

2020年度後期 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
東京工業大学科学技術創成研究院	研究員	日沼 洋陽	触媒インフォマティクスに向けた合成可能な表面探索
神戸大学大学院理学研究科	名誉教授	利根川 孝	空間構造をもつ一次元量子スピン系の数値的研究
玉川大学	助手	坂下 達哉	固有値ソルバの統一的インターフェースRokkoの開発と量子スピン系への応用
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理論的研究
東北大学大学院理学研究科	教授	石原 純夫	相関電子系における非平衡ダイナミクスの数値的研究
琉球大学理学部	准教授	安田 千寿	ハニカム格子上の多スピン交換模型における磁性
茨城大学理学部	教授	中川 尚子	非平衡定常系の大域的な熱力学関数
岐阜大学	助教	小野 頌太	金属のフェムト秒赤外発光の統一理解II
群馬大学	准教授	樋山 みやび	ケージドルシフェリン化合物およびその共役酸・塩基の電子励起状態
筑波大学計算科学研究センター	助教	堀 優太	プロトン伝導性有機結晶中の水素結合構造の解析
岡山大学大学院自然科学研究科	助教	三澤 賢明	第一原理計算と機械学習を用いた固体中の塑性波伝播の分子動力学シミュレーション
近畿大学	博士研究員	金子 隆威	テンソルネットワーク法によるスピンの大きい量子系の相転移の研究
埼玉大学大学院理工学研究科物質科学部門	名誉教授	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
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	コロイド粒子系に関する分子シミュレーション
九州大学 大学院理学研究科	教授	福田 順一	ソフトマテリアルの秩序構造とそのダイナミクス, 光学的性質の計算
産業技術総合研究所	上級主任研究員	柳沢 孝	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数値的研究
島根大学大学院自然科学研究科	教授	影島 博之	半導体表面界面における構造的素励起の研究
大阪大学基礎工学研究科	特任助教	山田 昌彦	キタエフスピン液体のスピンゼーベック効果の数値計算
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
福井大学学術研究院工学系部門	准教授	牧野 哲征	酸化物における電場印加下でのフォノン分散および状態密度の計算
福井大学学術研究院工学系部門	准教授	牧野 哲征	強相関系酸化物反強磁性体における電子構造の計算
千葉大学大学院工学研究院電気電子	准教授	酒井 正俊	有機電荷秩序相における電界誘起金属-絶縁体転移の解明
宇都宮大学大学院工学研究科	教授	石田 邦夫	遠隔空間に光誘起されるフォノン量子もつれ状態のダイナミクス
産業技術総合研究所	主任研究員	灘 浩樹	過飽和炭酸カルシウム水溶液に現れる多様なクラスター構造のメタダイナミクスシミュレーション解析
東京大学物性研究所	特任研究員	櫻井 誠大	第一原理KKR計算を用いた磁気特性の評価
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	フラストレート磁性体における多重Q秩序状態のスピン伝導・熱伝導
早稲田大学基幹理工学部	講師	白井 達彦	サイト変調された揺らぎを用いたアニーリング技術の創出
北海道科学大学	教授	内田 尚志	二次元遍歴磁性体における多重Q状態
東京大学物性研究所	教授	押川 正毅	Z ₂ 渦トポロジカル転移のテンソル繰り込みによる研究
大阪大学 大学院 工学研究科	准教授	有馬 健太	異なる幅を持つグラフェンナリボンのフェルミレベル近傍電子状態の解析
理化学研究所	特別研究員	吉岡 信行	ニューラルネットワークによる開放量子ダイナミクスの数値手法開発
茨城大学	助教	城塚 達也	低圧化学気相成長法による金属膜の高速成長の第一原理計算
茨城大学	助教	城塚 達也	酸化チタン界面における光触媒反応メカニズムの理論的解析
鹿児島大学理学部物理科学科	准教授	野澤 和生	合金触媒の原子構造と電子構造に関する第一原理計算
東京工業大学地球生命研究所	研究員	梅本 幸一郎	ポストポストペロブスカイト転移におけるAl不純物の影響についての第一原理研究
東北大学材料科学高等研究所	助教	横 哲	低温で酸素移動が生じる金属酸化物の第一原理計算
東京理科大学	教授	福元 好志	球体カゴメ系W72V30の磁氣的性質へのランダムネスの効果

2020年度後期 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	助教	森田 悟史	テンソルネットワーク法を用いた相転移・臨界現象の解明
立命館大学	専門研究員	渡部 洋	変分モンテカルロ法による銅酸化物高温超伝導体のストライプ秩序と超伝導の解析
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	磁性分子複合体・結晶・界面系の原子・磁気と原子構造の解析と外部電磁場効果の調査
大阪大学大学院理学研究科物理学専攻	特任研究員（常勤）	西口 和孝	ポスト-ハートレー-フォック法を用いた固体の電子状態計算の開発
東北大学多元物質科学研究所	教授	佐藤 卓	量子パイロクロア磁性体の磁気励起研究
東京大学工学系研究科物理学専攻	准教授	渡邊 悠樹	対称性指標を用いた網羅的なトポロジカル物質探索
慶応義塾大学理工学部	准教授	渡辺 宙志	機械学習を用いたコード最適化の並列化の検討
首都大学東京 理工学研究科物理学専攻	准教授	門脇 広明	厳密対角化とTPQ法による量子パイロクロア磁性体の研究
東京大学物性研究所	特任准教授	福島 鉄也	KKRグリーン関数法による磁性不規則合金のデータベース構築
物材機構	主任研究員	苅宿 俊風	二次元物質の積層を中心とした超構造による新奇物性探索
京都大学理学研究科化学専攻	教授	有賀 哲也	金属表面上の吸着フタロシアニン分子間相互作用
名古屋大学 大学院理学研究科	准教授	小林 晃人	有機ディラック電子系 $\alpha-(BETS)_2I_3$ における隠れた秩序状態
北海道大学 大学院工学研究院	教授	島田 敏宏	高温高圧における分子結晶の炭化反応と電子状態
立命館大学理工学部物理科学科	教授	池田 浩章	強相関電子系における多極子秩序と超伝導
ファインセラミックスセンターナノ構造研究所	研究員	藤井 進	結晶粒界・異相界面におけるフォノン散乱機構の系統的解析
鳥取大学大学院工学研究科	助教	榊原 寛史	新しい基底関数法PMTを用いた第一原理多体有効模型構築
東京大学物性研究所	特任研究員	赤井 久純	乱れた構造を伴う希土類磁石材料の磁気特性
東京大学物性研究所	准教授	加藤 岳生	近藤量子ドットを介した断熱電荷ポンピングの数値計算
琉球大学	助教	小林 理気	希土類金属化合物における置換可能非磁性元素のスクリーニングII
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	第一原理計算による水素化物の準安定固体相および超伝導の探索II
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	新奇なランダムトポロジカル系の量子相転移
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	集団運動での細胞込み合い状況下での多体効果
東京大学大学院工学系研究科	講師	速水 賢	遍歴電子系における正方格子型スキルミオン結晶探索
東北大学大学院工学研究科	助教	吉留 崇	タンパク質動的プロセス解析法：低温電子顕微鏡実験と分子シミュレーションの統合
大阪大学産業科学研究所	助教	山内 邦彦	反転中心の破れた反強磁性体の第一原理電子状態計算
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
岐阜大学	助教	小野 頌太	2次元物質の周期表に基づく動的に安定な合金の新しい探索法
東京大学総合文化研究科広域科学専攻基礎科学系	教授	加藤 雄介	汎関数くりこみ群を用いたキタエフスピン液体の動力学の研究
熊本大学大学院先端科学研究部	助教	島村 孝平	人工ニューラルネットワーク力場構築のための効率的な学習データ生成法の模索II
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	保存則を満たすGW+Bethe-Salpeter法の開発
熊本大学技術部	技術専門職員	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
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	準結晶電子系における非平衡ダイナミクスの数値解析
広島工業大学 工学部	准教授	大村 訓史	溶媒中の人工網膜分子の物性：第一原理分子動力学シミュレーション
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	強相関系の磁性・トポロジカル相形成と輸送現象

2020年度後期 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
大阪大学大学院工学研究科	特任助教	BUI VANPHO	純水による Si 単結晶の触媒表面基準エッチングのメカニズム解明
自然科学研究機構生命創成探究センター	准教授	奥村 久士	分子動力学シミュレーションによるタンパク質集合体の離合集散の研究
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
名城大学	准教授	立津 慶幸	Ga添加型永久磁石界面に対する第一原理的研究
愛媛大学理工学研究科	教授	淵崎 員弘	相転移キネティクスとポリアモルフィズム
北海道大学大学院工学研究科 附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター	准教授	坂口 紀史	燃料電池電極触媒及び水素透過膜の省貴金属化
北海道大学大学院工学研究科 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
東京大学物性研究所	助教	樋口 祐次	両親媒性分子凝集体の大変形プロセス
東京大学物性研究所	助教	井戸 康太	拡張Kitaev模型におけるスピン動的構造因子
九州大学大学院総合理工学研究科物質科学部門	学術研究員 (特任助教)	折本 裕一	有機・無機材料界面における自己秩序化現象の機構解明
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	准教授	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	高性能スピントロニクス磁性材料の電子構造解析および電気磁気効果解析
大阪大学産業科学研究所	教授	小口 多美夫	遷移金属合金の磁気熱量効果
筑波大学 数理工学系	助教	吉田 恒也	非エルミートポロジカル系における強相関効果
岩手大学理工学部	教授	西館 数芽	ダブルペロブスカイト型光触媒の電子構造に関する研究
東京理科大学理学部応用物理学科	教授	遠山 貴己	時間依存密度行列繰り込み群法による二次元ハバード模型の光学伝導度のスペクトル形状解析
理化学研究所 創発物性科学研究センター	研究員	野村 悠祐	ニッケル酸化物超伝導体と銅酸化物超伝導体の比較
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	教授	鈴木 雄二	機械学習を用いた高性能フッ素ポリマーエレクトレットの開発
東京大学大学院総合文化研究科	教授	新井 宗仁	新型コロナウイルス感染症の治療薬開発に向けたタンパク質デザイン
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
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	スピン軌道結合の強い相関電子系の理論的研究
兵庫県立大学 大学院工学研究科	准教授	鈴木 隆史	蜂の巣格子拡張キタエフ模型の基底状態相図 2
東京大学物性研究所	助教	春山 潤	密度汎関数法と溶液理論を用いた電気化学反応の解析 2-2
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	胡 世謙	二次元複合材料におけるフォノン熱伝導の研究
沖縄科学技術大学院大学	Postdoc	ゴウケ マティアス	Numerical study of spin-nematic order in the $S = 1/2$ $J_1 J_2 K$ -Heisenberg model on the square lattice
埼玉大学理学部物理学科	助教	品岡 寛	カゴメ格子上のJ1-J2反強磁性体の古典モンテカルロ計算
九州工業大学	准教授	中村 和磨	イリジウム酸化物 $\text{Ca}_5\text{Ir}_3\text{O}_{12}$ の第一原理フォノン計算
岡山大学異分野基礎科学研究科	教授	Jeschke Harald	擬1次元Crニクタイトにおける超伝導の理論研究
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	有限温度フラストレート磁性体の物性解明
分子科学研究所	准教授	南谷 英美	フォノン及び電子フォノン相互作用の第一原理精密解析
大阪大学 大学院工学研究科 物理学系専攻	助教	濱本 雄治	van der Waals密度汎関数法による金(110)表面に吸着した銅フタロシアニンの理論的研究
慶應義塾大学理工学部	教授	佐藤 徹哉	第一原理計算におけるPt(100)薄膜の強磁性発現に関する研究
自然科学研究機構アストロバイオロジーセンター&国立天文台	特任研究員	小松 勇	氷惑星および氷衛星内部における氷物質の熱力学特性
名古屋大学未来材料・システム研究所	特任助教	原嶋 庸介	窒化ガリウムp-nダイオードの不純物と貫通転位複合体の電子状態計算

2020年度後期 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
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所	研究員	松本 宗久	実験理論データ統合による最適化磁性材料設計
公益財団法人豊田理化学研究所	フェロー	川村 光	フラストレート磁性体における新奇秩序
沖縄科学技術大学院大学	ポスドク研究員	下川 統久朗	フラストレートした量子磁性体に対する熱ゆらぎの効果
東京大学工学系研究科附属光量子科学研究センター	特任助教	篠原 康	固体光吸収の第一原理計算
名古屋大学大学院理学研究科	教授	岡本 祐幸	拡張アンサンブル法による複雑系の研究
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	教授	坂井 徹	磁場誘起スピネマティック液体の数値対角化による研究
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ソルビトールの環化脱水反応の研究
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	超並列計算を用いた計算物質科学とデータ駆動科学の融合
東北大学材料科学高等研究所	助教	横 哲	CeO ₂ (100) でのメタンの酸化反応
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	表面、界面、欠陥等の複雑構造における原子構造と原子ダイナミクスに関する解析
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	フラストレーション系に現れる相転移と臨界現象の動的スケール解析II
大阪大学工学研究科	教授	浜口 智志	原子層エッチングプロセスにおける表面反応解析
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	斎藤 峯雄	群論に基づくバンド計算
東北大学大学院理学研究科物理学専攻	教授	川勝 年洋	マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォームを用いた流体-弾性体連成シミュレーション
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	邵 成	金属-絶縁体界面における結合した電子-フォノン輸送
名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授	白石 賢二	GaN中の不純物-らせん転位複合体の原子構造と電子構造の第一原理計算による研究
産業技術総合研究所	上級主任研究員	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
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	電子の長距離量子輸送シミュレーションに向けた第一原理アルゴリズムの開発と応用
千葉大学理学部物理学科	教授	中山 隆史	第一原理計算に基づく金属/半導体界面のギャップ状態制御の物理III：電場下・合金界面への展開
北海道大学大学院工学研究院	教授	明楽 浩史	原子層面内ヘテロ構造・積層構造におけるスピン偏極・擬スピン偏極の生成
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	教授	常行 真司	結晶構造予測のためのデータ同化手法の開発と水素を含む化合物への応用
山形大学学術研究院	助教	笠松 秀輔	第一原理計算・統計物理・機械学習の連携による不規則物質系の物性予測
琉球大学理学部物質地球科学科物理系	准教授	柳澤 将	高分子系有機半導体の電子状態・界面準位の第一原理的研究
大阪大学	教授	黒木 和彦	軌道間相互作用が増強するスピン揺らぎ媒介超伝導に関する研究
金沢大学ナノマテリアル研究所	特任助教	山口 直也	スピン流-電流変換物質における電界効果の第一原理計算
大阪大学 大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻	教授	森川 良忠	量子シミュレーションによる動的不均一触媒理論
東京大学機械工学専攻	特別研究員	LIAO YUXUAN	ポリマー材料の巨大熱物性データベースの機械学習支援開発
東京大学機械工学専攻	特任助教	大西 正人	第一原理計算を用いたクラスレート化合物の熱電特性解析
東京大学工学系研究科	教授	塩見 淳一郎	マテリアルズ・インフォマティクスを用いた熱機能材料探索
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	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
東京工業大学	特任准教授	松下 雄一郎	パワー半導体における界面欠陥構造の特定とその低減法の提案: 第一原理計算からのアプローチ
東京大学大学院総合文化研究科	教授	福島 孝治	テンソルくりこみ群によるスピングラス研究
横浜国立大学 大学院工学研究院 物理工学コース	准教授	レービガー ハンネス	ドライエッチング工程におけるフロロカーボン誘電膜の第一原理計算
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	高分子流体・固体のマルチスケールシミュレーション

2020年度後期 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
神戸大学大学院工学研究科 電気電子工学専攻	教授	小野 倫也	第一原理電子状態・輸送特性計算コードRSPACEの開発 とデバイスシミュレーション
横浜国立大学・工学部	准教授	首藤 健一	不純物ドーピングによるGa ₂ O ₃ およびGaNの光学的バンドギャップ制御
筑波大学 数理物質系 物理 工学域	教授	小林 伸彦	ナノ構造の量子伝導の第一原理計算
東京大学大学院理学系研究 科物理学専攻	助教	諏訪 秀磨	不純物の乱れから生じる隠れたSU(2)対称反強磁性スピ ンの巨大磁気応答
岡山大学大学院自然科学研 究科	教授	鶴田 健二	ナノ界面・分子構造の最適特性設計のための第一原理/ 機械学習連成計算
大阪大学 先導的学際研究機 構	特任准教授	水上 渉	量子古典混合アルゴリズムを用いた第一原理計算のノイ ズを考慮したシミュレーション
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	酸化物界面の安定構造探索および偏析現象の解明
東京大学大学院新領域創成 科学研究科物質系専攻	特任教授	岡崎 進	全原子分子動力学シミュレーションによる実在系バイオ ポリマーの力学的特性及び熱的特性発現の分子機構の解 明
金沢大学ナノマテリアル研 究所	准教授	石井 史之	二次元物質および表面合金の第一原理計算
京都大学大学院情報学研究 科	助教	原田 健自	エンタングルメント最適化法の開発
東京大学総合文化研究科	准教授	堀田 知佐	2次元格子モデルにおける電荷ガラス相の探索の理論そ の2
名古屋大学大学院工学研究 科	准教授	篠田 渉	全原子・粗視化力場によるソフトマターの分子シミュレ ーション
名古屋大学未来材料・シス テム研究所	特任教授	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
東京大学物性研究所	特任研究員	浅野 優太	複雑流体中のキャビテーションの分子動力学シミュレ ーション
早稲田大学理工学術院	研究院教授	今田 正俊	高精度第一原理強相関電子状態計算手法による高温超伝 導体の網羅的研究
東京大学物性研究所	教授	杉野 修	電気化学界面のシミュレーション
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	量子スピン液体物質の高精度第一原理有効ハミルトニア ンによる数値解析
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キタエフ関連モデルの計 算