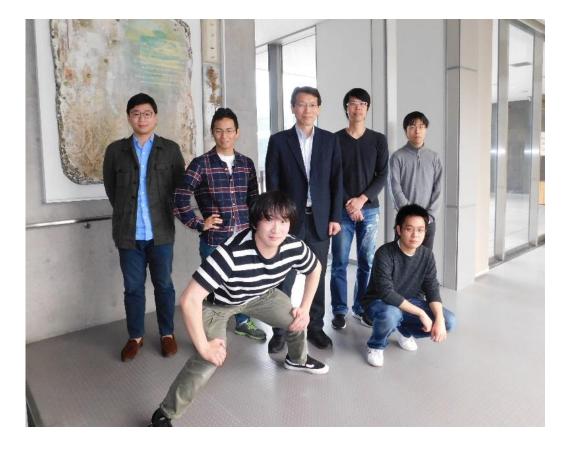
## 尾崎研究室

### 第一原理からの物質デザイン

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。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。



構成員 尾崎 泰助 (教授) 河村 光晶 (助教) 福田 将大 (助教) ポスドク2名 M1 二名

本研究室は2017年6月にスタートしました。学生受け入れは二回目となります。

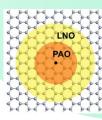
ご興味のある方はお気軽にご連絡ください。 t-ozaki@issp.u-tokyo.ac.jp WEB: https://t-ozaki.issp.u-tokyo.ac.jp/

### 第一原理電子状態 計算手法の開発

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

オーダーN法

OpenMXの開発



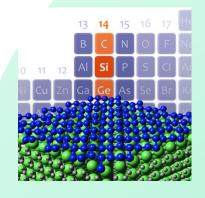


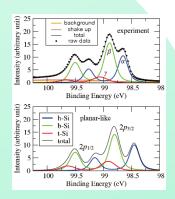


超並列計算機による大規模計算

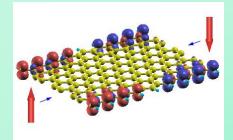
### 第一原理シミュレーション

シリセンと光電子分光





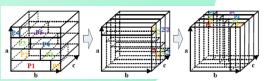
グラフェンナノリ ボンの二重スピン フィルター効果



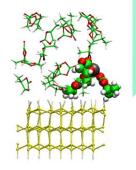
超並列計算機

超並列計算アルゴリズム





リチウムイオ ン電池のシミ ュレーション



●方程式をいかに解くか

高精度化、大規模化、超並列化

現実世界との対比

新規二次元物質(グラフェン、シリセン)、リチウムイオン電池、熱電材料、鉄鋼材料: 構造・ダイナミクスと機能の相関

物質デザインへ向けて

方程式をいかに解くか高精度化、大規模化、超並列化

•現実世界との対比

新規二次元物質(グラフェン、シリセン)、リチウムイオン電池、熱電材料、鉄鋼材料: 構造・ダイナミクスと機能の相関

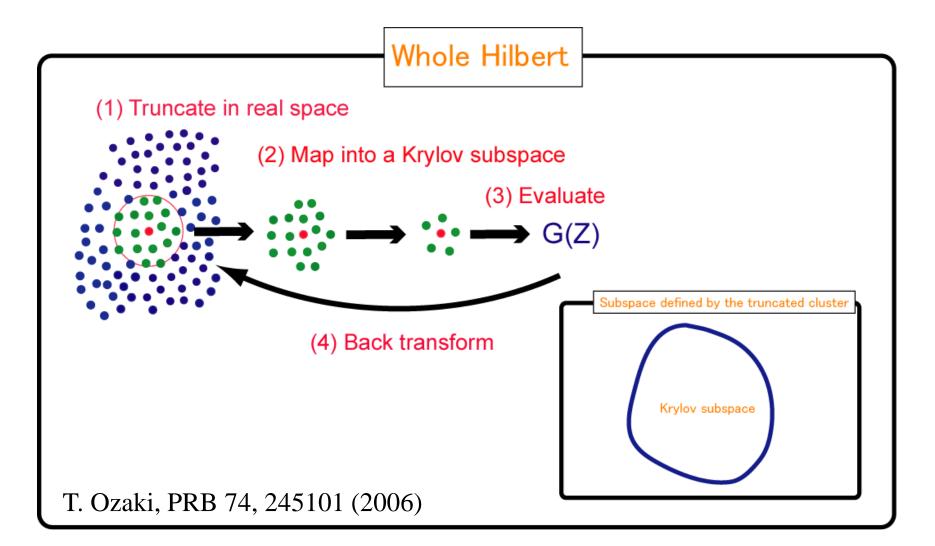
物質デザインへ向けて

### 新計算手法の開発

```
2000 block BOP法の開発 PRB 59, 16061, PRB 61, 7972
2001 ab initio recursion 法の開発 PRB 64 195126
    recursion法に基づくO(N)逆行列計算法の開発 PRB 64, 195110
2001
2003 変分基底法の開発 PRB 67, 155108, PRB 69, 195113, JCP 121, 10879
2005 LCPAO法の高精度実装法の開発 PRB 72, 045121
2005 O(N) LDA+U法の開発 PRB 73, 045110
2006 O(N) Krylov 部分空間法の開発 PRB 74, 245101
2007 高速・高精度Green関数積分法の開発 PRB 75, 035123
2008 スピン方位制約条件付きノンコリニア密度汎関数法の開発 web notes
2009 高速二電子積分法の開発 JCP 130, 124114
2009 高速球ベッセル変換法の開発 CPC 181, 277
2010 高精度非平衡グリーン関数法の開発 PRB 81, 035116
2011 高並列化O(N<sup>2~</sup>)法の開発 PRB 82, 075131
2011
     O(N)厳密交換汎関数法の開発 PRA 83, 032515
2012 O(N)法+有効媒質法の開発
                          JCP 136, 134101
2014 O(N)法の超並列化手法の開発
                            CPC 185, 777
2014 3D-FFTの超並列化手法の開発
                             CPC 185, 153
2014 大規模NBO解析手法の開発
                           JCP 140, 244105
2016 ∆-gauge 解析
                           Science 351, aad3000
2017 内殻電子の絶対束縛エネルギー PRL 118, 026401
```

# オーダーN Krylov 部分空間法

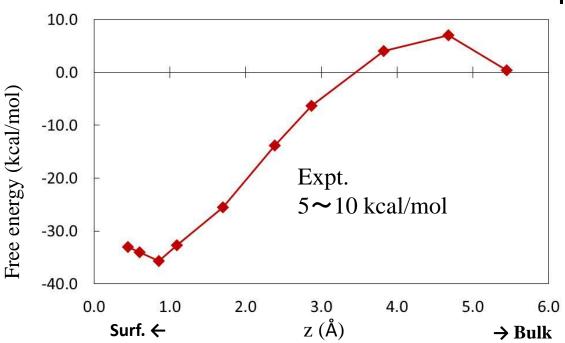
全ヒルベルト空間を二段階で部分空間に射影する。

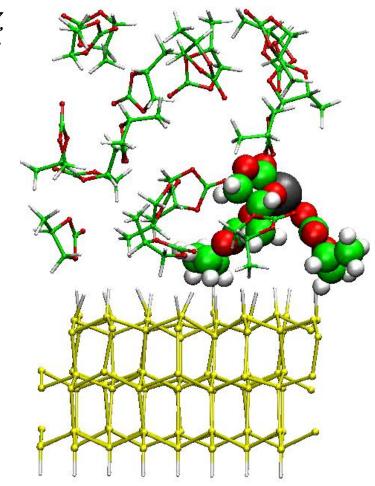


### Liイオンの脱溶媒和過程における自由エネルギー解析

日産アーク&産総研との共同研究





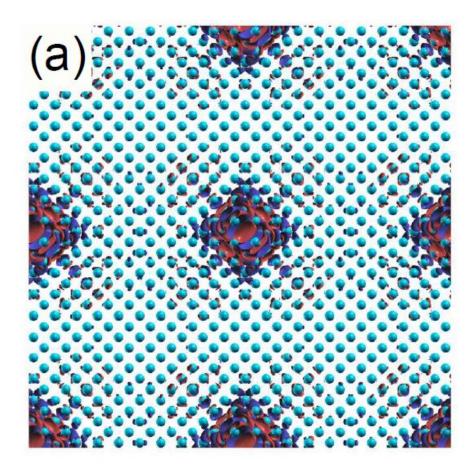


Calculation model of H-Si(111) anode-PC solvent with Li<sup>+</sup> interface (389 atoms).

- T. Ohwaki et al., J. Chem. Phys. 136, 134101 (2012).
- T. Ohwaki et al., J. Chem. Phys. 140, 244105 (2014).
- T. Ohwaki et al., PCCP 20, 11586 (2018).

### 固体における内殻電子絶対束縛エネルギーの 第一原理計算手法の開発

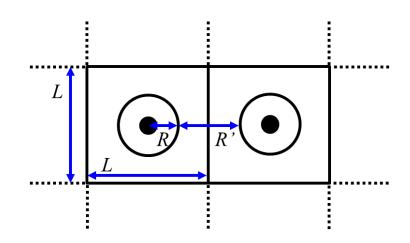
$$E_{\rm b} = E_{\rm f}^{(0)}(N-1) - E_{\rm i}^{(0)}(N) + \mu_0$$



ペナルティ汎関数法

$$E_{\rm f} = E_{
m DFT} + E_{
m p}$$

厳密クーロンカットオフ法



T. Ozaki and C.-C. Lee, Phys. Rev. Lett. 118, 026401 (2017)

### Open Source package for Material explorer

2000 Start of development

2003 Public release (GNU-GPL)

2003 Collaboration:

AIST, NIMS, SNU, KAIST, JAIST, Kanazawa Univ., CAS, UAM, NISSAN, Fujitsu Labs.



2017 18 public releases Latest version: 3.8 汎用第一原理電子状態計算ソフトウエアを 国際連携により開発・維持。国内外で広く 活用されている。

- オーダーN, 低次スケーリング法
- ノンコリニア磁性
- スピン軌道相互作用
- 非平衡グリーン関数法による電気伝導
- Berry位相による電気分極
- 最局在化Wannier関数
- 有効遮蔽体(ESM)法による電場印加
- NEB法による反応経路探索
- バンドunfolding法
- TH法によるSTM解析 等

http://www.openmx-square.org

・方程式をいかに解くか

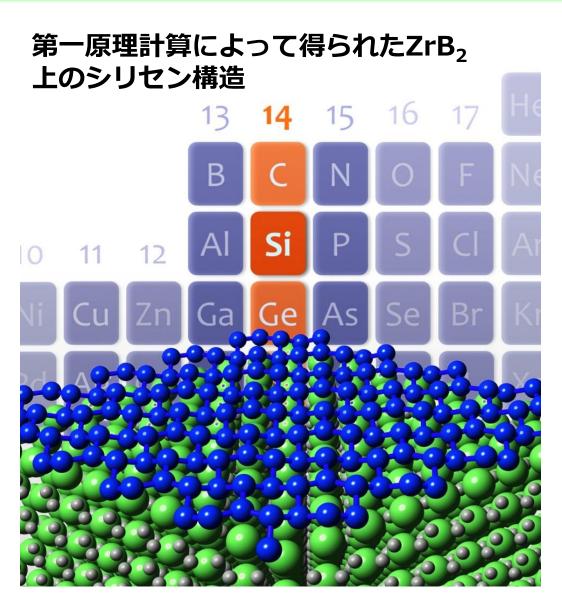
高精度化、大規模化、超並列化

•現実世界との対比

新規二次元物質(グラフェン、シリセン)、リチウムイオン電池、熱電材料、鉄鋼材料: 構造・ダイナミクスと機能の相関

物質デザインへ向けて

# 実験との共同研究によりZrB<sub>2</sub>上のシリセン構造と電子状態を解明



### シリコンテクノロジ(IMEC)の ロードマップ 2017年 14nm

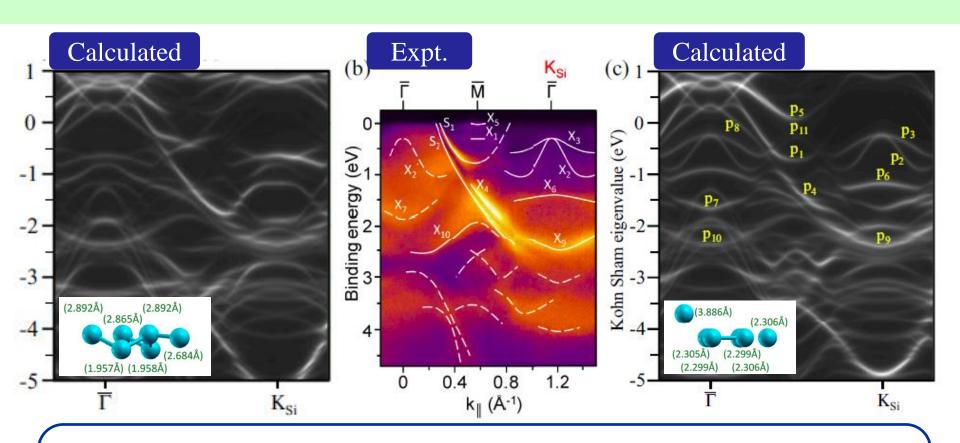
2018年 10nm 2020年 5nm 2023年 3nm 2025年 2nm 2027年 14Å

シリコンテクノロジーは近い将来 原子レベルでの制御が必要な段階 に到達する。そこではシリコンは 通常のダイヤモンド構造でない可 能性がある。

我々は実験との共同研究により、 その様な新しい構造の一つとして シリセン構造を同定した。

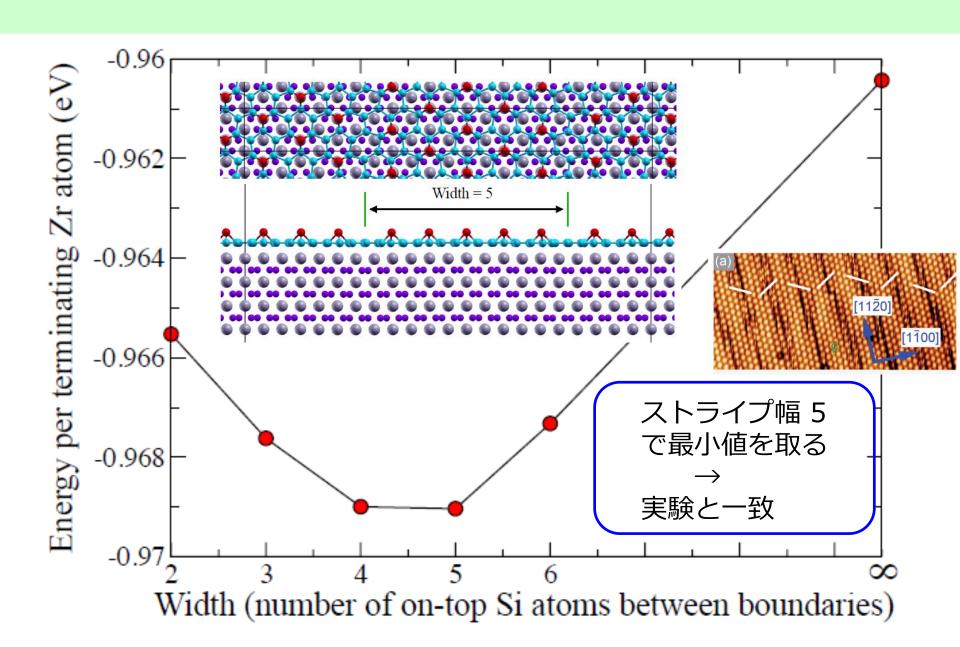
A. Fleurence et al., PRL 108, 245501 (2012); C.-C. Lee et al., PRB 90, 075422 (2014); C.-C. Lee et al., PRB 95, 115437 (2017).

### 角度分解光電子分光スペクトルとバンド構造の比較



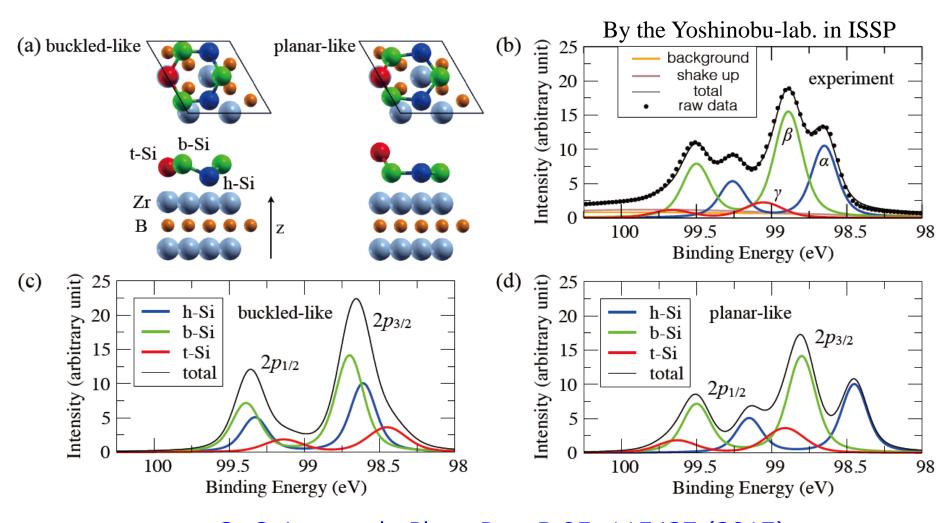
The ARPES intensity spectrum is well reproduced by the band structure of planar-like structure more than that of the buckled like structure, especially for  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $X_2$  and  $X_3$  bands.

## ストライプ構造の大規模第一原理計算



### XPS of Si-2p: 実験と計算の比較

#### XPSの実験結果はPlanar様構造の計算スペクトルと定量的に良く一致



C.-C. Lee et al., Phys. Rev. B 95, 115437 (2017).

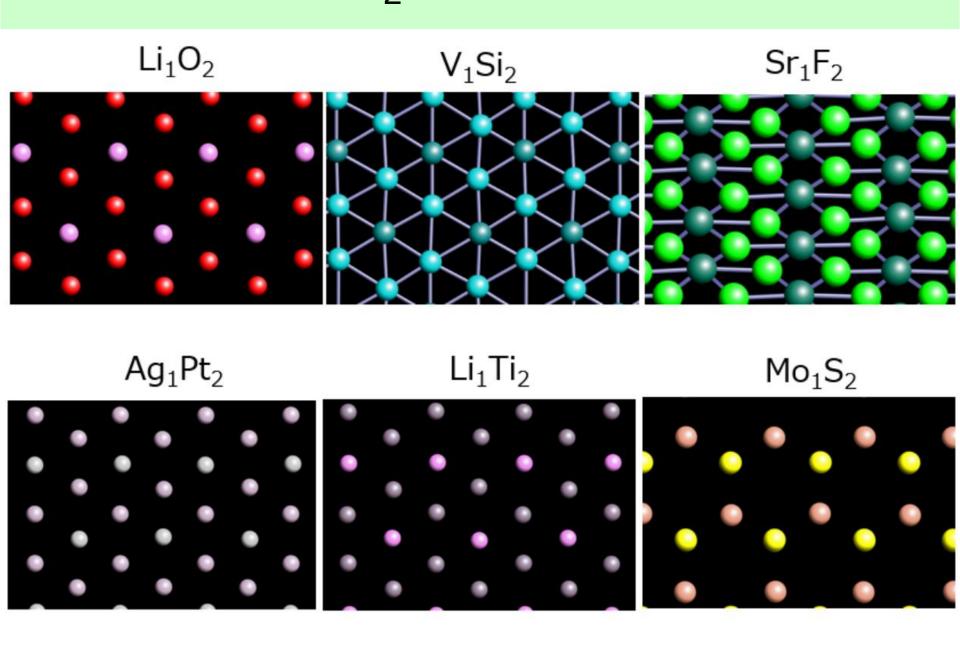
方程式をいかに解くか高精度化、大規模化、超並列化

•現実世界との対比

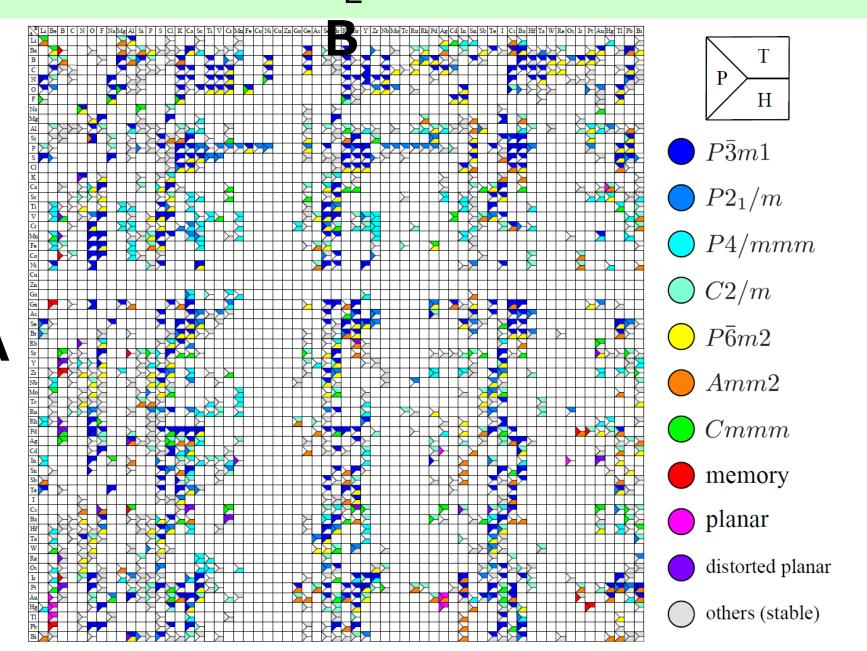
新規二次元物質(グラフェン、シリセン)、リチウムイオン電池、熱電材料、鉄鋼材料: 構造・ダイナミクスと機能の相関

物質デザインへ向けて

## 二次元AB<sub>2</sub>構造の網羅的探索



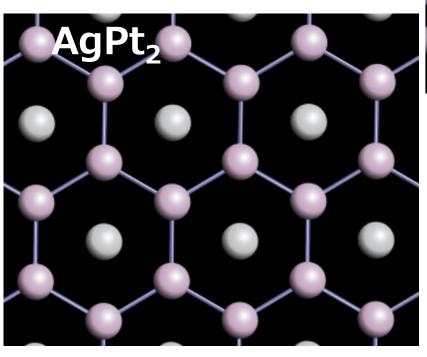
# AB<sub>2</sub>構造マップ

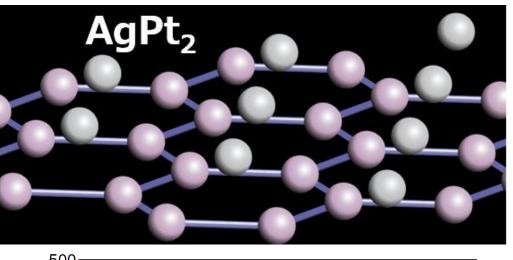


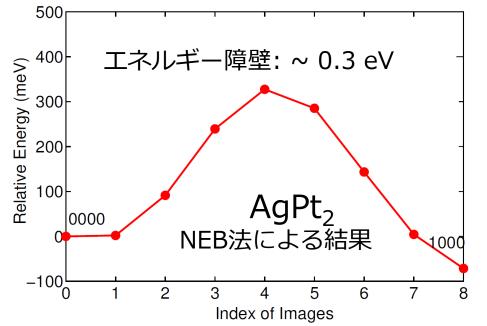
## メモリ構造と双安定性

元素B=AI, Cu, Cd, Ptの場合、いくつかの元素Aに対してメモリ構造が準安定構造となる

面直から見ると元素Aが三角格子を元素Bが蜂の巣格子を取るが、元素Aは元素Bの蜂の巣格子と同一平面上に存在しない。







### こんな方にお勧め

- 現実物質の性質を理論的に解明したい
- 生物、化学、物理、数学、計算機科学の学際 領域にチャレンジしたい
- 新しいアルゴリズムを考えたり、複雑なプログラミングに興味がある
- 実験グループと共同して、新しい現象を理論的 に解明したい
- 勉強したことを社会で活かしたい

ご興味のある方はお気軽に来て下さい。

尾崎居室 A424

学生居室 A420