

GAMESSを用いたモデル高分子の振動解析

パナソニック インダストリー(株) 技術本部 小城原 佑亮、東嶋 大樹

Vibration Analysis of Model Polymers using GAMESS

Panasonic Industry CO., Ltd., Engineering Division, Yusuke Ogihara, and Hiroki Tojima

目的 特性の高い高分子材料の絞り込みを行うこと。

内容 モデル化した多数の候補高分子に対して、
量子化学計算ソフトGAMESSを用い大容量メモリを
要する振動解析を行った。

結果 振動解析から得られた結果を検証することで、
候補物質を絞り込むことができた。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	253 時間
使用メモリ	1000 GB
並列化	4ノード 並列
使用ソフト	GAMESS