeo Kajishima, Takashi Ohta, Hiroki Sakai, Kie Okabayashi: "Influence of cavitation on turbulent separated flow," *Proc. 5th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, Munich, Germany, Vol. 2, pp. 829–834, Aug. 2007.
 86. Yu Takano, Kizashi Yamaguchi: "Hybrid density functional study of ligand coordination effects on the magnetic couplings and the dioxygen binding of the models of hemocyanin," *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 107, No. 15, p. 3103. 3119, Aug. 2007.
 87. Mitsuo Shoji, Hiroshi Isobe, Yu Takano, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, Kizashi Yamaguchi: "Theory of chemical bonds in metalloenzymes. IX. Theoretical study on the active site of the ribonucleotide reductase and the related species," *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 107, No. 15, p. 3250,3265, Aug. 2007.

88. Hiroaki Tanaka, Shoichi Shimada, Lawrence Anthony: "Requirements for Ductile-Mode Machining Based on Deformation Analysis of Mono-Crystalline Silicon by Molecular Dynamics Simulation," *Annals of the CIRP*, Vol. 56, No. 1, pp. 53–56, Aug. 2007.
89. Tomohito Tsuru and Yoji Shibutani: "Theoretical Investigation of the Displacement Burst Observed in Nanoindentation by collective Dislocation Loops Nucleaton Model," *日本機械学会論文集(A編)*, Vol. 73, No. 732, pp. 877–882, Aug. 2007.
90. T. Shioya, T. Sano, H. Takabe, T. Tsuribe: "The Structure of Accretion Disks Formed by Merging of White Dwarfs," *Publications of the Astronomical Society of Japan*, Vol. 59, No. 4, pp. 753–761, Aug. 2007.
91. Tsutomu Ikeno, Takeo Kajishima: "Analysis of dynamical flow structure in a square arrayed rod bundle," 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Pittsburgh, Vol. USA 86 · CD, Sept. 2007.
92. Tomoyuki JOHZAKI, Kunioki MIMA and Yasuyuki NAKAO: "Simulation Study of Ignition and Burn Characteristics of Fast Ignition DT Targets," *Plasma and Fusion Research*, Vol. 2, pp. 041-1, Sept. 2007.
93. 佐野孝好: "弱電離宇宙プラズマのシミュレーション," *プラズマ核融合学会誌*, Vol. 83, No. 9, pp. 747–752, Sept. 2007.
94. 加藤恒彦, 藤田裕: "電子・陽電子プラズマ中の無衝突衝撃波のシミュレーション," *プラズマ・核融合学会誌*, Vol. 83, No. 9, pp. 733–736, Sept. 2007.
95. Hiroaki Koga, Takahisa Ohno: "First-principles study of the geometry of Ag nanowires growing on a self-assembled Bi nanoline," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 19, No. 36, p.365225, Sept. 2007.
96. Hideki Yamasaki, Haruki Nakamura, Yu Takano: "Theoretical analysis of the electronic asymmetry of the special pair in the photosynthetic reaction center: Effect of the protein environment and structural asymmetry," *Chemical Physics Letters*, Vol. 447, No. 4-6, p.324,329, Oct. 2007.
97. 村上匡且, 長友英夫: "衝撃点火の理論モデル," *プラズマ核融合学会誌*, Vol. 83, No. 10, pp. 814–818, Oct. 2007.
98. Tsunehiko N. Kato: "Relativistic Collisionless Shocks in Unmagnetized Electron-Relativistic Collisionless Shocks in Unmagnetized Electron-Positron Plasmas," *The Astrophysical Journal*, Vol. 668, No. 2, pp. 974–979, Oct. 2007.
99. Tatsufumi Nakamura, Hitoshi Sakagami, Tomoyuki Johzaki, Hideo Nagatomo, Kunioki Mima: "Optimization of cone target geometry for fast ignition," *Physics of Plasmas*, Vol. 14, No. 10, p. 103105, Oct. 2007.
100. Hiroaki Koga, Takahisa Ohno: "Misoriented Bi dimers blocking Ag nanowire growth along the Bi nanoline: A first-principles study," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 19, No. 39, p. 396004, Oct. 2007.
101. 葛籠達郎, 中垣政俊, 松崎庸介, 原口雅宣, 岡本敏弘, 福井萬壽夫: "ギャッププラズモン導波路における、スロット線路フィルタ," *日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2007* in Osaka 講演予稿集, pp. 244–255, Nov. 2007.
102. Yoji Shibutani, Junyoung Park and Masato Wakeda: "Shear Banding Analyses of Amorphous Alloys with Crystalline Particles," *Material Science Forum*, Vol. 561-565, pp. 1323–1328, Nov. 2007.
103. 長友英夫, 村上匡且: "2次元統合シミュレーション," *プラズマ核融合学会誌*, Vol. 83, No. 10, pp. 819–822, Nov. 2007.
104. Bruno Julia-Diaz, T.-S. Harry Lee, Akihiko Matsuyama and Toru Sato: "Dynamical coupled channel model of piN scattering in the WPhysical Review C, Vol. 76, No. 6, p. 065201, Dec. 2007.
105. Tuan Mohammad Yusoff Shah Tuan Ya, Shin-taro Takeuchi, Takeo Kajishima, Atsushi Ueyama: "Immersed boundary method for flow around thin bodies with sharp edges," *Abstracts of 3rd Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics in conjunction with 11th International Conference on Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering*, p.238, Dec. 2007.
106. T. Johzaki, H. Sakagami, H. Nagatomo, T. Nakamura, A. Sunahara, Y. Nakao, K. Mima: "COMPUTATIONAL STUDIES FOR FAST HEATING IN FIREX-I," *Europhysics Conference Abstracts*, Vol. 31F, p.2.010, Dec. 2007.
107. T. Nakamura, K. Mima, H. Sakagami, T. Johzaki, H. Nagatomo: "Electron surface acceleration by using capillary targets," *Europhysics Conference Abstracts*, Vol. 31F, pp. 0–003, Dec. 2007.
108. Tomoyuki Johzaki, Hitoshi Sakagami, Hideo Nagatomo, Kunioki Mima: "Holistic Simulation for FIREX Project withFI3," *Laser and Particle Beams*, Vol. 25, No. 4, pp. 621–629, Dec. 2007.
109. Yu Takano, Hiroshi Isobe, Kizashi Yamaguchi: "Theoretical studies on electronic structures and chemical indices of the active site in oxygenated and deoxygenated hemerythrin," *Bulletin of the*

- Chemical Society of Japan, Vol. 81, No. 1, p. 91,102, Jan. 2008.
110. 太田貴士, 梶島岳夫: “非対称ディフューザーにおける非定常剥離乱流のDNSによる解析,” 日本機械学会論文集B編, Vol. 74, No. 738, pp. 329–335, Feb. 2008.
 111. Takashi Ohta, Takeo Kajishima: “Transition of different unsteady cavitating flows in 2D cascade with flat blades,” Proc. 12th International Symposium on Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery, Honolulu, USA, Vol. ISROMAC12-2008-20197 • CD, Feb. 2008.
 112. Takashi Ohta, Takeo Kajishima: “Transition of different unsteady cavitating flows in 2D cascade with flat blades,” Proc. 12th International Symposium on Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery, Honolulu, USA, Vol. ISROMAC12-2008-20197 • CD, Feb. 2008.
 113. 譯田真人, 渋谷陽二, 尾方成信: “アモルファス金属における多重せん断帶の原子論的形成メカニズム,” 材料, Vol. 57, No. 2, pp. 119–125, Feb. 2008.

2 國際會議會議錄掲載論文

1. Tomoya Ono and Kikuji Hirose: “First-principles study on quantum transport through thin films,” *International Conference on Nanospintronic Design and Realization (ICNDR ’ 07)*, 2007.
2. Tomoya Ono and Kikuji Hirose: “First-principles study of electron transport through fullerene wires,” *International Conference on Nano Science and Technology (ICN+T 2007)*, p.140, 2007.
3. Yoshiyuki Egami, Tomoya Ono and Kikuji Hirose: “First-Principles Electron-Conduction Properties Calculation for Nanostructures,” *Twelfth International Conference on the Application of Density Functional Theory (DFT ’ 07)*, p.76, 2007.
4. Tomoya Ono and Kikuji Hirose: “Electron-Transport Calculation Based on Real-Space Method: Application For Fullerene Chains,” *Twelfth International Conference on the Application of Density Functional Theory (DFT ’ 07)*, p.197, 2007.
5. Tsuyoshi Furukawa, Kenji Inoue, Tomohito Takubo, Tatsuo Arai: “Encountered-type Visual Haptic Display Using Flexible Sheet,” *2007 IEEE International Conference on Robotics and Automation*, Apr. 2007.
6. Eben Sy Dy, Hideaki Kasai: “A comparative study on the interaction of platinum with group 4A (germanium, tin and lead) porphyrins,” *Journal of Physics: Condensed Matter (Special Issue: Proc. the International Conference on Quantum Simulators and Design 2006)*, Vol. 19, No. 36, p. 365240(1-6), Sept. 2007.
7. Eben Sy Dy, Hideaki Kasai, Carl Redshaw, Christopher J. Pickett: “Mounting a Hydrogenase Analogue on Calixarenes –Designing a Nature-Inspired Solid State Catalyst for Fuel Cells by Density Functional Theory,” *Surface Interface Analysis (Special Issue: Proc. the 21st Century COE Program on Atomistic Fabrication Technology 2007)*, 2007.
8. K. Shirai, H. Yamaguchi, K. Matsukawa, T. Moriwaki, and Y. Ikemoto: “Control of impurity diffusion in Silicon by Intensive IR excitation,” *4th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources (WIRMS)*, p. 22, 2007.
9. M. Koma Y. Koma and H. Wittig: “Determination of the spin-dependent potentials with the multi-level algorithm,” *PoS*, Vol. LAT2005, p. 216, 2006.
10. M. Koma: “Optimization of lattice QCD codes for the AMD Opteron processor,” *Nucl.Instrum.Meth.*, Vol. A559, pp. 95–98, 2006.
11. Toru Sekido, Katsuya Ishiguro, Yoshihiro Mori and Tsuneo Suzuki: “Abelian dominance in local unitary gauges and without gauge-fixing in pure SU(2) QCD,” *PoS*, Vol. LAT2006, p. 073, 2006.
12. Y. Taniguchi, M. Kimura and H. Horiuchi: “Co-existence of cluster structure and mean-field-type structure in medium-weight nuclei,” *AIP Conf. Proc.* , Vol. 831, p. 245, 2006.
13. Y. Taniguchi, M. Kimura, Y. Kanada-En’yo and H. Horiuchi: “Coexistence of cluster structure and mean-field-type structure in medium-weight nuclei,” *Nucl. Phys. A*, *in press*, 2006.
14. H. Iida, H. Suganuma and T. T. Takahashi: “Bound states of (anti-)scalar-quarks in SU(3)c lattice QCD,” *AIP Conf. Proc.* , *in press*, 2006.
15. T. T. Takahashi, T. Doi and H. Suganuma: “Meson-Meson and Meson-Baryon Interactions in Lattice QCD,” *AIP Conf. Proc.* , Vol. CP842, pp. 249–251, 2006.
16. T. T. Takahashi, T. Doi and H. Suganuma: “Meson-Meson and Meson-Baryon Interactions in Lattice QCD,” *AIP Conf. Proc.* , Vol. CP842, pp. 246–248, 2006.
17. F. Okiharu, H. Suganuma, T. T. Takahashi and T. Doi: “Multi-Quarks and Two-Baryon Interaction in Lattice QCD,” *AIP Conf. Proc.* , Vol. CP842, pp. 231–233, 2006.

18. N. Ishii, T. Doi, H. Iida, M. Oka, F. Okiharu: "Anisotropic Lattice QCD Studies of Penta-Quarks and Tetra-Quarks," *AIP Conf. Proc.*, Vol. CP842, pp. 492–494, 2006.
19. H. Suganuma, K. Tsumura, N. Ishii and F. Okiharu: "Lattice QCD Evidence for Exotic Tetraquark Resonance," *Proc. Sci.*, Vol. LAT2005, p. 070, 2006.
20. H. Iida, N. Ishii, T. Doi and H. Suganuma: "J/Psi at High Temperatures in Anisotropic Lattice QCD," *Proc. Sci.*, Vol. LAT2005, p. 184, 2006.
21. T. Doi, N. Ishii, Y. Nemoto, M. Oka and H. Suganuma: "Anisotropic Lattice QCD Study of Pentaquark Baryons in Spin 3/2 Channel," *Proc. Sci.*, Vol. LAT2005, p. 064, 2006.
22. H. Suganuma, H. Ichie, F. Okiharu and T. T. Takahashi: "Lattice QCD Study for Confinement and Hadrons," *Moroccan Publisher*, 2006.
23. F. Okiharu, T. Doi, H. Ichie, H. Iida, N. Ishii, M. Oka, H. Suganuma and T. T. Takahashi: "Tetraquark and Pentaquark Systems in Lattice QCD," , 2006.
24. A. Diaz-Gil, J. Garcia-Bellido, M. Garcia Perez and A. Gonzalez-Arroyo: "Magnetic field production after inflation," *PoS*, Vol. LAT2005, p. 242, 2006.
25. T. Doi: "Theoretical Status of Pentaquarks," *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 2006.
26. Y. Nakagawa, A. Nakamura, T. Saito, H. Toki: "Infrared divergence of the color-Coulomb self-energy in Coulomb gauge QCD," *Proc. Science*, Vol. LAT2006, p. 071, 2006.
27. S. Negishi, H. Matsufuru, T. Onogi, T. Umeda. : "Study of 1/m corrections in HQET," *PoS*, Vol. LAT2005, p. 208, 2006.
28. S. Furui and H. Nakajima: "Correlation of the ghost and the quark in the lattice Landau gauge QCD," *Braz. J. Phys.*, Vol. 37, 2007.
29. T. Doi, T. Blum, M. Hayakawa, T. Izubuchi and N. Yamada: "The isospin breaking effect on baryons with Nf=2 domain wall fermions," *PoS*, Vol. LAT2006, p. 174, 2007.
30. Shoichi Shimada, Hiroaki Tanaka, Masahiro Higuchi, Tomomi Yamaguchi, Miki Yoshinaga: "Qualification of Raw Diamond from a Viewpoint of Chipping and Wear Resistance for Ultraprecision Cutting Tool," *Proc. 7th International Conference of the euspen society for precision engineering and nanotechnology*, No. 1, pp. 103–106, May. 2007.
31. Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, Ryuichi Iwata and Yoshihiko Yuki: "Large scale multi-phase flow analysis by an immersed boundary technique coupled with FEM and VOF for incorporating deformable objects," *Abstrct of IUTAM Symposium on Recent Advances in Multi-phase Flow: Numerical & Experimental, Istanbul, Turkey*, pp. 27–28, June. 2007.
32. M. Murakami, H. Nagatomo, T. Sakaiya, S. Fujio, H. Saito, H. Shiraga, M. Nakai K. Shigemori, H. Azechi, M. Karasik, J. Bates, D. Colombant, J. Weaver, A. Schmitt, A. Velikovich, Y. Aglitskiy, J. Se: "Progress of Impact Fast Ignition," *Electron Surface Acceleration by 34th EPS Conference on Plasma Phys.*, June. 2007.
33. T. Johzaki, H. Sakagami, H. Nagatomo, T. Nakamura, A. Sunahara, Y. Nakao, K. Mima: "COMPUTATIONAL STUDIES FOR FAST HEATING IN FIREX-I," *Electron Surface Acceleration by 34th EPS Conference on Plasma Phys.*, June. 2007.
34. M. Murakami, H. Nagatomo, T. Sakaiya, H. azechi et al. : "Innovative ICF Scheme - Impact Fast Ignition," *3th International Conference on Emerging Nuclear Energy Systems*, July. 2007.
35. T. Nakamura, K. Mima, H. Sakagami, T. Johzaki, H. Nagatomo: "Electron surface acceleration by using capillary targets," *Electron Surface Acceleration by 34th EPS Conference on Plasma Phys.*, July. 2007.
36. K. Nishihara, S. Abarzhi, M. Horikoshi, N. Inogamov, R. Ishizaki, C. Matsuoka, G. Wouchuk and V. Zhakhovskii: "Generation of Nonuniform Voriticity at Interface and Its Linear and Nonlinear Growth," *Turbulent Mixing and Beyond*, Aug. 2007.
37. DANNO Yuichiro, OHKUBO Satoshi, NISHIHARA Katsunobu: "High enegy electron trn-sport in dense plasma in fast ignition scenario YE Peiyong," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applicaitons Kobe*, Sept. 2007.
38. Takayoshi Sano, Yuta Yoshida, Katsunobu Nishihara: "The Effects of a magnetic field on the Richtmyer-Meshkov instability," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applicaitons Kobe*, Sept. 2007.
39. ZHAKHOVSKII Vasilii, INOGAMOV Nail, and NISHIHARA Katsunobu: "Laser Ablation of Crystalline Aluminum Simulated by Molecular Dynamics," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applicaitons Kobe*, Sept. 2007.

40. H. Nagatomo, T. Johzaki, T. Nakamura, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima: "Target Design for High-density Non-spherical Implosion for Fast Ignition," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications Kobe*, Sept. 2007.
41. Tomoyuki Johzaki, Hideo Nagatomo, Tatsufumi Nakamura, Hitoshi Sakagami, Atsushi Sunahara, Kunioki Mima and Yasuyuki Nakao: "Simulation Studies for Core Heating Properties in FIREX-I," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications Kobe*, Sept. 2007.
42. Tomoyuki Johzaki, Hideo Nagatomo, Tatsufumi Nakamura, Hitoshi Sakagami, Kunioki Mima, Ryosuke Kodama: "Integrated Simulations for Transport of Laser-produced Relativistic Electrons in Solid Targets," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications Kobe*, Sept. 2007.
43. T. Nakamura, H. Nagatomo, T. Johzaki, H. Sakagami, K. Mima: "Optimization of cone targets for fast ignition," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications Kobe*, Sept. 2007.
44. SAKAWA Youichi, OYA Akira, DONO Seiichi, KIMURA Tomoaki, OZAKI Norimasa, LOUPAIS Berenice, WAUGH Jonathan, NAGATOMO Hideo, SHIGEMORI Keisuke, TAKABE Hideaki, NORIMATSU Takayoshi, KODAMA Ryousuke, KOEN: "Laboratory Experiments to Study Astrophysical Shock and Jets," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications Kobe*, Sept. 2007.
45. OKANO Yasuaki, INUBUSHI Yuichi, NISHIMURA Hiroaki, FUJIOKA Shinsuke, KAI Takeshi, KAWAMURA Tohru, BATANI Dimitri, MORACE Alessio, REDAELLI Renato, FOURMENT Claude, SANTOS Joao, MALKA Gerard, BOSCHERON: "X-ray polarization measurement for fast electrons in intense-laser-produced plasma under oblique incidence," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications Kobe*, Sept. 2007.
46. Takeshi Kai, Tohru Kawamura, Shinobu Nakazaki, Yuichi Inubushi, Hiroaki Nishimura, Yasuaki Okano, Tatsufumi Nakamura, Tomoyuki Johzaki, Hideo Nagatomo, Shinsuke Fujioka, and Kunioki Mima: "Integral cross sections with magnetic sublevels of He-like ions by electron impact excitation for x-ray polarization spectroscopic analysis," *Fifth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications Kobe*, Sept. 2007.
47. H. Nagatomo, T. Johzaki, T. Nakamura, H. Sakagami, A. Sunahara, K. Mima: "Multi-scale Simulation for Laser Plasma Interaction," *US-Japan Simulation Science Workshop Austin, Texas*, Oct. 2007.
48. Takashi Ashihara, Takenori Yao, Tsunetoyo Namba, Yuko Nakazawa, Hikari Jo, Hideki Ito, Yoshihisa Sugimoto, Makoto Ito, Ryo Haraguchi, Kazuo Nakazawa, Takanri Ikeda, Minoru Horie: "Effects of amiodarone and bepridil on spiral wave reentries in human atrial model with electrical and structural remodelings," 文部科学省リーディングプロジェクト「細胞・生体機能シミュレーションプロジェクト」京都大学拠点第4回国際シンポジウム, Nov. 2007.
49. MASANORI NUNAMI, AKIRA TAKATA, KATSUNOBU NISHIHARA: "3D PIC Simulations of Laser Produced Plasma Expansion with Large Ion Larmor Radius," *The American Physical Society Division of Plasma Physics Orlando, Florida*, Nov. 2007.
50. Youichi SAKAWA, A. OYA, S. DONO, T. KIMURA, N. OZAKI, Y. KURAMITSU, T. Kato, H. NAGATOMO, K. SHIGEMORI, R. KODAMA, T. NORIMATSU, H. TAKABE, B. LOUPAIS1, M. KOENIG, J. WAUGH, N. WOOLSEY : "Plasma Jet and Shock Experiments Using High-Power Lasers," *The American Physical Society Division of Plasma Physics Orlando, Florida*, Nov. 2007.
51. H. Nishimura, Y. Inubushi, Y. Okano, S. Fujioka, T. Kai, T. Kawamura, D. Batani, A. Morace, R. Redaelli, C. Fourment, J. Santos, G. Malka, A. Boscheron, A. Casner, M. Koenig, T. Nakamura, T. Johzaki, H. Nagatomo, and: "X-ray polarization spectroscopy to study energy transport in laser produced plasma at 1018 W/cm²," *The American Physical Society Division of Plasma Physics Orlando, Florida*, Nov. 2007.
52. Takeshi Kai, Tohru Kawamura, Shinobu Nakazaki, Yuichi Inubushi, Hiroaki Nishimura, Yasuaki Okano, Tatsufumi Nakamura, Tomoyuki Johzaki, Hideo Nagatomo, Shinsuke Fujioka, Kunioki Mima: "Cross sections with magnetic sublevels of He-like ions for polarized x-ray spectroscopy," *The American Physical Society Division of Plasma Physics Orlando, Florida*, Nov. 2007.
53. Ryo Haraguchi, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Tsunetoyo Namba, Takahiro Todo, Hiroaki Naito, Masahiro Higashi, Wataru Shimizu, Shingo Suzuki, Shingo Murakami and Yoshihisa Kurachi: "Scroll Wave Dynamics in a Three-Dimensional Cardiac Tissue Model: Roles of Transmural Dispersion of Repolarization," *The*

54. K. Mima, H. Azechi, T. Johzai, R. Kodama, K. Kondo, N. Miyanaga, M. Murakami, H. Nagatomo, M. Nakai, T. Nakamura, K. Nishihara, H. Nishimura, T. Norimatsu, H. Shiraga, A. Sunahara, and K. A. Tanaka: "FIREX project for fast ignition at Osaka University," *Asia Plasma and Fusion Association 2007 Gandhinagar, India*, Dec. 2007.
55. Sadatake Furui and Hideo Nakajima: "Roles of the quark field in the infrared lattice Coulomb gauge and Landau gauge QCD," *PoS (Lattice2007)*, p. 301, 2007.
56. T. Kunihiro, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi and H. Wada, : "Mass spectroscopy of scalar and axial vector mesons in lattice QCD," *Acta Phys. Polon.*, Vol. B38, pp. 491–496, 2007.
57. Y. Koma, M. Koma, H. Wittig: "Relativistic corrections to the heavy quark potential at $O(1/m)$ and $O(1/m^2)$," *Proc. Sci.*, Vol. LAT2007, p. 111, 2007.
58. M. N. Chernodub, Katsuya Ishiguro, Atsushi Nakamura, Toru Sekido, Tsuneo Suzuki, V. I. Zakharov: "Topological defects and equation of state of gluon plasma," *Proc. Science (LATTICE 2007)*, Aug. 2007.
59. H. Ohki, H. Matsufuru, T. Onogi: "High precision study of $B^*B\pi$ coupling in unquenched QCD," *PoS(LATTICE 2007)*, p. 365, Aug. 2007.
60. T. T. Takahashi and T. Kunihiro: "Lattice QCD study of $gAN^{\hat{*}}N^{\hat{*}}$ with two flavors of dynamical quarks," , 2007.
61. M. Asakawa: "Quarkonium States at Finite Temperature," *Nucl. Phys.*, Vol. A783, p. 269, 2007.
62. M. Asakawa: "Quarkonium States at Finite Temperature," *J. Phys. G*, Vol. 34, p. S839, 2007.
63. M. Asakawa: "Anomalous Viscosity of an Expanding Quark-Gluon Plasma," *Nagoya University (2007)*, p. 83, 2007.
64. M. Asakawa: "Anomalous Viscosity of an Expanding Quark-Gluon Plasma," , 2007.
65. Y. Nakagawa, A. Nakamura, T. Saito, H. Toki : "Color confinement and the Faddeev-Popov ghosts in Coulomb gauge QCD," *Proc. Science*, Vol. (LAT2007), p.319, 2007.
66. Y. Nakagawa, A. Nakamura, T. Saito, H. Toki: "Long-distance color-dependent quark potentials in the Coulomb gauge QCD," , 2007.
67. Y. Nakagawa, A. Nakamura, T. Saito, H. Toki: "Confining time-like gluon and confined spatial gluons in Coulomb gaugeQCD," , 2007.
68. Hideo Suganuma, Arata Yamamoto, Naoyuki Sakumichi, Toru T. Takahashi, Hideaki Iida and Fukiko Okiharu: "Inter-Quark Potentials in Baryons and Multi-Quark Systems in QCD," , 2008.

3 国内研究会等発表論文

1. 磐野佑一, 原田和樹, 草部浩一: "ペロブスカイト型 LaFeO₃における仕事関数の第一原理計算," 第 55 回応用物理学関係連合講演会講演予行集, Vol. 2, p. 661, Mar. 2008.
2. 原田和樹, 磐野佑一, 草部浩一: "Pd(100) 表面上に形成された Pd₀ の薄膜への酸素・Pd 吸着反応の第一原理シミュレーション," 第 55 回応用物理学関係連合講演会予行集, Vol. 2, P.661, Mar. 2008.
3. 田村康祐, 上山篤史, 梶島岳夫: "IB-FEM による流体を介した柔軟な物体と壁面の相互作用の解析," 日本機械学会関西支部 第 83 期定期総会講演会講演論文集, p. 4,5, Mar. 2007.
4. 谷口征大, 岩田隆一, 梶島岳夫: "IB-VOF 法による自由表面挙動の高解像度解析," 日本機械学会関西支部 第 83 期定期総会講演会講演論文集, p.4,6, Mar. 2007.
5. 乙社知也, 太田貴士, 梶島岳夫: "LES を用いた円柱周り流れのレイノルズ数変化の影響に関する研究," 日本機械学会関西支部 第 83 期定期総会講演会講演論文集, p.5,12, Mar. 2007.
6. Eltayeb M. Eljack, 梶島岳夫, 太田貴士: "POD of Turbulent Channel Flow with Density Variation and its Implication for Low Dimensional Modeling," 日本流体力学会年会 2007 講演論文集, No. 2-4-1-4 • CD, Aug. 2007.
7. 百瀬英毅, 岡井宏樹, 森藤正人, 森伸也, 近藤正彦, 嶽山正二郎: "超強磁場サイクロトロン共鳴を用いた InGaAs/AlAs 超格子の Γ -X クロスオーバ現象解析," 日本物理学会講演第 26 回年次大会, Vol. 21pTG-10, Sept. 2007.
8. 岩田隆一, 竹内伸太郎, 梶島岳夫: "埋め込み境界法による三相流の数值解法," 日本機械学会 2007 年度年次大会講演論文集, No. 2, pp. 129–130, Sept. 2007.
9. 中村一樹, 太田貴士, 梶島岳夫: "温度成層乱流における密度変化の影響," 日本機械学会 2007 年度年次大会講演論文集, No. 2, pp. 147–148, Sept. 2007.
10. 鷹野優・中村春木: "チトクロム c 酸化酵素の heme a の酸化還元における電子構造変化とプロトン移動との関係," 第 1 回分子科学討論会 2007 仙台, Sept. 2007.

11. Yu Takano and Haruki Nakamura: "Molecular orbital study of the proton transfer through a peptide bond -A theoretical approach to a novel pathway of proton translocation of cytochrome c oxidase," ICCMSE2007 (International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering), Sept. 2007.
12. 原口雅宣, 岡本敏弘, 福井萬壽夫: "ギャップ型プラズモン導波路におけるスタブ構造の適用とその応用," 応用電子物性分科会誌, Vol. 13, No. 4, pp. 148–153, Oct. 2007.
13. 小野佳之: "LES of flows around a circular cylinder at the critical Reynolds numbers," 60th annual meeting Division of fluid dynamics , Nov. 2007.
14. 五十嵐 健夫, 井戸 敬, 高山 健志, 八尾 武憲, 芦原 貴司, 難波 経豊, 藤堂 貴弘, 東 将浩, 中沢 一雄: "患者個別の仮想心臓モデル構築効率化のための技術開発," 27回医療情報学連合大会(若手奨励賞内定), Vol. 27, No. Suppl, pp. 824–825, Nov. 2007.
15. 太田貴士, 梶島岳夫: "2次元平板翼列内キャビテーション流れの非定常現象のパラメーター依存性," 日本機械学会流体工学部門講演会講演概要集, Vol. G503·CD, Nov. 2007.
16. 原口 雅宣, 葛籠 達郎, 松崎 康介, 岡本 敏弘, 福井 萬壽夫: "プラズモン導波路による小型共振器の検討," 日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2007 in Osaka 講演予稿集, pp. 188–189, Nov. 2007.
17. 藤堂 貴弘, 原口 亮, 難波 経豊, 八尾 武憲, 芦原 貴司, 東 将浩, 稲田 紘, 中沢 一雄: "フィラメントの挙動に基づくスパイラルリエントリの持続および消滅の判定についての検討～コンピュータシミュレーションを用いた致死性不整脈の発生危険度予測システムの開発を目指して～," 電子情報通信学会技術研究報告書MEとバイオサイバネティックス研究会, Vol. MBE2007-75, pp. 13–16, Dec. 2007.
18. 上山篤史, 梶島岳夫, 竹内伸太郎: "IBM-FEM カッティング法を用いた可変形粒子群と流体の相互作用に関する研究," 第 21 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, Vol. C3-1 · CD, Dec. 2007.
19. 岩田隆一, 梶島岳夫, 竹内伸太郎: "VOF-IB 法による気泡と固体粒子の相互作用の直接数値シミュレーション," 第 21 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, Vol. C3-2 (CD), Dec. 2007.
20. 雪本隆幸, 梶島岳夫, 竹内伸太郎: "粒子間力のある固体粒子群の流体中での挙動の解析," 第 21 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, Vol. C3-3 · CD, Dec. 2007.
21. 山崎秀樹・鷹野優・中村春木: "光合成反応中心スペシャルペアカチオンラジカルのスピンドensity分布に関する理論的研究," 日本生物物理学会第 45 回年会, Dec. 2007.
22. Hideki Yamasaki, Yu Takano, and Haruki Nakamura: "Quantum chemical study of the spin density distribution of the special pair cation radical in the photosynthetic reaction center," The 1st International Global COE Symposium on Bio-Environmental Chemistry, Jan. 2008.
23. 原 英之, 森川良忠, 佐野泰久, 有馬健太, 服部 梓, 村田順二, 岡本武志, 三村秀和, 山内和人: "第一原理分子動力学計算を用いた 4H-SiC 表面エッチング機構の考察," 2008 年春季 第 55 回応用物理学関係連合講演会講演予稿集, Vol. 1, p. 436, Mar. 2008.
24. 松尾修司, 岸 智弥, 森川良忠: "有機分子/金属界面構造のシミュレーション," 先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用シンポジウム, Mar. 2008.
25. 鷹野優・中村春木: "シトクロム c 酸化酵素のヘム a の酸化還元状態における電子構造," 日本化学会第 88 回春期年会, Mar. 2008.
26. 原口雅宣, 葛籠達郎, 松崎康介, 岡本敏弘, 福井萬壽夫: "MIM 型プラズモン導波路に設けたファブリペロー型波長選択フィルタ," 第 55 回応用物理学関係連合大会 講演予稿集, Vol. 3, Mar. 2008.
27. 松崎庸介, 原口雅宣, 岡本敏弘, 福井萬壽夫: "ギャップ型プラズモン導波路におけるスタブ構造の適用とその応用," 第 55 回応用物理学関係連合大会 講演予稿集, Vol. 3, Mar. 2008.

4 その他の論文

1. Eben Sy Dy, Hideaki Kasai: "Density functional investigations on heme-based catalysts for potential fuel cell applications," December 2007, Awaji Island, Japan, 2007.
2. Eben Sy Dy, Hideaki Kasai: "The Design of an Artificial Hydrogenase H-subcluster (2Fe3S) on Calixarenes by Density Functional Theory," July 2007; also on August 2007; also on September 2007, Norwich, England; also at Manila, Philippines; also at Osaka, Japan, 2007.
3. S. Furui and H. Nakajima: "Infrared features of unquenched finite temperature lattice Landau gauge QCD," Preprint (hep-lat/0612009), 2007.
4. Toru Sekido, Katsuya Ishiguro, Yoshiaki Koma, Yoshihiro Mori and Tsuneo Suzuki: "Abelian dominance and the dual Meissner effect in local unitary gauges," Preprint, submitted, 2007.
5. H. Iida, H. Suganuma and T. Takahashi: "Scalar-Quark Systems and Chimera Hadrons in SU(3)c Lattice QCD," Preprint, submitted to Phys. Rev. D, 2007.

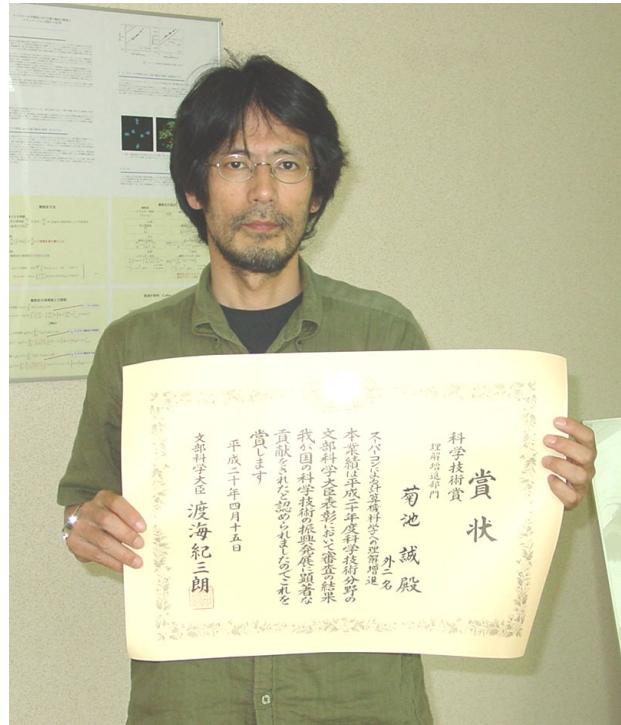
6. T. Kojo, H. Suganuma and K. Tsumura: “Peristaltic Modes of Single Vortex in the Abelian Higgs Model,” Preprint, submitted to Phys. Rev. D, 2007.
7. S. Negishi, H. Matsufuru, T. Onogi: “Precision Study of $B^*B\pi$ Coupling for the Static Heavy-light Meson,” Preprint(hep-lat/0612029), 2007.
8. Kazuhito Mizuyama: “Realistic continuum quasiparticle linear response theory with Skyrme interaction and multipole response in neutron rich nuclei,” Niigata University, 2007.
9. Toru Sekido: “The quark confinement and the dual Meissner effect in SU(2) lattice QCD,” Kanazawa University, 2007.
10. Shunsuke Negishi: “he Determination of the $B^*B\pi$ Coupling in Lattice QCD,” Department of Physics, Kyoto University, 2007.
11. Kenichi Yoshida: “Pair correlation and continuum coupling effects on low-frequency modes of excitation in deformed neutron-rich nuclei,” Department of Physics, Graduate School of Science, Kyoto University, 2007.
12. 原口亮: “スーパーコンピュータで捉える不整脈現象,” C&C ユーザーフォーラム 2007 全NUA ユーザー事例論文 (東京ビッグサイト), Dec. 2007.
13. M. N. Chernodub: “Topological defects as probes of nonperturbative structure of Quantum Chromodynamics,” , 2007.
14. Toru Sekido: “Quark confinement and the dual superconductor picture in SU(2) gluodynamics,” , 2007.
15. Arata Yamamoto: “Study of the Inter-Two-Quark Potential in Baryons in Quantum Chromodynamics,” , 2007.
16. Naoyuki Sakumichi: “Analyses of Nonperturbative Quantum Phenomena -Proton Transfer Chemical Reaction and Quark Confinement in QCD-,” , 2007.
17. A. Yamamoto, H. Suganuma and H. Iida: “Heavy-heavy-light quark potential in SU(3) lattice QCD,” preprint, arXiv:0708.3160 (2007), 2007.
18. Y. Hashimoto, K. Nodeki: “A Numerical method of solving time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov equation with Gogny interaction,” preprint, arXiv:0707.3083 [nucl-th] (2007), 2007.
19. 古川剛, 井上健司, 田窪朋仁, 新井健生: “柔軟シートを用いた遭遇型パブティックディスプレイの開発,” 日本機械学会ロボティクス・メカトロニクス講演会, May 2006.
20. 古川剛, 井上健司, 田窪朋仁, 新井健生: “柔軟シートを用いた視覚・触覚ディスプレイにおける背面投影画像のゆがみ補正,” 日本バーチャルリアリティ学会第 11 回大会, June 2006.

「高校生のためのスーパーコンピューティングコンテスト」 が平成20年度文部科学大臣賞を受賞

この度、高校生のためのスーパーコンピューティングコンテスト（通称：「夏の電腦甲子園」）を主催していた本学サイバーメディアセンター大規模計算科学研究部門菊池誠教授および東京工業大学学術国際情報センター渡邊治教授、同センター松田裕幸助教の3名が、「スーパーコンピュータによる計算機科学への理解増進」に寄与した功績により、平成20年度科学技術分野の文部科学大臣表彰（科学技術賞理解増進部門）を受賞しました。

スーパーコンピューティングコンテストは、高校生を対象としたプログラミングコンテストであり、スーパーコンピュータを使用して与えられた課題の解答法をプログラミングし、そのプログラムによる課題に対する解答の正確さと速さを競うものです。本コンテストは平成7年度から東京工業大学の主催で開催され、大阪大学は平成18年から共催、平成19年度から共同主催となり、コンテスト会場を東は東京工業大学、西は大阪大学に分け開催しています。平成19年度のコンテストにおいては本選出場校数15校20チームの内大阪大学会場には8校10チームが出場し、サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータを使用して実施されました。1位は一関工業高等専門学校、2位は東京工業大学付属科学技術高等学校、3位は洛南高等学校となりました。

なお、18年度の優勝チームの中から大阪大学への入学者を輩出しております。



大規模計算機システム Q&A・LINK集

サイバーメディアセンター

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、パスワードを入力を行って、新パスワードを指定します。この時、MAC OS を利用されていれば、Safari では問題があります（現在調査中）ので、Firefox か Netscape でご利用ください。

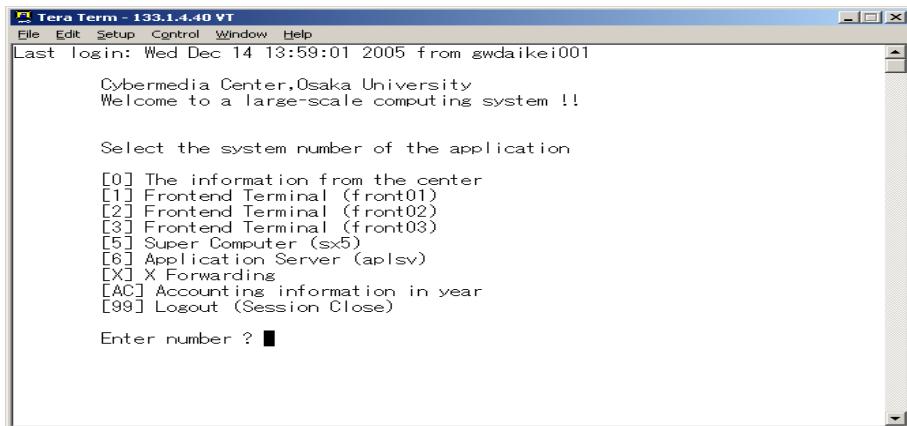
2. 研究室のパソコンからスペコンを利用したいのですが、どうすれば良いのでしょうか？

Windows の PC から利用する場合は、

- ① SSH(Secure Shell)用のソフトウェアを PC にインストールする必要があります。
- ② Tera Term Pro をダウンロードサイトを選択します。フリーソフトウェアなので Web から検索サイトを選べます。または、阪大では下記の URL からダウンロードが可能です。

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

- ③ Tera Term Pro をダウンロードします。
- ④ Tera Term Pro を PC にインストールします。
- ⑤ TTSSH を起動して、ログインサーバに接続します。
- ⑥ HOST フィールドにログインサーバのホスト名 : login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp 又は、133.1.4.40 を入力
- ⑦ Service として SSH を選択し、TCP Port#に 22 が表示を確認
- ⑧ OK ボタンをクリックします。
- ⑨ Add this machine and its key to the known hosts list をチェックし、
- ⑩ Continue ボタンをクリックします。
- ⑪ 次に User name Password の画面がでますので、利用者番号とパスワードを入力します。
- ⑫ 正常にログインされると、次のメニューが表示され、必要な数字を選択します。
- ⑬ スペコンにログインする場合、5 を入力します。



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のインターネットサービスの設定を知りたいのですが？

SSH によるログインサーバへ接続を行います。

下記の URL を参照ください。設定がわかります。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/sx5-nyumon.pdf>

5. 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/sx5-nyumon.pdf>

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定額制度についての情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。定額制の情報を知ることができます。

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

1 1. 大規模計算機システムの試用制度及び試用制度の申請をしたいのですが？

下記の URL をご覧ください。試用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>

1 2. 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>

1 3. 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>

1 4. 大規模計算機システムの刊行物の情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。年報を掲載しています。

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

1 5. 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

1 6. 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/intro/link.html>

1 7. スパコン会話利用の方法は、どうすれば良いのでしょうか？

下記の手順で行います。

①プログラムファイルを作成（例：sample.f）します。

②SX にログインします。

③SX%f90 sample.f で翻訳

④SX%a.out で実行、実行結果は画面に表示されます。

例) Gauusian98 の場合

SX%g98 <input.dat> out.dat input.dat:入力データ、out.dat:出力ファイル

1 8. スパコンを nqs (バッチリクエスト) で利用するには、どうすれば良いのでしょうか？

下記の手順で行います。

① フロント端末でプログラム等をエディタ編集を行い、

- ② 編集後、ftp で ASCII 転送を行い、
- ③ qsub コマンドで SX のバッチ JOB 投入を行います。
- ④ nqs のバッチ JOB のファイル（例：nqsfile）の内容は下記のようになります。

<code>#!/usr/bin/csh</code>	スクリプトを csh で実行宣言
<code>#PBS -q P1@cmc</code>	JOB クラスの指定
<code>#PBS -l memszjob=1gb,cputim_job=00:01:00</code>	メモリ容量制限値、CPU 時間制限値
<code>#PBS -o nqs.out</code>	標準出力ファイル名
<code>#PBS -e nqs.err</code>	標準エラー出力ファイル名
<code>#PBS -M <u>user@lab.univ.ac.jp</u></code>	メールの送信先を指定
<code>#PBS -m e</code>	JOB 終了時にメールを送信
<code>cd ~/nqs/</code>	実行するフォルダへ移動
<code>setenv F_PROGINF DETAIL</code>	解析情報を標準エラーへ出力
<code>a.out</code>	実行命令

プログラム翻訳は予め行い、a.out の実行モジュールを作成しておきます。
- ⑤ front01% qsub nqsfile として JOB を SX に投入します。
- ⑥ 投入後、リクエスト ID が表示されます。
- ⑦ front01%qstat で、JOB の状況を表示させます。
- ⑧ front01%qdel 12345.cmc で JOB をキャンセルすることが可能です。12345.cmc : リクエスト ID です。

1.9. Web 上のマニュアルを参照できませんか？

Web からポータルシステムにログインすることで、スーパーコンピュータシステムや汎用計算機システムのマニュアルを参照することができます。下記にポータルシステムにログインした時の画面を表示しています。左画面にマニュアル名が表示されています。そこをクリックすることで参照することができます。



2008 年度大規模計算機システム利用相談員

氏名	所属	職名	相談形態
高木 達也	大阪大学 大学院薬学研究科	教授	メール
山井 成良	岡山大学 総合情報基盤センター	教授	メール
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授	メール
柳澤 将	大阪大学 産業科学研究所	特任研究員	メール (木曜日 14 時～16 時)

* 委嘱期間 2008. 5. 1～2009. 3. 31

2008 年度大規模計算機システム利用指導員

氏名	所属	職名
板野 智昭	関西大学 システム理工学部	講師
藤 堅正	近畿大学 理工学部	講師
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授

* 委嘱期間 2008. 5. 1～2009. 3. 31

2008 年度大規模計算機利用相談員 自己紹介

たか ぎ たつ や
高木 達也

(大阪大学大学院薬学研究科生命情報環境科学専攻・教授)

初めまして。大阪大学大学院薬学研究科の高木達也と申します。よろしくお願ひ申し上げます。数えてみれば、1983 年からだと思いますので、大型計算機センター時代からもう 25 年も、相談員をさせて頂いております。この間、相談内容も大きな変化がありました。当初は、皆さんプログラムを自ら組まれる方ばかりでしたので、Fortran (当時はFORTRAN77) のプログラミング方法が主たる問い合わせでしたが、現在は、アプリケーションの使い方が、主たる質問内容になっています。こうした変化がそのまま、計算機を取り巻く社会環境の変化を表していると思っております。

さて、特に実験・観測研究者の皆さん、皆さんのお手元には大量の実験・観測データが、解析できないで残っていませんでしょうか。たとえば、

- ・プロテオミクス、○○ゲノミクス、DNA アレイなどのデータ
- ・大量のアンケート結果
- ・数理的解析を行いたい文献データ
- ・疫学、臨床データ

などは、宝の山かも知れません。そのような場合には、どうか一度ご相談下さい。適切なデータ解析方法をご提示できるかも知れません。これからは、大量の網羅的実験データを、数理的に解析することにより、情報を得る時代になってきました。これまでよりもっと、実験研究者とデータ解析研究者の密な語り合いが必要だと、私は考えています。

やまい なりよし
山井 成良

(岡山大学総合情報基盤センター 教授)

岡山大学総合情報基盤センターの山井と申します。ご存知の方もおられると思いますが、平成 9 年 11 月まで大阪大学大型計算機センター研究開発部に在籍しておりました。事前にお知らせいただければ、電子メールだけでなくセンターでの直接相談にも応じます。

さて、私の担当領域ですが、大規模計算機システムの基本的な利用法およびネットワークサービス全般とさせて頂きます。遠隔地からの利用に関する相談や電子メールや SSH などの利用におけるトラブルに関する質問も歓迎します。

本年度も微力ながら皆様のお役に立てれば幸いです。

たけ ち ひで お
武 知 英 夫

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

平成 19 年度になって SX8 の MPI 機能を活用したプログラムが書けるようになり、プログラミングやジョブのキューリングに関しての質問に対応できるようになった。チューニングに関しては現在もまだ複数の CPU と格闘中であるので、今年度中に何とか決着したいと考えている。

平成 19 年度のスパコン SX8 では MPI 用のチューニングツールが少々変更になり、使用中の PSUITE では実行過程の詳細がよく見えない難点が生じる。

コンカレント処理では事前にプログラマーがアルゴリズムを十分に咀嚼してからコード化する必要があり、MPI ジョブ投入をして並列実行できたところで殆ど有用性は生じない。

個人的には、現システムでは手に余るほどプログラムを投入したいと思っているが、このチャレンジに関しては現在までのところ全く手が届きそうにもない。

NEC/HP-UX の MPI ジョブに関しての英文 MPI マニュアルの初版本が何と 1991 年に発行されているのを最近発見して愕然とした。その頃我々は何をしていたかと言うと、TCP/IP を SLIP でとか BSC の maild を設定するなど全く真面目に計算をやっていなかったことを思い出した。

やなぎさわ すすむ
柳澤 将

(大阪大学 産業科学研究所 特任研究員)

大阪大学産業科学研究所の柳澤と申します。

現在、有機エレクトロニクスに関連した有機分子膜と金属表面からなる界面の原子レベルの構造と電子状態を、第一原理分子動力学シミュレーションによって調べています。計算プログラムとして、森川良忠教授が開発された第一原理分子動力学シミュレータ STATE や、最近では固体・結晶のバンド構造を精密に計算する GW 近似と呼ばれる方法の計算プログラムを SX または pc クラスタ上にて使用しています。現在、数 10 から数 100 の原子からなる系を研究対象としていますが、このようなサイズは第一原理分子動力学シミュレーションにとっては実行が大変であることが多く、SX のような数 10-100GB のメモリを使用した並列計算が可能なプラットフォームが必須となっています。私の所属するグループでは、SX での使用を前提として STATE コードの開発を進め、より多くの原子を含む系の第一原理シミュレーションを可能にすることで実際の実験研究や電子デバイスとの対応をより深めることを目指しています。

ユーザーのご相談で対応できそうなものは、主に SX 上での Fortran90 によるプログラムコードの使用に関する事です。少しでもお役に立てればと思います。よろしくお願いします。

2008 年度大規模計算機利用指導員 自己紹介

いた の とも あき
板 野 智 昭

(関西大学 システム理工学部 専任講師)

大阪府出身で吹田市にある府立千里高校卒業後、駿台予備校での真っ黒な浪人生活を経て、晴れて京都大学理学部に進学、高校で大好きになった物理学を修めました。趣味は旅と読書とサイクリングで、特に旅では見知らぬ土地で好んで友を作ることが好きです。研究に新しいアイデアをもたらすにも、旅とサイクリングによるリフレッシュが効果的（すなわち仕事の一部）だと信じています。

さて、私の専門は流体物理で、研究と計算機は切っても切り離せない関係にあります。計算機環境は愛用のラップトップにインストールした Linux で、研究時間の大半は計算機の前で過ごしてきました（ただし最近は研究以外の仕事が多すぎて、机の前に座る時間もかなり減っていますが・・・）。阪大のメディアセンターではありませんが大型計算機も使い始めて 10 年くらいになるでしょうか。長年の一利用者としてあちこちの計算機センターでお世話になっていますので、その視点から皆さんのお役に立てればと思っています。

ふじ けん しょう
藤 堅 正

(近畿大学 理工学部 講師)

近畿大学の藤です。所属学科は、理工学部の学科再編で、原子炉工学科から電気電子工学科（エネルギー工学コースが原子炉工学科に相当）になり、今年は第 4 期生が卒業研究を行います。

エネルギー材料（核燃料・原子炉材料）に関する実験系の研究室ですが、核燃料内部の化学状態を検討するための多相化学平衡計算や、燃料被覆管の水蒸気酸化シミュレーションあるいは燃料被覆材と核分裂生成物との固相反応の挙動解析に関する計算でサイバーメディアセンターを利用しておられます。また、電子エネルギーレベルの計算を少しだけお手伝いすることもありますが、何れも FORTRAN を使用している関係上、研究室で適宜 FORTRAN のご相談を承っております。宜しくお願いします。

たけ ち ひで お
武 知 英 夫

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

平成 19 年度になって SX8 の MPI 機能を活用したプログラムが書けるようになり、プログラミングやジョブのキューリングに関しての質問に対応できるようになった。チューニングに関しては現在もまだ複数の CPU と格闘中であるので、今年度中に何とか解決したいと思っている。

平成 19 年度のスパコン SX8 の機種更新の影響は、クライアントユーザーには全く負担を与えることなく、私が経験した中で最も完璧でシームレスな移行であったと思う。

現 SX8 のシステムでは、安定性や実行処理能力において全くストレスを感じさせないサービスが運用できている。

個人的には、現システムでは手に余るほどプログラムを投入したいと思っているが、このチャレンジに關

しては現在までのところ全く手が届きそうにもない。

NEC/HP-UX の MPI ジョブに関しての英文 MPI マニュアルの初版本が何と 1991 年に発行されているのを最近発見して愕然とした。その頃我々は何をしていたかと言うと、TCP/IP を SLIP でとか BSC の maild を設定するなど全く真面目に計算をやっていなかったことを思い出した。

利用規程等

・規程関係	41
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	41
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	42
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	43
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	43
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	44
ネットワーク専門部会内規	44
・附表	46
大規模計算機システム ホスト一覧	46
SX-8R のジョブクラスと制限値一覧	46

・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) 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ぬ。

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 前項の規定にかかるわらず、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 前条の規定にかかるわらず、次の各号に掲げる場合についてでは、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。)の場合にあっては、当該予算の振替による。
- (2) 前号以外の場合にあっては、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に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っては、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。

大規模計算機システム利用負担額一覧

(平成20年4月1日現在)

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)
		並列実行CPU数	メモリ制限		
基本負担額	1	4	16GB	10GB	0円（備考7）
	1	4	16GB	10GB	1万円
	10	4	32GB	300GB	10万円
	50	8	制限なし	1TB	50万円
	100	制限なし	制限なし	2TB	100万円
	260	制限なし	制限なし	3TB	200万円
	450	制限なし	制限なし	4TB	300万円
ファイル追加オプション	ファイル追加50GB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 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。なお、スーパーコンピュータ、クラスタシステムにおけるCPU・メモリなどの計算機資源は、フェアシェアスケジュール機能により設定したシェア値に応じて割り当てる。
- 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（10～3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シェア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。
- 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する。
- 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ヶ月間無料で利用できる。ただし、当該会計年度を超えて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の設定とする。

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てオンラインで、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・運用する全国共同利用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「大型計算機システム等」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、大型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。

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
大規模計算機システムホームページ	http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
Web ポータル	https://portal.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 のジョブクラスと制限値一覧

スーパーコンピュータのジョブ資源制限値は次のとおりです。また、使用するに当たって使用資源に見合ったクラスへのジョブ投入をお願いします。

ジョブクラス	経過時間		使用 CPU 数		主記憶 (G B)	
	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
SXF	1	24	1	8	1	120
SXL	1	120	1	32	1	1000
SXL(届出制)	1	240	1	64	1	2000
PCC	1	740(注 7)	4	64	16GB/ノード	

(注 1) ジョブを投入するときに、経過時間、使用 CPU 数、主記憶を指定します。ジョブの実行が始まると中断することなく CPU、メモリが占有して割り当てられます。

(注 2) DBG クラスは、従来どおりジョブを多重実行するため CPU 時間も制限があります。括弧内の数字は CPU 時間の規定値と最大値です。

(注 3) 基本負担額のコースによって、利用できる CPU 数、メモリを制限しています。(一般利用者の方は、CPU4 個、メモリ 16GB) 各コースの制限値は、利用負担額表 を参照してください。

(注 4) SXL は大容量メモリ用のクラスです。基本負担額が 1 万円及び 10 万円コースの方は、SXL のクラスは利用できません。

(注 5) 届出制の範囲を超える、経過時間が 240 時間を超えるジョブは、申請制として受け付けます。届出制、申請制については、教育・研究システム班までお問い合わせください。(メール: system @cmc.osaka-u.ac.jp)

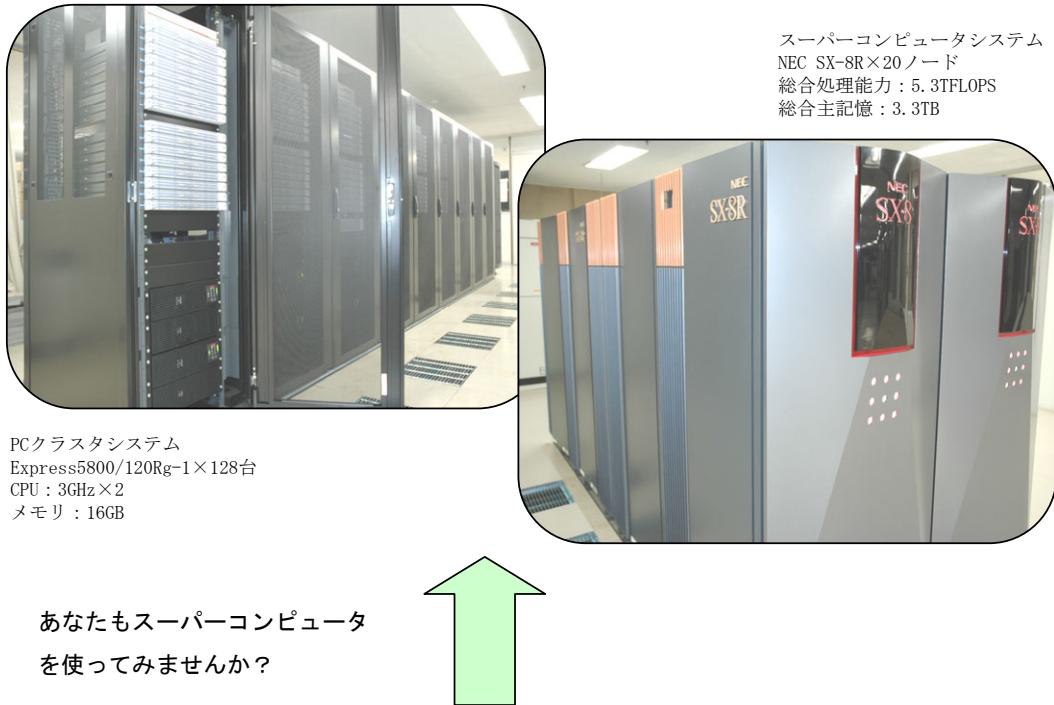
(注 6) PCC は PC クラスタのジョブクラスです。

(注 7) PC クラスタの経過時間の最大値を 740 時間としました。(2007.10.3)

募集

- ・大規模計算機システム利用者募集 ----- 49
- ・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 ----- 50

大規模計算機システム利用者募集！



後期(10月～3月)の利用なら負担額は半額

最大3ヶ月(後期1ヶ月)の無料試用制度

民間企業の研究者も利用できます

利用に関するご申請・お問い合わせは情報推進部情報企画課情報企画班までお願いします。
情報推進部情報企画課情報企画班
Tel 06-6879-8808
E-mail usersv@cmc.osaka-u.ac.jp

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（6月、12月）。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、皆さんのご投稿をお待ちします。

1. 隨筆
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、ご希望により掲載した広報誌5部を進呈いたします。

【原稿執筆に当たってご注意いただく事項、及び原稿の提出方法】

- a) Tex の場合（オフセット印刷可能なもの）
- Latex のソースファイルは、MS-DOS 形式のフロッピーあるいは電子メールで提出してください。
 - 図面・画像は、別途提出してください。また、図表や写真の挿入箇所を指示しておいてください。
 - 書式は、
 - フォントサイズ：10point
 - スタイルファイル：jarticle
 - 上余白：20mm、下余白：20mm
 - 左余白：20mm、右余白：20mm
- b) ワードプロセッサ出力（オフセット印刷可能なもの）
- テキストファイルは、MS-DOS 形式のフロッピーあるいは電子メールで提出してください。
 - 図面及び画像は、別途提出してください。また、図表や写真の挿入箇所を指示しておいてください。
 - 書式は、
 - フォントサイズ：10point
 - フォント：MS 明朝
 - 上余白：20mm、下余白：20mm
 - 左余白：20mm、右余白：20mm

a,b 共通)

- 1頁1段の行数：50行
- 1行の文字数：24文字
- 1頁2段書き、フォントはMS明朝
- 数字、英字は半角、フォントは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の括弧は全角
- 文中の半角の“、”や“.”は、全て全角の“、”や“.”とする。
- 原稿の題名は、MSゴシックで14Point。執筆者氏名は、姓と名の間及び所属機関・学部・専攻名の間を半角スペースとし、フォントサイズは10Point、フォントはMS明朝とする。

・注意事項

- a) 投稿原稿は原則として、サイバーメディアセンターホームページに公開されますことをご了承ください。なお、公開を希望されない場合には、その旨をご連絡してください。また、原稿の返却はいたしません。
- b) 執筆者には、ご希望により冊子を5部進呈します。
- c) 初回の校正は、誤植の防止をはかるため執筆者にお願いします。
- d) 原稿の送付先は、下記のとおりです（大阪大学内の方は、学内便でお願いします）。

郵送：〒567-0047

大阪府茨木市美穂ヶ丘5-1

大阪大学サイバーメディアセンター

情報推進部情報企画課

情報企画班

TEL 06-6879-8808 FAX 06-6879-8814

E-mail : usersv@cmc.osaka-u.ac.jp

編集後記

「計算機利用ニュース Vol.4 No.1」をお届けします。

今年は4年に1度のオリンピックイヤーです。すでに出場選手も決まり本番に向けて準備しているのですが、出場が決まるまでにも様々なドラマがあります。本来は力のある選手がなにかアクシデントや目に見えないプレッシャーなどで本来の力を発揮出来ず、出場を逃してしまうこともあったようです。人間のすることですので機械のようにいつも同じように、とはいきないです。だからこそ人間なのでしょうけれども。

サイバーメディアセンターでご提供しているサービスはスーパーコンピュータ、機械です。状況により多少の差は出ますが、コンスタントに同じパフォーマンスを発揮します。逆に人間味がないといつてしまえばそうかもしれません、有効に使えば人間にとっては大きな力となるはずです。当センターのスーパーコンピュータが皆様のそれぞれの研究分野において、金メダル（最高の結果）を目指す一助としてお役に立てば幸いです。

いつものことですが今回も計算機利用ニュースを発行するにあたり、執筆者の方々をはじめとする皆様のご協力をいただき感謝しております。この場をお借りして心よりお礼申し上げます。

(情報企画班 M.I)

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 2008年度 Vol.4 No.1
2008年6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
(小田中紳二、藤堅正、豊永昌彦、前迫孝憲、
養老真一、小郷直言、阿部浩和、清川清、
竹蓋順子、時田恵一郎、馬場健一)

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	利用規程等	39
・無衝突衝撃波問題のグローバル多次元 流体シミュレーション		・規程関係	41
水田 晃、蔵満 康浩、加藤 恒彦、 坂和 洋一、高部 英明	3	大阪大学サイバーメディアセンター	
・LPP-EUV光源におけるイオン・デブリ 磁場抑制の3D-PIC シミュレーション		大規模計算機システム利用規程	41
沼波 政倫	5	大阪大学サイバーメディアセンター	
・第一原理計算による酸化物触媒の 表面物性に関する研究		大規模計算機システム利用負担額一覧	42
草部 浩一、幾野 佑一、 原田 和樹、長柄 一誠	10	大阪大学サイバーメディアセンター	
・多相流の数値シミュレーション		大規模計算機システム試用制度利用内規	43
梶島 岳夫	14	大阪大学サイバーメディアセンター	
センター報告	17	大規模計算機システム利用相談員指導員内規	43
・2007年度大規模計算機システム 利用者論文、研究成果一覧	19	大型計算機利用大阪地区（第6地区）	
・「高校生のためのスーパーコンピュー ティングコンテスト」が平成20年度 文部科学大臣賞を受賞	30	協議会規程	44
・大規模計算機システムQ&A・リンク集	31	ネットワーク専門部会内規	44
・2008年度大規模計算機システム利用 相談員・指導員一覧	34	・附表	46
・2008年度大規模計算機システム利用 相談員・指導員自己紹介	35	大規模計算機システム ホスト一覧	46
		SX-8Rのジョブクラスと制限値一覧	46
		募 集	47
		・大規模計算機システム利用者募集	49
		・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	50
		編集後記	51

(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。