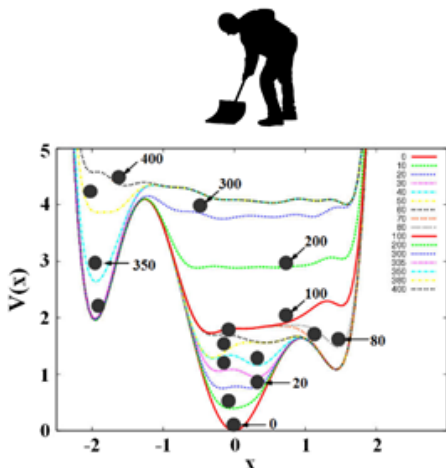


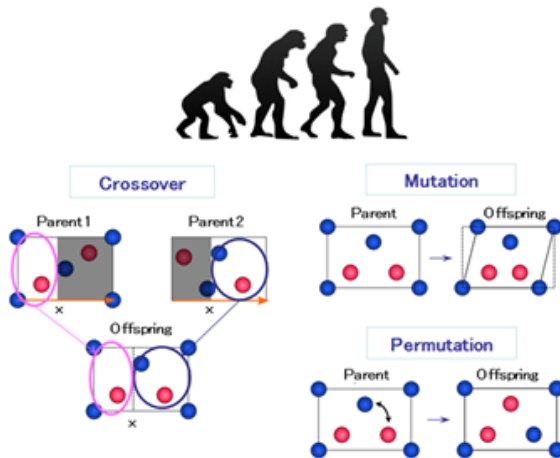
1. 結晶構造予測プログラムの開発(2004年以降)

石河孝洋、「高圧力の科学と技術」、23巻2号113-123(2013)、T. Ishikawa, Comput. Mater. Sci. 92, 36-40 (2014).

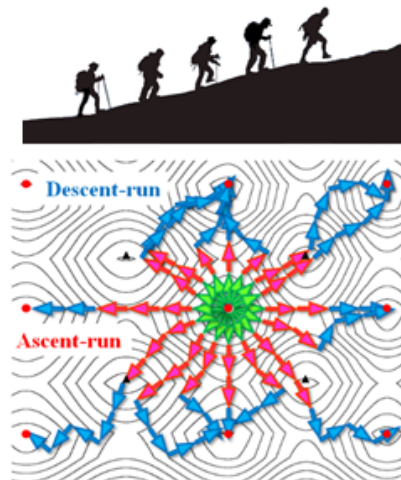
メタ・ダイナミクス



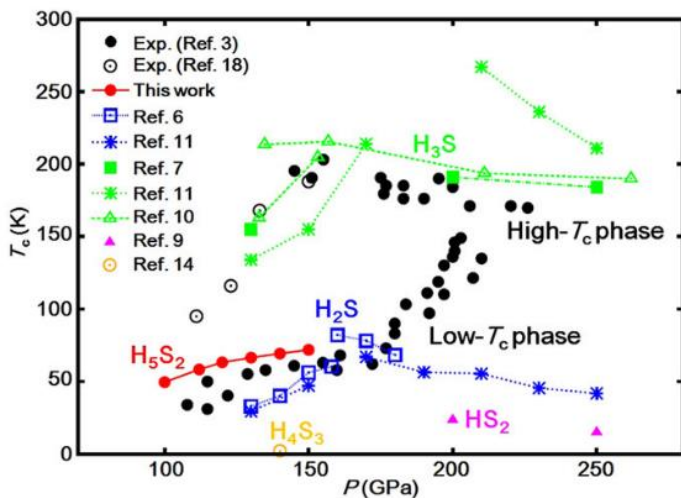
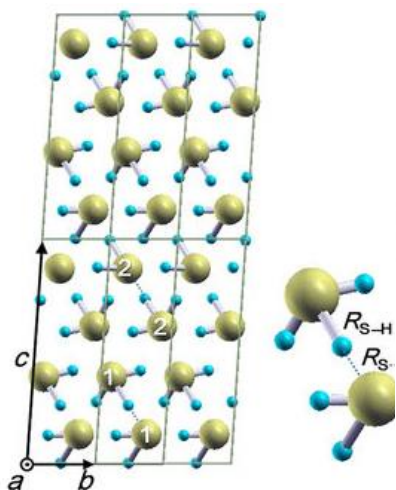
遺伝的アルゴリズム



ポテンシャルエネルギー面トレッキング



2. 圧力誘起超伝導の研究(2004年以降)



T. Ishikawa et al., Sci. Rep. 6, 23160 (2016).

・高温超伝導を示す新たな硫黄水素化物 H_5S_2 を予測

・リン(PRL 96, 095502 (2006))、カルシウム(PRB 77, 020101(R) (2008))、固体水素(PRB 90, 104102 (2014))の結晶構造、超伝導を予測