

2021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	准教授	加藤 岳生	量子モンテカルロ法を用いたスピンホール磁気抵抗効果の理論研究
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を介した熱輸送の数値計算
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
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	Patchy粒子系における構造形成
大阪大学基礎工学研究科	教授	藤本 聡	Kitaevスピン液体のトポロジカル・ネマティック相転移
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
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に関する理論的研究
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応答と相転移
大阪大学基礎工学研究科	准教授	水島 健	トポロジカル超伝導体におけるMajorana量子ビットの数値シミュレーションによる耐性評価
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ノリボンの電子状態と反応性調査
高度情報科学技術研究機構	職員	寺澤 麻子	ネオジム永久磁石副相および界面の構造と交換結合定数の第一原理計算的解析
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で実現するスピントクスチャへの磁気異方性の効果
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
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2次元冷却原子系の実時間ダイナミクスの計算
早稲田大学先進理工学部応用物理学科	教授	望月 維人	数値シミュレーションによる金属磁性体中のスキルミオン格子が示す光誘起現象の研究
東京大学物性研究所	助教	森田 悟史	高次元系におけるテンソルネットワークくりこみ群の改良
鳥取大学大学院工学研究科	助教	榊原 寛史	MLOを用いた第一原理有効モデルの自動生成システムの研究
名古屋大学 大学院理学研究科	准教授	小林 晃人	有機導体の強相関ディラック電子系における秩序状態の解明
金沢大学ナノマテリアル研究所	特任助教	山口 直也	有機分子を活用したスピン流-電流変換物質の第一原理計算
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	明石 遼介	超伝導密度汎関数理論に基づく第一原理Tc計算手法の高度化
帝京大学	教授	棚本 哲史	スピン量子ビット伝導機構の解明
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新奇表面サイト探索
東京大学生産技術研究所	教授	羽田野 直道	有向グラフのスペクトル解析によるクラスタリングの手法開発
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に基づく非平衡現象の大規模分子動力学シミュレーション
東京大学生産技術研究所	講師	徳本 有紀	Pb系トポロジカル絶縁体の欠陥形成エネルギーおよびバンド構造
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
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
北海道大学 大学院工学研究院	教授	島田 敏宏	大きな分子量を持つ有機半導体結晶の電子状態の計算
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
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電子格子相互作用
福井大学学術研究院工学系部門	准教授	牧野 哲征	既存Juliaパッケージを活用した分光データの非線形回帰分析の並列化
東京理科大学	教授	福元 好志	S=1/2球体カゴメ系W ₇₂ V ₃₀ , Mo ₇₂ V ₃₀ の熱力学的性質の統一的理解へ向けて
茨城大学	助教	城塚 達也	化学気相成長における金属膜成長メカニズムの理論解析
早稲田大学基幹理工学部	講師	白井 達彦	量子近似最適化アルゴリズムに相転移現象が与える影響の探求
東北大学大学院理学研究科	助教	小野 淳	相関電子系における光誘起非平衡ダイナミクス
北海道科学大学	教授	内田 尚志	反転対称な二次元ハバード模型における多重スピン密度波

2021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
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	連続体と分子動力学法連成のマルチスケールシミュレーション手法開発
名古屋大学	准教授	倭 剛久	タンパク質中の不均一な熱輸送物性の解析
物材機構	主任研究員	苅宿 俊風	非整合積層系の電子状態：モデル化の検証と応用
東京大学物性研究所	特任研究員	赤井 久純	永久磁石材料の有限温度磁性
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	主任研究員	田村 亮	有効モデル推定の誤差評価手法開発
立命館大学	専門研究員	渡部 洋	4バンドd-p模型を用いた銅酸化物高温超伝導体の解析
慶應義塾大学理工学部物理情報工学科	准教授	田中 宗	統計力学に基づくイジングマシンの新規アルゴリズム構築
東京大学物性研究所	教授	押川 正毅	量子スピン系におけるギャップレスSPT相の研究
立命館大学理工学部物理科学科	教授	池田 浩章	量子液晶の電子状態計算
東京大学総合文化研究科	准教授	堀田 知佐	1次元・2次元磁性体の有限温度熱力学量の計算手法の開発と実装
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
千葉大学大学院工学研究院電気電子	准教授	酒井 正俊	有機電荷秩序材料における電気伝導度変調の起源に関する研究
慶応義塾大学理工学部	准教授	渡辺 宙志	ガウス過程回帰を用いた効率的な相図探索手法の開発
東京大学物性研究所	助教	井戸 康太	強相関電子系における励起状態のためのニューラルネットワーク量子状態
東京大学物性研究所	助教	河村 光晶	多元球充填を指導原理とする結晶構造探索
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
工学院大学機械工学科	准教授	平塚 将起	機械学習と第一原理MDによる赤外およびラマンスペクトルの計算方法の検討
京都大学理学研究科化学専攻	教授	有賀 哲也	金属2原子膜と磁性金属フタロシアニン分子の相互作用
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	強誘電体/強磁性体界面系と異方的結晶構造を持つ磁性体の解析
東京工業大学	特任准教授	大野 玲	液晶におけるオーダーパラメータと電子輸送機構との相関
東京大学物性研究所	助教	福田 将大	網羅的DFT計算によるAB型2次元物質探索
大阪大学大学院工学研究科	助教	稲垣 耕司	ダイヤモンド表面のグラファイト化とその剥離プロセスの第一原理計算
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
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	機械学習を用いた環境発電用ポリマーエレクトレット材料の開発
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	助教	李 敏赫	機械学習を用いた代替燃料の低温酸化反応モデル構築
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	アンダーソン転移の新奇な普遍クラスの臨界現象
岐阜大学	助教	小野 頌太	原子層合金の安定性
東京大学物性研究所	准教授	眞弓 皓一	ロバスト強硬化高分子ゲルにおける伸長誘起結晶化の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
大阪大学量子情報・量子生命研究センター	特任研究員	岡田 健	変分モンテカルロ法によるツイスト二層グラフェンの研究
千葉大学	助教	二木 かおり	分子結晶表面状態の時間分解解析手法の確立
九州大学大学院総合理工学研究院物質科学部門	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二次元秩序構造形成過程の第一原理計算
名城大学	准教授	立津 慶幸	第一原理計算による磁性元素を含む表面・界面の理論解析
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
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	量子スピン液体に対するスピン非対角相互作用と双極子相互作用の効果
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	トポロジカル相とバルクエッジ対応の科学に関する数値的研究
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なサンプリングシミュレーション
琉球大学理学部	准教授	安田 千寿	ハニカム格子スピン系の数値的研究

2021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
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	第一原理GW+Bethe-Salpeter法によるXAS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
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
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	セラミックス界面におけるナノスケールフォノン散乱機 構の解明
千葉大学理学研究科	准教授	山田 篤志	強相関電子系での超伝導状態、および磁性状態のハバ ードモデルによる研究。
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	細胞の集団回転運動のシミュレーション
大阪大学産業科学研究所	助教	初田 浩義	ワイドギャップ酸化物材料における点欠陥の構造安定性 と電子状態
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	ボルツマンマシンを用いた量子多体系の有限温度計算
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
名古屋大学 未来材料・シ ステム研究所	教授	白石 賢二	GaN中の転位と不純物の複合体の第一原理計算による研 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III
兵庫県立大学 大学院工学 研究科	准教授	鈴木 隆史	ダイポール相互作用を持つ2次元正方格子上のボーズハ バード模型における超固体状態
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
産業技術総合研究所環境創 生研究部門	研究グループ長	灘 浩樹	大規模メタダイナミクスシミュレーションによるイオン 液体の結晶化経路解明
東京理科大学理学部応用物 理学科	教授	遠山 貴己	キャリアドーピングされた二次元モット絶縁体の光学伝導 度に現れるストリング励起の解析
東京大学物性研究所	助教	樋口 祐次	吸水した結晶性高分子の構造と機械的特性
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
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	キタエフ量子スピン液体におけるスピン輸送特性
産業技術総合研究所	主任研究員	橋本 保	BaTiO ₃ ナノ構造の分子動力学シミュレーション
分子科学研究所	助教	伊藤 暁	分子動力学シミュレーションを用いた脂質ラフト形成に 関する研究
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	HPCを基盤とした実験解析・シミュレーション・デー タ駆動科学の融合
電気通信大学情報理工学研 究科	教授	尾関 之康	臨界現象のための動的スケール解析の開発と改良
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
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	固体光吸収の原子論的シミュレーション
東京大学大学院工学系研究 科	講師	速水 賢	遍歴磁性体におけるメロン結晶の探索
兵庫県立大学大学院物質理 学研究科	教授	坂井 徹	スピン・フラストレーション系の量子相転移の数値対角 化による研究
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	積層グラフェンの物性解明
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
岡山大学大学院自然科学研 究科	教授	鶴田 健二	分子修飾ナノ界面設計のための第一原理および人工ニュー ラルネット分子動力学計算
広島工業大学 工学部	准教授	大村 訓史	ペロブスカイト型酸化物の光励起状態におけるイオン伝 導に関する第一原理分子動力学研究
京都大学学際融合教育研究 推進センター	特定助教	山内 邦彦	次世代スピントロニクス応用に向けたトポロジカル界面 の第一原理設計
大阪大学基礎工学研究科	特任助教	山田 昌彦	無秩序キタエフ模型におけるガラス転移
東京大学大学院工学系研究 科	教授	求 幸年	電荷・スピン・軌道結合系に現れる対称性の破れと量子 輸送現象の理論的研究
岩手大学理工学部	教授	西館 数芽	第一原理計算によるダブルペロブスカイト型光触媒の研 究

2021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
茨城大学理学部	教授	中川 尚子	大域熱力学的釣り合いによりもたらされる非平衡特有の現象
横浜国立大学	准教授	那須 謙治	キタエフ関連モデルにおけるトポロジカル熱伝導の数値解析
東京都立大学理学研究科物理学専攻	教授	堀田 貴嗣	重希土類イオンに創出するマルチチャンネル近藤効果の研究
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
東京大学機械工学専攻	特任助教	大西 正人	van der Waals 相互作用が生み出す低熱伝導
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	希土類永久磁石材料における計測・計算データ同化
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
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
筑波大学計算科学研究センター	助教	原嶋 庸介	不純物半導体の金属絶縁体転移の臨界指数とスピン秩序
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蓄電デバイス材料の解析
大阪大学大学院基礎工学研究科	准教授	草部 浩一	進化論的アルゴリズムによる高速化学反応過程シミュレーション手法の開発
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
千葉大学理学部物理学科	教授	中山 隆史	帯電が誘起する薄膜酸化物の構造相転移：第一原理計算による研究
京都大学大学院情報学研究科	助教	原田 健自	テンソルネットワーク表現を用いたデータ分析手法
東京工業大学物質理工学院材料系	准教授	合田 義弘	Bayes最適化を用いた界面電気磁気結合の最大化
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	遷移金属化合物における電子局在化の第一原理計算
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	斎藤 峯雄	固体中ミュオンの第一原理計算
理化学研究所	専任研究員	飯高 敏晃	玄武岩メルトとガラスの構造と物性
山形大学学術研究院	助教	笠松 秀輔	不規則物質系の超イオン伝導性
大阪大学基礎工学研究科	准教授	大槻 道夫	固体間摩擦の3次元有限要素解析
防衛大学校応用科学群応用物理学科	講師	萩田 克美	MP-SRP法を活用した架橋ネットワークのトポロジー効果のDPDシミュレーション研究
長岡技術科学大学	産学融合特任准教授	山下 智樹	機械学習を用いた結晶構造探索手法の開発
青山学院大学理工学部	教授	松川 宏	摩擦の物理
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
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
大阪大学	教授	黒木 和彦	新規ニッケル系超伝導体の多軌道モデルに基づく研究
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	邵 成	金属絶縁体超格子熱電材料の機械学習の最適化
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操作
茨城大学	助教	城塚 達也	第一原理計算による光触媒反応メカニズムの解明
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	強相関係のトポロジカル相・輸送現象と例外点効果
東北大学材料科学高等研究所	助教	横 哲	還元CeO ₂ (100) 上での水の反応による水素生成
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 3
大阪大学大学院基礎工学研究科	助教	大戸 達彦	分子接合の第一原理伝導計算
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
鹿児島大学理学部物理科学科	准教授	野澤 和生	複雑な構造を持つ合金表面の第一原理計算
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	特任講師	大久保 毅	キタエフスピン液体の有限温度物性の解明
熊本大学 大学院先端機構	助教	圓谷 貴夫	マグネシウム合金系の相安定性と物性制御因子の解明：第一原理計算による研究

2021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	助教	江上 喜幸	大規模界面構造における第一原理電子輸送計算手法の開発と応用
九州工業大学	准教授	中村 和磨	SrVO ₃ /SrTiO ₃ および CaCuO ₂ /SrTiO ₃ 多層膜に対する第一原理有効モデル導出
東京大学大学院総合文化研 究科	教授	新井 宗仁	ウイルス感染を阻害する新規人工タンパク質の理論的設 計
東京工業大学地球生命研究 所	研究員	梅本 幸一郎	Mg-Si-O系ポストアポストペロブスカイト相における秩序 無秩序転移
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
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セロピオースの加水分解反応過程の 研究
横浜国立大学大学院工学研 究院	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
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
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	常行 真司	高密度水素を用いた超機能性材料の機構解明と理論予測
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(MSSP)を用いた流体-粘弾性体膜の連成シミュレ ーション
筑波大学 数理物質系	助教	吉田 恒也	強相関効果と非エルミート・トポロジが織りなす異常 物性
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
沖縄科学技術大学院大学	Postdoc	ゴウケ マティ アス	Ground state and dynamical properties of the $J_1 J_2 K$ - Heisenberg model on the square lattice
東京大学工学系研究科	教授	塩見 淳一郎	マルチスケールシミュレーションを用いた熱機能材料の 性能解析
金沢大学	教授	新井 豊子	RSDFT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
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
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・氷衛星内部の熱力学的状態の統一的理解
大阪大学 先導的学際研究機 構	特任准教授	水上 渉	センサー材料のためのノイズを考慮した量子古典混合アル ゴリズム計算
琉球大学理学部物質地球科 学物理学系	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
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
東京大学工学部研究科	特任研究員	毛 偉	第一原理計算による金属酸化物中の水素同位体ミクロ挙 動に関する研究
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	第一原理計算による粒界安定構造探索
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凝集体の 離合集散の研究
大阪大学 大学院工学研究科 物理学系専攻	助教	濱本 雄治	ガウス過程回帰による二次元物質構造の大域的探索
東京大学大学院理学系研究 科物理学専攻	助教	諏訪 秀磨	イリジウム酸化物における電荷スピン軌道エンタングル メント
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
金沢大学ナノマテリアル研 究所	准教授	石井 史之	エネルギー変換物質におけるスピン分裂と異常ホール伝 導度の第一原理計算
早稲田大学理工学術院	研究院教授	今田 正俊	パイロクロア格子上的量子スピン液体
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
東京大学物性研究所	特任研究員	浅野 優太	分子動力学シミュレーションによる複雑流体の解析
名古屋大学未来材料・シス テム研究所	特任教授	押山 淳	量子論大規模計算による半導体薄膜成長とデバイス界面 形成の微視的機構解明

2021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
産業技術総合研究所	研究グループ付	大谷 実	固液界面における電気化学反応シミュレーション手法の開発とその応用
東京大学物性研究所	教授	杉野 修	水素の機能性に関する第一原理計算
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繰り込み群による臨界現象の研究
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におけるモット転移の数値的研究