

2022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
群馬工業高等専門学校	助教	塚原 規志	金属表面上における有機ハロゲン分子およびその反応生成物に関するDFT計算
産業技術総合研究所	主任研究員	日沼 洋陽	触媒インフォマティクスに向けた複雑酸化物の表面酸素空孔の安定性評価
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
物質・材料研究機構	ポスドク研究員	小松 尚登	双極子相互作用が作る薄膜上の磁気構造およびそれに起因する摩擦力
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
高エネルギー加速器研究機構	助教	望月 出海	2DMATをもちいた水素吸着セリア表面原子配列の精密構造解析
岐阜大学	助教	小野 頌太	表面合金データベース
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における秩序状態の系統的解明
物質・材料研究機構	ポスドク研究員	早坂 太志	原子論的モデルによる永久磁石の保磁力機構研究
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	強誘電性ネマチック液晶の分子モデルの開発
群馬大学	准教授	樋山 みやび	ホタル生物発光基質および関連分子の電子励起状態
近畿大学	博士研究員	金子 隆威	ボゾン系における量子多体傷跡状態の数値的研究
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
早稲田大学	教授	大久保 将史	末端官能基を制御した層状遷移金属炭化物MXeneの電荷貯蔵機構
国立研究開発法人 産業技術総合研究所	研究員	保田 侑亮	動的架橋エラストマーのレオロジーシミュレーション
国立研究開発法人 産業技術総合研究所	研究員	保田 侑亮	様々な架橋構造を持つ高分子網目の構造解析・力学物性シミュレーション
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平衡緩和とガラス転移
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	ANNポテンシャルを用いた大規模分子動力学シミュレーションによるシリカガラスの圧力誘起配位数変化の研究
立命館大学	専門研究員	渡部 洋	多バンドモデルを用いた銅酸化物高温超伝導体の統一的記述
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で実現するトポロジカルカイラリティ秩序とその安定性
京都大学理学研究科化学専攻	教授	有賀 哲也	金属表面と磁性金属フタロシアニン分子の相互作用
千葉大学大学院工学研究院 電気電子	准教授	酒井 正俊	有機電荷秩序材料の低励起状態における秩序構造
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
東京工業大学 理学院物理学系	助教	豊田 雅之	新奇ボロン系二次元物質BSの電子状態と類縁物質の設計
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
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	異方的結晶構造を持つ磁性体の解析
東京大学大学院理学系研究科 物理学専攻	助教	明石 遼介	電子間クーロン相互作用を考慮したエリアシュベルグ方程式解法の実装
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 大学院 工学研究科	准教授	有馬 健太	加工用触媒としての機能性グラフェンシートの電子状態と反応性評価
立命館大学理工学部物理科学科	教授	池田 浩章	量子液晶の第一原理計算
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普遍性クラスの同定
岡山大学大学院自然科学研究科	助教	三澤 賢明	極限環境下における破壊現象に関する分子動力学解析
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変態
東北大学大学院理学研究科	助教	小野 淳	遍歴磁性体における光誘起非平衡ダイナミクス
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	主任研究員	田村 亮	相図用ブラックボックス最適化手法の開発
東京理科大学	教授	福元 好志	三角格子及びカゴメ格子上のハイゼンベルグ反強磁性体の熱力学特性, 励起スペクトルの数値的研究
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バルク絶縁性向上を目指したドーパント探索

## 2022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
福井大学遠赤外領域開発研究センター	准教授	牧野 哲征	絶縁体的基底状態を有する希土類酸化物の振動・磁気特性に関する第一原理計算
筑波大学数理物質系	准教授	鈴木 義和	Quantum Espressoを用いた無機エネルギー材料の電子状態計算
琉球大学 理学部	教授	眞榮平 孝裕	d電子系およびd電子系化合物の電子構造とフェルミオロジ
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	固有値ソルバの統合的インターフェースRokkoの開発と量子スピン系への応用
名古屋工業大学	助教	小林 亮	蓄電固体ホモ・ヘテロ界面におけるイオン伝導の分子動力学解析
東京大学物性研究所	准教授	加藤 岳生	磁性接合系におけるスピン輸送の数値研究
金沢大学ナノマテリアル研究所	特任助教	山口 直也	第一原理LCPAO法を用いた大規模系におけるベリー位相を介した物性の効率的な評価手法の開発
大阪大学基礎工学研究科	准教授	水島 健	超伝導液晶秩序の非平衡ダイナミクス
岐阜大学	助教	小野 頌太	振動数解析に基づくLennard-Jonesクラスターの準安定構造マップ
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
琉球大学理学部	名誉教授、非常勤講師	稲岡 毅	固体表面・界面、ナノ構造体の新規電子物性の探索と実現
鳥取大学大学院工学研究科	准教授	榊原 寛史	第一原理バンド計算に基づくニッケル酸化物の研究
東京大学物性研究所	助教	福田 将大	DFTによるAB型2次元物質のデータベース構築
青山学院大学	助教	鈴木 岳人	ゆっくり地震から高速地震への遷移時刻の見積もりとその数理的意義
北海道科学大学	教授	内田 尚志	反転対称なハバード模型における多重Q秩序の磁気構造
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	ホイスラー化合物の熱電性能に関する理論的研究：弱結合理論からのアプローチ
九州工業大学 物材機構	主任研究員	河野 翔也 苅宿 俊風	酸化チタンTiO <sub>2</sub> 表面の酸素欠陥の第一原理計算 非整合積層系の新奇物性：新物質の探索と電子状態解析
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
早稲田大学	准教授	高山 あかり	2DMATによる2次元ホウ素シートポロフェンの構造解析
東京大学物性研究所	教授	押川 正毅	異方的三角strip模型におけるgapless SPT相
北海道大学 大学院工学研究院	教授	島田 敏宏	狭いバンドギャップを持つ有機電荷移動錯体半導体の計算機による探索
東京都立大学 理学研究科 物理学専攻	准教授	門脇 広明	量子パイロクロア磁性体の研究
慶應義塾大学理工学部 物理情報工学科	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の研究
東京大学工学系研究科 物理学専攻	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
早稲田大学基幹理工学部	講師	白井 達彦	マルチスピンフリップ法を用いたイジング計算機の開発
慶應義塾大学	特任講師	関 優也	情報統計力学におけるイジングモデルの解析
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で捉えた探針試料間に働く力の解析
工学院大学機械工学科	准教授	平塚 将起	機械学習による振動スペクトルの予測方法の検証
慶應義塾大学理工学部 物理情報工学科	学振PD	中野 裕義	熱伝導系が示す非平衡長距離相関
東京大学大学院工学系研究科	講師	速水 賢	フラストレート磁性体における磁気スキルミオンを探索するための機械学習を併用した数値シミュレーション
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	非エルミートランダム系の局在・非局在転移
大阪大学大学院基礎工学研究科	助教	大戸 達彦	グラフェン層数に依存する水/グラフェン界面構造の理論研究
名古屋大学大学院工学研究科 物質科学専攻	講師	横井 達矢	粒界一転位相互作用の微視的機構の解明に向けた高精度な機械学習型原子間ポテンシャルと大規模分子シミュレーション法の確立
東京工業大学物質理工学院 材料系	准教授	合田 義弘	磁気異方性の界面歪みと界面電気分極による制御
大阪大学大学院工学研究科	特任助教	BUI VANPHO	触媒表面基準RuTi合金触媒のメカニズム解明
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を用いた多成分複雑系に対する熱伝導度計算
名古屋工業大学	教授	中山 将伸	材料シミュレーションとインフォマティクスによる粒界アルカリイオン伝導機構の解析

2022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
東京大学機械工学専攻	特別研究員	LIAO YUXUAN	準フォノン結晶によるナノ熱輸送の究極の抑制
山形大学	助教	江目 宏樹	第一原理計算による光熱変換原理の解明
早稲田大学先進理工学部応用物理学科	教授	望月 維人	トポロジカル磁性における光誘起現象の開拓
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と磁性状態の研究。
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・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
東京理科大学理学部応用物理学科	教授	遠山 貴己	光励起された一次元モット絶縁体の過渡吸収スペクトル
名城大学	准教授	立津 慶幸	磁性元素を含む材料表面・界面ナノ構造に関する第一原理的研究
東北大学材料科学高等研究所	特任助教	佐藤 龍平	クロソ化合物超イオン伝導体の無秩序化による相転移及び輸送機構の解明
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	高効率な酸素吸蔵材料と水素遮蔽材料の探索
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
奈良先端科学技術大学院大学	助教	原嶋 庸介	不純物半導体の金属絶縁体転移のexponent puzzle
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	組織界面上の細胞集団運動の数値研究
琉球大学理学部	教授	安田 千寿	ハニカム格子スピン系における磁性の数値的研究
名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授	白石 賢二	スピン注入磁化反転型磁気抵抗メモリ(STT-MRAM)の第一原理計算による研究
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
東京大学工学系研究科	教授	山田 淳夫	新規蓄電デバイス材料の構造・電子状態に関する理論的解析
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機械学習を用いた研究
茨城大学理学部	教授	中川 尚子	相界面の特異的性質と自由エネルギーの有限サイズ効果
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電子-フォノン結合を考慮したバンド計算
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
産業技術総合研究所	主任研究員	橋本 保	BaTiO <sub>3</sub> ナノ構造の分子動力学シミュレーションII
広島工業大学 工学部	准教授	大村 訓史	超高圧環境下における炭化水素を含む混合液体の構造と輸送特性の解明
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	坂井 徹	新奇スピンネマティック相の数値的研究
東京大学物性研究所	助教	藤野 智子	EDXTオリゴマー電荷移動塩の電子構造解析：分子内・分子間クーロン反発エネルギーの算出
大阪大学大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻	助教	藤井 進	大規模粒界構造探索と構造に基づく複数物性予測
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フラックス構造のマヨラナ励起への影響
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
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
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
東京工業大学物質理工学院	助教	望月 泰英	格子振動に由来する負熱膨張材料の機構解明と設計指針創出
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病気関連生体分子の研究
兵庫県立大学 大学院工学研究科	准教授	鈴木 隆史	異方的相互作用を持つ蜂の巣格子Kitaev-I模型の動的性質
筑波大学計算科学研究センター	教授	大谷 実	電子論と古典溶液理論による界面反応の第一原理シミュレーション

2022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
防衛大学校応用科学群応用物理学科	講師	萩田 克美	ブロックコポリマーの相分離構造の鎖交差禁止による効果の検討
京都大学	講師	ピーターズ ロバート	近藤格子における強相関現象
東京理科大学先進工学部	助教	大矢 豊大	分子動力学法を用いた熱硬化性樹脂多成分系における化学反応計算
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	熱活性化遅延蛍光分子の光学特性調査
島根大学大学院自然科学研究科	教授	影島 博之	固体表面界面における構造的素励起の研究
東京大学物性研究所	教授	尾崎 泰助	三元系最密充填構造に基づく新物質探索
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
熊本大学大学院先端科学研究部	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
東京大学大学院理学系研究科知の物理学研究センター	特任准教授	大久保 毅	フラストレート磁性体の新規物性解明
東京大学物性研究所	特任助教	出倉 駿	第一原理計算を活用した分子性結晶におけるプロトン互変異性に基づく高速プロトン伝導機構解明
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
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
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	臨界現象研究のためのスケーリング解析の開発と応用
筑波大学計算科学研究センター	助教	佐藤 駿丞	遷移電流密度を用いた非線形光学応答の第一原理的解析
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	2次元層状ヘテロ構造における第一原理電子輸送特性研究
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	広義のトポロジカル相とバルクエッジ対応の科学の数値的研究
長岡技術科学大学	産学融合特任准教授	山下 智樹	結晶構造探索手法の開発と物質探索
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
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	新奇トポロジカル物質の第一原理設計および異常ホール伝導度の評価
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	ナノカーボン系物質の原子構造・電子物性の解明
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	助教	城塚 達也	電子状態計算による触媒における電荷移動反応メカニズムの解析
慶応義塾大学理工学部	准教授	渡辺 宙志	J1-J2フラストレートイジング模型の非平衡緩和解析
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	多軌道強相関物質における非局所電子相関の研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	教授	藤堂 眞治	テンソルネットワークとサンプリングによる量子多体系のシミュレーション
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
東京都立大学理学研究科物理学専攻	教授	堀田 貴嗣	ホルミウムイオンに創出する3チャンネル近藤効果の研究
東北大学	准教授	那須 譲治	多軌道ハバード模型で現れる励起子相に対する磁場効果
物質・材料研究機構	主幹研究員	野々村 禎彦	非平衡緩和温度スケーリングの量子系への応用
千葉大学理学部物理学科	教授	中山 隆史	電場下の半導体pn接合界面でのトンネル電流の理論：第一原理計算に基づく研究
京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻	助教	手塚 真樹	量子多体系における観測誘起相転移とカオスのダイナミクス
東京大学熱エネルギー工学研究室	PD	袁 志成	Numerical study of the contact line dynamics on a hybrid hydrophilic surface
東京大学光量子科学研究センター	特任研究員	加藤 洋生	電磁場と物質の相互作用の第一原理計算手法開発
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 4
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
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

2022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
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
埼玉大学理学部物理学科	助教	品岡 寛	強相関電子系における動的感受率の第一原理計算
宇都宮大学工学部	教授	石田 邦夫	量子光に誘起された固体中協力現象の初期ダイナミクス理論
東京大学工学系研究科附属光量子科学研究センター	客員研究員	篠原 康	多色レーザー場による誘電体光吸収の第一原理シミュレーション
東北大学大学院理学研究科物理学専攻	教授	川勝 年洋	相転移を伴う複雑流体のマルチスケール流動シミュレーション
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	密度汎関数理論を用いた分子・金属界面の研究
横浜国立大学大学院工学研究院	名誉教授	大野 かおる	全電子混合基底法プログラムの改良と応用
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	草部 浩一	ナノグラフェン・デバイスにおける量子効果の理論的研究
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白金ナノ粒子の酸化・硫化の研究
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
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	グリシンナノ結晶が示す多彩な結晶形の大規模メタダイナミクス計算解析
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評価
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
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
理化学研究所	専任研究員	飯高 敏晃	ランダム位相積状態法とニューラルネットワーク波動関数を使った量子多体系有限温度計算
東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻	助教	吉本 勇太	ポリマー材料の周波数依存誘電特性に関するデータセットの構築
大阪大学	教授	黒木 和彦	擬一次元的電子状態を有する銅酸化物超伝導体の理論研究
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ランダムスピン系の研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	諏訪 秀磨	相転移点近傍におけるスピンドダイナミクスの大規模計算
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
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とリチウムミクロ挙動に関する研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	教授	常行 真司	光応答性機能材料の第一原理的研究
筑波大学 数理物質系 物理工学域	教授	小林 伸彦	大規模第一原理電気伝導計算法による量子伝導理論
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	伸長流動下の高分子ダイナミクス
東京大学物性研究所	助教	樋口 祐次	マルチスケールシミュレーションによる荷電リン脂質二重膜とイオン分布の相関
金沢大学ナノマテリアル研究所	教授	石井 史之	原子層・トポロジカル物質の熱電性の第一原理計算
東北大学材料科学高等研究所	助教	横 哲	金属酸化物ナノクラスターの構造物性に関する理論計算
青山学院大学理工学部	教授	松川 宏	摩擦の物理
東京大学大学院総合文化研究科	教授	新井 宗仁	疾患に関わるタンパク質間相互作用を阻害する新規抗体の理論的設計
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
岩手大学理工学部	教授	西館 数芽	光触媒Ba <sub>2</sub> PrBiO <sub>6</sub> の表面電子構造の研究
東京大学 大学院工学系研究科 マテリアル工学専攻	教授	内田 建	タングステンブロンズの電気伝導・熱伝導特性の計算
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	モット絶縁体のキャリアドーピングの第一原理計算
千葉大学	助教	二木 かおり	分子吸着表面上における波数空間分解光電子分光スペクトルの解析

## 2022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
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
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	邵 成	エネルギー貯蔵用途のためのイオン液体の機械学習最適化
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
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	第一原理による特異原子構造探索
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
大阪大学基礎工学研究科	准教授	大槻 道夫	マクロな固体間摩擦の形状依存性
横浜国立大学・工学部	准教授	首藤 健一	2次元金属有機構造体および層状半導体の吸着状態と超高速動力学
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	中山 哲	第一原理分子動力学法を用いた固体酸化物触媒の機能解明
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
大阪大学基礎工学研究科	特任助教	山田 昌彦	SU(N)ハイゼンベルク模型の密度行列くりこみ群による研究
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
物質・材料研究機構	主任研究員	山地 洋平	長距離クーロン相互作用が導くキタエフ量子スピン液体候補における相競合
早稲田大学理工学術院	研究院教授	今田 正俊	分光実験データと高精度大規模数値計算を組み合わせた強相関電子系のための統合分光研究
大阪大学 大学院工学研究科物理学系専攻	教授	森川 良忠	密度汎関数理論と機械学習法による不均一触媒の動的過程の理論的研究
東京大学物性研究所	教授	杉野 修	密度汎関数理論による物性予測
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
山形大学学術研究院	助教	笠松 秀輔	第一原理基高速計算フレームワークによる不規則材料系の構造・物性相関の解明
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