

# 平成 26 年度後期 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
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	金属酸化物の酸化還元反応における担体効果シミュレーション
榊 原 寛 史	理化学研究所 特別研究員	遷移金属酸化物ヘテロ構造・超格子構造超伝導体の軌道純化理論に立脚した物質設計
大 戸 達 彦	大阪大学大学院基礎工学研究科 助 教	磁性電極を架橋する分子の熱電特性の第一原理計算
石 原 純 夫	東北大学大学院理学研究科 教 授	多自由度電子系における非平衡ダイナミクスの研究
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
大 野 隆 央	物質・材料研究機構 特命研究員	高イオン伝導物質の理論的設計
荒 川 直 也	理化学研究所創発物性科学研究センター 特別研究員	多軌道強相関電子系の輸送現象の微視的理論
内 田 尚 志	北海道科学大学 教 授	Cu <sub>3</sub> Au 型結晶構造を持つ Mn 規則合金の磁気構造と電子状態の温度依存性
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
能 川 知 昭	東邦大学医学部 講 師	多成分剛体球の稠密充填状態の並列 Wang-Lanadu 法による探索
三 浦 良 雄	京都工芸繊維大学工芸科学研究科 准教授	磁性薄膜における交換スティフネスの第一原理計算
本 山 裕 一	東京大学物性研究所 特任研究員	基板吸着 4He の数値解析
伏 屋 雄 紀	電気通信大学 准教授	熱電物質におけるスピン軌道相互作用の効果
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
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	14 族原子によるハニカムシートの構造と電子状態
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	金属電極にコンタクトした分子の幾何構造と磁性
柳 澤 将	琉球大学理学部物質地球科学科物理系 准教授	有機分子会合体や結晶の電子的性質に関する理論的研究
川 村 光	大阪大学理学研究科 教 授	地震の統計モデルの数値シミュレーション
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
古 賀 昌 久	東京工業大学 准教授	内部自由度のある系における超流動安定性
星 野 晋太郎	東京大学総合文化研究科 博士研究員	モンテカルロ法を用いたカイラルらせん磁性体の研究
利根川 孝	神戸大学大学院理学研究科 名誉教授	空間構造をもつ次元量子スピン系の数値的研究
田 中 宗	京都大学基礎物理学研究所 基研特任助教	フラストレーションのある統計力学模型における相転移の探求
田 村 亮	物質・材料研究機構 ポスドク研究員	スピン秩序構造の異方性と磁気熱量効果の関係の探索
福 島 孝 治	東京大学大学院総合文化研究科 准教授	有限次元模型のレプリカ対称性の破れの可能性





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
黒木和彦	大阪大学 教 授	ドーピングされたバンド絶縁体における非従来型超伝導メカニズムに関する研究
尾関之康	電気通信大学情報理工学研究科 教 授	カーネル法による動的スケージングの改良と非平衡緩和法への応用
渡邊 聡	東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 教 授	ナノ構造の電子およびイオン輸送特性の理論解析
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
斎藤峰雄	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
佐藤年裕	独立行政法人理化学研究所 基礎科学特別研究員	正方格子ハバード模型における反強磁性転移近傍の電気伝導の研究
古川 亮	東京大学生産技術研究所 助 教	不均一ソフトマター系のレオロジー
柳澤 将	琉球大学理学部物質地球科学科物理系 准教授	有機・金属界面で誘起される磁気分極に関する理論的研究
植田 暁子	筑波大学数理物質系 助 教	ジャンクションレストランジスタにおける不純物散乱
川村 光	大阪大学理学研究科 教 授	フラストレート磁性体における新奇秩序
小野 倫也	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	実空間差分法に基づく大規模第一原理電子状態・輸送特性計算手法の開発とシミュレーション
柳 有起	東京理科大学理工学部物理学科 助 教	1/5 周期欠損正方格子ハバード模型における反強磁性
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-
出倉 春彦	愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター 助 教	下部マントル鉍物の格子熱伝導率に対する鉄固溶効果の第一原理計算
諏訪 秀磨	東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 助 教	モンテカルロ法による効率的スペクトル解析法の開発と量子スピン系への応用
沖津 康平	東京大学大学院工学系研究科 助 手	X 線 n 波回折とタンパク質結晶構造解析における位相問題の研究
石井 史之	金沢大学理工研究域数物科学系 准教授	酸化物トポロジカル絶縁体の第一原理計算
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新奇秩序の探索
立川 仁典	横浜市立大学 教 授	水素結合型分子性機能物質における重水素効果の理論的解析
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
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固液界面の構造及び電子状態評価
芝 隼人	東京大学物性研究所 助 教	構造ガラスの超大規模シミュレーションによる静的動的不均一性の探索
館山 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
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
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
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
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
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

