

令和 6 年 5 月 23 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21H02056

研究課題名(和文) 正準分子軌道解析に基づくタンパク質性能改変の研究

研究課題名(英文) Study of protein performance modification based on canonical molecular orbital analysis

研究代表者

佐藤 文俊 (Sato, Fumitoshi)

東京大学・生産技術研究所・教授

研究者番号：00235392

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,100,000円

研究成果の概要(和文)：タンパク質正準分子軌道の経験から分子軌道が広範囲に広がるものと、局在化するものが存在することを見出した。タンパク質の正準分子軌道とその物性を理解するため、大規模なタンパク質正準分子軌道計算結果を解析する手法をいくつか開発し、解析を行なった。これにより、タンパク質正準分子軌道の広がり方や相互作用を網羅的かつ客観的に調査することが可能となった。これらの知見は量子効果に基づく新しいタンパク質設計の基盤技術を構築し、タンパク質の設計とその応用に新たな可能性を開くものと期待される。

研究成果の学術的意義や社会的意義

研究成果を公開するものとして論文・研究発表などのほか、開発した手法・アルゴリズムはインターネット上ですでに公開しているProteinDFやQCLobotに実装している。これらはGNU GPL v3ライセンスのもとオープンソースとして公開しており、自由に利用できる。

本研究の成果は、タンパク質に限らずさまざまな含金属・非金属物質および材料系に適用可能であり、大規模正準分子軌道計算の解析法の一つとして大いに利用されるものと考えている。

研究成果の概要(英文)：To understand the canonical molecular orbitals of proteins and their properties, several methods were developed to analyze the results of large-scale protein canonical molecular orbital calculations. This has enabled a comprehensive and objective investigation of the spread and interactions of protein canonical molecular orbitals. These findings are expected to build the foundation technology for new protein design based on quantum effects, opening up new possibilities for protein design and its applications.

研究分野：計算生体分子科学

キーワード：タンパク質 正準分子軌道計算 密度汎関数法

### 1. 研究開始当初の背景

分子軌道は分子の電子構造を理解・解析するための要である。一般的な分子では、化学反応は分子軌道の形状とこれらの間の相互作用によって説明される。タンパク質も分子であるし、酵素などが行っている反応は化学反応である。一般的な分子同様、分子軌道によって化学的性質が説明できることが望ましい。生物は生命現象を発現させる道具であるタンパク質を、地球上でもっとも多くの量が使え、H, C, N, O, Sなどの原子で作ることを選択した。生体温度というわずかなエネルギーで反応を進行させるために分子サイズをきわめて大きくする必要があった。様々なアミノ酸残基をつなぎ固有の高次構造を形成させて、反応に適した活性中心環境をつくるためと、分子軌道を非局在化させて分子全体に広げるためである。分子軌道の非局所化は化学反応に伴う電子の流出入による電子構造変化を分子全体で少しずつ分担させることでエネルギー差を少なくする合理的な戦略である。このように、一般論としてタンパク質分子軌道の化学的性質を説明することはできる。しかし、どのようにしてタンパク質の分子軌道を変化させ化学的性質を制御しているのかまでは解明に至っていない。

タンパク質の分子軌道(正準分子軌道)を計算する方法は、超大規模分散メモリ型並列計算機の登場からプログラムの対応がしばらくの間、追いついていなかった。大量のデータを通信する必要がある上、量子化学計算の標準法であるハイブリッド密度汎関数法では少なくとも4種類の計算律速ルーチンでコア数に見合った並列度を達成しなければならないからで、現行の並列化法では数千並列で高止まってしまう。

そのため我々は実質上どのような計算機アーキテクチャでも性能を活かすことができる正準分子軌道法である第3世代密度汎関数法アルゴリズムを独自に開発し実装した。これらの研究を通して、我々は様々なタンパク質の正準分子軌道を観察し、異なる非局在化様式が存在することが分かってきた。また、さらに驚くべきことに、非局在化の一方ではなく、逆に分子軌道を局在化させるケースも発見した。

例えばシトクロム *c* の分子軌道では鉄の *d* 軌道成分は 85.2% しかなく、残りの成分はタンパク質全体に広がっている。一方、ミオグロビンの分子軌道では鉄の *d* 軌道成分は 94.7% あり、ヘムと近位ヒスチジンで 99.9% を占める。これは次のように解釈できる。シトクロム *c* の広がった分子軌道は電子を授受する相互作用に適している。一方、ミオグロビンの同軌道は局在化することで鉄が酸化し失活することを防いでいる。タンパク質は明らかに分子軌道を制御している。これらの系はタンパク質の分子軌道の性質を解明する理想的な実験場と言えるだろう。

以上のように、第3世代法という解析のためのツールの確立、ミオグロビンやシトクロム *c* といったターゲットの発見によりタンパク質の分子軌道の形状を制御する機構を明らかにする絶好の機会が訪れた。これができれば、自然はタンパク質の分子軌道をアミノ酸残基の並びで制御しているので、アミノ酸残基置換ベースで化学的根拠に基づき性質を改変することができるのではないかと考えるに至った。

### 2. 研究の目的

本研究の最終目的は、タンパク質の正準分子軌道解析に基づく量子効果の検証とこれを用いたタンパク質設計の基盤技術を構築することである。

現在、タンパク質の量子化学計算は、2013年ノーベル化学賞を受賞した量子化学計算と分子力学計算を組み合わせる方法(QM/MM法)や、分子を領域分割して計算するフラグメント分子軌道法・分割統治法のように、計算モデルや解法に近似を施すものが大半である。端的に言えば、これら近似法はタンパク質全体の分子軌道を求めないことで計算高速化を図る。タンパク質の正準分子軌道計算を達成するためには、計算速度の問題以外にも大規模自己無撞着(SCF)計算を安全に収束させる問題も解決しなければならない。これを提示したのは国内外を通じ我々のグループのみである。

本研究では、タンパク質の正準分子軌道に特徴的な差異が生じたシトクロム *c*、ミオグロビンなどの系で、どのアミノ酸残基がどのような機構で量子効果を現すのかを検証する。これらの研究過程で、これまで知られていなかった電子構造上重要な働きを果たす残基やその仕組みも明らかとなるだろう。このような知見を集め、量子効果の制御方法が明らかとなれば、これらをタンパク質の設計に応用できる。量子効果に基づくタンパク質設計は、反応を阻害するというよりは反応を促進・抑制制御する設計の役に立つだろう。また量子効果は距離には依存しないため、よくできた反応中心を壊さずにタンパク質の性能を変えることも期待できる。タンパク質のまったく新しい設計法となるだろう。

### 3. 研究の方法

密度汎関数法に基づくタンパク質カノニカル Kohn-Sham 分子軌道計算には ProteinDF [1]を用いた。大規模分子の初期波動関数の作製には QCLO 法 [2, 3]に基づく自動計算プログラム QCLObot [4]を用いた。計算に用いたタンパク質モデル構造は、PDB から実験構造を取得した後、水素原子などの欠損原子を充足し、古典力場を用いて構造緩和することによって作製した。

#### 4. 研究成果

タンパク質の分子軌道の広がりを評価する上で、その分子軌道の広がりを測定する”ものさし”が必要であった。広がったタンパク質分子軌道は多くの原子上に点在し、逆に収縮した分子軌道は少ない原子上に局在化すると考えられる。そこで、Pipek と Mezey による局在化軌道を求める計算式 [5]を利用し、原子上の電子密度が分散する様子をあらわすG値を定めた。

$$Q_{pi} = \frac{1}{2} \sum_q^{N_{bf}} (C_{pi}^* S_{pq} C_{qi} + C_{qi}^* S_{pq} C_{pi})$$

$$G_i = \sum_p^{N_{bf}} (Q_{pi})^2$$

いくつかの占有および空軌道の等値面が作成する波動関数の体積とG値との関係性を具体的なタンパク質で評価した結果、これらに明確な相関があることがわかった(図 1)。G値は分子軌道の広がりを客観的に数値として評価する指標として使えることがわかった。そこで実際にコロナウイルス由来のタンパク質について分子軌道のG値を求めたところ、局在化する占有軌道と非局在化する空軌道の分布が観察できた(図 2)。経験的に空軌道の方が占有軌道よりも広がる傾向にあることは認識していたが、それを裏付ける結果となった。

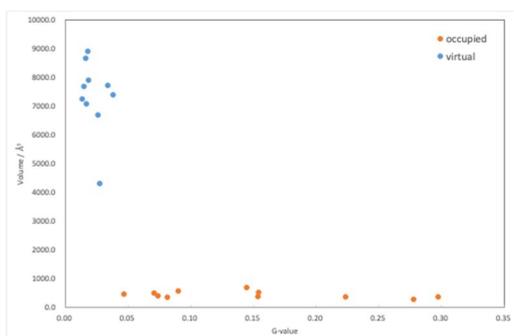


図 1 分子軌道体積と G 値の関係

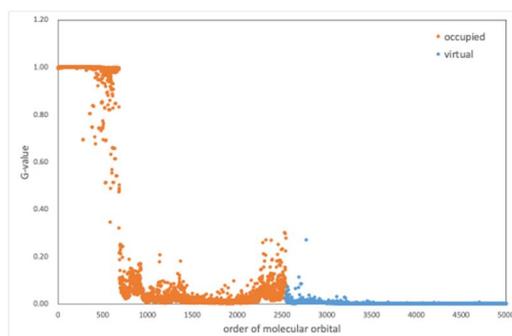


図 2 分子軌道と G 値の関係

橙: 占有軌道, 青: 空軌道

大規模分子であるタンパク質は電子数も多く、当然ながら分子軌道の数も多くなる。しかも炭素、酸素、窒素など最外殻軌道が 2s, 2p となる元素が主成分であり、分子軌道を構成する原子軌道が似たものが多い。したがって分子軌道のエネルギー準位の間隔は非常に密となり、分子軌道の由来を解析するのは困難である。そこで、QCLO 法 [2,3]と分子軌道重なり法 [6]の組み合わせにより、大規模分子(スーパーユニット)の分子軌道とサブユニットの分子軌道の関連性を解析する手法を開発した。分子軌道重なり法による分子軌道の評価では、2つの軌道が全く重ならない場合は 0 を、ぴったり同じ軌道になる場合は 1 を与える。本研究では QCLO 法におけるサブユニットの分子軌道とスーパーユニットの分子軌道の分子軌道重なり計算を網羅的に行った。図 3 には、コロナウイルス由来タンパク質をモデルとした分子軌道重なり計算結果を示した。左側はサブユニット、右側がスーパーユニットである。黒色または灰色の横線は一つの分子軌道を表しており、縦軸はエネルギー準位である。赤点線は分子軌道重なり法において、評価値が閾値を超えたものを対応付けており、右側の灰色横線の長さに対する黒色の長さがその割合を表している。サブユニットの分子軌道は、スーパーユニット上でそのまま維持するわけではなく他の軌道と混成しており、またエネルギー準位も変動していることがわかった。このように、評価値の大きな分子軌道の組み合わせを網羅的に抽出することで、サブユニットの分子軌道対応するスーパーユニットの分子軌道を簡単に見つけることができるようになった。本解析により、これまでの研究者の勘と経験に頼る観察方法と異なり、網羅的にかつ客観的に分子軌道の由来を探索することができる

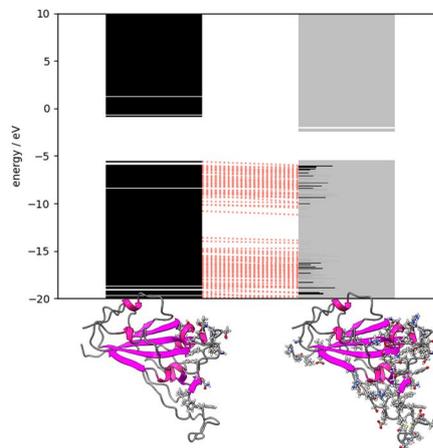


図 3 コロナウイルス由来タンパク質をモデルとした分子軌道重なり計算結果

ようになった。大量データゆえに見逃されてきた興味深い分子軌道の振る舞いを観察することができるかもしれない。

タンパク質の相互作用や化学反応性を調査する上で、どのアミノ酸残基がエネルギー的に安定・不安定に寄与しているかをあらかず相互作用エネルギー解析は、実験的手法で確認することは非常に難しく、シミュレーションに期待される要素の一つである。分子軌道計算で一般的に用いられる相互作用エネルギー計算は、単体と複合体のエネルギー計算から算出するものである。得られる相互作用エネルギーは理論的に厳密であるが、計算コストの高いタンパク質で複数回分子軌道計算を行うことは現実的ではなかった。本研究ではエネルギー密度解析(EDA) [7]を用いた。EDA は分子軌道計算によって得られたエネルギーの分布を基底関数のペアに分配したものと捉えられる。このEDA によって1 回の分子軌道計算で任意の領域間の相互作用エネルギーを求めることが可能になった。1 例として図4 に示す $\alpha$ ヘリックスモデルの電子のエネルギーにおけるEDA 分布を図5 に示した。縦軸・横軸ともに(原子)基底関数のインデックスである。青色は負(安定)、赤色は正(反発)のエネルギーであることを表している。黄色の点線で囲われた非対角要素は、 $\alpha$ ヘリックスを形成する主鎖骨格に由来するものである。対角項の自己相互作用成分に対して、非対角項が小さいため白色に見えてしまうが、決して0 ではないことを強調しておきたい。EDA ではエネルギーを基底関数ごとに細分化して求めることができるため、アミノ酸残基ごとだけでなく、主鎖・側鎖に分けて解析することも可能である。エネルギーは1 電子項、クーロン項、交換・相関項に分けて解析することも可能である。密度汎関数法における交換相関項の解析は ProteinDF がグリッドフリー法を採用したことにより実現した。

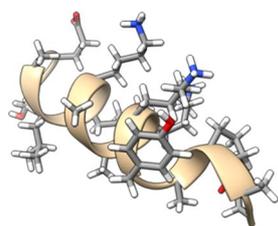


図4  $\alpha$ ヘリックスモデルの分子図

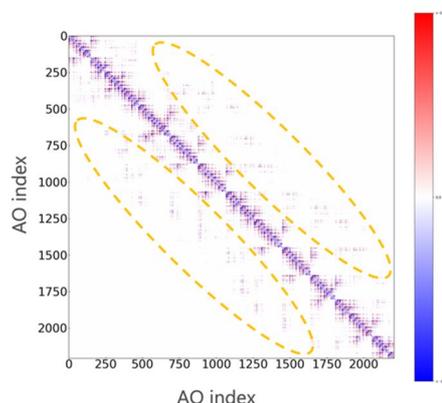


図5  $\alpha$ ヘリックスモデルのエネルギー密度解析(EDA)ヒートマップ  
黄色の点線部は $\alpha$ ヘリックス由来の相互作用分布をあらわしている

EDA は分子全体を通して正負のエネルギーがどのように分布が一目でわかる一方で、大規模分子であるタンパク質は基底関数の総数も数万規模におよび、どの相互作用が重要かわかりにくくなっている。そこでEDA の主成分解析を行なった。図6 に一例として $\alpha$ ヘリックスモデルEDA における主成分解析の固有値分布を示した。固有値はその絶対値が大きいものから並べた上で、横軸は固有値・固有ベクトルのインデックス、縦軸は固有値の絶対値の対数プロットである。固有値はほとんど負の値であり、エネルギーが安定化する結合性の相互作用(結合)であると考えられる。固有値はその大きさによっていくつかグループに分けることができた。これは $\sigma$ 結合性、 $\pi$ 結合性など相互作用(結合)の種類によって分類することができそうである。図7 には固有ベクトルの分布をヒートマップで表現した。横軸は図6 と同様に固有値・固有ベクトルのインデックス、縦軸は基底関数のインデックスである。赤・青のヒートマップは要素の大きさをあらわしている。これを見ても固有値の絶対値が大きい固有ベクトルは疎になっており、s 性の強い基底関数からの寄与が大きくなっていた。750~1000 番目付近の固有ベクトルは用いた基底関数全般に広がる様子が観察できた。これは主鎖のペプチド結合に由来するものと考えられるが、その断定にはさらなる検証が必要である。

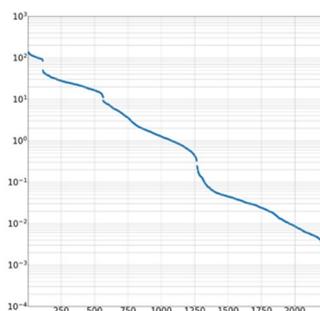


図 6  $\alpha$ ヘリックスモデル EDA における主成分解析の固有値分布

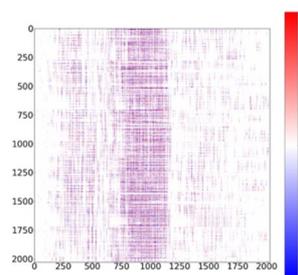


図 7  $\alpha$ ヘリックスモデル EDA における主成分解析の固有ベクトル分布

これまで述べてきたとおり、タンパク質正準分子軌道計算によって得られた分子軌道を観察すると、その分子軌道が広範囲にわたって広がっているものと、広がらずに局在化しているものがある。こうした分子軌道の広がり方の多様性によって、アミノ酸残基の改変(変異)によってタンパク質の電子構造が容易に変化するタンパク質や、一方で変異による電子構造論的影響に対してロバストな耐性をもつタンパク質といった、変異に対するタンパク質物性の感受性の違いは電子構造に由来するものと推測できる。

#### <参考文献>

- [1] <https://github.com/ProteinDF/ProteinDF>
- [2] H.Kashiwagi, H.Iwai, K.Tokieda, M.Era, T.Sumita, T.Yoshihiro, F.Sato, *Mol. Phys.*, **101**, 81 (2003).
- [3] N.Nishino-Uemura, T.Hirano, F.Sato, *J. Chem. Phys.*, **127**, 184106 (2007).
- [4] <https://github.com/ProteinDF/QCLObot>
- [5] J.Pipek, P.G.Mezey, *J. Chem. Phys.*, **90**, 4916-4926 (1989)
- [6] M.Dupuis, M.Nallapu, *J. Comput. Chem.*, **40**, 39-50 (2019)
- [7] H.Nakai, *Chem Phys. Lett.*, **363**, 73-79 (2002).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 5件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Hirano Toshiyuki Hirano, Sato Fumitoshi	4. 巻 2611
2. 論文標題 Theoretical Study of the Receptor-Binding Domain of Spike Protein of SARS-CoV-2 by Canonical Molecular Orbital Calculation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 AIP Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 020005:1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0119366	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 王 天宇、平野 敏行、佐藤 文俊	4. 巻 74
2. 論文標題 正準分子軌道法によるPETase の活性部位の触媒反応発生における役割に関する研究	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 生産研究	6. 最初と最後の頁 161~167
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11188/seisankenkyu.74.161	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 中岡 亮太、平野 敏行、佐藤 文俊	4. 巻 74
2. 論文標題 インターフェロン 2 の電子状態に基づく作用機序の研究	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 生産研究	6. 最初と最後の頁 153~159
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11188/seisankenkyu.74.153	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 佐藤 文俊	4. 巻 74
2. 論文標題 分子軌道法によるタンパク質のシミュレーション	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 機械の研究	6. 最初と最後の頁 247~251
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ogawa Saori, Shimidzu Hitomi, Fukuda Koji, Tsunekawa Naoki, Hirano Toshiyuki, Sato Fumitoshi, Yura Kei, Hasunuma Tomohisa, Ochi Kozo, Yamamoto Michio, Sakamoto Wataru, Hashimoto Kentaro, Ogata Hiroyuki, Kanao Tadayoshi, Nemoto Michiko, Inagaki Kenji, Tamura Takashi	4. 巻 85
2. 論文標題 Multiple mutations in RNA polymerase $\beta$ -subunit gene ( <i>rpoB</i> ) in <i>Streptomyces incarnatus</i> NRRL8089 enhance production of antiviral antibiotic sinefungin: modeling rif cluster region by density functional theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry	6. 最初と最後の頁 1275 ~ 1282
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/bbb/zbab011	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hirano Toshiyuki, Sato Fumitoshi	4. 巻 2343
2. 論文標題 Interaction energy analysis based on canonical Kohn-Sham molecular orbitals calculation of protein	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 AIP Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 020007:1 ~ 4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0047812	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 前田 大陸、平野 敏行、佐藤 文俊	4. 巻 73
2. 論文標題 正準分子軌道計算による光活動性黄色タンパク質の電子構造解析	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 生産研究	6. 最初と最後の頁 157 ~ 163
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11188/seisankenkyu.73.157	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 小杉亨, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊	4. 巻 75巻2号
2. 論文標題 がん抑制因子p53 の転写活性化ドメイン由来ペプチドとMDM2 タンパク質複合体の電子構造解析	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 生産研究	6. 最初と最後の頁 123-129
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11188/seisankenkyu.75.123	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 佐藤文俊, 平野敏行	4. 巻 42
2. 論文標題 タンバク質の正準分子軌道計算シミュレーション	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 シミュレーション	6. 最初と最後の頁 115-121
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato	4. 巻 3030
2. 論文標題 Study on Analysis Approach of Canonical Molecular Orbital Calculation in Large-scale Molecular System	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 AIP Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 020008:1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0192921	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Hirano Toshiyuki, Sato Fumitoshi
2. 発表標題 Study on Analysis Approach of Canonical Kohn-Sham Molecular Orbital Calculation in Large-scale Molecular System
3. 学会等名 17th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 平野敏行, 佐藤文俊
2. 発表標題 大規模正準分子軌道計算の実情と今後
3. 学会等名 令和4年電気学会基礎・材料・共通部門大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 平野敏行, 佐藤文俊
2. 発表標題 ACE2におけるスパイクタンパク質結合部位の電子状態
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hirano Toshiyuki, Sato Fumitoshi
2. 発表標題 Theoretical study of the receptor-binding domain of spike protein of SARS-CoV-2 by canonical molecular orbital calculation
3. 学会等名 16th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hirano Toshiyuki, Sato Fumitoshi
2. 発表標題 Orchestration software for canonical Kohn-Sham molecular orbital calculation of proteins: QCL0bot
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平野敏行, 坂口優羽, 佐藤文俊
2. 発表標題 新型コロナウイルスRNA結合ドメインの電子状態
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 王天宇, 平野敏行, 佐藤文俊
2. 発表標題 正準分子軌道法によるPETase活性中心の電子状態についての研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中岡亮太, 平野敏行, 佐藤文俊
2. 発表標題 正準分子軌道計算によるインターフェロン 2の電子状態解析
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 植弘 雄斗, 平野 敏行, 田原 才静, 佐藤 文俊
2. 発表標題 アミロイド線維コアおよび細胞内天然型プリオンの電子構造研究
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 平野敏行, Zheng Haojie, 佐藤文俊
2. 発表標題 軌道重なり法を用いたタンパク質正準分子軌道計算解析法の研究
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato
2. 発表標題 Principal Component Analysis of Energies Derived from Canonical Molecular Orbital Calculations of Proteins
3. 学会等名 ICNAAM2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Zheng Haojie, Hirano Toshiyuki, Tahara Saisei, Sato Fumitoshi
2. 発表標題 Insight into electronic structure of insulin analogues bound to IGF-1 receptor by quantum-chemistry calculation
3. 学会等名 Bio UT 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Zheng Haojie, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊
2. 発表標題 Electronic structure of insulin and its analogues bound to IGF-1 receptor by canonical molecular orbital calculations
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高橋 英男, 戸丸 辰也, 平野 敏行, 田原 才静, 佐藤 文俊
2. 発表標題 化学反応シミュレータの研究開発と将来展望
3. 学会等名 ワークショップ: 力学の未来(量子化学分野:量子コンピューティング)
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------