

2026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
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	格子欠陥による分極トポロジカル構造形成の第一原理解析
大阪公立大学工学研究科	准教授	播木 敦	強相関拡張交替磁性のX線磁気光学応答の理論シミュレーション
京都大学工学研究科機械理工学専攻	助教	見波 将	ひずみ誘起電子状態制御による巨大異常ネルンスト効果材料の体系的探索
室蘭工業大学大学院工学研究科	教授	小野 頌太	電子構造の次元変換に基づく原子層予測
室蘭工業大学大学院工学研究科	教授	小野 頌太	ソフト化学法で合成されたアルカリ金属化合物の結晶構造予測
金沢大学設計製造技術研究所	助教	佐藤 健	分子動力学シミュレーションによる多環状高分子のレオロジーの解析
東京大学物性研究所	助教	小野 清志郎	最適化理論に基づくテンソルネットワーク縮約とその応用
東京大学農学生命科学研究科	准教授	藤澤 秀次	DFT計算を用いたパラミロンの構造最適化
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
高千穂大学人間科学部	教授	鈴木 岳人	エントロピーの観点に基づく自然言語と人工言語の分類
東京大学大学院新領域創成科学研究科	教授	布浦 鉄兵	超臨界CO ₂ 処理によるMoS ₂ ナノシート形成機構の計算科学的解明
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	荷電ナノ粒子系における分子シミュレーション
富山大学学術研究部都市デザイン学系	助教	田中 克大	ヘテロ接合系におけるスピン依存物性の第一原理計算
千葉大学 大学院理学研究院	教授	泉 康雄	金属酸化物半導体表面でのH ₂ 活性化の可否とCO ₂ 光還元能の理論的研究
京都大学大学院理学研究科	准教授	奥山 弘	グラフェンに吸着したNiクラスターへの水素の吸着状態
東京大学大学院工学系研究科量子相エレクトロニクス研究センター	特任准教授	奥村 駿	電子状態計算に基づく 機能的磁性体の統合型理論設計
東京科学大学物質理工学院	研究員	田中 友規	スピクラスター展開モデルのための効率的モンテカルロ計算手法の開発
山口大学大学院創成科学研究科	助教	住谷 陽輔	高分子の接着現象の分子起源に関する量子化学的探求
中央大学	助教	尾崎 壮駿	LiVS ₂ の遅い格子ダイナミクスに対する自由エネルギーランドスケープ解析
琉球大学理学部物質地球科学科物理系	准教授	柳澤 将	ペロブスカイト太陽電池の材料探索に向けた低次元物質系の第一原理的研究
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/非磁性体界面の磁気物性に関する理論研究
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, 光学的性質の数値計算
東北大学多元物質科学研究所	助教	川合 航右	インターカレーション材料におけるイオン配置自由エネルギーの統計熱力学解析
学習院大学物理学科	教授	田崎 晴明	非可積分な量子スピン鎖における演算子の時間変化
慶應義塾大学医学部薬理学教室	助教	小和口 昌愛	複雑多孔質媒質における水・トレーサー拡散と膜透過の大規模シミュレーション: 脳実質モデルへの応用
産業技術総合研究所	テクニカルスタッフ	柳沢 孝	量子多体問題の数値的研究
東北大学	准教授	水上 雄太	バルクヘテロ接合超伝導体の電子対形成の解明
東北大学	准教授	那須 譲治	カゴメ格子上的のホフスタッター・ハバード模型における磁場誘起相転移
宇都宮大学工学部	教授	石田 邦夫	コヒーレント領域での電子・格子系ダイナミクス
東京大学総合文化研究科	教授	堀田 知佐	有限温度量子多体ダイナミクス手法の発展
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	QSGWと線形応答に基づく電荷・スピン集団励起の第一原理解析
大阪大学 基礎工学研究科 機能創成専攻	特別研究員	笠井 恒汰	磁気・分極スキルミオン格子欠陥ダイナミクスに関するphase-field解析
東京大学工学部マテリアル工学専攻	助教授	森田 路真	第一原理に基づく二次元FETセンサの化学認識機構の解明
九州大学大学院総合理工学研究院	准教授	中川 剛志	タングステン表面ポロナイゼーションの界面研究
工学院大学機械工学科	准教授	平塚 将起	グラフェン-ペプチド界面の第一原理計算によるおいセンサー応答機構の解明

2026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
金沢大学ナノマテリアル研究所	助教	山口 直也	ナノフレイク電子系における第一原理ベリール位相計算コードの開発
東京大学物性研究所	特任研究員	小正路 峻太郎	実行不能グラフの学習を包含した一般化離接計画問題に基づく結晶構造予測
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物性の研究
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	アンモニア火災による金属の窒化のシミュレーション
大阪大学	准教授	越智 正之	第一原理波動関数理論のプログラムコードのGPU化
横浜国立大学大学院工学研究院	名誉教授	大野 かおる	全電子湿合基底法プログラムの改良と応用
東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻	准教授	細野 暢彦	粗視化モデルを用いた多孔性金属錯体への高分子浸入原理の解明
名古屋大学大学院理学研究科	助教	西川 宜彦	異方的な粒子形状を持つガラス模型の大規模シミュレーション
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界面の電子状態と機能予測
金沢大学ナノマテリアル研究所	教授	石井 史之	大規模不規則系に対する第一原理輸送・応答解析手法の開発
東京大学大学院新領域創成科学研究科	教授	喜多 浩之	計算科学による原子層堆積法の反応機構の原子スケールでの理解
金沢大学理工研究域数物科学系	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
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	アモルファス酸化物のアモルファス酸化物のtail-stateの原子レベルの起源解明
名古屋大学理学研究科 物質理学専攻(物理)	教授	宮崎 州正	アクティブガラスと非平衡相転移
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	ワイドバンドギャップ半導体における欠陥および表面の第一原理計算
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	ベイム-カダノフの保存則を満たす第一原理Bethe-Salpeter法の開発
理化学研究所	特別嘱託研究員	飯高 敏晃	ゲージ変換虚時間発展による有限温度変分モンテカルロ法
愛媛大学 先端研究院	准教授	大村 訓史	トバモライトの分子吸着・脱離に関する第一原理分子動力学解析
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	坂井 徹	S=1/2近藤ネックレス鎖の磁化プラトー
琉球大学理学部物質地球科学学科物理系	准教授	柳澤 将	有機分子結晶における電子-フォノン結合を考慮したバンド構造の再現
千葉大学大学院工学研究院	助教	岩原 直也	機能性磁性物質の秩序状態
医療創生大学国際看護学部	准教授	浅野 優太	分子シミュレーションによる超音波キャビテーション解析手法の高度化
九州大学工学研究院	特任准教授	藤本 義隆	グラフェンとhBNヘテロ構造の電子輸送研究
東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻	教授	渡邊 聡	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
日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター	主任研究員	大西 弘明	CuO ₂ スピン鎖のRIXSスペクトル
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	機械学習ベースの動的スケールリング法による臨界指数の高精度決定と普遍性の検証 II
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	データ駆動型アプローチに向けた薄膜ゲート絶縁体の欠陥・界面電子状態の第一原理計算
東京大学大学院機械工学専攻	特任講師	許 斌	極低熱伝材料の創製とフォノン熱伝導機構の解明
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電子状態と相変態
産業技術総合研究所 マテリアルDX研究センター	主任研究員	新屋 ひかり	第一原理計算による高性能低抵抗材料の探索
九州工業大学	教授	中村 和磨	第一原理計算によるフォノン・超伝導・非共線磁性の研究
慶應義塾大学医学部薬理学教室	助教	小和口 昌愛	Population Annealingを用いた二成分ハードスフィア系準結晶の熱力学的安定性評価
東北大学未踏スケールデータアナリティクスセンター	准教授	張 成燾	記号回帰による仮説駆動材料探索

2026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	福島 孝治	テンソルネットワークサンプリングとその応用
九州大学総合理工学研究院	教授	辻 雄太	第一原理計算による結晶性共役配位高分子 M-PI における酸素発生反応機構と Co-Ni 協奏効果の解明
産業技術総合研究所	ポスドク	北 玲男	計算科学とデータ駆動手法による磁性材料の研究
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	CNT間架橋を有するカーボンナノチューブの構造-特性トレードオフ
新潟大学	教授	大野 義章	多バンド少数キャリア系における電荷・軌道・励起子揺らぎによる超伝導
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	強相関創発物性と量子機能設計の計算物質科学・情報科学的探究
大阪大学大阪大学エマージングサイエンスデザインR ³ センター	教授	浜口 智志	シリコン化合物低温エッチング表面反応機構の解明
東北大学理学研究科	准教授	佐藤 駿丞	非平衡電子ダイナミクスの理論的解析
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 アルピシ	六方晶 Fe ₃ Sn 系磁気トンネル接合のスピン軌道相互作用を考慮した第一原理計算
産業技術総合研究所	研究員	清水 康司	複雑構造中の原子・イオン挙動解析に向けた第一原理・機械学習計算
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	原子層ヘテロ積層構造および多層カーボンナノチューブにおけるバレー依存電子輸送特性の第一原理
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・反応・操作に関する研究 II
大阪大学大学院基礎工学研究科	特任助教	清水 真	スピン三重項超伝導発現機構の微視的理解
慶應義塾大学	准教授	山本 詠士	自由エネルギー解析によるイオンチャネル内の水・イオン占有状態と構造安定性のカップリング機構の解明
山形大学	教授	江目 宏樹	光照射による増強電場下における熱拡散場の分子動力学解析
東京大学大学院新領域創成科学研究科	助教	保田 侑亮	全原子分子動力学法による水中PEG鎖の負のエネルギー弾性および伸長誘起結晶化機構解析
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 続久朗	量子フラストレート磁性体における多体量子もつれ
東京大学工学部マテリアル工学専攻	助教	森田 路真	極低温におけるSiGe合金半導体デバイスの第一原理熱輸送解析
東京大学物性研究所	助教	中野 裕義	二次元乱流の分子動力学シミュレーション
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	黒鉛層間に成長したMoS ₂ ナノシートの構造と吸着特性
岡山大学異分野基礎科学研究所	准教授	大槻 純也	希土類反強磁性金属における異常ホール効果と非線形伝導
島根大学総合理工学部物理工学科	助教	SEO INSUNG	希土類磁石の結晶場解析における実空間グリッド起源誤差の定量評価
東京大学大学院総合文化研究科	教授	新井 宗仁	基質結合状態と生成物結合状態の安定性制御に基づく高活性酵素の分子設計と産業応用
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	金属材料の劣化を抑制するセラミックス保護被膜と結晶粒界の設計
九州大学情報基盤研究開発センター	准教授	樋口 祐次	結晶性高分子の融解挙動
工学院大学機械工学科	准教授	平塚 将起	機械学習力場によるセミクラスレート水和物のCO ₂ 包接自由エネルギーと相安定性の解析
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	機械学習を用いた統合分光データ解析による電子分数化の検証
東京大学物性研究所	特任准教授	乾 幸地	自動微分を組み込んだAkai-KKR法とMD計算による格子緩和を取り入れた物質の逆設計
東京大学物性研究所	特任准教授	三澤 貴宏	2層キタエフ模型の多変数変分モンテカルロ法を用いた解析
統計数理研究所	特任准教授	大西 正人	非調和フォノン特性データベースの構築と応用
東京大学工学系研究科	教授	塩見 淳一郎	セルロースナノ材料における熱担体挙動の解明：イオン、水閉じ込め、および複合構造の影響