

# MIへの適用を目指した量子化学計算

大阪大学大学院工学研究科日本触媒協働研究所

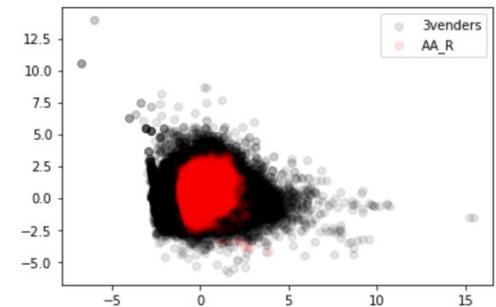
山本 啓太, 吉安 勇人, 本村 肇, 木下 竣登

**目的** 機械学習を用いて材料開発を行うマテリアルズ・インフォマティクス(MI)においてデータの質と量が重要となる。量子化学計算を利用したMIについて検討を行った。

**内容** 仮想的に発生させたアクリル酸誘導体モノマー構造をもとに Gaussian16を用いて構造最適化、エネルギー計算を行った。得られたデータを用いて主成分分析を行った。

**結果** 試薬ベンダー3社のHP上に記載されている構造情報をもとに行った計算結果と比較したところ、アクリル酸誘導体の主成分の広がりの方が小さいことが分かった。

利用した計算機	SQUID CPU
ノード時間	31700時間
使用メモリ	250GB
ソフトウェア	Gaussian16.C.01
並列化	76並列



図：主成分分析結果