

# 尾崎研究室

## 第一原理からの物質デザイン

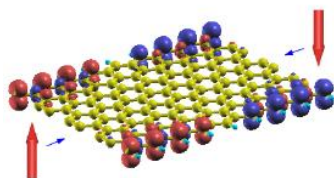
近年の計算機の発展に伴い、物質科学におけるコンピューターシミュレーションの重要性が高まっています。当研究室では基礎方程式から出発し、電子デバイス材料、鉄鋼材料、リチウムイオン電池などの現実物質系の特性を定量的に予測する新しい第一原理計算手法の開発を進めています。意欲ある方と共に計算物質科学の地平をひろげていきたいと考えています。

**OpenMXの開発:** 独自手法に基づく汎用第一原理計算プログラムを開発。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/>



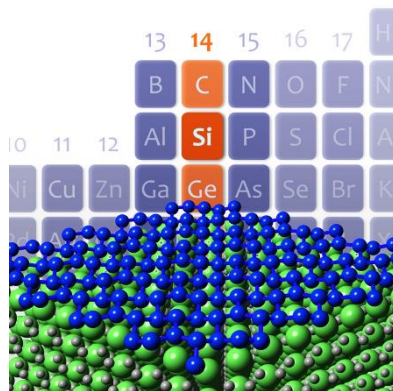
### 新規スピフィルターの提案

磁壁構造を持ったジグザググラフェンナノリボンが二重スピフィルターとして機能することを理論的に予測しました。

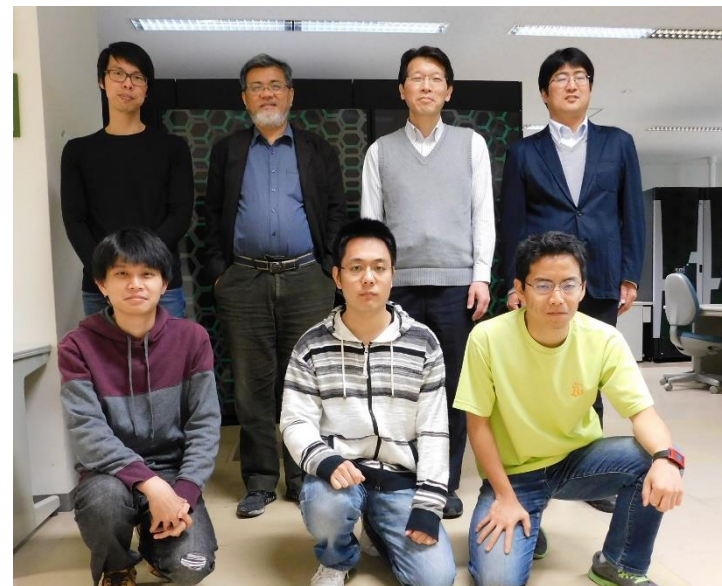


PRB 81, 075422 (2010).

**新しい二次元シリコン構造の同定:** 実験グループと共同でシリセン構造の同定に初めて成功しました。



PRL 108, 245501 (2012); PRB 95, 115437 (2017).



構成員 尾崎 泰助 (教授)  
河村 光晶 (助教)  
ポスドク三名

本研究室は2017年6月にスタートしました。学生受け入れは今回が初めてとなります。

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/>

# 尾崎研の挑戦

---

- 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

逆問題への挑戦、情報科学との融合

# 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
- 物理、数学、プログラミングが好き
- 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
- 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