

計算化学・機械学習を利用した新規材料開発

パナソニックインダストリー株式会社 技術本部 氏名 已上幸一郎

Development of novel materials through theoretical calculation and machine learning

Panasonic Industry Co., Ltd. Engineering Division Koichiro Mikami

目的 力学的刺激によってC-C結合が均等開裂するメカノフォアの
対応するラジカルの励起状態解析を行うこと。

内容 Gaussianを利用したTDDFT計算による励起状態計算

結果 DAAN ラジカルの蛍光性が D1状態のキノイド性と関係がある
ことが示唆された。

利用した計算機

SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 6,250 時間

使用ソフト Gaussian