

平成 29 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
東北大学大学院工学研究科	助教	吉留 崇	マニフォールド理論とマルコフ状態モデルの協奏によるタンパク質へのリガンド結合・解離過程の解明
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界面の電子物性の探索
埼玉大学大学院理工学研究科物質科学部門	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
奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科	准教授	服部 賢	Si 表面上の原子吸着系のモデル計算
名古屋大学ナショナルコンポジットセンター	博士研究員	天本 義史	分子動力学法による繰り返し変形下での高分子疲労メカニズムの解析
東京理科大学	准教授	福元 好志	カゴメ格子系 $\text{Cs}_2\text{Cu}_3\text{SnF}_{12}$ のマグノン分散関係の級数展開法による研究
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	混合溶媒中の高分子電解質のコンフォメーション・凝集構造
金沢大学理工研究域数物科学系	准教授	石井 史之	酸化物/貴金属界面におけるラッシュバ効果の第一原理計算
産業技術総合研究所	主任研究員	福田 順一	ソフトマテリアルの秩序構造とその光学的性質の計算
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	コロイド結晶に関する分子シミュレーション
東京大学物性研究所	特任研究員	樋山 みやび	生物発光関連分子およびその類似体の励起状態研究
琉球大学理学部物理系	教授	梯 祥郎	第 1 原理運動量依存変分理論に基づく鉄族強磁性金属の運動量分布関数と準粒子状態の定量的研究
東京大学生産技術研究所	助教	高江 恭平	強誘電 反強誘電相転移を利用した巨大応答と交差応答
北海道科学大学	教授	内田 尚志	三角格子ハバード模型における多重スピン密度波と磁気スキルミオンの理論
東京大学工学系研究科	准教授	塩見 淳一郎	機械ひずみを用いたナノ材料フォノン・電子輸送特性制御
東京工業大学 理学院物理学系	助教	豊田 雅之	同位体超格子や結晶多形超格子によるバンド・ギャップの制御
東京大学物性研究所	特任教授	赤井 久純	軽希土類永久磁石材料の電子状態
日本大学理工学部 一般教育教室（物理）	教授	中原 明生	ペーストの流れの記憶の数値実験
浜松医科大学フォトンクス医学研究部	特任助教	町田 学	輸送現象と光トモグラフィー
名古屋工業大学	助教	磯部 雅晴	高密剛体球系における非平衡相転移と衝撃波現象
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	パイロクロア反強磁性体におけるスピン-格子結合の効果
横浜国立大学 大学院工学研究院 物理工学コース	助教	レー ビ ガ ー ハンネス	電子デバイスのための自己組織化ナノインターフェイスの理論
鳥取大学大学院工学研究科	助教	榊原 寛史	多体電子論に基づく第一原理有効模型導出システムの構築
物材機構	研究員	苅宿 俊風	実空間構造によるトポロジカル状態の操作
東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻	助教	眞弓 皓一	環動ゲルネットワークの粗視化分子動力学シミュレーション
産業技術総合研究所	主任研究員	織田 望	300 超の原子数のシリコンクラスターによる超格子構造に対する第一原理計算

平成 29 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
宇都宮大学大学院工学研究科	教授	石田 邦夫	TH z 光誘起構造変化初期過程の理論研究
理化学研究所創発物性科学研究センター	特別研究員	荒川 直也	3次元カイラル磁性体のマグノン物性の微視的理論
東京大学新領域創成科学研究科物質系専攻	准教授	高木 紀明	2次元単原子層物質の構造と電子状態
東京大学新領域創成科学研究科物質系専攻	准教授	高木 紀明	固体表面に吸着した磁性分子の構造と電子状態
東京大学大学院総合文化研究科	准教授	新井 宗仁	再生医療に必要な生理活性タンパク質のフォールディング反応機構の解析
東京大学大学院総合文化研究科	准教授	新井 宗仁	計算機を用いた新規結合タンパク質の合理的人工設計
立命館大学理工学部物理科学科	教授	池田 浩章	第一原理的アプローチによる高温超伝導体の探索
大阪大学理学研究科	教授	川村 光	地震の統計モデルの数値シミュレーション
早稲田大学 高等研究所	助教	渡部 洋	電荷自由度を有する強相関電子系の超伝導・磁性・電荷秩序
東北大学大学院理学研究科	教授	石原 純夫	複合電子系における電子状態と過渡ダイナミクス
九州大学大学院工学研究院材料工学部門	准教授	佐藤 幸生	第一原理計算による電気化学材料の設計
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	金属酸化物物性の第一原理計算と触媒活性の材料アルズインフォマティクスアプローチ
産業技術総合研究所	上級主任研究員	柳沢 孝	量子モンテカルロ法と第一原理計算による強相関電子系の研究
東京大学物性研究所	助教	森田 悟史	対称性のあるテンソルネットワーク法の並列計算ライブラリ開発
秋田大学大学院理工学研究科	准教授	田沼 慶忠	異方的超伝導接合の量子現象における数値計算法の研究
北海道大学 大学院工学研究院	教授	島田 敏宏	有機分子の炭化反応と電子状態の計算
東京大学 大学院理学研究科	特任研究員	立津 慶幸	第一原理計算を用いた微量元素添加 Nd-Fe-B 磁石の磁気異方性解析
神戸大学大学院理学研究科	名誉教授	利根川 孝	空間構造をもつ次元量子スピン系の数値的研究
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	細胞伸長とその集団運動への影響の解明
京都工芸繊維大学	助教	水口 朋子	細孔内に閉じ込められた水の構造と物性に対する界面の影響の解明
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/イオン液体界面の第一原理分子動力学シミュレーション
名古屋大学 未来材料・システム研究所	特任講師	黒澤 昌志	新しいIV族半導体混晶に関する第一原理計算
京都大学理学研究科	ポスドク(特定研究員)	吉田 恒也	強相関トポロジカル系における新奇物性
神戸大学大学院システム情報学研究科	助教	島村 孝平	第一原理分子動力学シミュレーションによる原始地球における生体有機分子発生機構の解明 II
東京大学分子細胞生物学研究所	准教授	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

平成 29 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
慶應義塾大学理工学部機械工学科	教授	泰岡 顕治	還元されたアナターゼ型 TiO <sub>2</sub> ナノクリスタルにおける電子状態の研究
九州大学応用力学研究所	助教	大澤 一人	照射損傷と格子間原子との相互作用の研究
熊本大学学生支援部	技術職員	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研究
日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター	副主任研究員	大西 弘明	フラストレート量子スピン鎖の磁気励起とスピン伝導
金沢大学理工研究域数物科学系	准教授	石井 史之	酸化物薄膜・界面における磁気安定性と輸送特性の第一原理的研究
上智大学理工学部	教授	大槻 東巳	ランダムなトポロジカル物質の相図
東京大学大学院工学系研究科	教授	山口 周	CO <sub>2</sub> 転換プロセスのための酸塩基酸化物触媒水和表面のプロトン活性に関する研究
東京大学工学系研究科附属光量子科学研究センター	特任研究員	篠原 康	固体中アト秒電子ダイナミクス第一原理計算
北海道大学理学部物理学科	助教	速水 賢	スピン軌道相互作用を有する遍歴磁性体におけるスキルミオン結晶相
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	トポロジカル相におけるバルク・エッジ対応の数値的研究
産業技術総合研究所	研究センター長	浅井 美博	強相関材料の非平衡伝導特性に対する理論と第一原理計算の協奏研究
琉球大学理学部	教授	稲岡 毅	固体表面・界面、微粒子の新規電子物性の探索と実現
島根大学大学院総合理工学研究科	教授	影島 博之	半導体表面界面における構造的素励起の物性の研究
琉球大学理学部	准教授	安田 千寿	格子の自由度と結合した量子スピン系におけるランダムネスの効果
東京大学物性研究所	助教	野口 良史	第一原理計算による Singlet-Triplet splitting の評価
岡山大学大学院自然科学研究科	教授	鶴田 健二	第一原理計算による生物由来酸化鉄の形成機構とイオン拡散に関する研究
東京大学総合文化研究科広域科学専攻基礎科学系	准教授	加藤 雄介	次近接相互作用を取り入れたカイラルらせん磁性体モデルの物性
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
東京大学大学院総合文化研究科	准教授	福島 孝治	相転移・協力現象の統計力学的研究
大阪大学	教授	黒木 和彦	多サイト・多軌道系のリアリスティックな電子状態を考慮した電子相関と超伝導に関する研究
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	大久保 達也	活性点の制御されたゼオライト合成のための有機構造規定剤の設計
東北大学金属材料研究所	助教	樋口 祐次	大規模粗視化分子動力学法による結晶性高分子の変形と破壊のダイナミクス
慶應義塾大学理工学部	教授	佐藤 徹哉	量子井戸誘起強磁性を発現する Pd(100) における歪みをういた磁気機能制御の研究
首都大学東京理工学研究科物理学専攻	教授	堀田 貴嗣	2 チャンネル近藤効果と多極子感受率
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	助教	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

平成 29 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	教授	山田 淳夫	第一原理計算によるナトリウムイオン電池電極材料の解析
東京大学理学系研究科物理学専攻	教授	宮下 精二	量子応答、量子ダイナミクスの数値計算法の開発
東京大学工学系研究科	准教授	塩見 淳一郎	マテリアルズ・インフォマティクスによる熱機能材料の探索
大阪大学大学院基礎工学研究科	准教授	金 鋼	ガラス形成液体に潜んだ不均一的ダイナミクスの原理説明
国立研究開発法人物質・材料研究機構	NIMS ポスドク 研究員	山下 智樹	結晶構造探索手法の開発と磁石・スピントロニクス材料探索
愛媛大学理工学研究科	教授	淵崎 員弘	融解現象とポリアモルフィズム
兵庫県立大学 大学院工学研究科	准教授	鈴木 隆史	SU(N) スピンで記述される 2 次元一般化 Heisenberg 模型の基底状態相図
産業技術総合研究所	研究員	橋本 保	シェル・モデルを用いた強誘電体の分子動力学シミュレーション III
東京大学物性研究所	准教授	杉野 修	固液界面の機能性
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	研究員	田村 亮	物質・材料科学の知見を事前分布で表す方法の開発
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	燃料電池電極触媒及び水素透過膜の省貴金属化
北海道大学大学院理学研究院化学部門	教授	武次 徹也	豊富元素を利用した触媒の理論設計
広島工業大学 工学部	准教授	大村 訓史	高圧下における玄武岩質メルトの粘性と局所構造に関する第一原理的研究
京都大学大学院理学研究科物理学宇宙物理学専攻	教授	川上 則雄	強相関係におけるトポロジカル輸送と非平衡現象
北海道大学理学部物理学科	准教授	北 孝文	ローレンツ力とコブニン力、状態密度の傾きを含む拡張準古典方程式を用いた超伝導渦状態の微視的解析
熊本大学大学院自然科学研究科	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
東京理科大学理学部応用物理学科	教授	遠山 貴己	密度行列繰り込み群法によるフラストレート量子スピン系の研究
大阪大学大学院基礎工学研究科	教授	福井 賢一	電極と接して電気二重層を形成する電解質液体の構造化とダイナミクスの解析
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	第一原理に基づく動的電子輸送シミュレーターの開発と応用
東京理科大学理学部	教授	渡辺 一之	ナノ構造の励起電子動力学と光学応答の第一原理計算
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻	特任助教	大越 孝洋	ハバード模型におけるストライプ秩序と電子格子相互作用の関係の数値的研究
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	下川 統久朗	低次元量子磁性体に対するボンドランダムネスの効果
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	軌道自由度を有する強相関電子系における新奇量子状態の数値解析

平成 29 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
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	強いスピン軌道相互作用を有する相関電子系の数値的研究
産業技術総合研究所	主任研究員	灘 浩樹	前駆体クラスター形成を経由したヒドロキシアパタイト結晶核生成機構の分子動力学シミュレーション研究
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及び磁性状態の研究
岩手大学工学部	教授	西館 数芽	グラフェン上の有機半導体分子：界面の電子構造と結晶成長
大阪大学産業科学研究所	助教	初田 浩義	第一原理計算によるエネルギーデバイス材料の電子状態解析
九州大学総合理工学研究院	助教	水上 涉	固体及びナノ粒子表面に吸着した分子に対する非調和ポテンシャルの構築とその応用
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	明石 遼介	酸水素化物における水素 1s 金属状態および超伝導の追求
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	動的スケールリング解析の改良とトポロジカル相転移系への応用
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	第一原理計算による原子膜物質の原子構造・安定性・電子物性の解明
早稲田大学 高等研究所	助教	田中 宗	量子アニーリングを用いた機械学習
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	機能性材料の格子欠陥近傍におけるランダム原子構造と選択的偏析
東北大学原子分子材料科学高等研究機構	准教授	赤木 和人	金属酸化物の性質を特徴付ける構造単位の探索
京都大学大学院情報学研究科	助教	原田 健自	非平衡系の数値的研究
千葉大学理学部物理学科	教授	中山 隆史	電場下の金属/固体界面における金属原子のイオン化・拡散の研究
分子科学研究所計算科学研究センター	准教授	奥村 久士	親水性/疎水性溶液界面におけるアミロイドベータペプチド凝集機構を解明する分子動力学シミュレーション
東京大学工学系研究科	助教	伊與田 英輝	孤立量子系の熱化に関する数値的研究
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	超並列電子状態計算とデータ科学の融合による大規模デバイス材料研究
筑波大学大学院数理物質科学研究科	教授	重田 育照	非類似性を利用したナノバイオ系の構造変化解析
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	教授	坂井 徹	フラストレーション系のスピギャップの数値対角化による研究
高度情報科学技術研究機構	主査	吉澤 香奈子	第一原理計算によるルチル二酸化チタン中の不純物水素
京都大学 ESICB	特任研究員	小鷹 浩毅	第一原理計算を用いた Na <sub>2</sub> 次電池の負極材料物質の探索
東京大学大学院工学系研究科	教授	山下 晃一	太陽光エネルギー変換における基礎過程の研究と材料設計指針獲得のための大規模第一原理計算
筑波大学計算科学研究センター	准教授	小野 倫也	実空間差分法に基づく第一原理電子状態・輸送特性計算コードの開発とシミュレーション
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	バネ・ビーズ鎖におけるガラス状態の解析

平成 29 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
理化学研究所	基礎科学特別研究員	正木 晶子	並列化量子モンテカルロ法の開発と 2 次元量子格子系の研究
名古屋大学未来材料・システム研究所	助教	洗平 昌晃	炭素より重い IV 族元素の二次元結晶の電子状態と熱力学的安定性
琉球大学理学部物質地球科学科物理系	准教授	柳澤 将	有機半導体結晶の電子構造に関する理論的研究
秋田大学工学資源学部機械工学科	教授	足立 高弘	微細横溝加工を施した鉛直平板を流れる凝縮・沸騰液膜流の熱輸送特性
理化学研究所	特別研究員	星野 晋太郎	量子モンテカルロ法による非従来型超伝導体の局所電子相関の研究
東京大学物性研究所	助教	渡辺 宙志	不純物を含む液体における気泡核生成現象の分子動力学計算
名古屋大学大学院工学研究科	准教授	篠田 涉	定量的粗視化分子モデリングによるマクロ分子自己集合体の物性解析
東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻	教授	渡邊 聡	ナノ構造のイオン輸送特性、電気特性および界面電子状態の理論解析
大阪大学理学研究科	教授	川村 光	フラストレート磁性体における新奇秩序
信州大学工学部機械システム工学科	准教授	松中 大介	第一原理計算に基づくマグネシウム合金の欠陥場の解析
東京大学物性研究所	教授	押川 正毅	フィリング・エンフォースト量子バンド絶縁体を始めとする空間群対称性に基づく新奇量子物質の設計と評価
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	諏訪 秀磨	非閉じ込め量子臨界における創発粒子
物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点	グループリーダー	館山 佳尚	電池・触媒界面物性に関する第一原理”サンプリング”研究
産業技術総合研究所	研究チーム長	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
名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授	白石 賢二	第一原理量子論による新規相変化メモリの設計
東京工業大学物質理工学院材料系	准教授	合田 義弘	表面磁性超薄膜の第一原理計算
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	斎藤 峯雄	結晶評価法としての陽電子およびミュオン実験に関する第一原理計算
立教大学理学部化学科未来分子研究センター	教授	常盤 広明	第四次革新的手法を用いた合理的創薬手法の開発およびその応用
大阪大学産業科学研究所	助教	山内 邦彦	遷移金属酸化物の第一原理電子状態計算
筑波大学 数理物質系 物理工学域	准教授	小林 伸彦	ナノ構造の量子伝導の第一原理計算
東京電機大学理工学部	准教授	小畑 修二	磁気双極子相互作用に基づくナノ材料磁性
東京大学 大学院工学系研究科	助手	沖津 康平	分子標的創薬の大幅なコストダウンに向けた基礎研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	教授	常行 真司	実験データを援用した新しい物質構造予測手法の開発と応用
大阪大学 大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻	教授	森川 良忠	第一原理熱力学・統計力学手法を用いた不均一触媒反応過程の研究

平成 29 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
大阪大学大学院工学研究科	助教	稲垣 耕司	第一原理メタダイナミクス計算による CARE 加工プロセスの解明 -Pt と材料表面の間で生じる水分子分解とエッチング反応-
東京理科大学基礎工学部	助教	藤川 紗千恵	第一原理計算を用いた希薄窒化物半導体 InSbN のバンド構造に関する研究
大阪大学 大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻	助教	濱本 雄治	第一原理計算によるグラフェン端に吸着した Pt クラスターの研究
東京大学物性研究所	特任研究員	大久保 毅	古典・量子フラストレートスピン系における新規秩序の探索
九州工業大学	准教授	中村 和磨	イリジウム酸化物に対する第一原理フォノン計算
大阪大学大学院基礎工学研究科	准教授	草部 浩一	ナノグラフェン VANG の強相関一重項が示す反応特異性
東京大学物性研究所	助教	笠松 秀輔	vdW-DF + U 法による固体酸素の第一原理計算
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	准教授	藤堂 眞治	統計的機械学習によるモデル推定と臨界現象解析
東京大学情報基盤センター	特任講師	五十嵐 亮	長距離相互作用行列の低ランク近似を用いたモンテカルロシミュレーション
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	エレクトレット荷電メカニズムの解明
東京大学物性研究所	特任研究員	三澤 貴宏	多変数変分モンテカルロ法を用いた強相関トポロジカル物質の研究
青山学院大学理工学部	教授	松川 宏	摩擦の科学
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	小田 竜樹	スピントロニクス材料および分子性磁性体の原子構造、磁気状態、電子状態の解析
東京大学工学系研究科物理工学専攻	教授	今田 正俊	ペロブスカイト遷移金属酸化物 SrRuO <sub>3</sub> における磁気異方性と量子異常ホール効果の研究
分子科学研究所	准教授	信定 克幸	電子・光機能を持つ界面の計算科学的研究
名古屋大学大学院理学研究科	教授	岡本 祐幸	拡張アンサンブル法による複雑系の研究
東京大学工学系研究科	教授	押山 淳	ハード及びソフトナノ物質の原子構造と電子物性
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻	特任准教授	山地 洋平	量子スピン液体における励起スペクトルの数値的研究
東京大学物性研究所	教授	川島 直輝	連続空間および離散空間量子モンテカルロ法によるヘリウム系有効モデルの決定
防衛大学校応用科学群応用物理学科	講師	萩田 克美	高分子材料の破壊と補強に関する粗視化 MD シミュレーション