

平成 30 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
お茶の水女子大学理学部物理学科	教授	小林 功佳	新たなナノスケール表面界面の電子物性の研究
千葉大学先進科学センター	特任助教	日沼 洋陽	触媒インフォマティクスに向けた酸化物の表面物性計算
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
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
群馬大学	准教授	樋山 みやび	ケージド化合物の水溶液中における電子状態の解明
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	コロイド粒子系における大規模分子シミュレーション
九州大学 大学院理学研究院	教授	福田 順一	ソフトマテリアルの秩序構造とその光学的性質の計算
東京大学工学系研究科	准教授	塩見 淳一郎	機械ひずみを用いたナノ材料フォノン・電子輸送特性制御
福岡工業大学	准教授	蒲池 高志	固体表面上での小分子活性化、および素反応データベースの構築
北海道大学 触媒科学研究所	助教	鳥屋尾 隆	触媒インフォマティクス構築に向けた固体触媒の電子状態計算
筑波大学大学院数理物質科学研究科	准教授	岡田 晋	電界下におけるナノスケール炭素物質の物性解明
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	博士研究員	若林 大佑	シリカガラスの圧力誘起相転移過程における中間状態の圧縮挙動と不均質構造の研究
産業技術総合研究所	上級主任研究員	柳沢 孝	最適化量子変分モンテカルロ法による強相関電子系の研究
東京大学生産技術研究所	助教	高江 恭平	荷電コロイド系の動的な構造形成
東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻	助教	眞弓 皓一	変形下における環動ゲルの環と軸分子の分子ダイナミクス解析
名古屋工業大学	助教	礪部 雅晴	高密度剛体球系における非平衡相転移と遅い緩和
東京大学生産技術研究所	教授	田中 肇	剛体球コロイド系の結晶核形成に対する流体力学的相互作用の影響
北海道科学大学	教授	内田 尚志	フラストレート型遍歴磁性体における多重スピン密度波と磁気スキルミオンの理論
物材機構	研究員	苅宿 俊風	ナノ構造によるトポロジカル状態の実現と操作
宇都宮大学大学院工学研究科	教授	石田 邦夫	フェムト秒領域における電子・格子・光相互作用系の非断熱ダイナミクス
東京工業大学	研究員	寺澤 麻子	数理モデルを用いたアモルファス磁性体および永久磁石内アモルファス相界面の第一原理計算および解析
東京大学物性研究所	助教	森田 悟史	テンソルネットワーク法による量子多体問題ソルバー開発
浜松医科大学フォトンクス医学研究部	指定講師	町田 学	ランダム媒質の光学特性値
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	三角格子 Heisenberg 反強磁性体における動的スピン相関の理論研究
東京大学物性研究所	助教	渡辺 宙志	大規模分子動力学データの圧縮方法の検討
信州大学工学部機械システム工学科	准教授	松中 大介	第一原理計算に基づくマグネシウム合金の欠陥場の解析
東北大学大学院理学研究科	教授	石原 純夫	相互作用の強い系における複合量子ダイナミクス
早稲田大学 高等研究所	助教	渡部 洋	ダイマー内電荷自由度がもたらす分子性導体の新奇現象
立命館大学理工学部物理科学科	教授	池田 浩章	第一原理的アプローチによる電子状態と超伝導
東京大学物性研究所	教授	押川 正毅	多体分極と量子ダイナミクスの数値的研究
大阪大学大学院基礎工学研究科	特任研究員(常勤)	西口 和孝	二体自己無撞着法を用いた多層系銅酸化物の超伝導の理論的研究
横浜国立大学・工学部	准教授	首藤 健一	硫化鉛ナノ構造の化学ドーブ効果
東京大学物性研究所	教授	常次 宏一	強磁性超伝導における渦糸の数値的研究

平成 30 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
北海道大学 大学院工学研究 院	教授	島田 敏宏	BCN 系および MX2 系新規二次元物質およびナノチューブ の生成機構と電子状態に関する研究
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	特任教授	赤井 久純	希土類磁石材料混晶の安定性と磁気特性
東京工業大学 理学院物理学 系	助教	豊田 雅之	四重極型配置の局在スピンの系による電気磁気効果の理論的 解明
東京大学物性研究所	特任研究員	本山 裕一	機械学習と多変数変分波動関数を用いた相分類
横浜国立大学 大学院工学研 究院 理工学コース	准教授	レービガー ハ ンネス	電子でバイスのための自己組織化ナノインターフェイスの 理論
鳥取大学大学院工学研究科	助教	榊原 寛史	高精度な第一原理手法に基づくモデルパラメータの決定方 法の研究
東京大学物性研究所	准教授	松田 康弘	最大エントロピー法やスパースモデリングを用いた状態密 度の推定
東京大学生産技術研究所	准教授	羽田野 直道	バイナリランダムネスのアンダーソン局在のフラクタル 性
工学院大学機械工学科	助教	平塚 将起	第一原理計算を用いた TABA セミクラスレートハイドレ ートの相平衡条件の計算
東京大学工学系研究科	教授	山田 淳夫	新規二次電池材料に関する第一原理計算
東京工業大学	特任研究員	立津 慶幸	Nd-Fe-B 磁石の副相探索及び界面の大規模第一原理計算
大阪大学大学院基礎工学研究 科	助教	大戸 達彦	超分子自己組織化膜/水界面の第一原理分子動力学シミュ レーション
大阪大学大学院工学研究科	特別研究員	BUI VAN- PHO	純水による SiC 単結晶の触媒表面基準エッチングのメカニ ズム解明
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	ランダムなトポロジカル、非トポロジカル系のスケーリ ング理論
東北大学大学院工学研究科	助教	吉留 崇	マニフォールドラーニングを用いたタンパク質-リガンド複 合体の解離定数の定量計算
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
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	異方的形状細胞の込み合いによる集団運動転移の数値的研 究
岡山大学異分野基礎科学研究 所	教授	Jeschke Har- ald	キャリア注入した二次元層状物質の電子構造及び超伝導の 圧力依存性
東京大学物性研究所	助教	樋口 祐次	大規模粗視化分子動力学法による結晶性高分子の凝集プロ セスと機械的特性
琉球大学理学部	教授	稲岡 毅	固体表面・界面、微粒子の新規電子物性の探索と実現
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	原子吸着 Si 表面系の原子構造・電子状態
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
大阪大学ナノサイエンスデザ イン教育研究センター	特任准教授	下司 雅章	新しい構造探索法の開発と新機能性物質の探索
北海道大学理学部物理学科	助教	速水 賢	近藤格子模型において発現するスキルミオン結晶に対する 磁気異方性の効果
島根大学大学院総合理工学研 究科	教授	影島 博之	半導体表面界面における構造的素励起の物性の研究
京都工芸繊維大学	助教	水口 朋子	メソポーラスシリカの界面との相互作用が水のダイナミク スに及ぼす影響
早稲田大学先進理工学研究科	教授	関根 泰	電場中での担持金属触媒表面状態の評価
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

平成 30 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
東京工業大学生命理工学院	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
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
東京大学大学院工学系研究科	特任研究員	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
琉球大学理学部	准教授	安田 千寿	スピンパイエルス系におけるランダムネスの効果
東京大学大学院総合文化研究科	教授	新井 宗仁	産業・医療応用のためのタンパク質の理論物性解析と分子設計
大阪大学産業科学研究所	助教	山内 邦彦	トポロジカル物質の第一原理電子状態計算
慶應義塾大学理工学部物理情報工学科	訪問研究員 (日本学術振興会)	櫻木 俊輔	量子井戸状態を用いたバンドエンジニアリングによる表面・界面スピン物性の開拓と制御
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	研究員	田村 亮	機械学習を用いた複数種類入力による有効モデル推定手法の開発
慶應義塾大学理工学部	教授	佐藤 徹哉	Fe/Pd(001)2 層膜の磁気特性に Pd 層の量子井戸状態が与える影響に関する研究
産業技術総合研究所	主任研究員	灘 浩樹	メタダイナミクス法を組み合わせた大規模分子動力学シミュレーションによるリン酸カルシウム結晶形成機構解析
東京大学物性研究所	助教	野口 良史	自己無撞着 GW を用いた XPS 計算
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	強相関電子系において現れる超伝導と軌道秩序との競合
東京大学大学院 理工学専攻	助教	野村 悠祐	多軌道 TRILEX の実装と応用 - 弱相関側からのアプローチと強相関側からのアプローチをつなぐ新手法 -
千葉大学理学研究科	准教授	山田 篤志	ハバードモデルにおける超伝導及び磁性状態の研究
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	数値的手法によるトポロジカル相とバルク・エッジ対応の研究
和歌山大学システム工学部	講師	小田 将人	GaN 中の欠陥に起因した振動モード変調の研究
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	絶縁体非線形光吸収の第一原理計算
岩手大学理工学部	教授	西館 数芽	燃料電池活性サイトおよび光触媒の密度汎関数法による第一原理計算
兵庫県立大学 大学院工学研究科	准教授	鈴木 隆史	蜂の巣格子キタエフハイゼンベルク模型の磁場中動的性質
首都大学東京理工学研究科物理学専攻	教授	堀田 貴嗣	希土類系のマルチチャンネル近藤効果
神戸大学大学院システム情報学研究科	助教	島村 孝平	深海熱水噴出孔における持続的な化学反応過程の第一原理分子動力学シミュレーション
九州工業大学	准教授	中村 和磨	エキシトニック絶縁体 Ta ₂ NiSe ₅ に対する第一原理低エネルギー有効模型導出
筑波大学大学院数理物質科学研究科	教授	重田 育照	非類似性を利用した自己組織化過程解析
大阪大学工学研究科精密科学・応用物理専攻	准教授	濱田 幾太郎	ファン・デル・ワールズ密度汎関数を用いた金属表面への分子吸着の研究
東京大学大学院工学系研究科物理学専攻	特任助教	大越 孝洋	ファインマン・ダイアグラム展開に基づく量子モンテカルロ法の開発と冷却フェルミ原子系の研究
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 IV
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	明石 遼介	第一原理計算でせまる超伝導体における電荷・スピン揺らぎの定量的競合
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	NIMS ポスドク研究員	山下 智樹	マテリアルズインフォマティクスを用いた新材料開発

平成 30 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
東京大学大学院工学系研究科	教授	山口 周	酸化物表面の Lewis 酸塩基中和による吸着分子の Brønsted 酸性発現機構の解明
大阪大学産業科学研究所	助教	初田 浩義	第一原理計算を用いた環境発電・エネルギー貯蔵デバイス材料の理論設計
兵庫県立大学大学院 生命理学研究科	教授	舘野 賢	分子動力学計算による生体高分子複合体の自由エネルギー計算
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) 表面における温度由来の欠陥安定性に関する研究
大阪大学	教授	黒木 和彦	多バンド系における第一原理計算とモデル計算による電子相関と超伝導に関する研究
北海道大学理学部物理学科	准教授	北 孝文	拡張準古典方程式による渦糸フローホール効果の微視的計算
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	高性能フッ素ポリマーエレクトレットの開発
広島工業大学 工学部	准教授	大村 訓史	軽元素含有による超高压環境下の液体鉄合金の輸送特性変化:第一原理分子動力学シミュレーション
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YNAMIXの研究
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手法の開発と原子層状物質への応用
大阪大学大学院基礎工学研究科	教授	福井 賢一	電極と接して電気二重層を形成するイオン液体の構造化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	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
工学系研究科総合研究機構	助教	毛 偉	第一原理計算によるトリチウム透過防止用金属酸化物中の水素同位体ミクロ挙動に関する研究
愛媛大学工学研究科	教授	淵崎 員弘	相平衡とポリアモルフィズム
九州大学総合理工学研究院	助教	水上 渉	第一原理計算によるモデルリアル触媒上の表面反応の探求
福井大学大学院工学研究科	准教授	牧野 哲征	Yb ₂ O ₃ 完全結晶の電子構造に関する研究
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	スピン軌道結合物質が示す量子磁性の数値的研究
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ナノ物質の構造・機能の解明と予測
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
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ベータペプチド全長のオリゴマー形成過程の研究
京都大学大学院情報学研究科	助教	原田 健自	非平衡系における相転移の数値的研究
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	ギ酸分解触媒及び酸素吸蔵材料の省貴金属化
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	強相関系の外場下応答とトポロジカル現象
埼玉大学	助教	星野 晋太郎	強相関系における非従来型電子秩序の数値的研究
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	教授	坂井 徹	スピントラップの量子相転移の数値的研究
名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授	白石 賢二	第一原理計算と流体力学の融合による窒化物半導体 MOVPE 成長のマルチフィジックスシミュレーション
沖縄科学技術大学院大学	ポスドク研究員	下川 統久朗	フラストレート八ニカム磁性体における多重 Q 秩序相
東京大学物性研究所	特任研究員	浅野 優太	キャピテーションの分子動力学シミュレーション

平成 30 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	第一原理計算によるグラフェンの電子特性の解明
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	動的スケール解析によるトポロジカル相転移の研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	特任講師	大久保 毅	ハニカム格子キタエフ物質における新規秩序の探索
岡山大学大学院自然科学研究科	教授	鶴田 健二	第一原理メタヒューリスティクス法によるナノ炭素機能設計
筑波大学計算科学研究センター	研究員	ハシユミ アルカム	遷移金属ジカルコゲナイドにおけるスピン-バレー分極と異常量子ホール伝導
東京理科大学理学部	教授	渡辺 一之	ナノ構造の励起電子・陽電子・原子動力学と光学応答の第一原理計算
産業技術総合研究所	研究チーム長	石橋 章司	第一原理計算による有機強誘電体・圧電体の物性予測
京都大学理学研究科	ポスドク(特定研究員)	吉田 恒也	強相関トポロジカル系が創発する異常物性
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	第一原理熱力学・統計力学手法を用いた不均一触媒反応課程の研究
東京大学 大学院新領域創成科学研究科	准教授	佐々木 岳彦	第一原理計算による高温水中の多価アルコールの反応過程の研究
新潟大学	教授	大野 義章	第一原理計算と動的平均場理論による多バンド系の超伝導
東京大学大学院工学系研究科総合研究機構	教授	幾原 雄一	機能性材料界面の原子構造および特性発現機構の解明
東京大学 大学院工学系研究科	助手	沖津 康平	多波高木方程式の「キュービックアルゴリズム」による解法の研究
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	スピン依存ファン・デル・ワールス密度汎関数法による磁性分子複合体・結晶・界面系の構造解析と電子相関効果の調査
熊本大学 大学院先導機構	助教	圓谷 貴夫	第一原理計算による Fe 系形状記憶合金および Mg 合金における長周期積層欠陥構造の形成メカニズムの解明
青山学院大学理工学部	教授	松川 宏	摩擦の物理
東京大学物性研究所	助教	笠松 秀輔	レプリカ交換法と第一原理計算を基盤とした構造・物性予測フレームワークの開発
名古屋大学未来材料・システム研究所	助教	洗平 昌晃	ゲルマニウム二次元結晶に関する第一原理計算
東京理科大学	教授	藤代 博記	Sb 系テラヘルツトランジスタのための歪バンド構造設計
東京工業大学物質理工学院材料系	准教授	合田 義弘	表面 Bi ナノ構造の Rashba 効果
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	ナノデバイスに関連する諸特性の理論解析
東京大学工学系研究科	助教	伊與田 英輝	相転移を起こす系における固有状態熱化仮説の数値的研究
千葉大学理学部物理学科	教授	中山 隆史	電場下の金属/固体界面における金属原子のイオン化・拡散の研究：半導体・有機固体基板への展開
琉球大学理学部物質地球科学科物理系	准教授	柳澤 将	第一原理計算による有限温度下での有機半導体のバンド計算
東京大学理学系研究科物理学専攻	教授	宮下 精二	量子状態の動的な外場による制御
早稲田大学 高等研究所	准教授	田中 宗	量子アニーリングの性能向上を目指した統計力学研究
防衛大学校応用科学群応用物理学科	講師	萩田 克美	高分子材料の破壊と補強に関する粗視化 MD シミュレーション
東北大学材料科学高等研究所	准教授	赤木 和人	トポロジカル解析と系の秩序パラメータ
埼玉大学理学部物理学科	助教	品岡 寛	強相関遷移金属化合物の動的平均場近似計算

平成 30 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
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第一原理電子状態・輸送特性計算コード RSPACE の開発とシミュレーション
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
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	斎藤 峯雄	ワイドギャップ半導体におけるミュオン及び陽電子実験に関わる第一原理計算
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	van der Waals 密度汎関数法による有機-金属界面電子状態の理論的解明
東京大学大学院工学系研究科 化学システム工学専攻	教授	大久保 達也	ゼオライト合成における相選択性の理論的、実験的検討
東京大学大学院理学系研究科 物理学専攻	教授	常行 真司	第一原理シミュレーション手法の開発と応用：構造探索から超伝導まで
東京大学物性研究所	特任研究員	松本 宗久	強磁性 $f-d$ 金属間化合物の微視的電子状態第一原理計算と中間スケール磁区構造実験データの統合解析
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・触媒界面物性に関する第一原理”サンプリング”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駆動科学の融合による大規模デバイス材料研究
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	量子多体系におけるトポロジカルな秩序と量子ダイナミクス
理化学研究所	基礎科学特別研究員	正木 晶子	ハイゼンベルグ模型の励起ダイナミクスの研究
立教大学理学部化学科未来分子研究センター	教授	常盤 広明	第四次革新的手法を用いた産業応用酵素および創薬標的タンパク質の理論的研究
東京大学大学院総合文化研究科	教授	福島 孝治	データ駆動科学の物質科学への応用
東京都立産業技術高等専門学校	准教授	鈴木 達夫	高効率な原子層水分解光触媒の理論的探索 II
金沢大学理工研究域数物科学系	准教授	石井 史之	スピン変換物質の第一原理的研究
筑波大学 数理物質系 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
東京大学情報基盤センター	特任講師	五十嵐 亮	ハミルトニアン行列の低ランク行列近似を用いた全固有値計算と量子スピン系への応用
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 -エッチングにより形成される表面粗さの検討-
大阪大学大学院基礎工学研究科	准教授	草部 浩一	ナノグラフェンに現れる動的効果の理論解析
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	高分子流体の非平衡ダイナミクスの解析
名古屋大学大学院工学研究科	准教授	篠田 渉	全原子・粗視化分子動力学シミュレーションによるソフトマターの分子論的解析
東京大学物性研究所	准教授	杉野 修	電極界面の機能物性
東京大学工学系研究科理工学専攻	教授	今田 正俊	低エネルギーフェルミオン励起に基づく銅酸化物の擬ギャップ・超伝導機構の解明
東京大学物性研究所	特任研究員	三澤 貴宏	負のフント結合をもつ多軌道系における超伝導と量子スピン液体
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	小田 竜樹	高機能スピントロニクス材料物質の原子・磁気・電子構造の解析
東京大学工学系研究科	教授	押山 淳	量子論による半導体界面形成機構と電子物性の解明

平成 30 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
東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻	特任准教授	山地 洋平	強相関電子系における分数励起の数値的研究
東京大学物性研究所	Postdoctoral	Sayyad Sharareh	Nonequilibrium investigation of high temperature super- conductors
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非磁性相の探求