

理学系
物理学専攻

尾崎研究室



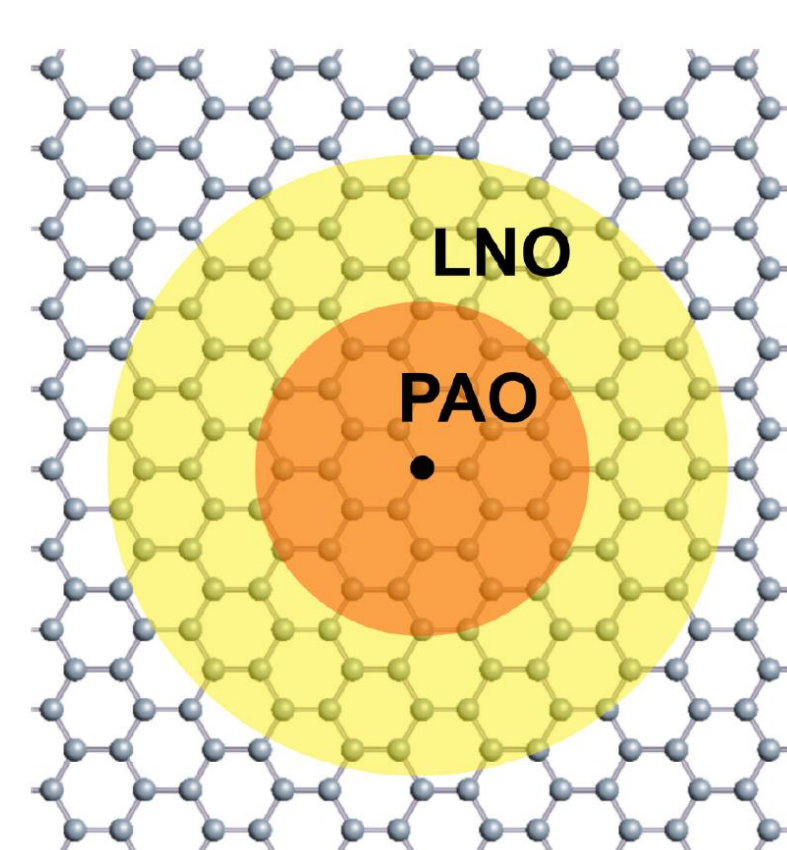
教授 尾崎泰助

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、鉄鋼材料、リチウムイオン電池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。

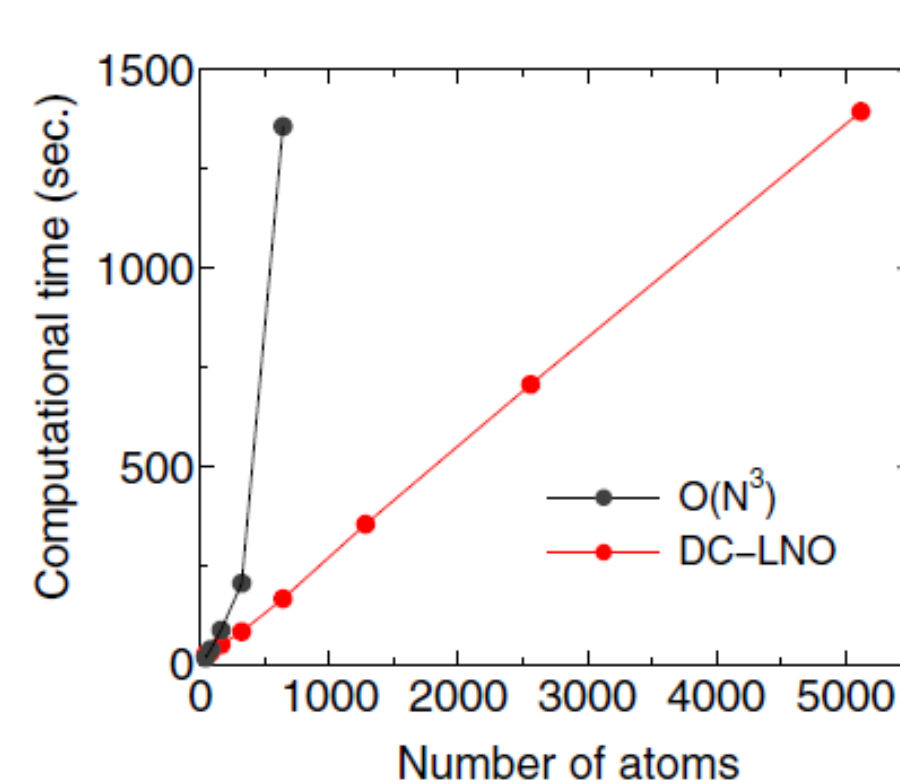
大規模シミュレーション手法:

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。

局在自然軌道を導入した
 $O(N)$ 分割統治法概念図



$O(N)$ 法と通常の $O(N^3)$ 法の
計算時間の比較



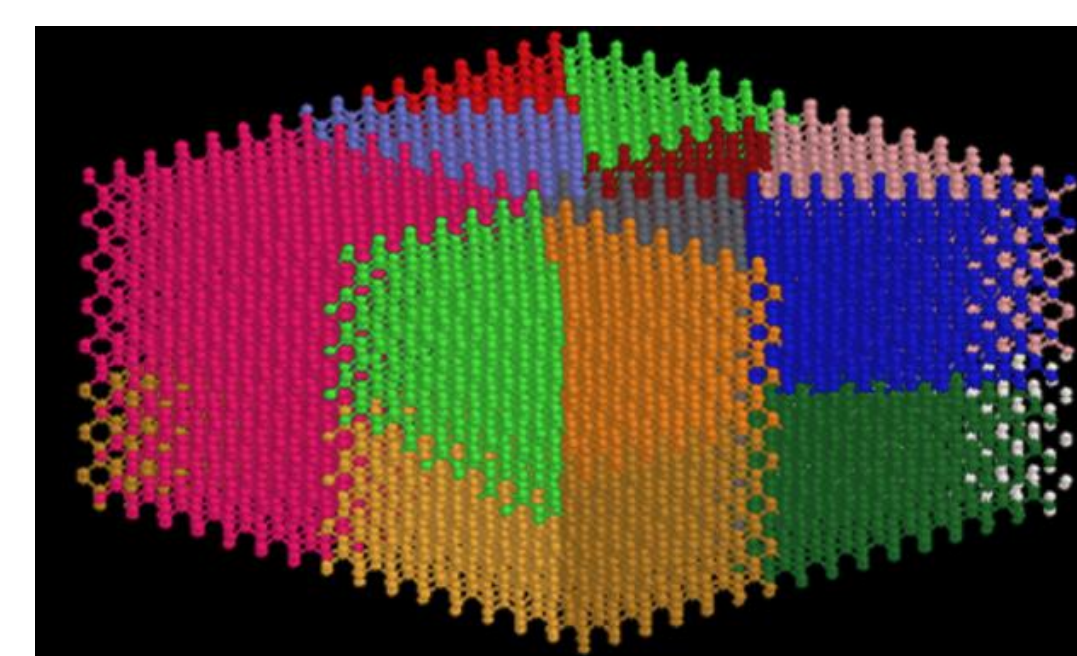
T. Ozaki, M. Fukuda, and G. Jiang, PRB 98, 245137 (2018).

超並列計算: 物性研究所「ohtaka」に代表される計算機は十万コア以上から構成される超大型並列計算機です。このような大規模な計算機を効率的に利用するためには計算を分散させて実行します。通信効率を高めた空間分割と高速フーリエ変換の新しい並列化手法を開発し、超並列計算を実現しました。

物性研究所に設置されたスパコン「Ohtaka」

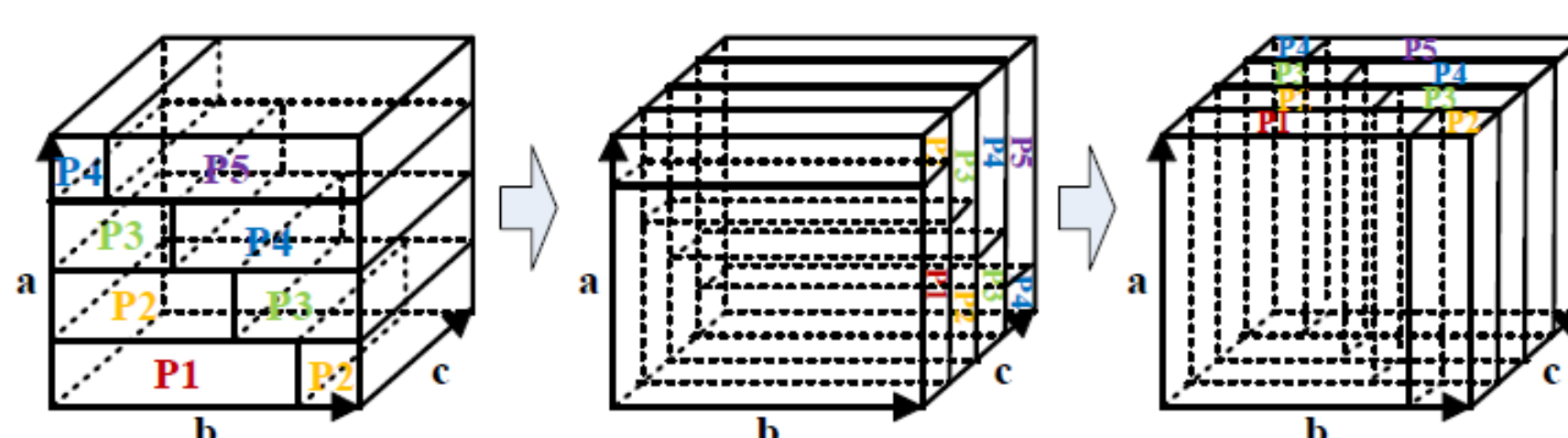


再帰二分法と慣性モーメントテンソルに基づく領域分割



T.V.T. Duy and T. Ozaki, CPC 185, 777 (2014).

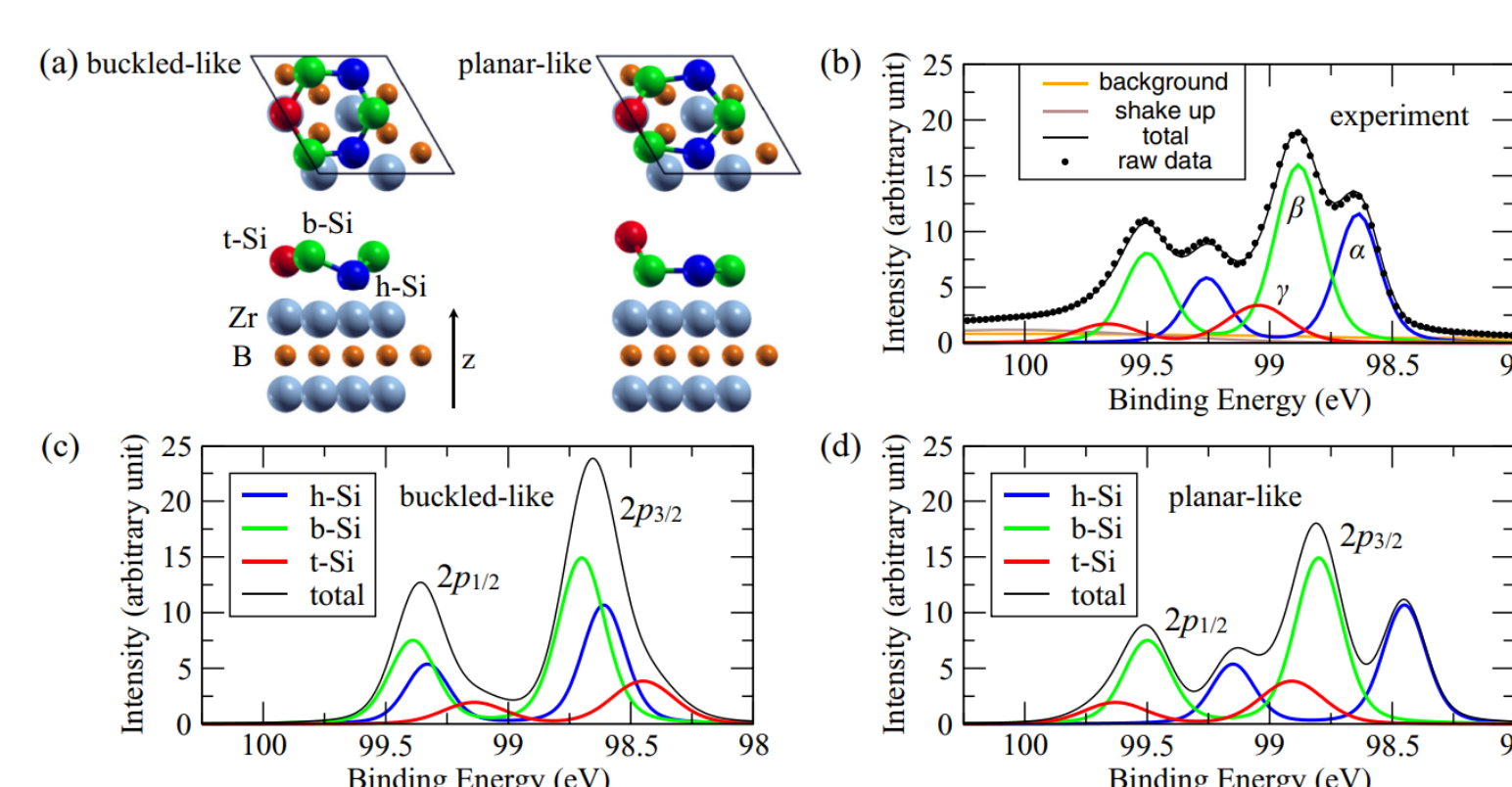
最小通信量を持つ三次元FFTの領域分割法の提案



T.V.T. Duy and T. Ozaki, CPC 185, 153 (2014).

内殻電子の絶対束縛エネルギーの計算:

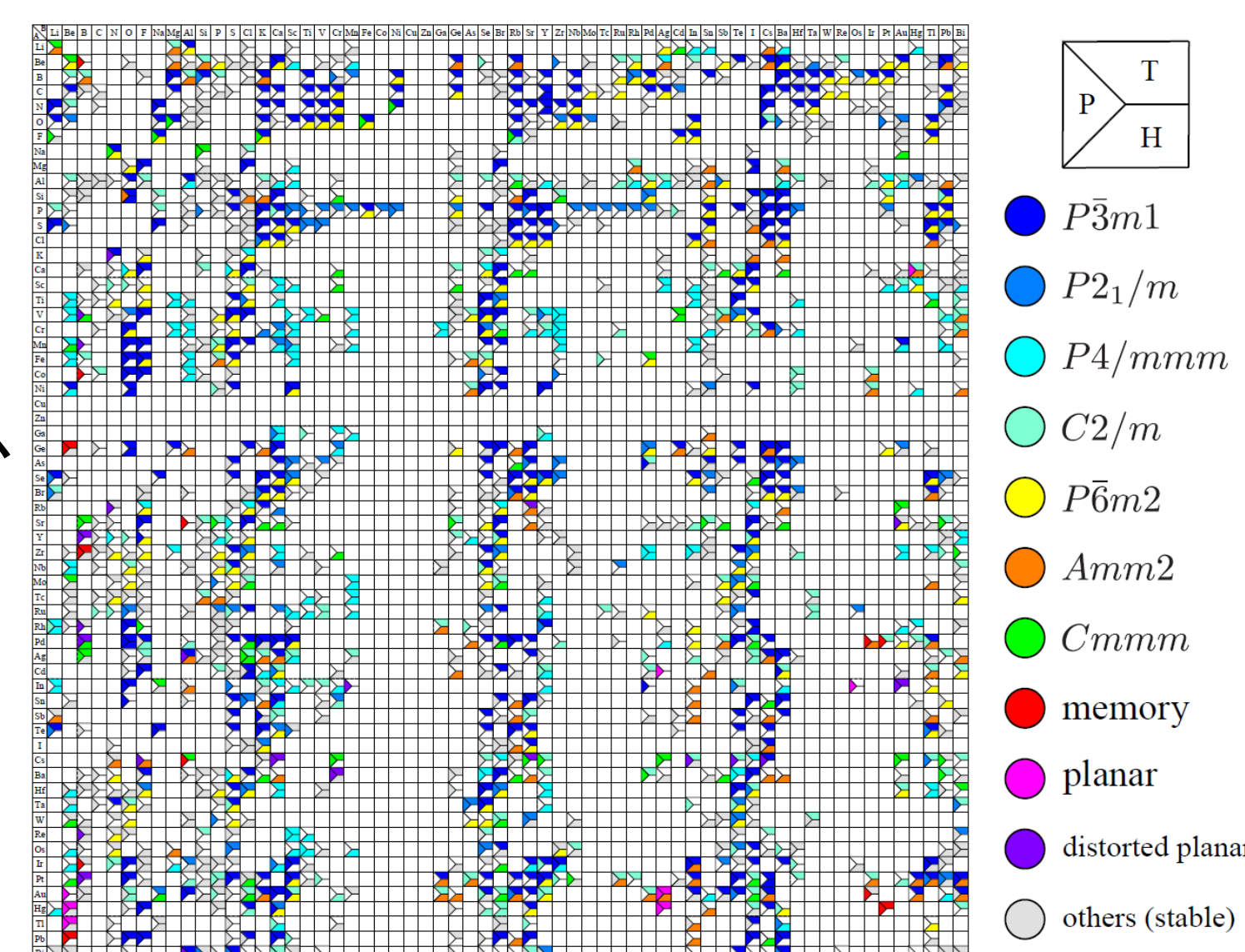
X線光電子分光法 (XPS) における内殻電子の絶対束縛エネルギーを高精度に計算できる新手法を開発し、 ZrB_2 上のシリセンのXPSを再現することで、長年の議論となっていた座屈構造を決定しました。



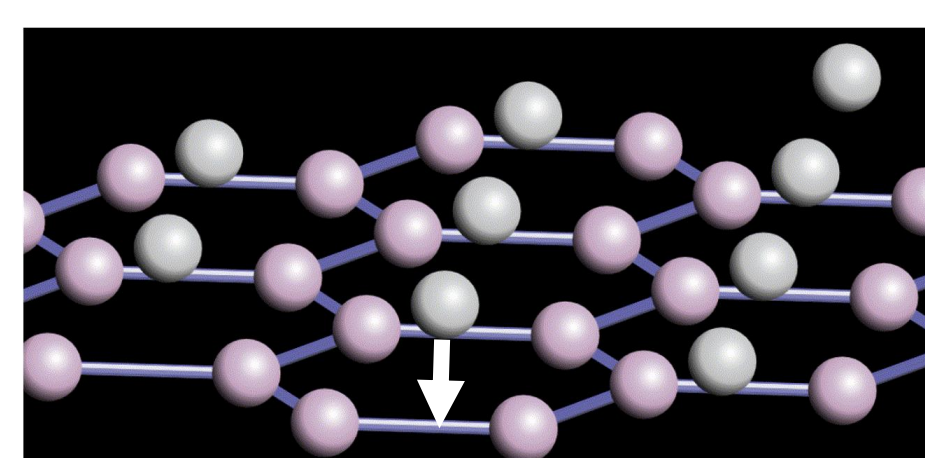
T. Ozaki and C.-C. Lee, PRL 118, 026401 (2017).
C.-C. Lee et al., PRB 95, 115437 (2017).

二次元 AB_2 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、 AB_2 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。

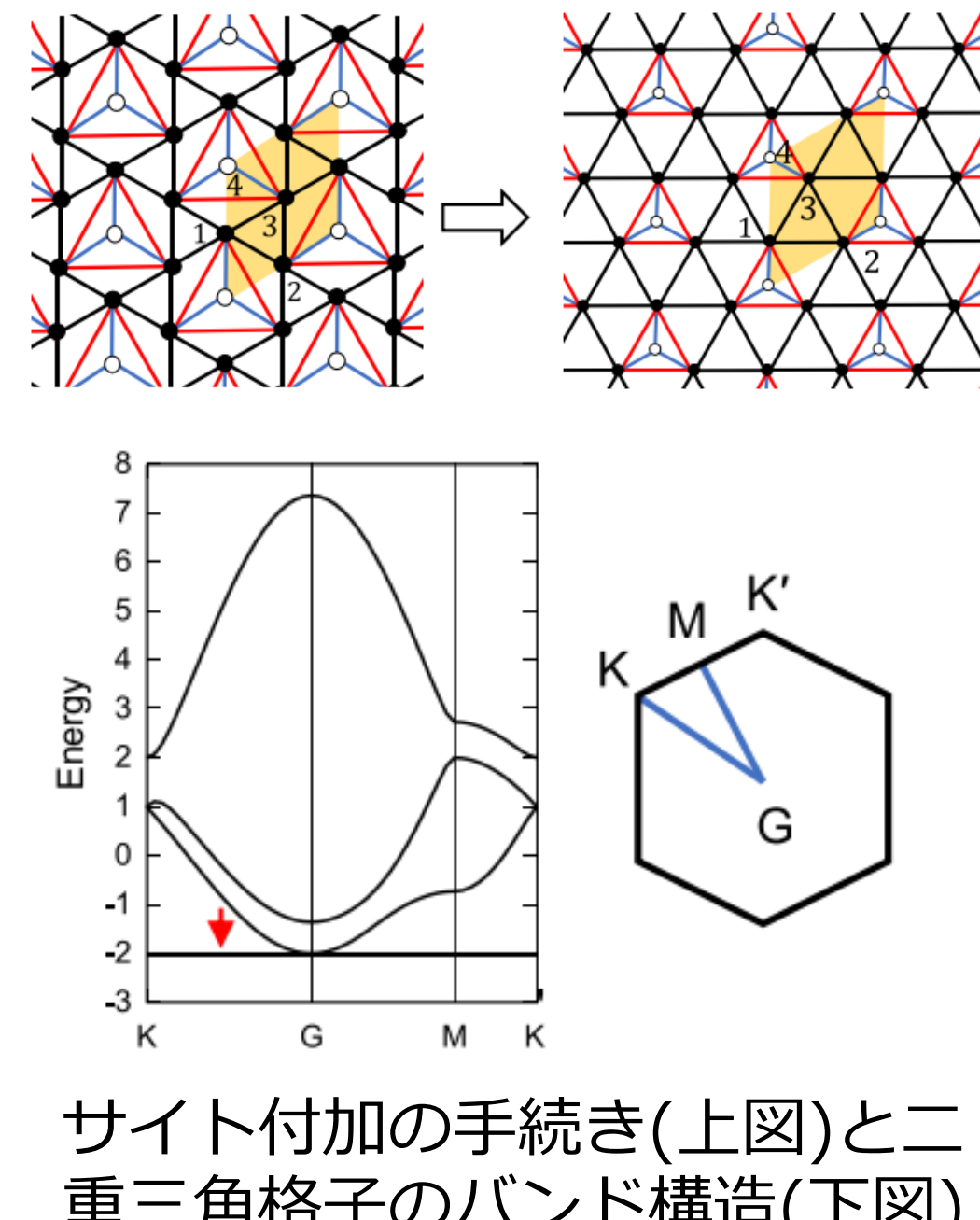
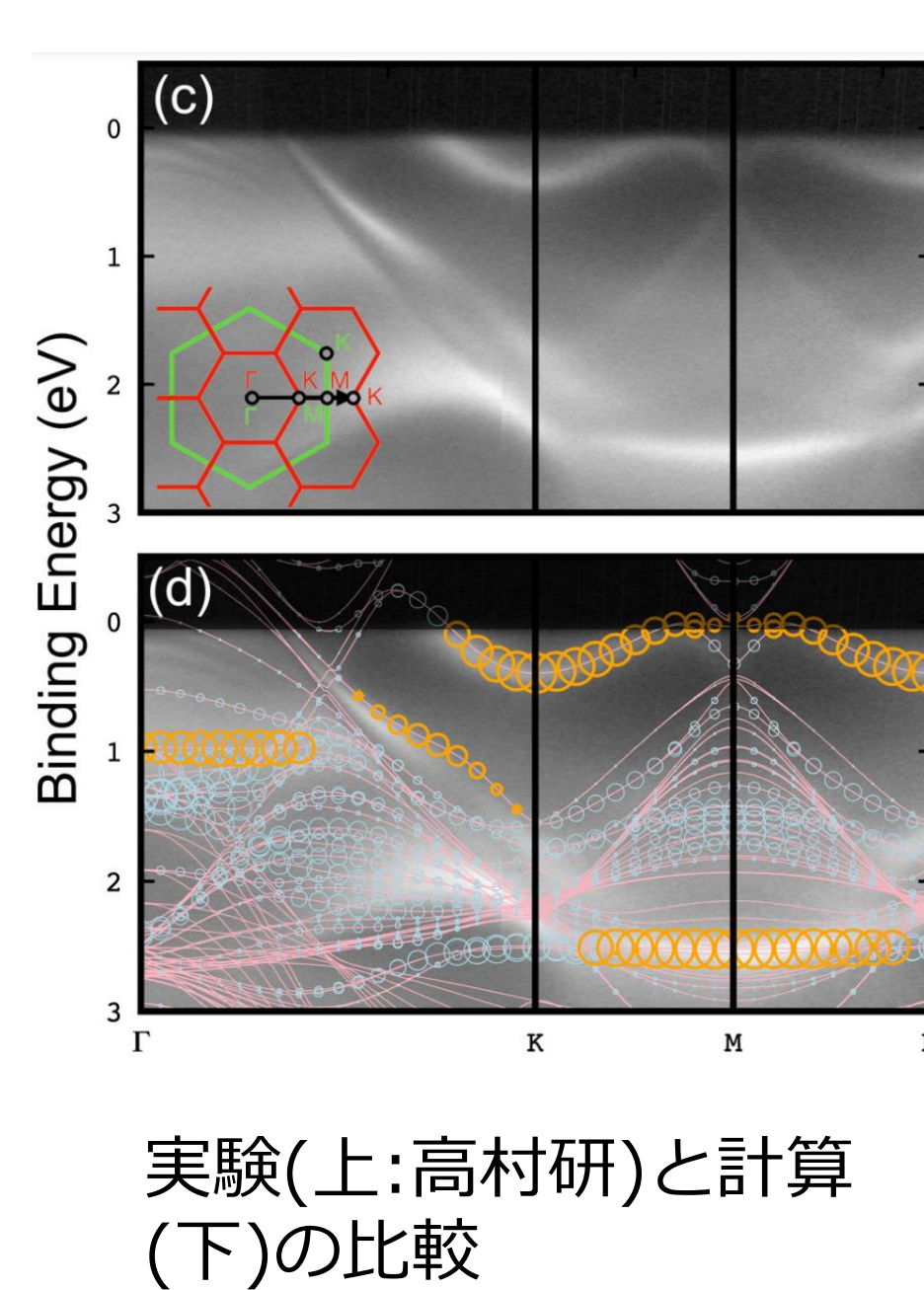
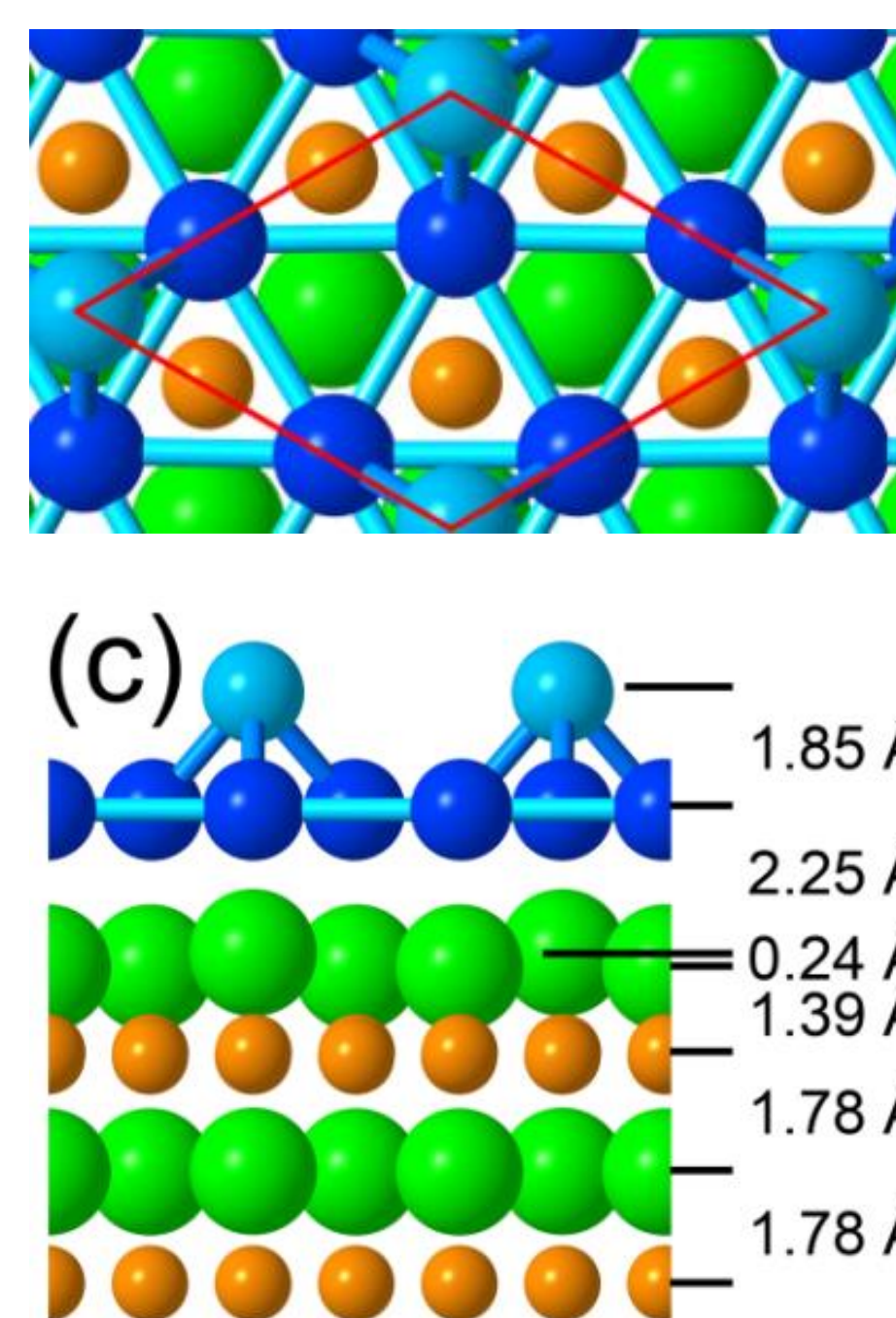


$AgPt_2$ による
メモリ構造:
 Ag 原子の位置
が上下で双安定である。



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

新しい二次元Ge構造の発見: 実験グループと共同で ZrB_2 上にシリコンに二重三角格子構造が形成することを発見。さらに二重三角格子の電子構造にカゴメ格子に由来するフラットバンドが埋め込まれていることを理論的に明らかにしました。



実験(上:高村研)と計算
(下)の比較

サイト付加の手続き(上図)と二重三角格子のバンド構造(下図)

C.-C. Lee et al., PRB 100 (4), 045150 (2019).
A. Fleurence et al., PRB 102, 201102 (2020).
T. Ogata et al., PRB 103, 205119 (2021).

第一原理計算で得られた
構造モデル

こんな人が私たちの研究室に向いています

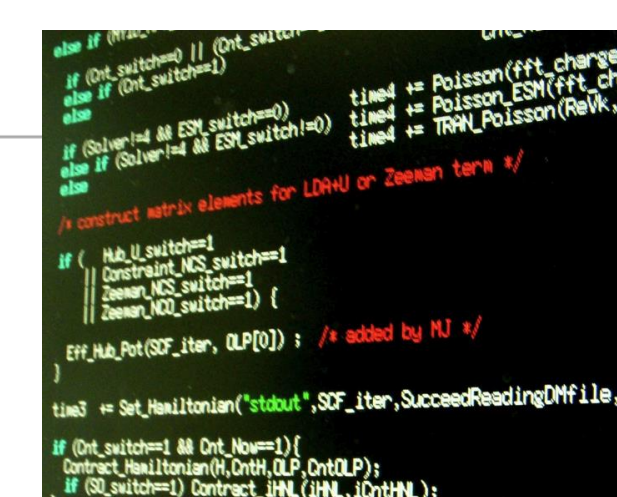
- ・現実物質の性質を理論的に解明したい
- ・物理、数学、プログラミングが好き
- ・学際領域にチャレンジしたい

Welcome to OpenMX

Open source package for Material explorer

Contents

- What's new
 - Winter School in Beijing (Dec. 19-23, 2016)
 - 2nd Developer's Meeting in Daejeon (Nov. 23-25, 2016)
 - Release of OpenMX Viewer (Aug. 19, 2016)
 - Release of OpenMX Ver. 3.8 (Apr. 3, 2016)
- What is OpenMX?
- Download
- Manual of Ver. 3.8
- Manual of Ver. 3.7
- Technical Notes
- Video Lectures
- Publications
- OpenMX Forum
- OpenMX Viewer
- Workshop
- Database of VPS and PAO Ver. 2013
- ADPACK
- Miscellaneous informations
- Contributors



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。

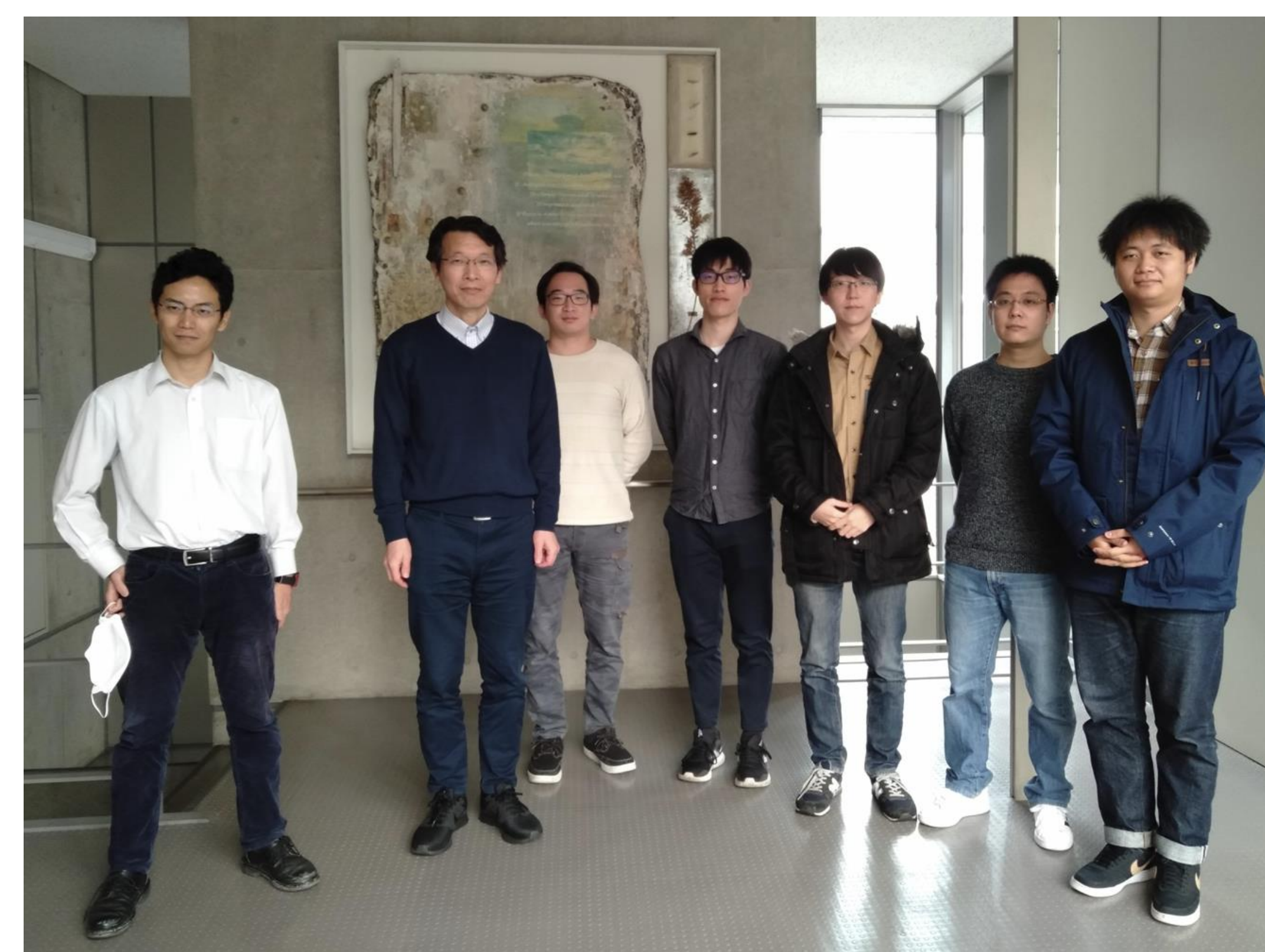
我々の開発したOpenMXは東大物性研だけでなく、世界中の研究者に広く活用され、様々な応用研究の基盤ソフトウェアとなっています。

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

構成員:

(2023年4月時点)

尾崎泰助 (教授)
福田 将大 (助教)
D3 1名
D1 2名
M1 2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