

◎戦略課題1 「新量子相・新物質の基礎科学」

- P-1 高擬縮重電子状態を持つ系の電子動力学と光化学過程における波束の非断熱分岐の記述  
米原文博（東京大学）
- P-2 Parallel computational study of the free energy landscape of myosin II in the coupled sliding and binding process of the force-generation  
Qing Miao Nie（名古屋大学／分子科学研究所）†
- P-3 Numerical Studies on Nonequilibrium Processes in One-Dimensional Strongly Correlated Systems  
Hantao Lu（京都大学）†
- P-4 スピン系の厳密対角化パッケージの並列化と高精度化  
坂下達哉（東京大学）†
- P-5 トポロジカル絶縁体表面での超伝導相の安定性  
山地洋平（東京大学）†
- P-6 ALPS/diagonalizationの並列化とその強相関フェルミオン系への応用の試み  
五十嵐亮（東京大学）†
- P-7 多変数変分モンテカルロ法を用いた  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルグ模型の解析  
金子隆威（東京大学）†
- P-28 露わに相関したスレーター行列式を使用した量子モンテカルロ法  
大塚勇起（神戸大学）

◎戦略課題2 「次世代先端デバイス科学」

- P-8 Car-Parrinello 分子動力学法によるグラフェンの酸素プラズマエッチングの反応機構とその自由エネルギー障壁の決定  
小泉健一（東京大学）†
- P-9 ペロブスカイト型強誘電体における Rashba 効果の第一原理計算  
石井史之（金沢大学）
- P-10 実時間・実空間電子ダイナミクス法による  $C_{60}$  ナノ構造体の光学応答計算  
野田真史（分子科学研究所）†
- P-11 ナノ構造の交流伝導特性のシミュレーション  
笹岡健二（東京大学）†
- P-12 分割統治型実空間密度汎関数(DC-RGDFT)コードの性能評価  
河野貴久（東京大学）

### ◎戦略課題3 「分子機能と物質変換」

- P-13 膜タンパク質のフリップ-フロップ運動の自由エネルギー解析  
水口朋子（京都大学／分子科学研究所）†
- P-14 MODYLAS の自由エネルギー計算機能-熱力学的積分法  
藤本和士（名古屋大学）†
- P-15 遺伝的アルゴリズムを取り入れたタンパク質のフォールディングシミュレーション  
榮慶丈（名古屋大学／分子科学研究所）

### ◎戦略課題4 「エネルギー変換」

- P-16 トンネル移動における中間ブリッジ状態  
河津励（金沢大学／分子科学研究所）
- P-17 First-Principles Study of Fe/TiC Interfaces: Local-Stress and Local-Energy Distribution  
Sharma Vikas（産業技術総合研究所）†
- P-18 水溶液-電極界面系の構造・ダイナミクス・化学反応  
赤木和人（東北大学）

### ◎拠点研究課題

- P-19 A Domain Decomposition Method for Large-Scale DFT Electronic Calculations  
Truong Vinh Truong Duy（北陸先端科学技術大学院大学／東京大学）
- P-20 平面波基底第一原理計算コードの開発：入力形式の統一化  
吉澤香奈子（東京大学）
- P-21 合金でのナノ構造形成と熱伝導  
小西優祐（産業技術総合研究所）†

### ◎一般課題

- P-22 ハイブリッドDFTによるGaP固溶体の光学伝導度  
合田義弘（東京大学）
- P-23 異方性の動的制御による量子相転移の数値的解析  
安田真也（東京大学）†
- P-24  $Z_2$ ベリ-位相の量子モンテカルロ計算  
本山裕一（東京大学）†
- P-25 強誘電体の電気熱量効果の直接的な分子動力学計算  
西松毅（東北大学）

- P-26 第一原理計算を用いたFドープTiO<sub>2</sub>系のキャリア活性化率とTiOF<sub>2</sub>生成の熱力学  
神坂英幸（東京大学）
- P-27 有機分子の溶液中での電子移動に関する理論的研究  
臼井孝介（名古屋大学）