

数物科学専攻	研究分野	シミュレーション科学	Lab. ID MP17
研究室Webサイト	<a href="http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/home1.html">http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/home1.html</a> <a href="http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/oda-web/index.html">http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/oda-web/index.html</a> <a href="http://hal.s.kanazawa-u.ac.jp/">http://hal.s.kanazawa-u.ac.jp/</a>		
<b>研究課題の概要</b>			
<p>計算科学の最先端研究を実施している。計算物性グループ: 固体物理の電子状態計算手法を用いて半導体、磁性体、超伝導体、カーボン新材料などの物性のデザインに関する研究を行う。計算ナノ科学グループ: 第一原理分子動力学やモンテカルロ法を用いて磁性や結晶成長、表面・界面物理やナノ科学などの物性の解析に関する研究を行う。計算バイオ科学グループ: 分子動力学法やモンテカルロ法を用いてタンパク質や生体分子、バイオ科学や生物物理学に関する研究を行う。</p>			
<b>博士前期課程/後期課程院生の指導方針、具体的なカリキュラム、研究室での活動等</b>			
<p>博士前期課程では、講義の他、研究室のゼミに参加する。具体的な研究テーマを決め研究を行い修士論文を執筆する。博士後期課程では、主任指導教員が中心となり指導し、博士論文を執筆する。</p>			
<b>研究室生活の紹介等</b>			
<p>各自PCを使い研究等を行います。また、他大学等のスーパーコンピュータを使って大規模なシミュレーションができます。</p>			
<b>教員からのメッセージ</b>			
<p>計算科学は、実験科学・理論科学に次ぐ第3の科学です。この新しい科学に意欲的に挑戦する学生を期待しています。</p>			
<b>最近(過去3年間+必要に応じて)の修士論文題目</b>			
修了年月	タイトル		
2017.9	Development of classical molecular dynamics for magnetic oxygen systems (磁性酸素系に対する古典分子動力学の開発)		
2017.9	Study of CO adsorption on Ni(111) surface using van der Waals density functional (ファン・デル・ワールス密度汎関数を用いたCO吸着Ni(111)表面の研究)		
2017.9	薄膜・界面系におけるスピン軌道相互作用の第一原理的研究		
2017.9	First-principles study on electronic and magnetic structures of nickel cobaltite spinel (ニッケルコバルトスピネルの電子構造および磁気構造に関する第一原理的研究)		
2017.3	粗視化モデルによる脂質膜の自己組織化過程と形状変化に関する理論的研究		
2017.3	III-V族化合物半導体におけるスピン軌道分裂の第一原理的研究		
2017.3	結晶中陽電子消滅のシミュレーション		
2017.3	Gö-likeモデルを用いたタンパク質複合体における分子間相互作用と構造安定性に関する理論的研究		
2017.3	ブラウン動力学法を用いた2元粒子系の2次元構造制御シミュレーション		
2017.3	膜電位による脂質二重層膜の構造安定性に関する理論的研究		
2017.3	TI積層Ag(111)表面および固体酸素における電子構造の第一原理的研究		
2017.3	半導体中ミュオニウムの電子構造計算		
2016.9	First-Principles Calculations of Li-intercalated Bilayer Graphene (Li 挿入二層グラフェンの第一原理計算)		
2016.9	First-Principles Calculation of Layer Distances in Multi-layer Graphenes (多層グラフェンの層間距離に関する第一原理計算)		
2016.9	ピラミッド型容器内への沈降によるブラウン粒子の沈降における外力の方向と頂点角度の効果		
2016.9	Theoretical Study of Buckminsterfullerene Formation Pathway from Polycyclic Aromatic Hydrocarbon in Interstellar Medium (星間媒質中多環芳香族炭化水素からのバックミンスターフラーレン生成経路に関する理論的研究)		
2016.3	ピラミッド型容器と外力によるコロイド結晶の構造制御		
2016.3	ヘモグロビン環境を考慮した酸素分子吸着鉄ポルフィリン錯体の第一原理的研究		
2016.3	2次元六員環構造に化学吸着した水素の第一原理計算		
2016.3	多層ラメラ構造における脂質二重層膜間に働く相互作用と安定性に関する理論的研究		
2016.3	TiPb合金積層Si(111)表面の電子構造と特異的ラシュバ効果の第一原理的研究		
2016.3	二重脂質膜と混合膜の構造ダイナミクスと弾性に関する理論的研究		
2016.3	光合成反応中における金属タンパク質の会合-解離過程に関する理論的研究		
2015.9	界面Fe/酸化物絶縁体の電子状態と磁気異方性電界効果に関する第一原理的研究		
2015.9	Prediction of Solvation Free Energy of Proteins and Organic Molecules: Molecular Dynamics Simulation and QSPR Model Approach (分子動力学法とQSPR法を用いたタンパク質と有機分子の溶媒和自由エネルギーの予測)		

2015.9	Electronic Structure Calculations of Hydrogen Impurity in Gallium Nitride (窒化ガリウム中水素不純物の電子構造計算)
2015.9	First principles calculation of multiferroic BiFeO3 for photovoltaic application (光電池応用のためのマルチフェロイックBiFeO3の第一原理計算)
2015.3	移動する粒子源によるパターン形成-フェーズフィールドシミュレーション-
2015.3	ブラウニアン動力学を用いたブラウン粒子の結晶化シミュレーション
2015.3	Ni基板上グラフェンの電子状態計算
2015.3	グラフェンおよびシリセンにおける電子状態の群論に基づく解析
2015.3	電子状態のトポロジーに由来する異常熱電効果の理論的研究
2015.3	第一原理計算によるトポロジカル絶縁体の理論探索
2015.3	粗視化モデルによる脂質間相互作用とベシクルの構造形成に関する理論的研究
2014.9	Group Chase and Escape with an Off-lattice Model (非格子モデルでの集団による追跡と逃避)
2014.9	Pure Rotational Spectroscopy of Neutral and Charged Titanium Oxide Molecules (中性及び荷電酸化チタン分子の回転スペクトル)
2014.9	Magnetic Dipole-dipole Interaction Calculation and Magnetic Structure in Solid Oxygen (磁気的双極子双極子相互作用の計算と固体酸素における磁気構造)
2014.9	Molecular Dynamics Study of Human Defensins HNP-1 Binds to DPPC Membrane: Structure and Stability (分子動力学法を用いたヒトディフェンシンHNP-1のDPPC膜への結合構造と安定性)
2014.3	発癌プロセスと発癌頻度の関係性について
2014.3	シリセンの電子状態シミュレーション
2014.3	酸化チタンに化学吸着したPCBMのシミュレーション
2014.3	第一原理分子動力学法に基づく対数形式自由エネルギー計算手法の開発研究
2014.3	Investigating the electronic structure of the polar Zinc Oxide slab based on the first-principles calculation (第一原理計算に基づいた極性酸化亜鉛スラブの電子構造研究)
2014.3	ファン・デル・ワールス密度汎関数による電子状態計算手法の開発と実装
2014.3	強誘電体におけるスピン軌道相互作用の第一原理的研究
2014.3	過剰化学ポテンシャル計算の高速化とタンパク質多量体の水和特性に関する理論的研究
2014.3	Go-likeモデルによるサテライトタバコモザイクウイルスの構造安定性とダイナミクスに関する理論的研究
2014.3	粗視化シミュレーションの高速化とベシクルの構造安定性に関する理論的研究
2014.3	水の酸化における酸化還元電位の溶媒効果依存性に関する理論的研究
2013.9	First-Principles Calculations of Water Molecules Adsorbed on Graphene (グラフェンに吸着した水分子の第一原理計算)
2013.9	Implementation of Parallel Matrix Diagonalization for Ab-Initio Molecular Dynamics Program using ScaLAPACK (第一原理分子動力学におけるScaLAPACKを用いた並列処理行列対角化の実装)
2013.9	Tight-Binding Molecular Dynamics with Fermi Operator Expansion: Application to Silicon Defects (フェルミ演算子展開を用いたタイトバインディング分子動力学とシリコン欠陥への応用)
2013.9	Co Impurity on Fe/MgO Interface: a First Principles Study (第一原理的研究にもとづくFe/MgO界面のCo不純物)
2013.9	Computational Study of Oxidation Potential Fluctuation of Ketone Molecule (ケトン分子の酸化電位ゆらぎに関する理論的研究)
2013.9	An Approach for Combining Docking and Molecular Dynamics (MD) Simulation In Protein-Ligand Docking (タンパク質-基質複合体予測のための分子ドッキングと分子動力学シミュレーション)
2013.3	シリコン中原子空孔の第一原理計算
2013.3	第一原理計算によるTI積層Si表面の原子・電子構造と特異的ラシュバ効果
2013.3	磁性薄膜の磁気異方性およびその電界効果に関する第一原理的研究
2013.3	水素結合型誘電体H2C4O4の第一原理的研究
2013.3	分子動力学法によるジヒドロ葉酸還元酵素の構造安定性
2013.3	分子動力学シミュレーションによるタンパク質-基質分子間結合に関する研究
2012.9	First Principles Calculations of Hydrogen Adsorption on Armchair Edge (5,5) Carbon Nanotubes (アームチェア端を持つカーボンナノチューブにおける水素吸着の第一原理計算)
2012.9	First Principles Calculations of Hydrogen Chemisorption on Zigzag Edge (10,0) Carbon Nanotubes (ジグザク端を持つ(10,0)カーボンナノチューブの水素化学吸着の第一原理計算)
2012.9	Structural, magnetic and electronic properties in small bismuth clusters (小さなビスマスクラスタにおける構造、磁性および電子状態)
最近(過去3年間+必要に応じて)の博士論文題目	
修了年月	タイトル
2016.9	Development and application of spin dependent van der Waals density functional method (スピン依存ファン・デル・ワールス密度汎関数法の開発・応用)

2015.9	Density-functional theory based calculations of spin-orbit interaction in ZnO (ZnO におけるスピン軌道相互作用の密度汎関数理論に基づく計算)
2015.9	First-principles calculations of vacancies in semiconductors (半導体中原子空孔の第一原理計算)
2015.3	遷移金属酸化物のスピン構造と物性の理論的研究
2015.3	Theoretical Studies on Redox Potential of Molecules by Molecular Dynamics simulation (分子動力学計算による分子の酸化還元電位に関する理論的研究)
2014.9	First-Principles Electronic-Structure Calculations of Functional Materials (機能性材料の第一原理電子構造計算)
2014.9	First-Principles Calculations of Polythiophene Derivatives (ポリチオフェン誘導体の第一原理計算)
2014.9	Theoretical studies of the formation mechanism of protein complex by using coarse-grained models (粗視化モデルを用いたタンパク質複合体形成機構に関する理論的研究)
2014.9	Theoretical Studies of the Dependence of Chemical Reaction on Tautomeric Form of His64 in the Active Site of Human Carbonic Anhydrase II (ヒト由来炭酸脱水酵素 II の化学反応性の活性部位 His64 互変異性依存性に関する理論的研究)
2013.9	Study of Carbon Nanomaterials Based on Density Functional Theory (密度汎関数理論に基づくカーボンナノ材料の研究)
2013.3	ビスマス超薄膜の相対論的電子状態計算
2012.9	A molecular dynamics study of Hras-GTP complex and Hras-GDP complex (Hras-GTP 複合体と Hras-GDP 複合体の分子動力学による研究)
2011.3	Study on magnetic anisotropy and its electric field modulation in the surface and interface: from a first principles approach (第一原理手法による表面・界面の磁気異方性とその電界変調効果に関する研究)
研究室連絡先メールアドレス 小田竜樹 (おだ たつき) <oda *at* cphys.s.kanazawa-u.ac.jp>	