

令和4年度

卒業研究

TITLE

TITLE

大阪大学 工学部 応用理工学科

マテリアル生産科学科目 マテリアル科学コース

計算材料設計学領域 number name

## 目次

1	緒言	1
2	理論	2
3	結果	3
3.1	サブセクション . . . . .	3
4	結言	5
5	謝辞	6
6	付録	7

## 1 緒言

## 2 理論

文章中で数式を使いたい時には $\$$ で囲む。 $A = B + C$

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{QP}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} |\psi_i^{\text{QP}}\rangle \left( \text{Re} \Sigma_{ij}(\varepsilon_i^{\text{QP}}) + \text{Re} \Sigma_{ij}(\varepsilon_j^{\text{QP}}) \right) \langle \psi_j^{\text{QP}}| \quad (2.1)$$

## 3 結果

### 3.1 サブセクション

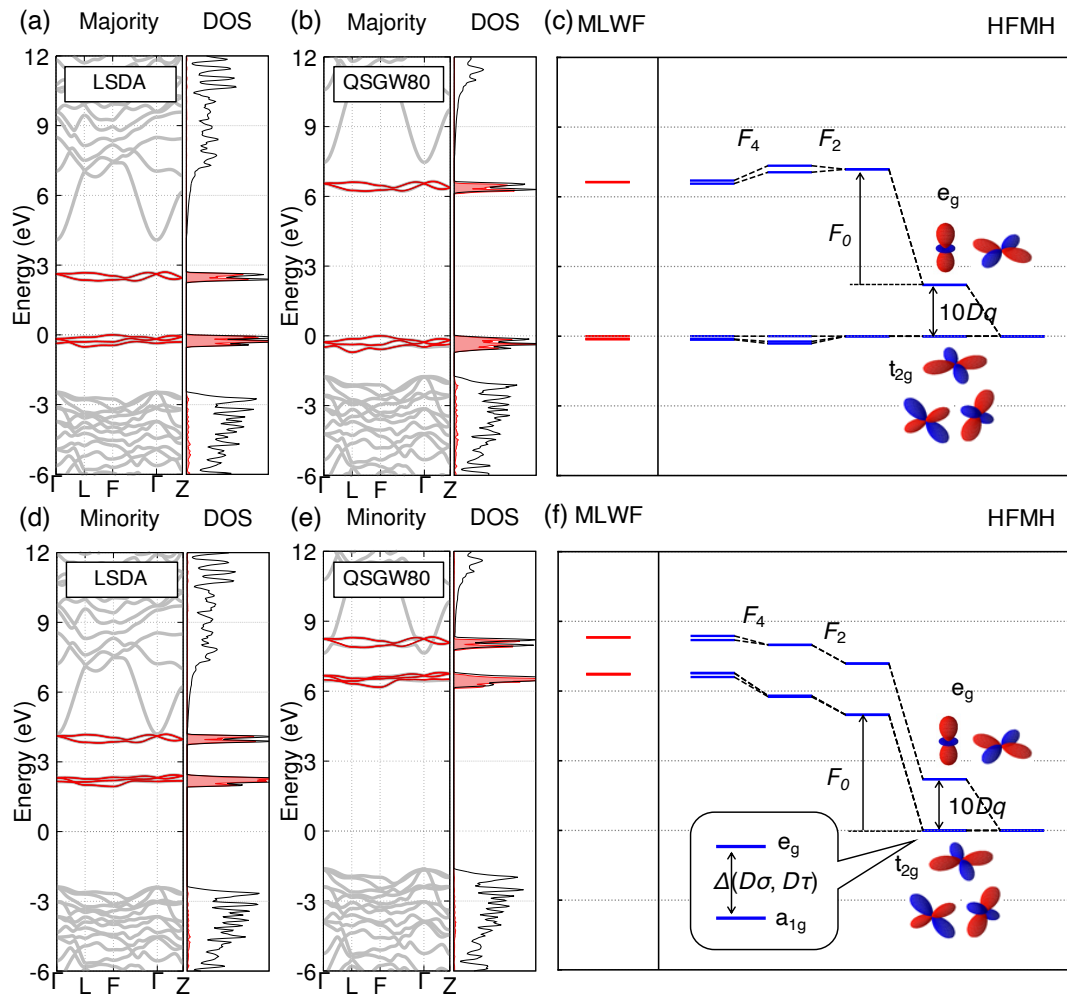


図 3.1  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:Cr}^{3+}$  の QSGW80 による電子状態

- (1) 物質依存のパラメータやモデルを必要としない計算手法であること
- (2) 半導体・絶縁体のバンドギャップを正確に再現すること
- (3) 母物質のバンドと 3d 不純物バンドの位置関係を正確に再現すること

## 3.1.1 サブサブセクション

表 3.1 希土類窒化物における最近接交換相互作用・Curie 温度の計算結果

REN	$J/k_B[K]$	$T_C[K]$	$T_{C,\text{expt.}}[K]$
NdN	0.39	12	27.6
GdN	0.38	47	58, 72
TbN	0.16	16	40
DyN	0.13	9.0	17.6
HoN	0.11	5.2	12.8
ErN	0.45	13	6, 3.4

## ■パラグラフ

## 4 結言

## 5 謝辭



## 6 付録

## 参考文献

- [1] L. Hedin. New method for calculating the one-particle Green's function with application to the electron-gas problem. *Phys. Rev.* **139**, A796 (1965).
- [2]
- [3]
- [4]