

# 平成 26 年度前期 スーパーコンピュータ共同利用採択課題一覧

代 表 者	所 属	タ イ ト ル
小林 功 佳	お茶の水女子大学理学部物理学科 教 授	新たなナノスケール界面の電子物性の探索
服 部 賢	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	Si 表面上の原子吸着系のモデル計算
飛 田 和 男	埼玉大学大学院理工学研究科物質科学部門 教 授	1次元フラストレート量子スピン系の数値的研究
芝 隼 人	東京大学物性研究所 助 教	低レイノルズ非ブラウン粒子懸濁液の吸収状態転移と粘弾性
荒 木 武 昭	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	ネマチック液晶中の高分子鎖の挙動 II
藤 原 進	京都工芸繊維大学大学院工学科学研究科 准教授	両親媒性溶液中におけるミセル形状変化の分子シミュレーション研究
磯 部 雅 晴	名古屋工業大学 助 教	高密度剛体球系の非平衡相転移と大規模分子動力学シミュレーション
伏 屋 雄 紀	電気通信大学 准教授	鉄系超伝導体における動的スピンゆらぎ増強機構
高 木 紀 明	東京大学新領域創成科学研究科物質系専攻 准教授	低次元ハニカムシートの物性探索
高 木 紀 明	東京大学新領域創成科学研究科物質系専攻 准教授	固体表面における有機分子の磁性
永 井 佑 紀	日本原子力研究開発機構 研究員	非従来型超伝導体の束縛状態
渡 部 洋	理化学研究所創発物性科学研究センター 特別研究員	バンド間相互作用がもたらすエキシトン凝縮・CDW・超伝導に関する理論的研究
磯 田 誠	香川大学教育学部 教 授	カイロペンタゴン格子用量子スピンの磁場中相転移
寺 尾 貴 道	岐阜大学工学部 准教授	クーロンガラス系の動的性質
城 真 範	産業技術総合研究所 主任研究員	Feigenbaum 定数の高精度計算 2
大 槻 純 也	東北大学大学院理学研究科 助 教	動的平均場理論の拡張理論による非従来型超伝導の研究
下 川 統久朗	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	ハニカム格子磁性体を用いた非自明な磁気現象に関する数値的研究
佐 藤 幸 生	東京大学総合研究機構 助 教	セラミックスの粒界における原子配列および電子状態の第一原理計算
三 浦 良 雄	京都工芸繊維大学工学科学研究科 准教授	磁性薄膜におけるノンコリニア磁気構造の第一原理計算
平 井 國 友	奈良県立医科大学医学部物理学 教 授	層状人工格子界面の電子状態と近接効果
石 原 純 夫	東北大学大学院理学研究科 教 授	電子相関系における誘電応答・光応答とそのダイナミクス
宇 田 豊	大阪電気通信大学工学部機械工学科 教 授	超精密ダイヤモンド工具の損耗機構
山 内 淳	慶應義塾大学理工学部 准教授	半導体格子欠陥の第一原理計算
溜 瀧 継 博	静岡大学理学部 准教授	疎 Pfaffian の高速計算アルゴリズムの開発とイジング系への応用
柳 沢 孝	産業技術総合研究所 上級主任研究員	量子モンテカルロ法と第一原理計算による強相関系の研究



國貞雄治	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	第一原理計算を援用した固体表面・界面領域における電子状態と反応解析
斎藤峯雄	金沢大学理学部計算科学科 教 授	スピントロニクス向け材料の電子物性シミュレーション
野口博司	東京大学物性研究所 准教授	生体膜上での膜タンパク質の自己集合
堀田貴嗣	首都大学東京理工学研究科物理学専攻 教 授	数値繰り込み群法による電子・フォノン系の近藤効果の研究
野口良史	東京大学物性研究所 助 教	全電子第一原理 GW+Bethe-Salpeter 法の開発と応用計算
淵崎員弘	愛媛大学理工学研究科 教 授	非平衡準安定状態での遅い緩和過程
田村 亮	物質・材料研究機構 ポスドク研究員	磁場印加下でのフラストレート磁性体が示す新規機能物性の探索
江上喜幸	北海道大学大学院工学研究院 助 教	動的電子輸送解析に向けた第一原理計算手法の開発と応用
福島孝治	東京大学大学院総合文化研究科 准教授	有限次元モデルのレプリカ対称性の破れの可能性
正木晶子	東京大学物性研究所 特任研究員	並列化マルチワームアルゴリズムを用いたカゴメ格子系上ハードコアボソンのエッジ状態
山内邦彦	大阪大学産業科学研究科 助 教	遷移金属酸化物における磁性・誘電性・トポロジカル性質の電子状態計算
安田修悟	兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科 准教授	複雑流体の熱流動に対するマルチスケールシミュレーション
岡 隆 史	東京大学工学系研究科物理工学専攻 講 師	強相関超伝導体における非平衡現象
原田健自	京都大学大学院情報学研究科 助 教	量子スピン系の非磁性相に関する数値的研究
大村訓史	京都大学理学研究科 学振 PD	第一原理分子動力学法による X-FEL 照射に伴う分子解離ダイナミクス
下條冬樹	熊本大学大学院自然科学研究科 教 授	高圧力下における共有結合性液体の構造と電子状態の第一原理計算
中村浩次	三重大学大学院工学研究科物理工学専攻 准教授	遷移金属薄膜・有機金属錯体の電子構造と磁性に関する第一原理計算
三宅 隆	産総研ナノシステム研究部門 主任研究員	磁気物性値とスピン軌道相互作用系の第一原理計算
梯 祥 郎	琉球大学理学部物理系 教 授	非局所動的 CPA 理論に基づく長距離磁気相関の数値的研究
首藤健一	横浜国立大学・工学部 准教授	金属表面の欠陥と有機分子の結合状態
有田亮太郎	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 准教授	強相関フラーレン系の超伝導の非経験的研究
大野隆央	物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット長	全固体電池におけるイオン伝導特性の計算科学的解析
初田浩義	大阪大学産業科学研究科 助 教	第一原理計算による二次電池正極材料の充放電機構解析
渡辺宙志	東京大学物性研究所 助 教	気泡の Ostwald 的成長過程におけるスケーリング解析
小畑修二	東京電機大学理工学部 准教授	鉄化合物の磁性と電子状態計算
小口多美夫	大阪大学産業科学研究科 教 授	遷移金属化合物の第一原理計算
安藤康伸	東京大学工学系研究科 助 教	電圧印加密度汎関数計算によるナノキャパシタンス解析
豊田雅之	大阪大学産業科学研究科 特任研究員(常勤)	第一原理計算による遷移金属酸化物の原子配列構造の解明と磁性の研究
大友順一郎	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	無機複合型プロトン電解質の結晶界面におけるイオン伝導度の評価
灘 浩 樹	産業技術総合研究所 主任研究員	シュウ酸カルシウム一水和物による氷核生成促進機構の分子動力学シミュレーション研究



重田 育 照	大阪大学大学院基礎工学研究科 准教授	ナイロン分解酵素 NylC の熱耐性の理論解析
稲垣 耕 司	大阪大学大学院工学研究科 助 教	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-GaN,SiC および SiO <sub>2</sub> のエッチング反応障壁の解析-
沖津 康 平	東京大学大学院工学系研究科 助 手	X線 n 波動力学および運動学理論とその解法の研究
庄 司 光 男	筑波大学数理物質科学研究科 助 教	トレオニン合成酵素の全反応機構の解明
籾 口 友 紀	東京大学大学院総合文化研究科 助 教	ボルツマン液体の基底状態と固化
小林 伸 彦	筑波大学数理物質科学研究科電子・物理工学専攻 准教授	ナノ構造の量子伝導の第一原理計算
杉 野 修	東京大学物性研究所 准教授	酸化物電極触媒
藤 堂 眞 治	東京大学物性研究所 特任教授	量子スピン系における量子相関とトポロジカルな秩序に関する 研究
足立 高 弘	秋田大学工学資源学部機械工学科 准教授	微細横溝加工を施した鉛直平板を流れる凝縮液膜流の熱輸送特性
舘 野 賢	兵庫県立大学大学院生命理学研究科 教 授	ハイブリッド ab initio QM/MM 計算による生体高分子の生物機 能の解析
松 川 宏	青山学院大学理工学部 教 授	摩擦の物理
草 部 浩 一	大阪大学大学院基礎工学研究科 准教授	グラフェン量子素子デバイスの理論的創成
幾 原 雄 一	東京大学大学院工学系研究科総合研究機構 教 授	酸化物界面原子構造及び電子特性
芝 隼 人	東京大学物性研究所 助 教	界面活性剤系のマルチラメラ高次構造形成ダイナミクス
福 井 賢 一	大阪大学大学院基礎工学研究科 教 授	第一原理及び古典分子動力学計算による電解質溶液/電極界面の 微視的研究
星 健 夫	鳥取大学大学院工学研究科機械宇宙工学専攻応用理工学講座 准教授	第一原理計算と革新的数理手法に基づく並列化超大規模電子構 造理論
中 野 博 生	兵庫県立大学大学院物質理学研究科 助 教	量子スピン系の低エネルギー状態に関する数値的研究
森 川 良 忠	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	界面における構造、電子状態、および、反応過程の第一原理シミュ レーション
押 山 淳	東京大学工学系研究科 教 授	ハード及びソフトナノ物質の原子構造と電子物性
村 島 隆 浩	東北大学大学院理学研究科 助 教	高分子溶融体の要素変形を考慮したマルチスケールシミュレー ション
濱 本 雄 治	大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻 特任助教	グラフェンに担持した Pt クラスタに対する vander Waals 相互 作用の第一原理計算
今 田 正 俊	東京大学工学系研究科物理学専攻 教 授	スピン軌道相互作用と電子相関の協奏による新奇量子相の数値 的研究
舘 山 佳 尚	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	DFT 自由エネルギー計算手法を用いた電池・触媒界面の酸化還元 反応機構解析
常 行 真 司	東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 教 授	物質構造・電子状態の新しい第一原理シミュレーション手法の開 発と応用
矢 花 一 浩	筑波大学計算科学研究センター 教 授	極限的パルス光と物質の相互作用に対する実時間第一原理計算
岡 本 祐 幸	名古屋大学大学院理学研究科 教 授	拡張アンサンブル法による複雑系の研究
小 田 竜 樹	金沢大学理工研究域数物科学系 教 授	スピントロニクス材料の原子構造、磁気状態、および電子状態の 解析
大 谷 実	産業技術総合研究所 研究グループ付	電極電位一定の方法を用いた電気化学反応シミュレーション
川 島 直 輝	東京大学物性研究所 教 授	テンソルネットワーク法の並列化
大久保 毅	東京大学物性研究所 特任研究員	フラストレート磁性体におけるトポロジカル相転移の研究