

2020年度 利用報告書

課題名(タイトル): 有機材料の誘電・光電変換機能の高性能・高効率化に向けた強電場オペランド分光

利用者氏名: 五月女真人

理研における所属研究室名: 創発光物性研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

研究に用いた低分子の Gaussian による分子軌道計算法を教えていただくために、理研内の共同研究者に HOKUSAI での計算方法を教えていただいた。

その後はスタンドアローン PC で計算を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian16

3. 結果

分子軌道を正常に計算でき、方法を修得した。

4. まとめ

Gaussian16 での分子軌道計算ができ、低分子であったためその後はパーソナルコンピュータで計算を行った。

5. 今後の計画・展望

理研退職のため、不記入。

6. 利用がなかった場合の理由