

配位子の構造計算

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

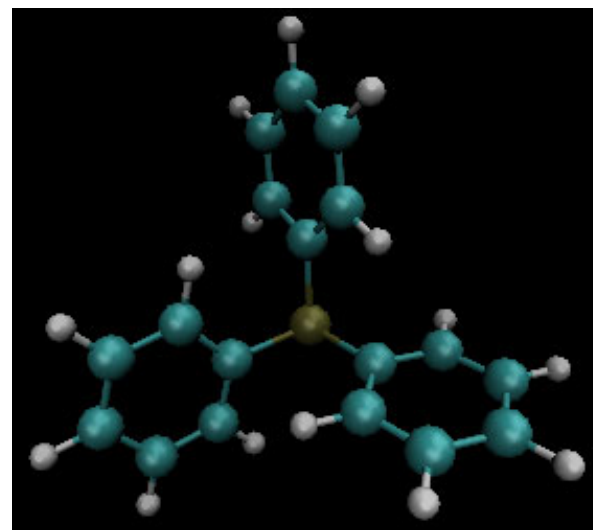
目的 機械学習を用いて材料開発を行うマテリアルズ・
インフォマティクス(MI)においてデータの質と量が重要となる。
配位子を対象とした量子化学計算について検討を行った。

内容 量子化学計算ソフトウェアGaussianとxTB, crestを用いて計算を行った。

結果 100種の構造に対して計算を実行し、最適化後の構造を得た。

利用した計算機
使用メモリ
ソフトウェア
並列化

SQUID CPU
250GB
Gaussian
76並列



図：最適化後の構造例