

## 2022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
国立研究開発法人産業技術総合研究所	上級主任研究員	ビュクール マリウス	第一原理量子輸送と深層学習を連携させ、仮想実験環境を構築
京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻	准教授	荒木 武昭	混合溶媒中の高分子電解質の凝集
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
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Kitaev模型のクエンチダイナミクスの研究
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
京都大学理学研究科化学専攻	教授	有賀 哲也	共役 $\pi$ 電子系分子の面内相互作用
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	荷電patchy粒子系における構造形成
東京大学理学系研究科	特任助教	見波 将	トポロジカル磁性体におけるトンネル伝導度と界面構造の第一原理計算
大阪大学 大学院 工学研究科	准教授	有馬 健太	しわ構造を持つグラフェンナリボンの電子状態計算
島根大学総合理工学部	助教	臼井 秀知	第一原理計算による高エントロピー化合物のバンド構造の解析
東京大学新領域創成科学研究科	教授	御手洗 容子	ハイエントロピー合金の相安定性と力学特性
岐阜大学	助教	小野 頌太	グラフェン基板上的2D金属の安定構造
大阪大学 世界最先端研究機構 量子情報・量子生命研究センター	特任研究員	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
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	メタダイナミクス法と教師なし機械学習によるアモルファス酸化シリコンの構造解析
大阪大学大学院工学研究科	助教	大久保 雄司	第一原理計算を用いた金属とプラズマ処理したフッ素樹脂界面の接着メカニズムの解明
青山学院大学	助教	鈴木 岳人	透水係数の空間変化に基づく前震一本震系列の繰り返し周期の決定
産業技術総合研究所	招聘研究員	柳沢 孝	強相関電子系の電子状態の数値的研究
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	異方的結晶構造を有する磁性材料の解析
東京理科大学	助教	森田 克洋	フラストレート量子スピン系の有限温度計算
東京理科大学	教授	福元 好志	球体カゴメ系W72V30における磁化過程, 帯磁率に対する大きなポンドランダムネスの効果の数値的研究
岡山大学異分野基礎科学研究所	准教授	大槻 純也	動的平均場法を用いた希土類強磁性体の研究
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	ブリージングカゴメ反強磁性体におけるトポロジカルカイラル秩序への磁場効果
早稲田大学	教授	大久保 将史	遷移金属炭窒化物の新規相探索
理化学研究所生命機能科学研究センター	基礎科学特別研究員	足立 景亮	タンパク質の多成分相分離ダイナミクス
日本原子力研究開発機構	研究主幹	奥村 雅彦	機械学習分子動力学法による複雑な構造を持つ物質の物性解析
東京大学工学系研究科物理学工学専攻	助教	藤 陽平	観測誘起相転移における普遍性クラスの数値的研究
立教大学	助教	横森 創	傾角反強磁性を示す単一成分分子性導体の電子構造に対する分子配列変調効果の研究
早稲田大学基幹理工学部	講師	白井 達彦	イジング計算機のための古典アルゴリズムの開発
国立研究開発法人産業技術総合研究所	上級主任研究員	ビュクール マリウス	光起電力応用ナノクリスタルの第一原理計算による研究
東北大学大学院情報科学研究科	特任助教	西川 宜彦	格子模型を用いたガラス転移の熱力学的研究
東京大学大学院総合文化研究科	教授	新井 宗仁	医療や産業への応用を指向した新規タンパク質の理論的設計
慶応義塾大学理工学部物理情報工学科	学振PD	中野 裕義	アクティブブラウン粒子系が示すモティリティ誘起相転移の数値的解析
大阪大学	准教授	越智 正之	多体波動関数を用いた第一原理計算手法の開発
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	組織界面接着による細胞の運動秩序安定化
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
山形大学	准教授	江目 宏樹	第一原理計算による光熱変換原理の解明
東北大学材料科学高等研究所	准教授	李 昊	新規機械学習手法及びpH-電場を考慮したDFT計算によるCO <sub>2</sub> 還元反応触媒設計

2022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
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電子-フォノン結合を考慮した有機結晶のバンド計算
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
東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻	講師	吉本 勇太	フッ素樹脂の熱的・誘電特性に関するデータセットの構築
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	第一原理計算と機械学習を援用した強相関トポロジカル物性の理論研究
早稲田大学先進理工学部応用物理学科	教授	望月 維人	磁性金属における光誘起トポロジカル電子状態の探索
東北大学材料科学高等研究所	講師	横 哲	CeO <sub>2</sub> (100)面上でのWater-splittingによる水素生成
分子科学研究所	教授	斉藤 真司	生体分子および液体のダイナミクスの理論研究
岡山大学異分野基礎科学研究所	教授	Jeschke Harald	ゆらぎ交換近似を用いた有機電荷移動錯体の超伝導転移温度および超伝導対称性に関する研究
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・磁気構造解析および準粒子自己無撞着GW法の並列化開発
大阪公立大学大学院工学研究科電子物理系専攻	准教授	福田 常男	第一原理計算によるCu-Ni2次元合金の安定性の研究
名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授	白石 賢二	フラッシュメモリ応用を目指したSi-richアモルファスSiNの第一原理計算による研究
東京大学大学院総合文化研究科	教授	福島 孝治	結合分子誘起の相分離の分子動力学法による研究
沖縄科学技術大学院大学	スタッフサイエンティスト	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
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	ガウス過程回帰を用いたゆらぎの緩和による臨界指数評価
大阪大学大学院工学研究科 物理学系専攻 精密工学コース	准教授	濱田 幾太郎	密度汎関数理論を用いた金属表面上における分子吸着と反応の研究
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	助教	李 敏赫	鉄系材料表面におけるアンモニア分解反応機構のモデル化
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銀(111)表面上シリセン安定構造の大域的探索
名古屋大学	講師	沢邊 恭一	機械学習によるTiO <sub>2</sub> に埋め込まれた単原子触媒のCO吸着エネルギー予測
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	機械学習ポテンシャルを用いた表面・界面・欠陥等の複雑構造における局所物性に関する解析
大阪大学工学研究科	教授	浜口 智志	金属酸化物のプラズマ耐性に関する研究
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	燃料電池電極触媒とギ酸分解触媒の省貴金属化
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	高効率な酸素吸蔵材料と水素遮蔽材料の探索
東京大学物性研究所	准教授	眞弓 皓一	高分子ゲルにおける伸長誘起結晶化の発現機構解明
神戸大学分子フォトサイエンス研究センター	客員教授	川村 光	フラストレート磁性体における新奇秩序
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	坂井 徹	自発的対称性の破れを伴う磁化プラトー
東京大学機械工学専攻	特任助教	大西 正人	フォノンデータベースを利用した熱機能材料の開発
東京大学物性研究所	助教	井戸 康太	フラストレーションのある量子スピン系における量子スピン液体の安定性
東京大学工学系研究科	教授	塩見 淳一郎	第一原理計算に基づく熱機能材料の開発
名古屋大学	教授	宇治原 徹	SiC溶液法における溶媒への添加元素の挙動解析
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を用いたテンソルデータ解析
鹿児島大学理学部物理科学科	准教授	野澤 和生	金属間化合物の表面原子構造と化学的特性に関する第一原理計算
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の開発と高機能界面のデザイン
金沢大学ナノマテリアル研究所	教授	石井 史之	異常ホール効果を計算する正確で効率的な方法の開発

## 2022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	特任助教	出倉 駿	非従来型分子性導体Cat-TTF類縁体における $\pi$ 電子-プロトン相関物性の解明に向けた電子相関パラメータの第一原理計算
沖縄科学技術大学院大学	Staff Scientist	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
東京大学大学院機械工学専攻	特任助教	許 斌	機械学習ベースの熱機能材料用に最適化されたポリマー
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
九州大学情報基盤研究開発センター	准教授	樋口 祐次	荷電リン脂質二重膜と水分子の構造とダイナミクス
慶応義塾大学理工学部	准教授	渡辺 宙志	分子動力学法を用いた界面構造の動的性質の解析
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	原子層状物質における大規模電子輸送特性についての第一原理研究
九州工業大学	准教授	中村 和磨	第一原理計算に基づく多層膜の安定性および物性評価
大阪大学 量子情報・量子生命研究センター	准教授	水上 渉	センサー材料のためのノイズを考慮した確率的量子混合計算シミュレーション
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	分子動力学法によるペロブスカイト型酸化物粒界の研究
早稲田大学理工学術院	研究院教授	今田 正俊	遷移金属酸化物高温超伝導物質の網羅的第一原理計算
東京大学物性研究所	教授	川島 直輝	古典・量子統計力学モデルにおけるループ気体表現とテンソルネットワーク計算
岡山大学異分野基礎科学研究所	教授	篠田 渉	全原子及び粗視化モデルによるソフトマターの大規模分子シミュレーション
東京工業大学	研究スタッフ	トランバハンク	磁気熱量材料と永久磁石の計算機上スクリーニング
東京工業大学	特任准教授	松下 雄一郎	第一原理計算に立脚したグリーンデバイスの提案：材料探索からデバイス作製まで