

2020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
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非平衡過程に関する分子動力学的研究
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複合酸化物の表面物性計算
東京大学物性研究所	准教授	加藤 岳生	メゾスコピック素子における断熱ポンピングの理論
群馬大学	准教授	樋山 みやび	ホタル生物発光関連分子の吸収/蛍光スペクトル解析
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
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
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
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
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
東京大学 大学院総合文化研究科	特任助教	舘野 道雄	質量保存型反応拡散系の粗大化ダイナミクス
東京大学 大学院総合文化研究科	特任助教	舘野 道雄	Phase field 法による多細胞シミュレーション
大阪大学 大学院 工学研究科	准教授	有馬 健太	微小グラフェンシート上のSTM観測で得られる特異な輝点列の起源の解明
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
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
東京大学物性研究所	助教	森田 悟史	テンソルくりこみ群による相転移・臨界現象の解明
埼玉大学理学部物理学科	助教	品岡 寛	統合型動的平均場近似ソフトウェアDCoreの開発と応用
東京大学工学系研究科物理工学専攻	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
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
東北大学大学院理学研究科	教授	石原 純夫	光誘起非平衡ダイナミクスにおける不均一効果
産業技術総合研究所	上級主任研究員	柳沢 孝	強相関電子系における新規量子現象の研究
東京理科大学	准教授	福元 好志	球体カゴメ系 $W_{72}V_{30}$ の状態密度、動的構造因子の計算
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
物質・材料研究機構	ポスドク研究員	小松 尚登	双極子相互作用が存在する磁性薄膜における非平衡状態の磁気構造
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	磁性体における相転移に伴うスピン伝導
名古屋工業大学	准教授	磯部 雅晴	高密度剛体球系における非平衡相転移と遅い緩和
早稲田大学グリーン・コンピューティング・システム研究機構	次席研究員	白井 達彦	非平衡環境と接した定常状態の普遍的性質の解明
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
早稲田大学 グリーン・コンピューティング・システム研究機構	准教授	田中 宗	イジングマシンにおける新規アルゴリズム構築
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	主任研究員	田村 亮	誤差付き有効モデル推定
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
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ダイナミクス、光学的性質の計算
大阪大学基礎工学部	特任准教授	真砂 啓	電気伝導度の温度依存性とゼーベック係数の第一原理計算
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・磁気構造の解析と外部電場・磁場効果の調査
福井大学学術研究院工学系部門	准教授	牧野 哲征	デラフォサイト型銅酸化物における定常電場印加下での電子構造計算
福井大学学術研究院工学系部門	准教授	牧野 哲征	希土類セスキオキシドにおける電子格子相互作用の計算
東京大学物性研究所	助教	福田 将大	物質表面における電子場の局所量解析
物材機構	主任研究員	苅宿 俊風	超構造によるバンドエンジニアリングとその応用
東京工業大学物質理工学院	研究員(PD)	高 成柱	密度汎関数理論と線形応答理論の枠組みにおけるゼーベック係数計算手法の開発
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	シリサイド薄膜系の原子構造と電子状態

2020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
東京理科大学	教授	飯田 努	環境調和型シリサイドSrSi ₂ の熱電性能への不純物添加効果の理論的研究
宇都宮大学大学院工学研究科	教授	石田 邦夫	遠隔系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
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
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
琉球大学	助教	小林 理気	ファンデルワールス希土類化合物における置換可能元素のスクリーニング
北海道科学大学	准教授	村口 正和	半導体デバイス中のキャリアダイナミクスの機械学習モデルに関する研究
北海道科学大学	教授	内田 尚志	空間反転対称な遍歴磁性体における多重ヘリカルスピン密度波
北海道大学 大学院工学研究院	教授	島田 敏宏	原子層物質形成反応の解析と物性予測
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
帝京大学	教授	棚本 哲史	量子アニーリング機械を目指した近接相互作用量子ビット系のパルス操作による全結合実装方式の検討
首都大学東京 理工学研究科物理学専攻	准教授	門脇 広明	厳密対角化による量子パイロクロア磁性体の研究
東京工業大学	特任准教授	大野 玲	液晶における電子輸送機構のモデル化と解明
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 α -(BETS) ₂ I ₃ の低温相における隠れた秩序状態
鳥取大学大学院工学研究科	助教	榊原 寛史	PMT基底関数法を用いた第一原理多体有効モデル構築
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
工学院大学機械工学科	助教	平塚 将起	機械学習と第一原理計算による赤外およびラマンスペクトルの予測方法の検証
金沢大学ナノマテリアル研究所	特任助教	山口 直也	LCPAO法を用いた一様電場下にある絶縁体・半導体バルクにおけるバンド分散の第一原理的解析
日本大学理工学部 一般教育教室(物理)	教授	中原 明生	ペーストの流れの記憶の多様性
神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科	特命助教	西口 和孝	量子化学計算を用いた固体の電子状態計算の開発
慶応義塾大学理工学部	准教授	渡辺 宙志	液膜破壊を伴う流動現象の分子動力学計算
東北大学材料科学高等研究所	助教	横 哲	金属ドーブによるセリウム酸化物の格子歪発現と酸素貯蔵能向上に関する第一原理計算
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	新奇なランダム系の量子相転移
北海道大学理学部物理学科	助教	速水 賢	ボンド依存した異方的相互作用をもつ系における多重Q磁気秩序相の探索
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
筑波大学計算科学研究センター	助教	堀 優太	プロトン伝導性酸塩基複合体中の局所構造と分子運動の解析
横浜国立大学・工学部	准教授	首藤 健一	不純物ドーブによる ϵ 型と κ 型のGa ₂ O ₃ の光学的バンドギャップ制御
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
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	「厳密」な第一原理GW+Bethe-Salpeter法の開発
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
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
広島工業大学 工学部	准教授	大村 訓史	多元系液体鉄合金の超高圧下における構造と輸送特性
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
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
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
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
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

2020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
東北大学大学院工学研究科	助教	吉留 崇	天然構造が極めて類似したタンパク質における熱変性の理論研究
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	駆動力に対する込み合い細胞運動の応答理論の構築
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：古典力学系から量子系まで
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
名城大学	准教授	立津 慶幸	永久磁石内部の異相界面に対する第一原理的研究
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
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
神戸大学大学院システム情報学研究科	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
北海道大学理学部物理学科	准教授	北 孝文	拡張準古典方程式を用いた熱ホール効果の磁場依存性
東京大学工学系研究科	教授	山田 淳夫	第一原理計算による新規二次電池材料の解析
名古屋大学未来材料・システム研究所	特任助教	原嶋 庸介	パワー半導体デバイスのリーク電流と貫通転位における電子状態
東京大学物性研究所	助教	樋口 祐次	粗視化シミュレーションによる両親媒性分子の凝集プロセス
兵庫県立大学 大学院工学研究科	准教授	鈴木 隆史	蜂の巣格子上拡張キタエフ模型の基底状態相図
熊本大学学生支援部	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
産業技術総合研究所	主任研究員	灘 浩樹	水と水溶液の大規模メタダイナミクスシミュレーション
名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授	白石 賢二	マルチフィジックスシミュレーションによる半導体気相成長の解明
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
北海道大学	助教	岩佐 豪	双極子近似を超えた光-分子相互作用のための第一原理計算手法の開発と応用
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	汎関数くりこみ群によるキタエフハイゼンベルグの動力学の研究
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	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
熊本大学パルスパワー科学研究所	特任助教	熊添 博之	スパース推定による広域 X 線吸収微細構造計測の解析手法の確立
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
東京工業大学物質理工学院材料系	准教授	合田 義弘	フォノンの磁性への影響の理論解析
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
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
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
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
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
大阪大学大学院基礎工学研究科	助教	大戸 達彦	ハイブリッド汎関数による水/酸化チタン界面構造の第一原理シミュレーション
京都工芸繊維大学	助教	水口 朋子	DNAの引っ張りシミュレーションによる巻き戻し機構の解明
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	教授	坂井 徹	S=2 反強磁性鎖における対称性に守られたトポロジカル相
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	強相関系の相形成と輸送現象
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
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モット絶縁体の光学伝導度のスペクトル形状解析
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
筑波大学 数理物質系	助教	吉田 恒也	非エルミートトポロジカル系におけるバルクエッジ対応

2020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
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に対する強相関第一原理計算
横浜国立大学	准教授	那須 譲治	キタエフ量子スピン液体に対する乱れの効果
大阪大学	教授	黒木 和彦	銅酸化物における特異な電子状態による超伝導増強機構に関する研究
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
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	絶縁体非線形光吸収の第一原理計算
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	非平衡分子動力学シミュレーションによるアミロイド線維破壊の研究
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	スピン軌道結合の強い相関電子系の理論的研究
千葉大学	助教	二木 かおり	波数空間分解光電子分光を用いた 分子結晶表面の解析手法の確立
岡山大学異分野基礎科学研究所	教授	Jeschke Harald	圧力下におけるSrおよびAgをドーブしたBi ₂ Se ₃
首都大学東京理学研究科物理学専攻	教授	堀田 貴嗣	2チャンネル近藤状態とフェルミ液体状態の間に現れる量子臨界点の研究
東京工業大学	研究員	寺澤 麻子	第一原理計算を用いた永久磁石内の様々な相・相界面に対する交換結合定数計算および界面磁気特性の解明
長岡技術科学大学	産学融合特任准教授	山下 智樹	表面および界面構造探索手法の開発
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
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	分子・金属界面の第一原理計算
青山学院大学理工学部	教授	松川 宏	摩擦の物理
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
東京工業大学地球生命研究所	研究員	梅本 幸一郎	Na-Mg-F系超高压相における秩序無秩序転移
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
九州工業大学	准教授	中村 和磨	熱力学状態図作成のための第一原理計算: 交換相関汎関数依存性
三重大学大学院工学研究科	助教	河村 貴宏	NaフラックスGaN成長における融液構造および融液物性の解析
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	準結晶系における新規秩序相と非平衡現象の探索
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
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
金沢大学ナノマテリアル研究所	准教授	石井 史之	ベリー位相法による金属強磁性体の異常ホール係数の第一原理計算
広島大学大学院理学研究科	准教授	高橋 修	有機物水溶液の電子状態
東京大学物性研究所	助教	井戸 康太	強相関電子系で発現する量子スピン液体の解析
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
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	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
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	群論に基づくバンド計算
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
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	グラフェンへのドーピングと分子吸着

2020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
千葉大学理学研究科	准教授	山田 篤志	ハバードモデルによる、強相関電子系での超伝導状態、および磁性状態の研究。
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
産業技術総合研究所	主任研究員	橋本 保	液体BaTiO ₃ の分子動力学シミュレーション
北海道大学大学院工学研究科	助教	江上 喜幸	大規模第一原理電子輸送シミュレーションに向けたアルゴリズム開発と応用
東京大学 大学院工学系研究科	助手	沖津 康平	X線結晶構造解析における2波近似理論の破れの研究
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金(110)表面に吸着した銅フタロシアニンの理論的研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	教授	常行 真司	水素を含む固体の先端計算による水素機能予測
山形大学学術研究院	助教	笠松 秀輔	統計物理・第一原理計算連携シミュレーションによる蓄電固体界面の熱力学解析
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	量子化学計算を用いた高性能フッ素ポリマーエレクトレットの開発
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	諏訪 秀麿	2次元反強磁性体の巨大磁気応答における不純物効果
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複雑流動の解析
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
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
金沢大学	教授	新井 豊子	DFT計算による非接触原子間力顕微鏡のエネルギー散逸チャンネルで捉えた原子変位機構の解明
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	第一原理分子動力学法による異種界面原子構造の解析
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
東京大学大学院総合文化研究科	教授	新井 宗仁	産業や医療に有用な新規タンパク質の合理的設計
千葉大学理学部物理学科	教授	中山 隆史	金属/半導体界面のギャップ状態制御の物理：第一原理計算による研究II
琉球大学理学部物質地球科学科物理学系	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
筑波大学 数理工学系 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
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結晶系の第一原理計算
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	胡 世謙	シリコン結晶マトリックスにナノ粒子アレイを導入することによる2経路フォノン干渉共鳴誘導ストップバンド
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	邵 成	自己組織化単分子膜を用いたPbS量子ドット系のフォノンエンジニアリング
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	拡張動的平均場理論による第一原理データと実験測定結果の自己無撞着解析
横浜国立大学 大学院工学研究科 物理工学コース	准教授	レービガー ハンネス	低次元ペロブスカイトにおける励起子自己捕獲現象の第一原理計算
東京大学大学院総合文化研究科	教授	福島 孝治	物質科学における並列ベイズ計算
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
横浜国立大学大学院工学研究科	教授	大野 かおる	全電子混合基底法プログラムの改良と応用
東京大学物性研究所	特任准教授	福島 鉄也	KKRグリーン関数法を用いたハイスループット材料計算手法の開発
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磁性材料の電子構造解析および電気磁気効果解析
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
東京大学物性研究所	教授	杉野 修	水素の計算物質科学
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

2020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
早稲田大学理工学術院	研究院教授	今田 正俊	準粒子干渉実験データの機械学習による銅酸化物高温超伝導の解析
東京大学物性研究所	特任研究員	浅野 優太	複雑流体中におけるキャビテーションの分子動力学シミュレーション
東京大学物性研究所	特任研究員	三澤 貴宏	Pd(dmit) ₂ 系分子性導体に対する第一原理低エネルギー有効Hamiltonianの系統的解析
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	量子相互情報量による量子スピン液体の数値的研究