

## 2025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
室蘭工業大学大学院工学研究科	教授	小野 頌太	非van der Waals型2D物質を予測する新たな方法
東京大学 理学系研究科	特任助教	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
大阪大学大学院工学研究科	准教授	大久保 雄司	DFT+U法による水酸基を含むクロメート層に対するフッ素系分子の吸着エネルギーの計算
大阪公立大学工学研究科	准教授	播木 敦	強相関物質の共鳴非弾性X線散乱スペクトルにおける磁気円二色性の理論シミュレーション
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
琉球大学理学部物質地球科学物理系	准教授	柳澤 将	有機結晶と電極との界面における電荷移動のしくみに関する第一原理的研究
立命館大学理工学部物理学科	教授	池田 浩章	カイラル物質における電子カイラリティとスピニ流
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	荷電デンドリマー高分子系における構造形成と動的性質
琉球大学理学部物質地球科学物理系	准教授	柳澤 将	二次元ペロブスカイト太陽電池の有機材料探索に向けた第一原理的研究
高千穂大学人間科学部	教授	鈴木 岳人	言語獲得方法の違いに基づく文生成の特性の理解
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	第一原理計算による反強磁性体の磁気特性と輸送特性制御に関する研究
東京大学先端科学技術研究センター	特別研究員	ベンガイルク リシュナン ヴ イシュヌ	コロイドゲルの降伏と老化
京都大学 大学院工学研究科機械理工学専攻	教授	嶋田 隆広	Polar Skyrmion創発に向けた格子欠陥電子状態の第一原理的設計
東京理科大学	教授	福元 好志	歪んだカゴメ格子系のマグノンクリスタル状態に関する理論的研究
鳥取大学	教授	灘 浩樹	氷VI形成機構のメタダイナミクシミュレーション研究
慶應義塾大学	准教授	村松 真由	FEM-MD連成解析手法の開発
東京科学大学物質理工学院	研究員	田中 友規	磁気相互作用パラメータ計算用プログラムのスキルミオン系への適用
東北大学大学院理学研究科物理学専攻	特任助教	岩崎 龍太	第一原理計算に基づく有機モット絶縁体における新奇量子相の開拓
千葉大学 大学院理学研究院	教授	泉 康雄	高選択性なCO <sub>2</sub> 光還元を実現する半導体式光触媒表面中間種の挙動の理論的追跡
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	特任研究員	タタン アルビ ン	非共線的アンチフェロ磁性体を用いた磁気トンネル接合の第一原理研究
山口大学大学院創成科学研究科	助教	住谷 陽輔	第一原理計算に基づく高分子接着性の発現原理の解明
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	準粒子自己無撞着GW計算コードの高度化と界面系への応用
上智大学理工学部	准教授	酒井 志朗	不規則ハイパーエニフォーム電子系の数値シミュレーション
国立研究開発法人産業技術総合研究所	研究員	黒田 文彬	表面構造探索プログラムの開発とその基盤構築
産業技術総合研究所	招聘研究員	柳沢 孝	強相関多体電子系における多体波動関数と電子状態の研究
東京大学物性研究所	特任研究員	川口 海周	光励起下におけるトポロジカル絶縁体Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 薄膜のスピノ偏極バンド構造の検証
東京大学大学院新領域創成科学研究科	教授	布浦 鉄兵	Ni/CeO <sub>2</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 触媒によるリグニン構造単位分子の水素化分解に関する理論解析
東京大学物性研究所	特任研究員	石井 浩平	電子・2フォノン相互作用による電子状態補正の第一原理計算
慶應義塾大学 Bio2Q	特任助教	ジョシ アシシ	ニューラル量子状態による量子スカーミオンの調査
大阪大学	助教	孫 栄硯	第一原理計算によるプラズマ援用研磨の摩擦界面における化学反応メカニズムの解明
新潟大学自然科学系	助教	韓 智海	第一原理計算を用いたLi-S電池の電極／電解液界面における反応機構
京都大学工学研究科機械理工学専攻	助教	見波 将	ひずみ誘起磁気熱電応答のハイスクープト第一原理計算
新潟大学自然科学系	教授	梅林 泰宏	古典分子動力学と第一原理計算を用いたLi-S電池の電極と電解液の相互作用
九州大学大学院総合理工学研究院	准教授	中川 剛志	電子回折とDFT計算による二次元borideの結晶構造解析

## 2025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
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	教授	鈴木 雄二	アンモニア火炎による金属の窒化のシミュレーション
九州大学	助教	工藤 耕司	異常量子ホール・超伝導接合系の数値的研究：非可換エニオンの生成
九州大学情報基盤研究開発センター	准教授	樋口 祐次	結晶性高分子とフィラーの変形
金沢大学理工研究域数物学科	教授	小田 竜樹	準粒子自己無撞着GW法の開発・応用およびスピントニクス磁性材料の電子構造・磁気異方性解析
名古屋大学理学部 化学科	准教授	フンマインク アン	次世代電池電極材料におけるナトリウム挿入およびイオン移動機構の密度汎関数理論による解明
九州大学工学研究院	特任准教授	藤本 義隆	不純物ドープ型カーボンナノチューブの電子デバイスへの理論的研究
東京大学大学院機械工学専攻	特任講師	許 斌	機械学習支援によるツイスト型ファンデルワールス界面の熱輸送解析
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	数理情報科学を援用した強相関量子物性の理論的解明
東京大学物性研究所	特任研究員	小正路 嶽太郎	数理結晶化学に基づく新物質合成
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 聰	複雑構造における物性と原子構造の相関に関する第一原理計算に基づく方法による解析
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・ダイオードのための歪バンド構造設計
東京科学大学	准教授	古賀 昌久	粒子をドープした場合のSU(N)フェルミハバード模型のDMFTによる強磁性秩序の解析
九州工業大学大学院工学院物質工学研究系	准教授	制野 かおり	第一原理計算によるパワー半導体材料の表面系および欠陥系の物性解明(2)
東京大学新領域創成科学研究所	教授	御手洗 容子	ハイエントロピー合金の電子状態と相変態
東京大学工学系研究科 機械工学専攻	助教	秋葉 貴輝	非線形ダイナミクスのハミルトニアシス템への転換技術の創出
東京大学総合文化研究科	教授	堀田 知佐	フラストレート量子スピン系における乱れの効果
東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター	准教授	横 哲	超微細金属酸化物の電子状態と吸着による変化
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	燃料電池電極触媒とギ酸分解触媒の省貴金属化
物質・材料研究機構ナノアーキテクトニクス材料研究センター	研究員	佐藤 直大	特異的な化学結合および局所構造が熱輸送・熱電特性に与える影響の解明
京都先端科学大学工学部	特任研究員	上村 直樹	マグネシウムのすべり系に及ぼす添加元素の影響
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表面における分子の吸着と反応に関する研究
愛媛大学理工学研究科	教授	渕崎 員弘	相転移キネティクスとポリアモルフィズム
京都大学理学研究科	特定研究員	清水 真	圧力下におけるUTe <sub>2</sub> のスピニラギと超伝導
九州大学総合理工学研究院	准教授	辻 雄太	酸素発生反応に対する第一原理計算アプローチ
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
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	講師	李 敏赫	詳細反応機構と界面相変化を考慮したアルミニウム粒子燃焼の多相反応シミュレーション
東北大学国際集積エレクトロニクス研究開発センター	教授	白石 賢二	Si/SiO <sub>2</sub> 界面を用いる新規振動発電素子の原子レベルの動作機構の解明
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	高精度化された動的スケーリング解析による臨界普遍性研究の深化
産業技術総合研究所 マテリアルDX研究センター	ポスドク	平松 謙也	遷移金属系の有限温度磁気特性に関する第一原理計算
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 育	フラストレート磁性体の新奇物性解明
東北大学流体科学研究所	教授	小宮 敦樹	時間依存密度汎関数法によるレーザー照射下での電子と格子の相互作用に関する数値計算
九州工業大学	教授	中村 和磨	イリジウム酸化物 Ca <sub>5</sub> Ir <sub>3</sub> O <sub>12</sub> に対する第一原理電子構造解析
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	坂井 徹	S=3/2反強磁性鎖の磁化過程

## 2025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
東京大学大学院総合文化研究科	教授	新井 宗仁	統計力学理論によるタンパク質の構造ダイナミクスの高精度予測
京都工芸繊維大学 電気電子工学系	教授	三浦 良雄	強磁性体界面のスピントリカル性に関する理論研究
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	2次元ハニカム構造物質におけるバレー輸送特性制御に関する第一原理研究
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	量子フ拉斯トレート磁性体における多体量子もつれ
慶應義塾大学理工学部	教授	渡辺 宙志	擾乱を用いた界面不安定性の分子動力学解析
岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科	准教授	濱本 雄治	ガウス過程回帰による金(111)薄膜上平坦シリセンの構造探索
愛媛大学 先端研究院	准教授	大村 訓史	エトリンガイトの脱水・再水和に伴う構造不安定化に関する第一原理分子動力学的研究
京都工芸繊維大学	准教授	水口 朋子	疎水性イオンの直接膜透過における対イオンの働き
慶應義塾大学	教授	海住 英生	分子スピントロニクス素子における電子状態計算と界面スピントリカル性の推定
東京大学物性研究所	助教	中野 裕義	非平衡臨界現象の上部臨界次元の数値的研究
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	自己相互作用補正を考慮した第一原理GW法の開発
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	第一原理計算を用いたデバイス機能予測
東北大学材料科学高等研究所	准教授	井上 和俊	理論計算による捩り粒界安定構造の探索と偏析挙動の解明
大阪大学工学研究科	教授	浜口 智志	原子層プロセス機構解明のため機械学習力場構築Ⅱ
東京理科大学先進工学部	助教	大矢 豊大	分子シミュレーションによるビトリマーの自己修復性能および微視的損傷評価
岡山大学異分野基礎科学研究所	准教授	大槻 純也	磁気トロイダル秩序状態における非線形電気伝導度の動的平均場計算
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
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異原子ドープCeO <sub>2</sub> 触媒の設計
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	Ru(001)上の吸着水素原子の拡散挙動の研究
産業技術総合研究所	研究員	清水 康司	第一原理計算と機械学習による複雑構造中の原子・イオン挙動解析
金沢大学ナノマテリアル研究所	教授	石井 史之	第一原理手法によるスピントリカル材料の物性計算手法の開発と応用
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	金属材料の水素脆化を抑制するセラミックス保護被膜の開発
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	機械学習と分子動力学を活用した多層CNT紡績糸の最適構造予測と高強度化のための設計指針の構築
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
上智大学	客員教授	今田 正俊	量子多体ソルバーの開発と応用
東京大学物性研究所	特任准教授	三澤 貴宏	ドープしたキタエフスピントリカル性における新奇超伝導
医療創生大学国際看護学部	准教授	浅野 優太	流体潤滑におけるキャビテーション壊食の分子動力学計算
統計数理研究所	特任准教授	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構築
東京大学工学系研究科	教授	塩見 淳一郎	ねじれ構造およびアモルファス材料における高度熱マネジメントのための無秩序駆動フォノン工学
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表面・界面反応過程の理論的研究
東京大学理学系研究科物理学専攻	特任准教授	松下 雄一郎	材料開発を加速するHPC/量子融合型欠陥解析プラットフォームの開発