

課題名 (タイトル) :

第一原理計算による分子の物理化学データベース構築

利用者氏名 : 中田真秀

所属 : 情報基盤センター

一般課題 G15027 の利用を使ったための簡易利用であるため、そちらを参照のこと。

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

なし

【国際会議などの予稿集、proceeding】

The PubChemQC project: A large chemical database from the first principle calculations, [Nakata Maho](#).
AIP Conf. Proc. 1702, 090058 (2015).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Maho Nakata, Advanced Center for Computing and Communication, RIKEN,
“The PubChemQC Project: a large chemical database from the first principle calculations”, Kobe
workshop for material design on strongly correlated electrons in molecules and materials, 2016/2/17
<http://www.aics.riken.jp/labs/cms/workshop/201602/index.html>

【その他（プレスリリース、学術会議以外の一般向けの講演など）】

なし