

# 第一原理計算による 新物質設計・合成プロセス設計



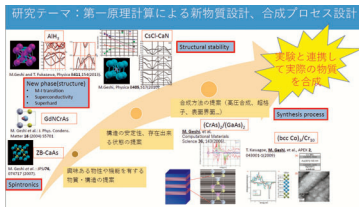
**キーワード** 第一原理計算、物質設計、高圧物性、計算科学人材育成

**下司 雅章** GESHI Masaaki

工学研究科共同研究講座／エマージングサイエンスデザイン R<sup>3</sup> センター 特任准教授（常勤）  
住友電気共同研究講座



**ここがポイント！【研究内容】**



- 第一原理計算を用いて新物質設計及び合成プロセス設計を行う。特に、高圧極限環境における物質の相転移などを第一原理計算で調べ、物質合成のステージとする。構造探索法の開発も行っている。
- 計算科学教育に豊富な実績があり、年2回開催の計算機マテリアルズデザイン（CMD<sup>®</sup>）ワークショップを運営している。その他、第一原理計算入門の企業向けセミナーも行っている。
- 富岳を中心としたスパコンを使いこなす人材育成活動も行っている。

応用分野	新材料開発分野、合成プロセス設計
論文・解説等	[1] M. Geshi, H. Funashima, and G. P. Hettiarachchi, <i>Phys. Rev. B</i> 104, 104106 (2021) [2] 下司編「計算科学のためのHPC技術1&2」大阪大学出版会 [3] Geshi ed., "The Art of High Performance Computing for Computational Science Vol.1 & 2, Springer"
連絡先 URL	<a href="http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/~geshi/">http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/~geshi/</a>

