

尾崎研究室

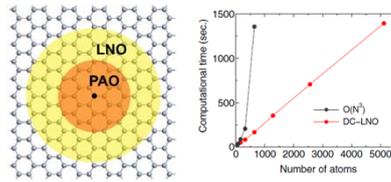


教授 尾崎 泰助

近年の計算機の発展に伴い、物質科学におけるコンピューターシミュレーションの重要性が高まっています。当研究室では基礎方程式から出発し、電子デバイス材料、二次元物質、物質表面などの現実物質系の特性を定量的に予測する新しい第一原理計算手法の開発を進めています。第一原理計算の観点から複雑な物質のあるがままの姿を理解し、そして予測していくことが私達の研究目標です。実験に先立つ新物質予測も大きな課題であり、最近ではハイスループット計算によって二次元物質の構造マップを作製し、多数の新構造の予測を行いました。意欲ある方と共に計算物質科学の地平をひろげていきたいと考えています。

大規模シミュレーション手法:

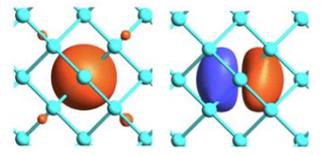
密度汎関数理論に基づきDirac方程式を数値的に解くことで、物質の安定性、磁気特性、電子伝導特性、光学特性等を定量的に計算することが可能です。また計算量が原子数に比例するO(N)法の開発により、従来は困難であった数千原子系の第一原理計算を実現しました。



TO, M. Fukuda, and G. Jiang, PRB 98, 245137 (2018).

最近接ワニ関数の理論:

密度汎関数理論に基づく第一原理計算の結果を解析する手法として、最近接ワニ関数の理論を構築。電子状態を原子軌道の観点から理解することが可能になりました。

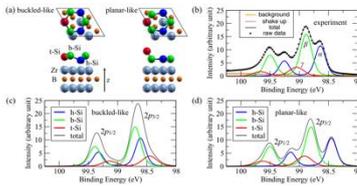


Si固体の最近接ワニ関数

TO, Phys. Rev. B **110**, 125115 (2024).

内殻電子の絶対束縛エネルギーの計算:

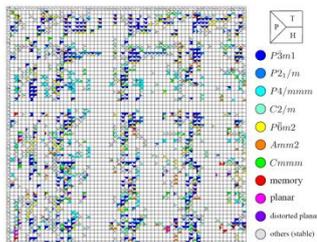
X線光電子分光法 (XPS) における内殻電子の絶対束縛エネルギーを高精度に計算できる新手法を開発し、ZrB₂上のシリセンのXPSを再現することで、長年の議論となっていた座屈構造を決定しました。



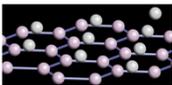
T. Ozaki and C.-C. Lee, PRL 118, 026401 (2017)
C.-C. Lee et al., PRB 95, 115437 (2017).

二次元AB₂構造の網羅探索:

未知の二次元構造を実験に先立って予測するために、AB₂組成を持つ二次元構造の網羅探索計算を実行し、多数の新構造を発見しました。



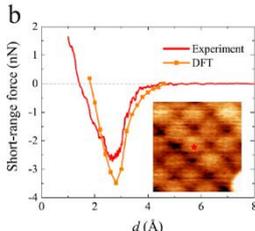
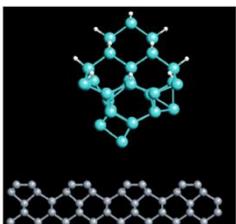
AgPt₂によるメモリ構造: Ag原子の位置が上下で双安定である。



M. Fukuda et al., Mater. Adv. 2, 4392-4413 (2021).

原子間力顕微鏡(AFM)の第一原理計算:

AFMの探針をコンピュータ内に再現し、ダイヤモンド(001)面との相互作用をシミュレーション。実験で観測された探針と表面原子間の相互作用を定量的に再現しました。



R. Zhang, M. Fukuda et al., Nano Lett. 25, 1101 (2025).

OpenMXの開発: 現実に近い状況を高精度にシミュレーションするためには効率的かつ高精度な計算手法が必要です。私たちは独自の的方法論に基づいたソフトウェアOpenMXを開発し、シミュレーションを行っています。

Welcome to OpenMX
open source package for Material scientist



日本、韓国、台湾、中国のコミュニティで連携しながら開発を進めています。

- What's new
 - The 6th OpenMX developer's meeting (Nov. 5-10, 2023)
 - Patch 3.9.9 to OpenMX Ver. 3.9 (Oct. 17, 2023)
- What is OpenMX?
- Download
- Manual of Ver. 3.9
- Manual of Ver. 3.8
- Technical Notes
- Video Lectures
- Publications
- OpenMX Forum
- OpenMX Viewer
- Workshop
- Databases of Results
- Databases of VPS and PAO
 - Ver. 2019
 - Ver. 2019 for core excitations
- ADPACK
- Miscellaneous informations
- Contributors
- Acknowledgment
- Opening positions
- Links



我々の開発したOpenMXは東大物性研だけでなく、世界中の研究者に広く活用され、様々な応用研究の基盤ソフトウェアとなっています。

<http://www.openmx-square.org/>

構成員:

(2025年2月時点)

- 尾崎泰助 (教授)
- 福田 将大 (助教)
- PD 1名
- D2 2名
- M2 2名
- 研究生 1名
- 事務補佐員 2名



研究室見学はいつでも歓迎です

Tel: 04-7136-3285

E-mail: t-ozaki@issp.u-tokyo.ac.jp

場所: 物性研A棟A421

