

光機能性材料の構造解析

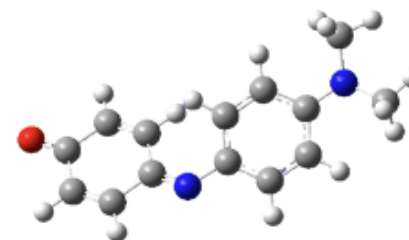
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 野澤俊介

目的 溶液中軽元素分子における光反応過程の可視化

内容 XFELを利用して測定された時間分解X線溶液散乱の構造最適化をするため、反応中間体の構造モデルをSQUIDを用いた量子化学計算を用いて計算する。

結果 測定データに対して、計算した構造モデルを元にMDシミュレーションを用いた構造最適化を実施することで、反応中間体を可視化することに成功した。現在、論文を準備中。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 25,000 時間



図：構造最適化された1つの反応中間体における分子構造