

バラザ ロペス研究室

Barraza-Lopez Group

外国人客員教授 バラザ ロペス サルバドール
Visiting Professor BARRAZA- LOPEZ, Salvador

材料物理学者として、実験的研究に従事する研究者や解析的手法を重視する理論家との交流を軸に研究を進めている。これまで二次元材料の物理的特性に着目し、構造と機能の相関解明において重要な貢献を果たしてきた。これらの研究成果は、後に二次元強誘電体という新たな分野への発展がある。この研究において、局在基底を用いる密度汎関数理論コード SIESTA の改良を実施した。尾崎教授は、局在基底に基づく第一原理計算ツール OpenMX コードの主要開発者であり、物性研においては SIESTA コードに光学的第二次高調波発生の強度計算手法を実装した後に、さらに OpenMX への移植を計画している。また、物性研内で二次元材料に取り組む研究者との交流を一層深めることを期待している。

I am a materials physicist who loves conversing with experimentalists and with theoreticians who have analytical backgrounds. Most of my work is concerned with the properties of two-dimensional materials, and I was an early proponent of structural modifications of those materials (those ideas eventually spanned a field of two-dimensional ferroelectrics). In reaching those conclusions, I have made modifications to the SIESTA density functional theory code, which relies on a localized basis set. Professor Taisuke Ozaki is the lead developer of the OpenMX code, a tool for first principles calculations based on another type of localized basis. At Tokyo, I intend to finalize an implementation of optical second harmonic generation into the SIESTA code, and to port it into OpenMX. I also look forward to interacting with Professor Ozaki and additional colleagues at the ISSP working on two-dimensional materials.