

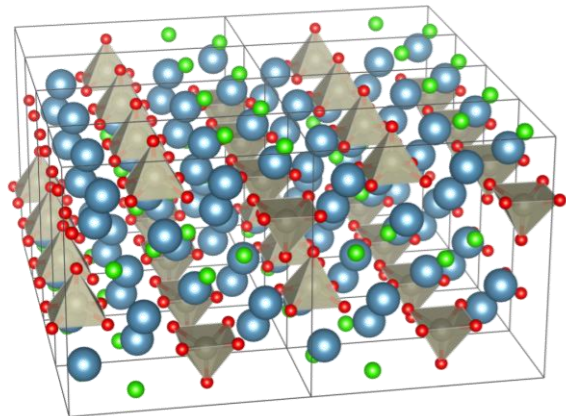
# 第一原理計算による物質設計

物理工学EP

知的構造の創生部門

河村光晶 研究室

組成 構造  
温度 圧力 欠陥



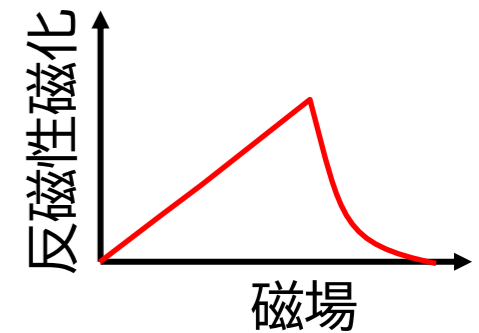
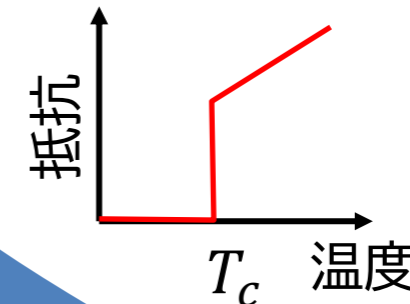
相互作用 格子振動  
相対論補正 Etc.

量子力学  
 $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$   
 $S = \ln W$   
統計力学



スパコン  
GPGPU  
OSS

超伝導



Etc.

多色性



過去の4年生卒論タイトル

- 第一原理計算による2H-NbS<sub>2</sub>の非調和フォノン計算および超伝導転移温度評価
- 単体元素における虚数フォノンモードの解消および転移温度の第一原理計算
- 結晶グラフ畳み込みニューラルネットワークによる無機結晶の電子・磁気特性予測
- ワニエ関数とベイズ最適化を用いた結晶場分裂エネルギー最大化物質の探索

物理工学の講義(座学)と  
プログラム実習で  
得たものを  
フル活用しましょう