2026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
室蘭工業大学大学院工学研究科	教授	小野 頌太	非層状-層状構造相転移による2D物質探索
京都大学大学院理学研究科	准教授	奥山 弘	グラフェン上に担持した金属単原子と気体分子の相互作用
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	准教授	辻 直人	テンソルトレイン法による非平衡不純物問題のソルバー開発
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
福井大学遠赤外領域開発研究センター	准教授	牧野 哲征	全電子法と励起子理論による希土類単酸化物の誘電関数解析
産業技術総合研究所	ポスドク	奥村 晴紀	Mn_3Ga系ホイスラー合金の磁気特性の第一原理計算
東北大学大学院理学研究科物理学専攻	特任助教	岩﨑 龍太	第一原理計算に基づくスピン軌道モット絶縁体の有効理論構築
群馬工業高等専門学校	准教授	塚原 規志	多孔性有機金属薄膜にトラップされたゲスト吸着分子の電子状態に対するDFT計算
名古屋大学	准教授	柚原 淳司	ハライド系ペロブスカイト超薄膜の構造解析
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	エアロゲルの力学物性
山口大学大学院創成科学研究科	助教	住谷 陽輔	高分子接着現象の分子起源に関する量子化学的探求
工学院大学機械工学科	准教授	平塚 将起	第一原理計算を用いた自己治癒セラミックスの接合力評価
東京理科大学	教授	二国 徹郎	冷却フェルミ超流動体における非平衡現象の微視的解明
群馬大学	准教授	樋山 みやび	橙色生物発光を示す化合物の電子状態研究
高千穂大学人間科学部	教授	鈴木 岳人	統計力学的手法に基づく言語分類
量子科学技術研究開発機構	主任研究員	明石 遼介	Spacetime法によるGW0-Eliashberg方程式解法の開発
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
岩手大学理工学部	教授	西館 数芽	ダブルペロブスカイト型光触媒の電子構造に関する研究
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 アルピン	ランタノイドおよび遷移金属化合物における超伝導の第一原理計算研究
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球科学専攻	特任研究員（学振PD）	仲井 文明	粉体の崩壊直前の振動特性
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
千葉大学 大学院理学研究院	教授	泉 康雄	CO_2光還元を飛躍的に促進する還元性TiO_2およびCeO_2の電子供与の理論的評価
国立研究開発法人　産業技術総合研究所	主任研究員	吉岡 裕典	パワーMOSFETのチャネル界面特性向上のための電子状態計算
福岡工業大学工学部知能機械工学科	准教授	三澤 賢明	機能性材料の表面・界面におけるナノ構造と電子状態
名古屋工業大学	准教授	礒部 雅晴	自己駆動剛体粒子流の協働ファシリテーションと非平衡相転移
慶應義塾大学大学院理工学研究科	特任講師	杜 韋霖	フェルミマシン波動関数の開発
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
産業技術総合研究所	テクニカルスタッフ	柳沢 孝	量子多体問題における多体波動関数の最適化と位相的状態の研究
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
東北大学	助教	正木 祐輔	空間反転対称性の破れた超伝導体の空間変調構造
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
埼玉大学大学院理工学研究科	特定助教	稲吉 健	物質特性を反映した非平衡現象解析のためのGreen関数法の開発
電気通信大学情報理工学域	准教授	臼井 秀知	データベースと第一原理計算を利用した新奇ゴニオ極性材料の理論的探索
北海道大学　大学院工学研究院	教授	島田 敏宏	有機分子に関する機械学習ポテンシャルを利用した分子動力学
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	強誘電トポロジカル秩序創発への格子欠陥の第一原理機能解析
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 その２

2026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
東京大学工学系研究科物理工学専攻	助教	藤 陽平	測定誘起相転移における対称性と普遍性
東京大学先端科学技術研究センター	教授	関 真一郎	高精度第一原理計算による新しいAltermagnet関連物質の探索
東京大学理学系研究科物理学専攻	特任研究員	山田 昌彦	行列積くりこみ群法による物性物理学の革命
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
名古屋大学　大学院理学研究科	准教授	小林 晃人	有機化合物中の非等価ダイマーに基づく補償フェリ磁性体の磁気光学効果
神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻	助教	植本 光治	酸化物誘電体中の構造欠陥による光学応答の第一原理計算
早稲田大学高等研究所	准教授	白井 達彦	量子準断熱操作による熱的アンサンブル生成
慶應義塾大学大学院理工学研究科	特任准教授	森田 悟史	テンソルくりこみ群におけるループ最適化手法の開発
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
東京理科大学	教授	福元 好志	カゴメ格子系のマグノンクリスタル状態の変分法による研究
九州大学大学院 工学研究院	特任助教	成瀬 卓弥	格子振動効果を含む有限温度機械学習ポテンシャルの開発
琉球大学　理学部	教授	眞榮平 孝裕	オスミウムの電子構造
北海道大学・理学研究院	准教授	松永 悟明	低次元有機導体の電子状態の研究
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	Cu表面上のAu、Ag吸着初期過程の第一原理計算
北海道大学大学院工学研究院	助教	和泉 廣樹	分子導入による層状カルコゲナイド表面の構造・電子状態解析
慶應義塾大学	准教授	村松 眞由	FEM-MD連成解析手法の開発
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	三角格子反強磁性体で実現するトポロジカルカイラル相の安定性と磁気励起
神戸大学大学院システム情報学研究科	非常勤講師	西口 和孝	ペロブスカイト光触媒における強誘電性と点欠陥の第一原理解析
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	特任研究員	陸 劭聡	水素化物における第一原理計算
金沢大学ナノマテリアル研究所	博士研究員	ZHANG YAOTANG	Joint Embedding Predictive Architectureに基づく 多モーダル自己教師あり材料基盤モデル
東京大学物性研究所	准教授	加藤 岳生	分数量子ホール液滴におけるマイクロ波共鳴の量子モンテカルロシミュレーション
福井大学工学部応用物理学科	准教授	加藤 康之	磁性体の量子輸送とトポロジカルスピン構造の数値的研究
日本大学生産工学部	助教	渡部 洋	変分モンテカルロ法を用いたニッケル酸化物の超伝導・磁性・電荷秩序の解析
近畿大学理工学部	准教授	鬼頭 宏任	導電性配位高分子の第一原理電子状態計算
大阪公立大学工学研究科	准教授	播木 敦	DFT+DMFT法を用いた希土類フリー遷移金属近藤酸化物の探索
近畿大学理工学部	准教授	鬼頭 宏任	タングステン表面に吸着したフラーレンの原子論的シミュレーション
物材機構	主任研究員	苅宿 俊風	人工積層系のモデル化と新規機能発現の理論的研究
京都大学工学研究科機械理工学専攻	助教	見波 将	エピタキシャルひずみによる磁気熱電効果のハイスループット第一原理解析
名城大学理工学部	助教	片岡 啓介	Li含有酸化物におけるLi/H欠陥とイオン輸送の第一原理計算
大阪大学大学院工学研究科	助教	稲垣 耕司	機械学習ポテンシャルの生成とそれによる半導体表面プロセスの解析
名城大学理工学部	助教	片岡 啓介	測定誘起相転移とトポロジカルエンタングルメントの数値解析
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表面・界面系への応用
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
北海道科学大学	教授	内田 尚志	ハバード模型における多重Q秩序の磁気構造と電子状態
東京大学大学院総合文化研究科	助教	角田 峻太郎	多自由度系における角運動量・磁性・超伝導に関する理論的研究

2026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
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/非磁性体界面のスピン物性に関する理論研究
大阪大学	助教	孫 栄硯	第一原理計算によるダイヤモンドPAP加工における界面反応メカニズムの総合的解明
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
石川県立大学	准教授	島倉 宏典	液体ピルビン酸の構造と近接ダイナミクス
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
東北大学大学院理学研究科	助教	小野 淳	数値的汎関数微分に基づく非線形応答関数の計算
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	高圧化誘電体光学特性の第一原理計算
東京大学物性研究所	准教授	加藤 岳生	カイラルフォノンによる軌道蓄積効果の第一原理計算
慶應義塾大学理工学部物理情報工学科	教授	田中 宗	量子最適化過程の物理的性質の研究
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	熱電半導体における点欠陥配置の最適化計算
九州大学大学院総合理工学研究院	准教授	中川 剛志	長周期ホウ化ニッケル表面構造の探索
東京大学物性研究所	特任研究員	石井 浩平	リジッドイオン近似に基づく電子・2フォノン相互作用の第一原理計算
大阪大学大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻	特任助教	勝本 啓資	第一原理計算で迫る交替磁性の機械特性
東京大学物性研究所	助教	福田 将大	領域化学ポテンシャルによる物質表面のAFM像予測
東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻	助教	亀山 亮平	分子性結晶・界面の電子構造設計と輸送機構の解明
早稲田大学	教授	高山 あかり	1BL-Bi/Sbヘテロ積層におけるバンド計算と構造決定
横浜国立大学工学研究院	准教授	河村 光晶	超伝導密度汎関数理論に基づく臨界磁場の第一原理計算
東京大学物性研究所	特任研究員	小正路 崚太郎	混合整数非線形計画問題に基づく結晶構造予測
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	坂井 徹	ボンド交代鎖の磁化過程の数値対角化による研究
東京大学工学系研究科マテリアル工学専攻	助教	佐藤 龍平	機械学習ポテンシャルを用いた新規材料および合成経路探索
大阪大学基礎工学研究科	特任研究員	山内 邦彦	交替磁性体におけるピエゾ磁気効果の第一原理計算
熊本大学研究開発戦略本部技術部門	技術専門職員	高良 明英	第一原理分子動力学法に基づく軽金属合金の静的・動的性質の圧力依存性
北海道大学大学院理学研究院	教授	速水 賢	多極子基底を用いた物質解析
産業技術総合研究所	ポスドク	奥村 晴紀	4f電子系磁性材料における磁気異方性の第一原理計算
富山大学学術研究部都市デザイン学系	助教	田中 克大	トポロジカル材料の第一原理電子状態計算とそのヘテロ接合系への応用
熊本大学大学院先端科学研究部	教授	下條 冬樹	極限環境下における構造不規則系の構造と電子状態の第一原理計算
国立研究開発法人理化学研究所 開拓研究所	研究員	シブガテゥラー ムハマディー	密度汎関数法および分子動力学計算を用いた固体状態イオニクスにおける熱力学的安定性とイオン動力学解析
理化学研究所開拓研究本部	研究員	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 8
東京科学大学物質理工学院材料系	教授	合田 義弘	金属のα-β構造相転移温度の第一原理計算
名桜大学	准教授	立津 慶幸	ニューラルネットワークポテンシャルとDFTによる次世代磁性材料の計算科学的設計
東京理科大学先進工学部物理工学科	教授	遠山 貴己	密度行列繰り込み群によるカゴメ格子ハバード模型の量子状態の研究
大阪大学　理学研究科	准教授	竹森 那由多	超均質フォトニック結晶におけるスカラー場拡張と光学特性の数値解析
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	ガラスにおけるJohari-Goldstein緩和の物理的機構とその普遍性
大阪大学	准教授	越智 正之	第一原理波動関数理論の接続による高精度化と精度検証
静岡大学工学部	准教授	野口 良史	自己相互作用を完全に取り除いた第一原理GWΓ法の開発
琉球大学理学部	教授	安田 千寿	磁性体における転移温度の普遍性
京都大学	准教授	ピータース ロバート	ニューラルネット量子状態および動的平均場理論による量子磁性の研究
横浜市立大学	教授	島崎 智実	第一原理計算による多機能分子によるペロブスカイト材料の界面制御のための理論的探究

2026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
静岡大学　学術院理学領域	講師	ポーレ リコ	電子–格子相互作用を伴うモット絶縁体の非平衡ダイナミクス
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ヘテロ型積層界面の熱輸送解析
筑波大学計算科学研究センター	助教	萩原 聡	電極/水溶液界面に対するESM-RISM法の適用
千葉大学	助教	二木 かおり	スピン分解光電子分光スペクトル解析手法の確立
東北大学金属材料研究所	特任助教	張 成燻	大規模物性データに基づく水素貯蔵材料の探索
茨城大学理学部	教授	中川 尚子	重力下気液共存状態への熱流影響と動的転移の発生
広島大学統合生命科学研究科	特任准教授	松下 勝義	負の極性相互作用と細胞ジャミングのシミュレーション
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	アミロイド症の原因タンパク質の分子動力学シミュレーション
京都大学理学研究科	特定研究員	清水 真	ウラン系化合物における磁性と超伝導
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 アルピン	第一原理計算に基づく新規Mn_3Sn磁気トンネル接合の設計
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
広島大学	准教授	多田 靖啓	磁場中における強相関系の研究
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
愛媛大学　先端研究院	准教授	大村 訓史	第一原理分子動力学を用いた超低炭素型コンクリート開発における亜硝酸系混和材の機能解明
熊本大学大学院先端科学研究部	准教授	島村 孝平	結合指標に基づく機械学習原子間ポテンシャルの再設計と高精度化
東北大学材料科学高等研究所	特任助教	ルウ ティンユ	酸素還元増強のための第二配位圏単原子触媒における軌道カップリング
九州大学総合理工学研究院	准教授	辻 雄太	金属酸化物多形のOER活性序列の第一原理的探索
九州大学情報基盤研究開発センター	准教授	樋口 祐次	結晶性高分子の力学挙動に対する温度の影響
東京都立大学理学研究科物理学専攻	教授	堀田 貴嗣	核スピンと局在4f電子の超微細相互作用によって誘起される３チャンネル近藤効果の研究
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
東京大学工学系研究科　機械工学専攻	助教	秋葉 貴輝	非線形反応ダイナミクスのハミルトニアン変換
兵庫県立大学　大学院工学研究科	准教授	鈴木 隆史	スピンSに対するカゴメ格子反強磁性模型の磁化プラトー探索
東北大学	特任助教	ワン チェン	二価イオン電池用固体電解質としての生体由来ヒドロキシアパタイトの実現
東京大学工学系研究科	教授	山田 淳夫	第一原理計算と機械学習力場を併用した新規二次電池材料の解析
東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻	教授	渡邉 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
東京科学大学物質理工学院	研究員	田中 友規	スピンクラスター展開による一般スピンモデルの体系化と有限温度磁気相図計算基盤の構築
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
東京科学大学生命理工学院	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
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	特任助教	石河 孝洋	水素化物高温超伝導体の探索
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	フラッシュメモリ応用を目的としたSi-rich アモルファスSiNの理論研究
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
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
慶應義塾大学	教授	海住 英生	第一原理計算を用いた新材料バリア型磁気トンネル接合における電子状態解析

2026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
東北大学材料高等研究所	特任助教	ジャン デイ	機械学習駆動の遺伝的アルゴリズムとメタダイナミックシミュレーションによる高イオン伝導性固体電解質の探索
長岡技術科学大学技学研究院電気電子情報系	准教授	山下 智樹	エネルギー材料の特性に影響を与える欠陥物性の第一原理計算
東京科学大学	准教授	古賀 昌久	準周期系における測定誘起ダイナミクスの解析
九州大学大学院工学研究院材料工学部門	准教授	藤井 進	PbTeにおける粒界構造データベースの構築と格子熱伝導相関
東京大学物性研究所	助教	井戸 康太	磁場下におけるフラストレート磁性体の基底状態解析
神戸大学	教授	天能 精一郎	第一原理計算による可視光応答ペロブスカイト光触媒の理論的研究
大阪大学	教授	黒木 和彦	アニオン自由度と光制御の視点からの多層型ニッケル酸化物における常圧下超伝導の理論探索
千葉大学理学研究科	准教授	山田 篤志	ハバードモデルにおける超伝導状態の解析。
東北大学材料科学高等研究所	助教	JIA XUE	データマイニングと触媒理論に基づくアルカリ水分解用高性能金属炭化物/窒化物電極触媒の開発
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	量子観測された電子系におけるエントロピーの揺らぎへの相互作用効果
核融合科学研究所	教授	加藤 太治	機械学習によるプラズマ対向材料損傷挙動の第一原理シミュレーションのスケールアップ
九州大学工学研究院	特任准教授	藤本 義隆	グラフェンと異種原子層の電子物性研究
九州大学応用力学研究所	助教	大澤 一人	照射損傷と格子欠陥との相互作用の研究
大阪大学大学院基礎工学研究科	教授	福井 賢一	イオン液体電解液が造る電気二重層中でのエネルギーキャリア金属イオンの拡散挙動と界面キャリアのトラップ挙動の解明
慶応義塾大学理工学部	教授	渡辺 宙志	分子動力学法を用いた界面不安定性における粘性効果の研究
大阪大学大学大学院基礎工学研究科	助教	近藤 慎司	計算科学主導によるイオン液体型ソフトマター電解質の高リチウムイオン伝導設計
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
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結晶性高分子の機械特性評価
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	アクティブPotts模型における時空間パターン
産業技術総合研究所	ポスドク	北 玲男	有限温度下における二元合金の磁気特性
大阪大学基礎工学研究科物質創成専攻	特任研究員	吉田 旭	不均一な表面構造を持つ固体上での流体の滑り現象とその線形応答理論
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フラストレート磁性体の物性解明
名古屋大学工学研究科　物質プロセス工学専攻	特任助教	ホ ゴック　ナム	遷移金属カルコゲナイドの輸送特性に関する有限温度マルチスケールシミュレーション
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	ナノ細孔からの高分子引き抜き過程の分子動力学シミ ュレーション
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	ヘテロ構造界面に誘起されるバレー選択的散乱と輸送特性の第一原理解析
鳥取大学大学院工学研究科	准教授	榊原 寛史	第一原理計算を用いたバイレイヤー型超伝導体の理論研究と新物質設計
鳥取大学	教授	灘 浩樹	新たに発見された氷XXIの形成機構に関する大規模分子シミュレーション研究
兵庫県立大学大学院理学研究科	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
量子科学技術研究開発機構	主幹研究員	藤田 貴敏	第一原理計算による有機分子集合体の光電子機能の解析
東北大学理学研究科	准教授	佐藤 駿丞	固体におけるアト秒光学応答の第一原理計算
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
立命館大学理工学部物理科学科	教授	池田 浩章	電子カイラリティおよびカイラルフォノンの第一原理計算
医療創生大学国際看護学部	准教授	浅野 優太	超音波キャビテーションにおける気泡雲形成の分子動力学シミュレーション
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
青山学院大学理工学部	教授	松川 宏	摩擦と滑りの物理
東京科学大学	助教	安原 颯	三元系ウルツァイト型化合物の分極反転に伴う結合状態変化の観察

2026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　大学院基礎工学研究科　物質創成専攻化学工学領域	助教	多田 幸平	スピン調和型材料設計に向けた基礎理論の構築
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リング法による臨界指数の高精度決定と普遍性の検証
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
島根大学	教授	八代 圭司	固体電池の性能と耐久性向上に資するコート材料のイオン輸送に関する研究
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	Ru(001)およびステップ表面上の水素原子拡散挙動
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	SYK類似強相関模型の開拓と、非従来型対称性を持つスピン系のダイナミクス
東京大学物性研究所	助教	中野 裕義	揺らぐ流体力学シミュレーションにおけるスペクトル法の有効性と計算精度
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	外径–架橋密度トレードオフに基づくCNT紡績糸の引張強度最適化とナノ構造設計
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	二次元半導体原子層堆積プロセス表面反応機構の解明
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
九州工業大学	教授	中村 和磨	5d　遷移金属化合物における強スピン軌道相互作用起源の光学応答とスピンホール効果の第一原理解析
横浜国立大学　大学院工学研究院　物理工学コース	教授	レービガー ハンネス	対称性破れを利用したMAX相量子材料の設計
京都大学大学院情報学研究科	助教	原田 健自	多体問題に対するテンソルネットワークアルゴリズム
金沢大学ナノマテリアル研究所	助教	山口 直也	層異常ホール材料のための第一原理層分解ベリー位相計算コード開発
横浜国立大学工学研究院	准教授	藤野 智子	新規高次元オリゴマー型伝導体単結晶の示す電子構造解析
日本女子大学　理学部　数物情報科学科	教授	村岡 梓	第一原理計算を用いたペロブスカイト吸収層の構造・電子物性評価
奈良先端科学技術大学院大学	准教授	原嶋 庸介	材料開発のためのマテリアルズインフォマティクス手法開発
産業技術総合研究所　マテリアルDX研究センター	研究チーム長	福島 鉄也	第一原理計算データを活用した磁石化合物の汎用基盤モデルの構築
東北大学	准教授	那須 譲治	ホフスタッター・ハバード模型における量子多体効果の数値解析
東京大学物性研究所	教授	杉野 修	一般化ランジュバン方程式を用いたマルチスケールシミュレーション
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
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ーフォノン結合を考慮したバンド構造の再現
島根大学　材料エネルギー学部	助教	藤崎 貴也	メタンからの高効率水素製造：ナノ粒子の電荷制御に着目した触媒設計
三重大学大学院工学研究科電気電子工学専攻	教授	中村 浩次	界面スピンオービトロニクス機能創出と界面材料設計
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手法の融合による量子多体系シミュレーション
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	からみあい高分子のダイナミクスにおけるトポロジー効果の解明
東京大学大学院総合文化研究科	教授	福島 孝治	Lifting を活用した Irreversible 拡張アンサンブル法と多体系への展開
東京大学総合文化研究科	教授	堀田 知佐	三角格子量子スピン系におけるスピン液体とその動的性質
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
ファインセラミックスセンター	主任研究員	桑原 彰秀	ハイスループット第一原理計算による超イオン伝導体探索
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	教授	常行 真司	アモルファス材料の誘電特性予測

2026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
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
兵庫県立大学大学院理学研究科	教授	草部 浩一	原子スケールダイナミクス計算による機能性材料設計
東北大学大学院理学研究科 物理学専攻	教授	川勝 年洋	流体粒子法におけるマルチスケール境界条件と非線形流動
学習院大学理学部物理学科	教授	宇田川 将文	ハニカムネットワーク上で形成される量子液体の動的応答
東京大学大学院新領域創成科学研究科	助教	保田 侑亮	粗視化分子動力学法を用いた固定・動的・環動架橋網目の力学物性計算・精密構造解析
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酵素反応の高精度予測と酵素設計への応用
東京大学物性研究所	特任研究員	岩崎 舜平	有機分子結晶の第一原理有効模型解析
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
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 諒也	秩序度を考慮した遷移金属系の有限温度磁気特性に関する第一原理計算
東京科学大学物質理工学院	助教	望月 泰英	原子変位パラメータの機械学習から抽出した材料の分子動力学計算による負熱膨張挙動の理論予測
東北大学金属材料研究所	助教	BAE SOUNG-MIN	Koopmans適合型密度汎関数理論による酸化物・窒化物におけるボーラロン生成のハイスループット解析
兵庫県立大学 大学院情報科学研究科	准教授	芝 隼人	ガラスの超長時間サンプリングに向けた構造遷移生成モデル開発
東北大学 材料科学高等研究所 デバイス・システムグループ	特任講師	サウ カーテイツク	次世代のバッテリー、水素貯蔵、および熱管理システムに向けた先進的な水素化物材料の設計:　コンピュータシミュレーションを活用して
山形大学学術研究院	准教授	笠松 秀輔	欠陥を有する遷移金属複合酸化物の電荷・スピン秩序の第一原理解析
理化学研究所	特別嘱託研究員	飯高 敏晃	普遍ランダム位相状態を用いた有限温度量子スピ ン系の計算
京都先端科学大学工学部	特任研究員	上村 直樹	第一原理計算と機械学習ポテンシャルによる合金の力学特性の原子論的解析
産業技術総合研究所	招聘研究員	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
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多極子相互作用および非線形伝導の研究
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	量子フラストレート磁性体における多体量子もつれ
名古屋大学理学部 化学科	准教授	フン マイン クアン	機械学習モデル構築に向けた遷移金属錯体のスピン状態エネルギーに関する大規模データベースの作成と高精度量子化学計算による検証
東北大学金属材料研究所	博士号研究員	COSTAAMARAL RAFAEL	アモルファス TeO_x および Se 合金化系における 酸化度制御構造と p 型伝導機構の第一原理計算研究
岡山大学異分野基礎科学研究所	教授	Jeschke Harald	二次元および三次元複素磁性体における古典的・量子スピン液体
東京理科大学先進工学部 マテリアル創成工学科	ポスドク研究員	元 師弘	自由体積の時空間変動と局所・鎖スケール運動の連成に基づく高分子緩和ダイナミクスの分子動力学シミュレーション
東北大学材料科学高等研究所	准教授	井上 和俊	第一原理による異種界面の原子構造と偏析機構の解明
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
金沢大学ナノマテリアル研究所	教授	石井 史之	非周期系におけるバンド描像と物理量の第一原理計算プログラムの開発と応用
大阪大学 量子情報・量子生命研究センター	准教授	水上 渉	センサー材料の定量的計算に向けた量子支援計算ワークフローの構築
東京大学化学システム工学専攻	助教	村岡 恒輝	ゼオライト界面の網羅的探索
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	高酸素貯蔵放出材料のナノ構造と反応活性
東京大学物性研究所	特任研究員	吉見 一慶	多次元組成空間における高エントロピー REBCO 材料の第一原理電子構造・物性探索
核融合科学研究所研究部プラズマ量子プロセスユニット	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

2026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
上智大学 理工学部 機能創造理工学科	特任准教授	金子 隆威	テンソルネットワーク状態を用いたニューラルネットワーク量子状態の最適化
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液体における新奇超伝導 II
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
東北大学金属材料研究所	教授	野村 悠祐	多軌道クラスター動的平均場理論による非従来型超伝導の物性解明
上智大学	客員教授	今田 正俊	量子多体問題の高精度高効率数値解法の開発と応用
東北大学材料科学高等研究所	Assistant Professor	リウ ヘン	遷移金属窒化物のpH依存性表面状態と酸素発生反応性能の探求
物質・材料研究機構	グループリーダー	山地 洋平	数値分光法による高温超伝導およびフラストレート量子磁性体の研究
九州大学	助教	工藤 耕司	カイラル中心電荷の評価による非可換トポロジカル秩序相の探索
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開発と応用
東京大学工学系研究科	教授	塩見 淳一郎	有機・低次元材料における無秩序-結晶界面を介した熱輸送機構
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
東北大学	特任助教授	トラン バ フン	巨大磁気熱量測定材料の計算機スクリーニング
東北大学材料科学高等研究所	准教授	李 昊	CO_2還元反応(CO_2RR)触媒の磁気特性の計算化学的スクリーニング
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	HPC/量子コンピュータハイブリッド計算機を用いた材料計算手法の開発
東京大学物性研究所	助教	高橋 惇	量子モンテカルロ法による閉じ込め弦とバレンスボンド準結晶の解析
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赤井KKR法を用いた欲しい性質を持つ物質の逆設計