

尾崎研究室 Ozaki Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 第一原理電子状態計算における高精度・高速計算手法の開発
Development of efficient and accurate methods for first-principles electronic structure calculations
- 2 OpenMX の開発と公開
Development of the OpenMX software package
- 3 X線分光スペクトル計算手法の開発
Development of first-principles methods for X-ray spectroscopies
- 4 物質表面・2次元物質の第一原理電子状態計算
First-principles calculations of surfaces and two-dimensional structures



教授 尾崎 泰助
Professor OZAKI, Taisuke

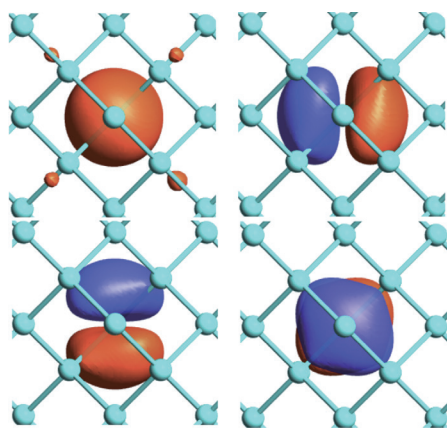
専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.

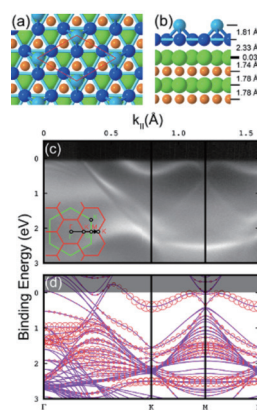
超並列計算機の発展と物質科学の精密化に伴い、第一原理電子状態計算の重要性が増している。我々は密度汎関数理論に基づき、現実に近い系をより精密に取り扱うための新しい計算手法・ソフトウェアパッケージ OpenMX の開発に取り組んでいる。汎用性の高い原子様基底関数法を基盤として、局在自然軌道に基づくオーダー N 分割統治法、修正再帰二分法による領域分割法、最小通信量を持つ高速フーリエ変換並列化法など、様々な高速計算手法を開発し、実験と直接比較できるシミュレーションを可能とした。近年は内殻電子の絶対束縛エネルギーの計算手法、最近接ワニエ関数法、機械学習ポテンシャル法、交換相関汎関数の開発に取り組み、第一原理計算のさらなる進展を目指している。また物質表面や二次元構造の第一原理シミュレーションにも取り組み、実験グループとの共同研究を行っている。

With the development of supercomputers and the refinement of materials science, the importance of first-principles electronic structure calculations has been increasing. We are engaged in developing a new computational method and software package, OpenMX, based on density functional theory, to precisely handle systems close to reality. Based on the versatile atomic-like basis function method, we have developed various efficient computational methods, such as the order-N divide-and-conquer method based on localized natural orbitals, the atom decomposition method by modified recursive bisection, and the Fast Fourier Transform parallelization method with minimal communication volume, enabling simulations that can be directly compared to experiments. Recently, we have been working on the development of calculation methods for the absolute binding energy of core electrons, the closest Wannier function method, machine learning potential methods, and the development of exchange-correlation functionals, aiming for further advances in first-principles calculations. We are also engaged in first-principles simulations of material surfaces and two-dimensional structures, conducting joint research with experimental groups.



最近接ワニエ関数法で得られた Si 固体のワニエ関数。原子基底の形状を保持している。

Wannier functions of Si bulk calculated by the closest Wannier function method, almost keeping the shape of atomic orbitals.



(a) 及び (b) 第一原理計算により求められた ZrB_2 上 Ge 層の二重三角格子構造。(c) 角度分解光電子分光の結果と、(d) バンド構造の計算結果が良く一致することから、構造モデルの妥当性が認められる。

(a), (b) Bitriangular structure of Ge determined by DFT calculations. (c) Angle-resolved photoemission spectrum (ARPES) of the bitriangular structure. (d) Unfolded band structure of the bitriangular structure which well reproduces the ARPES measurement.



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/ozaki_group.html