

2023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
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	特任助教	田中 克大	第一原理計算を用いた磁気トンネル接合の設計と伝導度計算
早稲田大学 理工学術院総合研究所	主任研究員	金子 隆威	変分モンテカルロ法による多層型ピスマス系超伝導体の有効模型の基底状態探索
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
琉球大学理学部	准教授	田原 周太	超イオン導電体 $RbAg_4I_5$ のイオン伝導メカニズム
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
京都大学工学研究科機械理工学専攻	助教	見波 将	トポロジカル磁性体における磁気熱電効果の第一原理計算
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	非球形微粒子系における構造形成
大阪大学大学院工学研究科	助教	大久保 雄司	フッ素樹脂表面に生成した水素を含む官能基のX線光電子分光スペクトルにおける化学シフト計算
東京工業大学	助教	安原 颯	ウルツァイト型 $LiGaO_2$ の強誘電性発現機構の解明
東北大学金属材料研究所	准教授	小野 頌太	表面ペイン変形
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
青山学院大学	助教	鈴木 岳人	流体圧と空疎率に基づくゆっくり・高速地震の振る舞いの分類
横浜国立大学	准教授	上原 政智	深層学習による超伝導体転移温度予測とモデル解析によるフォノン状態密度推定
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と形状記憶合金の相平衡
鳥取大学	教授	灘 浩樹	空気分子含有水から成長する氷結晶形の大規模分子動力学シミュレーション研究
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超伝導体のバンド構造の解析
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	磁性形状記憶合金の第一原理計算
島根大学 材料エネルギー学部	助教	藤崎 貴也	バイオガス直接供給による燃料電池の高効率化に向けた改質触媒の最適組成の探索
北海道大学 大学院工学研究院	教授	島田 敏宏	トポロジカル物質 $Pr_2Ir_2O_7$ の実験結果の解釈のためのモデルハミルトニアン構築
Kanazawa University	Specially Appointed Assistant Professor	Kadarisman Hana	ダイヤモンド材料の第一原理研究
東京理科大学	教授	福元 好志	ハイゼンベルグ反強磁性体のスピノン演算子表示に基づく動的構造因子の数値的研究
東京大学物性研究所	助教	森 亮	トポロジカル絶縁体薄膜における表面と界面のスピンおよび電子状態の探索
産業技術総合研究所	招聘研究員	柳沢 孝	強相関電子系における高温超伝導機構の研究
大阪大学 大学院 工学研究科	教授	有馬 健太	機能性グラフェンシート/半導体界面反応の解析
宇都宮大学工学部	教授	石田 邦夫	局在電子・格子結合系の光誘起量子もつれ生成ダイナミクス
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
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	コロイダルゲルのトポロジーと力学物性
東京大学工学系研究科物理工学専攻	助教	藤 陽平	対称性のある測定下の量子系におけるダイナミクス
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	坂井 徹	二次元強磁性ダイマー系のスピンネマティック相
東京工業大学物質理工学院材料系	准教授	合田 義弘	磁気異方性発現機構の電子論
大阪大学	准教授	越智 正之	第一原理波動関数理論の高精度化およびソフトウェア開発
京都大学	講師	ピータース ロバート	ニューラルネットワークを用いた相関量子物質の非平衡ダイナミクス
九州大学工学研究院	特任准教授	藤本 義隆	グラフェンの電子輸送計算
東京大学物性研究所	教授	杉野 修	電極表面吸着系の第一原理計算
東京工業大学物質理工学院	研究員	田中 友規	磁氣的短距離秩序に依存した交換相互作用定数の第一原理計算
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

2023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
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
大阪大学理学研究科	特任准教授	松下 勝義	細胞分裂での計算物理による分裂面予測
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
九州工業大学大学院工学研究 院物質工学研究系	准教授	制野 かおり	第一原理計算によるGaN中の点欠陥の研究
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	第一原理による粒界偏析構造解析と機能予測
東京大学大学院工学系研究 科	教授	求 幸年	強相関トポロジカル物性の理論的解明と機械学習への応 用
東京大学大学院機械工学専 攻	特任助教	許 斌	半導体界面での熱輸送機構解明
東京大学物性研究所	助教	中野 裕義	レヴィウォークするアクティブブラウン粒子系の相分離 現象
九州工業大学	教授	中村 和磨	第一原理計算を用いた遷移金属化合物界面の光学特性調 査
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における分子吸着と反 応の研究
名古屋大学 未来材料・シ ステム研究所	教授	白石 賢二	GaN MOSFET用のGaN/絶縁膜界面の第一原理計算によ る設計
東京大学 工学系研究科・総 合研究機構	Postdoctor	ソン シン エ	機械学習に基づいた基盤上の二次元材料における輸送特 性の大規模シミュレーションに関する研究
神戸大学	教授	天能 精一郎	ペロブスカイト半導体光触媒による人工光合成の第一原 理解析
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多体トポロジカル相
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	GW近似における自己相互作用補正
理化学研究所	専任研究員	飯高 敏晃	ランダム位相状態を用いた有限温度計算法の一般変分波 動関数への拡張
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	多成分フェルミ粒子系のDMFTによる強磁性秩序の解析
東北大学多元物質科学研究 所	助教	出倉 駿	As導入型有機元素材料の相安定性と電子状態に対する第 一原理計算
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	第一原理計算に基づく方法を用いた複雑構造における局 所物性に関する解析
東京工業大学	助教	安原 颯	第一原理計算に基づくK2NdNb5O15の安定構造探索およ び相転移機構の解析
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揺らぎの緩和解析の改良 II
東京大学大学院総合文化研 究科	教授	新井 宗仁	酵素を合理的に高活性化させる普遍的手法の開発
大阪大学工学研究科	教授	浜口 智志	機械学習による反応性スパッタリングシミュレーション 用原子間相互作用モデル構築
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	金属材料の高い耐食性を実現するセラミックス保護被膜 の開発
東京大学物性研究所	教授	森 初果	プロトン互変異性伝導経路の第一原理NEB計算(II)
九州大学総合理工学研究院	准教授	辻 雄太	第一原理計算による酸素発生反応の理論的研究
東北大学	准教授	那須 譲治	量子スピン液体におけるマヨラナゼロモードの生成と制 御
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
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
京都先端科学大学ナガモリ アクチュエータ研究所	特任研究員	上村 直樹	第一原理計算と分子動力学計算による合金材料の力学特 性解析
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・磁気異方 性解析および準粒子自己無撞着GW法の並列化開発・応 用
岡山大学異分野基礎科学研 究所	教授	Jeschke Har- ald	鉄系超伝導体における等電子ドーピング効果の理論研究

2023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
九州大学情報基盤研究開発センター	准教授	樋口 祐次	リン脂質二重膜上の水分子の回転拡散
名古屋大学	講師	沢邊 恭一	機械学習による担持酸化物単原子触媒のルイス酸度予測
金沢大学ナノマテリアル研究所	教授	石井 史之	ファンデルワールス磁性体における熱電効果の第一原理計算
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
東京大学工学系研究科	教授	塩見 淳一郎	不規則系における熱輸送解析
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	テンソルネットワーク法によるハニカム格子量子スピン模型の研究
琉球大学理学部物質地球科学科 物理系	准教授	柳澤 将	有機半導体結晶における電子-フォノン結合を考慮した第一原理バンド計算
東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻	准教授	山本 剛	層間架橋結合による多層CNTのトポロジカル欠陥感受性の低減
北海道大学大学院工学研究科	助教	江上 喜幸	第一原理計算による分子吸着した原子層状物質における電子輸送特性研究
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
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トモグラフィを基盤とする量子混合計算シミュレーション
東北大学金属材料研究所	助教	浅野 優太	超音波キャビテーションの分子動力学シミュレーション
東京工業大学	研究スタッフ	トランバハン グ	磁気記録応用を目指した磁性ナノ粒子の大規模シミュレーション
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非調和フォノン特性データベースの構築
岡山大学異分野基礎科学研究科	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	特任准教授	三澤 貴宏	データベースを活用した高温超伝導体に対する網羅的強相関第一原理計算
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表現に基づく古典ランダムスピンの研究
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
工学系研究科総合研究機構	特任研究員	北井 孝紀	分子動力学シミュレーションのトラジェクトリデータを活用した高分子物性の予測モデル開発
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ワイドギャップ半導体の電子状態解明:パワーデバイスから量子デバイスまで