

平成 29 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
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
慶應義塾大学理工学部物理情報工学科	准教授	神原 陽一	混合アニオン層状化合物の仕事関数に関する研究
浜松医科大学フォトンクス医学研究部	特任助教	町田 学	有限差分法・有限要素法による輻射輸送方程式
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	博士研究員	若林 大佑	ANN ポテンシャルを用いた大規模分子動力学シミュレーション:高密度化シリカガラス中におけるナノメートルスケールのドメイン構造の研究
宇都宮大学大学院工学研究科	教授	石田 邦夫	フェムト秒領域における電子・格子・光相互作用系の非断熱ダイナミクス
九州大学 大学院理学研究科	教授	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
千葉大学先進科学センター	特任助教	日沼 洋陽	ブルシャンブルー類似体の基底構造の探索
東北大学大学院理学研究科	教授	石原 純夫	複合多体電子系の過渡量子ダイナミクス
産業技術総合研究所	上級主任研究員	柳沢 孝	最適化量子モンテカルロ法および第一原理計算による強相関係の研究
東京大学物性研究所	特任研究員	白井 達彦	ランチョス法を用いた量子共振器系での光双安定性の解析
大阪大学大学院理学研究科宇宙地球専攻	助教	青山 和司	フラストレート磁性体における動的スピン相関の理論研究
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
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
東京大学生産技術研究所	教授	田中 肇	テトラヒドラル液体の構造とダイナミクス
東京大学生産技術研究所	教授	田中 肇	コロイド分散系のゲル化における運動量保存則起源の有限サイズ効果の解明
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超伝導の解析
東京工業大学	研究員	寺澤 麻子	第一原理計算によるネオジム磁石結晶のアモルファス粒界相の形成過程および磁気特性解析
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	第一原理計算による高温高压水中の多価アルコールの脱水過程の研究
工学院大学機械工学科	助教	平塚 将起	第一原理計算を用いたセミクラスレートハイドレートの相平衡条件の計算
理研	基礎科学特別研究員	紙屋 佳知	トポロジカル絶縁体表面上のマヨラナフェルミオン格子の量子モンテカルロシミュレーション
東北大学大学院工学研究科	助教	吉留 崇	エンドポイント法を用いたアポプラストシアニン折り畳みに伴う熱力学量変化の定量的計算
大阪大学大学院基礎工学研究科	助教	大戸 達彦	ドーピンググラフェン・水界面の第一原理分子動力学シミュレーション
早稲田大学 高等研究所	准教授	田中 宗	量子アニーリングを用いた行列分解
東北大学金属材料研究所	博士研究員	彭 海龍	イミダゾリウム系イオン液体-水混合系におけるナノ構造相の探求
京都大学理学研究科	ポスドク(特定研究員)	吉田 恒也	トポロジーと強相関効果が創発する異常物性
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	細胞の伸長誘起動的転移の数値的研究

平成 29 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
早稲田大学理工学術院	教授	中井 浩巳	不均一触媒によるトルエンの可逆的水素化反応に対する第一原理計算
横浜国立大学・工学部	准教授	首藤 健一	遷移金属ポルフィリン誘導体超薄膜のスピン配列と振動分光の密度汎関数法による解析
慶應義塾大学理工学部機械工学科	教授	泰岡 顕治	アナターゼ型 TiO ₂ ナノクリスタルにおける余剰電子の安定性解明
岡山大学異分野基礎科学研究所	教授	Harald Jeschke	インターカレートした FeSe の電子構造及び超伝導の圧力依存性
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 II
兵庫県立大学大学院 生命理学研究科	教授	舘野 賢	ハイブリッド ab initio QM/MM MD 計算によるスーパーコイル DNA 構造を選択的に認識するタンパク質の機能メカニズムの解明
兵庫県立大学 大学院工学研究科	准教授	鈴木 隆史	蜂の巣格子 SU(N) ハイゼンベルク模型の基底状態相図
東京大学大学院 物理工学専攻	助教	野村 悠祐	多軌道強相関物質におけるフント結合がもたらす非局所相関
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	フラストレート強磁性鎖のスピンネマティック状態における磁気熱効果
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	強相関系におけるトポロジカル物質開拓とトポロジカル相転移
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	多軌道強相関系における新奇量子相の熱揺らぎの効果
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
大阪大学工学研究科精密科学・応用物理専攻	准教授	濱田 幾太郎	ファン・デル・ワールス密度汎関数を用いた固体表面への分子吸着系の研究
兵庫県立大学大学院物質理学研究科	教授	坂井 徹	低次元量子スピン系におけるスピフロップ現象の数値的研究
福井大学大学院工学研究科	准教授	牧野 哲征	ペロブスカイト型鉛ハライド混晶の電子構造と状態密度に関する研究
筑波大学計算科学研究センター	研究員	ハシュミ アルカム	新規半導体 2 次元構造の探索
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
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
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
北海道大学理学部物理学科	准教授	北 孝文	FLEX-S 近似を用いた銅酸化物高温超伝導体における微視的な解析
九州工業大学	准教授	中村 和磨	第一原理多体摂動計算ソフトウェア RESPACK の整備
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
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	高性能フッ素ポリマーエレクトレットの開発

平成 29 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総合研究機構	教授	幾原 雄一	機能性材料粒界の原子構造および機能特性解析
東北大学大学院理学研究科	助教	大槻 純也	動的平均場近似に基づく強相関電子系化合物の電子状態および多極子揺らぎ
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	分子動力学法を用いた希薄高分子溶液の流れ解析
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
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
国立研究開発法人 物質・材料研究機構	研究員	田村 亮	情報科学的手法による有効モデル推定の高速度化
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	動的スケール解析の改良とトポロジカル相転移への応用 II
東京大学理学部物理学科	助教	森 貴司	孤立量子多体スピン系のダイナミクス
東京大学理学系研究科	博士研究員	檜原 太一	原子スケールモデルによる磁化反転過程の解析
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
沖縄科学技術大学院大学	ポスドク研究員	下川 統久朗	フラストレートハニカム磁性体における多重 Q 秩序相
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
東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻	講師	森本 賢一	乱流伝熱問題における形状最適化シミュレーション
東京大学 大学院工学系研究科	助手	沖津 康平	多波高木方程式の最小二乗法による解法の開発
東京都立産業技術高等専門学校	准教授	鈴木 達夫	高効率な原子層水分解光触媒の理論的探索
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チトクロム c 複合体の構造変化解析
筑波大学計算科学研究センター	教授	矢花 一浩	表面電子ダイナミクスの第一原理計算
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
東京大学大学院理学系研究科 物理学専攻	特任講師	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
理化学研究所	基礎科学特別研究員	正木 晶子	二次元量子スピン系の励起ダイナミクス
金沢大学理工研究域数物科学系	准教授	石井 史之	表面・界面におけスピン構造の第一原理計算
東京大学総合文化研究科広域科学専攻関連基礎科学系	准教授	加藤 雄介	カイラルらせん磁性体の有限サイズ効果とヒステリシス
東京大学物性研究所	特任研究員	松本 宗久	f-d 金属間化合物の相対論的電子状態計算
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
首都大学東京	准教授	服部 一匡	ダイヤモンド格子上的 XY 模型：フラストレーションの効果

平成 29 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
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
東京大学工学系研究科物理工学専攻	教授	今田 正俊	光とフォノンの協奏による強相関係での非平衡高温超伝導の発現
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
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材料物質および分子性磁性体の原子・磁気・電子構造の解析
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
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