

Development of a quantum chemical methodology in combination with machine learning for the theoretical design of functional polymers

マリア, イヴォニナ

<https://hdl.handle.net/2324/5068245>

出版情報 : Kyushu University, 2022, 博士 (学術), 課程博士

バージョン :

権利関係 : Public access to the fulltext file is restricted for unavoidable reason (2)

氏名	IVONINA MARIIA
論文名	Development of a quantum chemical methodology in combination with machine learning for the theoretical design of functional polymers (機能性高分子の理論設計のための機械学習と組み合わせた量子化学的手法の開発)
論文調査委員	主査 九州大学 教授 青木 百合子 副査 九州大学 准教授 森 俊文 副査 九州大学 准教授 藤田 克彦 副査 九州大学 准教授 村田 亜沙子

論文審査の結果の要旨

本論文は、高速高精度量子化学計算法・分子軌道間相互作用解析法・深層学習を融合した理論計算化学手法を開発したもので、物質の機能・反応・設計における、電子状態に基づく基礎研究やデータサイエンスの発展に貢献するところが大きい。よって、本論文は博士（学術）の学位論文に値するものと認める。