

平成 28 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所属	職名	代表者名	プロジェクト名
東京大学物性研究所	特任研究員	坂下 達哉	厳密対角化パッケージ Rokko による Heisenberg-Kitaev 模型の研究
お茶の水女子大学理学部物理学	教授	小林 功佳	新たなナノスケール界面の電子物性の探索
大阪電気通信大学工学部機械工学科	教授	宇田 豊	超精密ダイヤモンド工具の損耗機構
東京大学大学院総合文化研究科	准教授	新井 宗仁	タンパク質の分子動力学シミュレーション
東京大学大学院総合文化研究科	准教授	新井 宗仁	計算機を用いた新規人工タンパク質の合理的設計
埼玉大学大学院理工学研究科物質科学部門	教授	飛田 和男	1次元フラストレート量子スピン系の数値的研究
鳥取大学大学院工学研究科	助教	榊原 寛史	第一原理バンド計算を用いた強相関電子系の有効模型導出方法の研究
奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	准教授	服部 賢	Si 表面上の原子吸着系のモデル計算
岡山大学大学院自然科学研究科	教授	鶴田 健二	アモルファス酸化鉄二次電池の構造と荷電状態に関する第一原理計算
慶應義塾大学理工学部	准教授	山内 淳	半導体格子欠陥の第一原理計算
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	半導体ナノ結晶に関する大規模シミュレーション
東京大学物性研究所	特任教授	赤井 久純	軽希土類永久磁石材料の電子状態
北海道科学大学	教授	内田 尚志	Mn-Pt 合金の複雑磁気構造の第一原理分子スピン動力学理論
九州大学大学院工学研究院材料工学部門	准教授	佐藤 幸生	第一原理計算によるエネルギー応用に向けた触媒設計
早稲田大学 高等研究所	助教	渡部 洋	型分子性導体におけるダイマー内電荷自由度と磁性・超伝導
琉球大学理学部物理系	教授	梯 祥郎	第 1 原理運動量依存変分理論の構築と鉄化合物の運動量分布関数・準粒子バンドへの応用
筑波大学	助教	苅宿 俊風	トポロジカル系における実空間構造の効果の研究
産業技術総合研究所	上級主任研究員	柳沢 孝	量子モンテカルロ法および第一原理計算による強相関電子系の研究
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	パイロクロア反強磁性体における局所格子歪みの効果
名古屋工業大学	助教	礪部 雅晴	高密度体球系の非平衡相転移と大規模分子動力学シミュレーション
東京工業大学物質理工学院材料系	准教授	合田 義弘	表面ナノ構造における重元素効果
奈良県立医科大学医学部物理学	教授	平井 國友	層状人工格子界面の電子状態と近接効果
理化学研究所創発物性科学研究センター	特別研究員	荒川 直也	多軌道相関金属の内因性スピンホール効果における相互作用効果や多バンド効果の研究
東京大学新領域創成科学研究科物質系専攻	准教授	高木 紀明	2次元八ニカムシートのエッジ構造と電子状態
東京大学新領域創成科学研究科物質系専攻	准教授	高木 紀明	固体表面における磁性分子の吸着状態

平成 28 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所属	職名	代表者名	プロジェクト名
京都大学 学際融合教育研究推進センター（常駐先：産業技術総合研究所）	特定研究員	胡 春平	定電位電極表面における電解質の拡散過程の第一原理シミュレーション
大阪大学理学研究科	教授	川村 光	地震の統計モデルの数値シミュレーション
東京大学物性研究所	特任研究員	樋山 みやび	生物発光関連分子の電子状態についての研究
横浜国立大学 大学院工学研究院 物理工学コース	助教	レービガー ハンネス	電子デバイスのための自己組織化ナノインターフェースの理論
お茶の水女子大学	特任リサーチフェロー	小串 典子	内部反応との相互作用を伴う膜系についての研究
大阪大学大学院基礎工学研究科	助教	大戸 達彦	グラフェン・水界面の第一原理分子動力学シミュレーション
東北大学大学院工学研究科	助教	吉留 崇	マニフォールド理論を用いたタンパク質折り畳みのマルコフ状態モデルの構築
京都工芸繊維大学	助教	水口 朋子	過冷却液体状態のシクロヘキサンにおける局所構造変化と相転移現象
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	教授	鈴木 雄二	3次元電場内の液晶分子の配向
神戸大学大学院理学研究科	名誉教授	利根川 孝	空間構造をもつ次元量子スピン系の数値的研究
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	細胞集団運動における細胞込み合いの効果
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	ランダムな Dirac/Weyl 電子系の数値的研究
熊本大学大学院自然科学研究科	教授	下條 冬樹	高圧力下における共有結合性液体・ガラスの構造と電子状態の第一原理計算
島根大学大学院総合理工学研究科	教授	影島 博之	二次元半導体の多原子空孔とクラスターの構造・形成・物性の解明
熊本大学学生支援部	技術職員	高良 明英	第一原理分子動力学法に基づくガラスの静的構造に関する研究
東京大学 大学院理学研究科	特任研究員	立津 慶幸	第一原理計算を用いた Nd-Fe-B 磁石副相の構造同定
琉球大学理学部	教授	稲岡 毅	固体表面、微粒子の新規電子物性の探索と実現
大阪大学産業科学研究所	助教	山内 邦彦	進化的アルゴリズムを用いたトポロジカル物質の探索と設計
北海道大学大学院理学研究院化学部門	教授	武次 徹也	第一原理計算による豊富元素を利用した触媒設計
琉球大学理学部	准教授	安田 千寿	格子の自由度と結合した量子スピン系におけるランダムネスの効果
東京大学分子細胞生物学研究所	准教授	北尾 彰朗	蛋白質物性に強く関与するソフトモードの効率的サンプリングシミュレーション
物質・材料研究機構	MANA 研究者	濱田 幾太郎	大規模 GW 計算コードの開発と応用
産業技術総合研究所	主任研究員	織田 望	シリコンクラスター超格子の不純物状態に対する第一原理計算
東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻	研究員	藤本 義隆	原子膜物質の原子構造と電子物性の解明
東京大学工学系研究科	准教授	塩見 淳一郎	マテリアルズ・インフォマティクスによる熱機能材料の探索
慶應義塾大学理工学部	教授	佐藤 徹哉	第一原理計算による Pd(100) 超薄膜に生じた自発歪みと強磁性に関する研究
九州大学応用力学研究所	助教	大澤 一人	照射損傷と格子間原子との相互作用の研究

平成 28 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所属	職名	代表者名	プロジェクト名
大阪大学大学院基礎工学研究科	教授	福井 賢一	第一原理及び古典分子動力学計算による固体と接する液体の構造とダイナミクスの解析
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	教授	坂井 徹	数値対角化によるフラストレーション系における量子スピン液体の研究
愛媛大学理工学研究科	教授	淵崎 員弘	融解現象とポリアモルフィズム
大阪大学	教授	黒木 和彦	第一原理計算とモデル多体理論の融合による遷移金属酸化物の電子相関と超伝導に関する研究
三重大学大学院工学研究科物理工学専攻	准教授	中村 浩次	磁性金属超薄膜・有機金属錯体の電子構造と磁性、電界効果に関する第一原理計算
神戸大学大学院システム情報学研究科	助教	島村 孝平	第一原理分子動力学シミュレーションによる原始地球における生体有機分子発生機構の解明
東京大学工学系研究科附属光量子科学研究センター	特任研究員	篠原 康	超短パルスレーザーに誘起されるスピン・電荷ダイナミクスの第一原理計算
分子科学研究所計算科学研究センター	准教授	奥村 久士	分子動力学シミュレーションによるアミロイド線維の動的秩序の形成
北海道大学大学院工学研究院 附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター	助教	國貞 雄治	燃料電池電極触媒及び酸素吸蔵材料の省貴金化
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	研究員	田村 亮	ランダム磁性体が示す磁気熱量効果
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	準周期構造をもつ強相関電子系に対する動的平均場理論
筑波大学大学院数理物質科学研究科物理学専攻	教授	初貝 安弘	数値的手法によるバルク・エッジ対応の研究
東京大学大学院工学系研究科	教授	山下 晃一	太陽光エネルギー変換における基礎過程の研究と材料設計指針獲得のための大規模第一原理計算
広島工業大学 工学部	助教	大村 訓史	超高圧環境下における液体金属の新奇構造：第一原理分子動力学計算
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	助教	中野 博生	量子スピン系の低エネルギー状態に関する数値的研究
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	小田 竜樹	スピントロニクス材料および分子性磁性体の原子構造、磁気状態、電子状態の解析
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
東京大学理学系研究科物理学専攻	教授	宮下 精二	量子応答関数に関するマイクロハミルトニアンからの直接計算法の開発
東京大学物性研究所	助教	森田 悟史	並列化テンソルネットワーク法の開発とその応用
理化学研究所	基礎科学特別研究員	正木 晶子	量子モンテカルロ法の開発とランダムボーズ系の臨界現象
産業技術総合研究所	研究員	橋本 保	シェル・モデルを用いた強誘電体の分子動力学シミュレーション II
東京大学大学院総合文化研究科	准教授	福島 孝治	ランダムスピン系の大規模モンテカルロ計算
京都大学理学研究科	ポスドク(特定研究員)	吉田 恒也	強相関系のトポロジカル相の解析

平成 28 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所属	職名	代表者名	プロジェクト名
広島大学大学院先端物質科学研究科	助教	獅子堂 達也	磁性体の第一原理計算
慶應義塾大学理工学部機械工学科	教授	泰岡 顕治	ルチル型 TiO ₂ (110) 還元表面での O ₂ 分子吸着反応における格子間チタンの役割解明
東京大学総合文化研究科	博士研究員	星野 晋太郎	相関する電子およびスピン系のモンテカルロ法を駆使した数値解析
大阪大学産業科学研究所	助教	初田 浩義	電子・スピンデバイス材料の第一原理計算
産業技術総合研究所	主任研究員	灘 浩樹	ヒドロキシ酸による二酸化チタン結晶形態制御機構の分子動力学シミュレーション研究
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	時間に依存した電子輸送計算に向けた第一原理シミュレーターの開発と応用
ファインセラミックスセンター	主任研究員	桑原 彰秀	Li イオン 2 次電池材料における機械特性の第一原理計算
首都大学東京理工学研究科物理学専攻	教授	堀田 貴嗣	パイエルス・アンダーソンモデルにおける近藤効果の研究
東京大学生産技術研究所	准教授	古川 亮	ガラス状物質及び粉体分散系の異常レオロジー現象
東京大学物性研究所	助教	渡辺 宙志	不純物を含む流体の大規模分子動力学計算
大阪大学大学院 工学研究科 応用物理学専攻	准教授	ディニョ ウィルソン アジェリコ	酸化物系材料における水素および酸素の表面反応
青山学院大学理工学部	教授	松川 宏	摩擦の物理
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻	特任助教	大越 孝洋	銅酸化物高温超伝導体における電子格子相互作用の役割についての第一原理的研究
岩手大学工学部	教授	西館 数芽	有機半導体の第一原理分子動力学
東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻	教授	渡邊 聡	ナノ構造のイオン輸送特性、電気特性および界面電子状態の理論解析
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻	特任講師	山地 洋平	強相関トポロジカル物質における励起スペクトルの数値的研究
京都大学 ESICB	特任研究員	小鷹 浩毅	非自明な電子構造の第一原理研究
京都大学大学院情報学研究科	助教	原田 健白	テンソルネットワーク計算手法の開発
京都大学大学院理学研究科物理学宇宙物理学専攻	教授	川上 則雄	スピン軌道相互作用の強い強相関系におけるスキルミオン相と非平衡現象
日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター	副主任研究員	大西 弘明	フラストレート量子スピン鎖の磁気励起とスピン伝導
福井大学大学院工学研究科	准教授	牧野 哲征	ペロブスカイト型鉛ハライド混晶の電子構造に関する研究
千葉大学理学研究科	准教授	山田 篤志	強相関電子系における超伝導及び磁性状態の研究
早稲田大学 高等研究所	助教	田中 宗	量子アニーリングの実験的実現のための理論基盤構築
首都大学東京	准教授	服部 一匡	横磁場イジング近藤格子模型の数値解析
名古屋大学未来材料・システム研究所	助教	洗平 昌晃	第一原理電子状態計算による拡張アンサンブル計算手法の開発とその応用
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	カーネル法による非平衡緩和解析の改良
東京大学物性研究所	教授	押川 正毅	有機金属構造体におけるトポロジカルな物性と量子スピン液体の実現に関する数値的研究

平成 28 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所属	職名	代表者名	プロジェクト名
九州工業大学	准教授	中村 和磨	第一原理多体摂動計算に基づくパラマグノン揺らぎ評価コードの開発
千葉大学理学部物理学科	教授	中山 隆史	半導体中の軽原子不純物がつくる分子性リドベルグ状態の理論：トンネル電流と強発光特性
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	斎藤 峯雄	固体中ミュオン及び陽電子の第一原理計算
大阪大学大学院工学研究科	助教	稲垣 耕司	第一原理メタダイナミクス計算による CARE 加工プロセスの解明 -Pt と材料表面の間で生じる水分子分解反応-
東京理科大学理学部応用物理学科	教授	遠山 貴己	動的密度行列繰り込み群法によるフラストレート量子スピン系のスピンドYNAMIKSの研究
東京大学大学院工学系研究科	特任研究員	只野 央将	フォノン物性における非調和効果の第一原理計算
東京理科大学理学部	教授	渡辺 一之	ナノ構造の励起電子動力学と表面陽電子状態の第一原理計算
東京電機大学理工学部	准教授	小畑 修二	磁気双極子モーメント相互作用に基づく磁化過程
大阪大学大学院 理学研究科 宇宙地球科学専攻	特任研究員	下川 統久朗	低次元量子磁性体に対するボンドランダムネスの効果
大阪大学 大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻	助教	濱本 雄治	第一原理計算によるグラフェン担持 Pt クラスタに対する格子欠陥の影響
東北大学原子分子材料科学高等研究機構	准教授	赤木 和人	金属酸化物の性質を特徴付ける構造単位の探索
愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター	助教	出倉 春彦	下部マントル鉱物の格子熱伝導率に対する鉄固溶効果の第一原理計算
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	強相関電子系におけるスピン軌道物性の大規模数値シミュレーション
筑波大学大学院数理物質科学研究科	教授	重田 育照	タンパク質の構造変化の量子解析
名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授	白石 賢二	第一原理量子論による次世代新原理メモリの設計指針の獲得
大阪大学理学研究科	教授	川村 光	フラストレート磁性体における新奇秩序
東京大学情報基盤センター	特任講師	五十嵐 亮	MPS 法の並列化および GPGPU 対応とそのフラストレーション系への応用
東京大学物性研究所	特任研究員	大久保 毅	フラストレート磁性体における新奇秩序の探索
東京大学物性研究所	特任研究員	本山 裕一	基板吸着 ^4He の量子モンテカルロ計算
東京大学物性研究所	助教	笠松 秀輔	界面欠陥構造が誘電応答に及ぼす影響の第一原理的研究
東京大学 大学院工学系研究科	助手	沖津 康平	N 波高木方程式の球面波 X 線入射条件における数値解法の研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	諏訪 秀磨	創発励起を伴う量子スピン系のモンテカルロスเปクトル解析
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	講師	森本 賢一	相変化熱流体機器の最適設計手法の開発
芝浦工業大学	准教授	富田 裕介	$O(N)$ モンテカルロ法による 1 次元長距離相互作用イジング模型の動力学の研究

平成 28 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

所属	職名	代表者名	プロジェクト名
琉球大学理学部物質地球科学 学科物理系	准教授	柳澤 将	有機半導体結晶の電子構造に関する理論的研究
鳥取大学大学院工学研究科 機械宇宙工学専攻応用数理 工学講座	准教授	星 健夫	超並列電子状態計算とデータ科学の融合による大規模 デバイス材料研究
金沢大学理工研究域数物科 学系	准教授	石井 史之	異常熱電効果の第一原理的研究
埼玉大学理学部物理学科	助教	品岡 寛	5d 遷移金属酸化物の強相関第一原理計算
東京理科大学	助教	平山 尚美	シリサイド系半導体における熱電輸送物性の不純物添 加効果
筑波大学 数理物質系 物理 工学域	准教授	小林 伸彦	ナノ構造の量子伝導の第一原理計算
筑波大学計算科学研究セン ター	准教授	小野 倫也	実空間差分法に基づく大規模第一原理電子状態・輸送 特性計算手法の開発とシミュレーション
京都産業大学 理学部 物 理科学科	准教授	内田 和之	原子膜積層系におけるモアレの第一原理計算その 2
物質・材料研究機構 国際 ナノアーキテクトニクス研 究拠点	グ ル ー プ リ ー ダ ー	館山 佳尚	電池・触媒の界面反応に関する第一原理サンプリング 研究
大阪大学大学院基礎工学研 究科	准教授	草部 浩一	低エネルギー 2 体散乱過程の幾何学的対称性が発する 強相関電子物性
東京大学大学院理学系研究 科物理学専攻	教授	常行 真司	大規模時空シミュレーションのための第一原理計算手 法の開発と応用
東北大学金属材料研究所	特任助教	芝 隼人	実在ガラス材料の組織形成と変形に関する不均一動 力学の研究
東京大学大学院理学系研究 科物理学専攻	助教	明石 遼介	硫化水素系超伝導体における電子フォノン結合の精密 評価
東京大学大学院理学系研究 科物理学専攻	准教授	藤堂 眞治	確率的最適化による相転移解析と構造探索
秋田大学工学資源学部機械 工学科	教授	足立 高弘	微細横溝加工を施した鉛直平板を流れる凝縮液膜流の 熱輸送特性
東京大学物性研究所	教授	川島 直輝	テンソルネットワーク法によるフラストレート量子ス ピン系の研究
東京大学大学院工学研究科 物理工学専攻	助教	三澤 貴宏	熱的純粋量子状態を用いた量子スピン液体の有限温度 の性質の研究
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	高分子溶融体のマルチスケールシミュレーション
兵庫県立大学 大学院工学 研究科	准教授	鈴木 隆史	蜂の巣格子 Kitaev-Heisenberg 模型の熱力学的性質と 動的性質
東京大学工学系研究科物理 工学専攻	教授	今田 正俊	有限温度変分モンテカルロ法の開発とドーブした 2 次 元ハバード模型・銅酸化物第一原理模型の有限温度物 性と超伝導機構検証
大阪大学 大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻	教授	森川 良忠	第一原理電子状態計算と統計力学的手法を組み合わせ た不均一触媒反応解析
東京大学物性研究所	助教	野口 良史	大規模第一原理 GW+Bethe-Salpeter 計算
東京大学工学系研究科	教授	押山 淳	ハード及びソフトな物質の原子構造と電子物性