

令和元年度後期 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	講師	志賀 拓磨	フォニック結晶の熱伝導解析
東京大学生産技術研究所	教授	田中 肇	コロイドのネットワーク状相分離の粗大化メカニズム
大阪大学大学院理学研究科宇 宙地球科学専攻	准教授	湯川 諭	分岐ネットワークの統計的性質
東京大学生産技術研究所	教授	田中 肇	ガラスの遅いダイナミクスの構造的起源に関する研究
琉球大学	助教	小林 理気	希土類金属化合物における置換可能非磁性元素のスクリー ニング
岐阜大学工学部	教授	寺尾 貴道	Patchy 粒子系に関する分子シミュレーション
群馬工業高等専門学校	助教	塚原 規志	超伝導基板への吸着を応用したランタノイド 4f スピン検出 に関する理論的研究
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 II
岐阜大学	助教	小野 頌太	金属のフェムト秒発光ダイナミクス
物質・材料研究機構	ポスドク研究員	小松 尚登	磁性薄膜における双極子相互作用と Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用の競合
物質・材料研究機構	グループリーダー	三浦 良雄	ハーフメタル材料の有限温度特性に関する第一原理計算
物質・材料研究機構	研究員	増田 啓介	磁気トンネル接合における磁気抵抗比、磁気異方性の第一 原理解析
福井大学学術研究院工学系部 門	准教授	牧野 哲征	定常電場印加下での強相関酸化物の電子構造計算
福井大学学術研究院工学系部 門	准教授	牧野 哲征	銅酸化物におけるフォノン状態密度分布の第一原理計算
物質・材料研究機構	NIMS ポスドク研 究員	山本 薫	磁気トンネル接合および巨大磁気抵抗素子における熱電性 能の第一原理計算
大阪大学大学院理学研究科宇 宙地球専攻	助教	青山 和司	ブリージングパイロクロア反強磁性体における局所格子歪 みと磁場効果
産業技術総合研究所	上級主任研究員	柳沢 孝	最適化モンテカルロ法および第一原理計算による強相関電 子系の研究
金沢大学理工研究域	助教	小幡 正雄	磁性分子複合体・結晶・界面系の原子・磁気構造の解析と外 部電場・磁場効果の調査
東京大学物性研究所	助教	福田 将大	物質表面における場の量子論に基づく局所物理量解析
東京理科大学	准教授	福元 好志	球体カゴメ系の磁場中低温比熱に対する Dzyaloshinskii- Moriya 相互作用 とランダムネスの効果
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光学的性質の計算
大阪大学	教授	藤井 啓祐	NISQ 量子コンピュータを用いた量子多体系の物性計算の シミュレーション
日本原子力研究開発機構	研究員	村井 直樹	遷移金属カルコゲナイド物質の CDW 相における格子ダイ ナミクスの研究
名古屋大学 大学院理学研究 科	准教授	小林 晃人	有機ディラック電子系 $\alpha$ -(BEDT-TTF) <sub>2</sub> I <sub>3</sub> の電荷秩序相に おけるスピン電荷分離
広島工業大学 工学部	准教授	大村 訓史	高圧下における液体 Fe-Si-O 混合系の構造と不混和性に関 する第一原理分子動力学シミュレーション
日本大学理工学部 一般教育 教室 (物理)	教授	中原 明生	ペーストのメモリー効果の転移現象
東京大学総合文化研究科	准教授	堀田 知佐	横磁場イジングモデルにおける新規量子相の解析
宇都宮大学大学院工学研究科	教授	石田 邦夫	相互作用のない電子格子系間に光によって生成される量子 もつれ状態の性質
東北大学材料科学高等研究所	助教	横 哲	溶媒和を考慮した超臨界場における反応の理論計算
福島工業高等専門学校	准教授	小田 洋平	金属クロムの磁性に対するひずみ効果の解析

令和元年度後期 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	特任研究員	赤井 久純	希土類混晶磁石材料の磁気特性データ構築
広島大学大学院理学研究科	准教授	高橋 修	様々な環境下における水の電子状態
名古屋大学大学院工学研究科 物質科学専攻	助教	横井 達矢	粒界原子ダイナミクスの解析に向けた機械学習駆動型分子シミュレーション
神戸大学大学院理学研究科	名誉教授	利根川 孝	空間構造をもつ一次元量子スピン系の数値的研究
熊本大学パルスパワー科学研究 所	特任教授	熊添 博之	スパース推定による広域 X 線吸収微細構造計測の解析手法の確立
兵庫県立大学大学院物質理学 研究科	教授	坂井 徹	低次元系のスピネマティック相の数値対角化による研究
愛媛大学理工学研究科	教授	湊崎 員弘	相転移キネティクスとポリアモルフィズム
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
東京理科大学理学部	教授	渡辺 一之	ナノ構造の励起電子・陽電子・原子動力学と光・熱電物性の第一原理計算
東京大学物性研究所	助教	樋口 祐次	大規模粗視化分子動力学法を用いた持続応力による結晶性高分子の破壊
東京工業大学	准教授	古賀 昌久	軌道自由度をもつ相関電子系における非平衡ダイナミクスの数値解析
岡山大学異分野基礎科学研究 所	教授	Jeschke Har- ald	LaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> における超伝導安定性
東京大学総合文化研究科広域 科学専攻関連基礎科学系	教授	加藤 雄介	スピン液体相の汎関数くりこみ群による研究
京都大学大学院理学研究科物理 学宇宙物理学専攻	教授	川上 則雄	強相関系の磁性・トポロジーと輸送現象
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	燃料電池電極触媒及び水素透過膜の省貴金属化
大阪大学大学院基礎工学研究 科	助教	大戸 達彦	電子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
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	ギ酸分解触媒及び酸素吸蔵材料の省貴金属化
東京大学大学院新領域創成科学 研究科環境システム学専攻	准教授	大友 順一郎	プロトン伝導性固体電解質中のイオン電導機構解析とプロトン伝導体を用いた触媒表面反応への応用
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	胡 世謙	2次元ヘテロ接合材料の面外熱伝導率の操作
東京大学機械工学塩見研究室	Post Doctor	邵 成	熱電材料のマルチスケール計算設計
東京大学物性研究所	准教授	野口 博司	生体膜の構造形成
物質・材料研究機構	主幹研究員	野々村 禎彦	非平衡初期緩和の温度スケーリングの一般化
沖縄科学技術大学院大学	ポスドク研究員	下川 続久朗	フラストレートした量子磁性体に対する熱ゆらぎの効果
名古屋大学未来材料・システ ム研究所	特任助教	原嶋 庸介	不純物半導体の転位に生じるリーク電流の第一原理的研究
東京大学大学院総合文化研究 科	教授	新井 宗仁	抗アレルギー薬の開発に向けたタンパク質デザイン
分子科学研究所	准教授	南谷 英美	電子フォノン相互作用の精密第一原理解析
首都大学東京理学研究科物理 学専攻	教授	堀田 貴嗣	超ウラン系における 2 チャンネル近藤効果の研究
横浜国立大学	准教授	那須 讓治	時間変動する磁場下でのキタエフスピン液体の磁気状態
分子科学研究所計算科学研究 センター	准教授	奥村 久士	分子動力学シミュレーションによる全長アミロイドペプチドの凝集過程の研究

令和元年度後期 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
大阪大学	教授	黒木 和彦	異種アニオンから構成される梯子型電子状態における超伝導の可能性に関する研究
東京大学大学院工学系研究科	教授	求 幸年	スピン軌道結合と電子相関による量子物性の理論的研究
九州工業大学	准教授	中村 和磨	熱力学状態図の第一原理計算
理化学研究所 創発物性科学研究センター	研究員	野村 悠祐	機械学習の技術を用いたフラストレート磁性体の研究
東京工業大学	特任准教授	松下 雄一郎	パワー半導体における界面欠陥構造の特定とその低減法の提案:第一原理計算からのアプローチ
電気通信大学情報理工学研究科	教授	尾関 之康	動的スケージング解析を利用したトポロジカル相転移の臨界普遍性の研究 II
大阪大学理学研究科	PD	松下 勝義	組織内での細胞誘導機構の数値的研究
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のための歪バンド構造設計
高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所	研究員	松本 宗久	磁性材料における順問題としての電子状態データの粗視化と逆問題としての実験データ解析の自己無撞着解析
大阪大学サイバーメディアセンター	准教授	吉野 元	パイロクロア格子フラストレート模型におけるスピンと格子ひずみの同時ガラス転移
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	表面、界面、欠陥における原子構造と原子ダイナミクスの解析
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	第一原理電子状態・輸送特性計算コード RSPACE の開発とデバイスシミュレーション
筑波大学 数理物質系	助教	吉田 恒也	強相関ダイナミクスが誘起する新奇トポロジカル現象
東京大学 大学院工学系研究科	助手	沖津 康平	X 線多波回折理論による結晶構造解析法の研究
東京大学工学部機械工学科	特任研究員	鞠 生宏	有機-無機ハイブリッド熱電材料のエネルギー輸送
物質・材料研究機構 GREEN	グループリーダー	館山 佳尚	次世代二次電池界面・電解液に関する第一原理サンプリング研究
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻	助教	諏訪 秀磨	スピン軌道絶縁体の動的スピン構造因子
金沢大学	教授	新井 豊子	DFT 計算による非接触原子間力顕微鏡のエネルギー散逸チャンネルで捉えた原子変位機構の解明
山形大学学術研究院	助教	笠松 秀輔	BaZrO <sub>3</sub> 系イオン伝導体のドーピングスキーム設計
金沢大学理工研究域数物科学系	教授	斎藤 峯雄	スピン偏極陽電子実験の可能性を広げるための第一原理的研究
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
琉球大学理学部物質地球科学科物理系	准教授	柳澤 将	有機分子膜での構造歪み・欠陥の電子構造への影響に関する理論的研究
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	第一原理分子動力学法によるヘテロ界面原子構造および電子状態の解明
物質・材料研究機構	研究員	只野 央将	有限温度フォノン計算に基づく構造相転移の理解と予測
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	量子化学計算を用いた高性能フッ素ポリマーエレクトレットの開発
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レナード・ジョーンズ粒子系の相転移の研究
北海道大学大学院工学研究院	助教	江上 喜幸	2次元物質における電子状態および電子輸送特性制御に関する第一原理研究
金沢大学ナノマテリアル研究所	准教授	石井 史之	第一原理計算による磁性熱電物質の結晶構造予測
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磁性材料の電子構造解析および磁気的性質解析

令和元年度後期 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	教授	川島 直輝	テンソルネットワーク表現に基づくキタエフ関連モデルの変分計算
東京大学物性研究所	特任研究員	浅野 優太	複雑流体中のキャピテーション流れの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	特任教授	押山 淳	量子論による半導体界面形成機構と電子物性の解明
東北大学大学院理学研究科	助教	村島 隆浩	高分子流体・固体のマルチスケール解析
早稲田大学理工学術院	研究院教授	今田 正俊	電子状態理論と時間分解実験データの統合による強相関係での非平衡高温超伝導の解析手法創出