

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 8 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2011～2015

課題番号：23245005

研究課題名(和文) DNAの協同的分子認識機構解明のための電子相関効果を導入した量子化学解析法と応用

研究課題名(英文) Quantum chemistry method with electron correlation effect for the analysis of the cooperative molecular recognition process in DNA

研究代表者

青木 百合子 (Aoki, Yuriko)

九州大学・総合理工学研究科(研究院)・教授

研究者番号：10211690

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 37,900,000円

研究成果の概要(和文)：量子化学は1981年福井謙一の国内第一回ノーベル化学賞以来、コンピュータの進歩と共に大きく発展してきた。しかし、ペタスケールスパコンが発展した今ですら、大きな生体系になると膨大な計算時間を必要とする。代表者らのグループで高分子の電子状態計算のために開発してきた超高精度オーダー(N)計算法 - 高分子の電子状態の理論的重合法 - Elongation法 - を三次元生体高分子に効率よく適用可能となるよう一般化した(3D-ELG法)。これを協同現象解明に役立てるため局所的構造最適化、電子相関、励起状態等のアルゴリズムを3D-ELG法に導入し、DNAの構造解析やミスマッチ過程やバンド構造の解明などに適用した。

研究成果の概要(英文)：Quantum chemistry has been rapidly developed along with remarkable progress in recent computers, since the Nobel Prize in Chemistry 1981, awarded to Kenichi Fukui, first time in Japan. Even with recently advanced peta-scale supercomputer, however, the accurate quantum chemical calculations should require enormous computational time. We have mainly been engaged in developing an original Order (N) computational method, theoretical synthesis of one-dimensional polymers - elongation method - toward three dimensional systems to become applicable to entangled DNA and proteins with high efficiency and accuracy. To make it use to the analysis of cooperative phenomena in DNA, algorithms for local geometry optimization, electron correlation and excited states calculations are incorporated into 3D-ELG method, and then geometrical structures, band structures, mismatch process were examined for DNA and proteins.

研究分野：量子化学

キーワード：Elongation法 分子軌道法 電子相関 構造最適化 DNA ミスマッチ バンド構造 タンパク質

1. 研究開始当初の背景

量子化学計算は小さな分子に対して成功を遂げたものの、ランダムな配列をもつ DNA や蛋白質等の非周期的大規模系に対しては無効である。本課題の根幹となる手法に関わるプログラム開発は世界にさきがけて 1990 年より着手している。これまで培ってきたノウハウをベースとして DNA やタンパク質の不規則三次元的な巨大生体系に対して *ab initio* 法のレベルで高速かつ高精度に実行可能とする世界で唯一のオリジナル手法を展開する。開発したプログラムを、生物界における諸現象に適用しうるよう方法的に発展させ、生物物理化学分野においても、電子状態理論の立場から貢献できる領域を新しく開拓していきたいという着想に至った。特に生体内における微妙な相互作用を扱う上で必須である電子相関効果計算、全系を扱うことない局所的構造最適化、局所励起状態計算のアルゴリズムが当初未導入であった。本プログラムの理論計算の枠を拡張し、DNA、タンパク質、糖、酵素など、現実の巨大生体分子に応用可能となるよう展開する。

2. 研究の目的

本申請課題では、巨大生体複雑分子に対し、超効率的にグローバルミニマムな安定構造を決定し、その電子状態を高精度に求めることにより生体内で起こる諸現象解明や生体機能をミクロな立場から設計できる方法を構築することを目的とする。そのために、一次元系高分子をターゲットとして代表者らがオリジナルに開発してきたElongation(ELG)法に、二次的に絡み合った系の安定構造、基底状態、励起構造、遷移状態を電子相関効果のもとで正確に得る手法を導入し、DNAを代表する生体系の生理機能を分子レベルで解明できる方法を展開する。構築したプログラムをDNAそのものや、DNAの機能発現にかかわるタンパク質・糖鎖なども含めた生体系一般に応用し、DNAにおける協同的分子認識機構解明と新規生体材料設計に役立てる。なお、本課題は応用というよりむしろ応用を行なうための道具(オリジナル計算手法)の開発が中心となる。

3. 研究の方法

(1) Elongation-LCIS法の開発

DNA やタンパク質を含む一般的な高分子に対して計算不可能な全系の励起状態計算を効率よく実現するための、領域局在化分子軌道を基底とした局所一電子励起配置間相互作用である Local Configuration Interaction Single (LCIS) 法を開発し、Elongation 法に導入を行なった。一重項と三重項に対する相互作用行列

$${}^1H_{iw,jx} = \frac{1}{2} \langle E_{wi} | H | E_{xj} \rangle = \delta_{ij} \delta_{wx} E_{HF} + \delta_{ij} F_{wx} - \delta_{wx} F_{ij} + 2(iw|jx) - (ij|wx)$$

$${}^3H_{iw,jx} = \frac{1}{2} \langle E_{wi} | H | E_{xj} \rangle = \delta_{ij} \delta_{wx} E_{HF} + \delta_{ij} F_{wx} - \delta_{wx} F_{ij} - (ij|wx)$$

において、基底を正準軌道ではなく領域局在化分子軌道で表現することが本手法の特色である。ここで、 F_{ij}, F_{wx} は MO ベースの Fock 行列要素、 E_{HF} は参照 HF エネルギーである。以降記述する扱いでも同様に、全て領域局在化分子軌道で表現することにより、局所的な効果を可能な限り全系からの影響を含めた形で効率の良い扱いを実現している。

(2) Elongation-LMP2法の開発

電子相関効果

Elongation-LCIS 法と同様に、領域局在化分子軌道を基底とした Local MP2 法を導入し、系を伸長したあとに効率よく特定の領域の相関効果を算出できるように開発した。

(3) Elongation-OPT法の開発

それまで領域局在化分子軌道を基底とした構造最適化法である Elongation-OPT 法において数々の不明名点があった。Frozen 軌道と Active 軌道との境界付近で精度が下がることである。また、しばしば従来法による全系の最適化に比べて安定点に到達する例が出てきたので、これらの現象について解析し、解明および改良を行なった。

(4) 一般化のための 3D-ELG法の開発

DNA にタンパク質などが絡み合った系を計算するための三次元系のための Elongation 法は既に関係していたが、AO-cut-off が成されないため計算速度に問題があった。3D-ELG 法では、反応末端と Frozen 部の配置により領域局在化分子軌道を Frozen 化したり Active 化する作業が頻りに繰り返されるが、不要な基底関数を取り除くための AO-cut-off が必要に応じて自動的に働くようにプログラム開発を行なった。また、電子非局在性の強い系に対しては Elongation 法で用いている領域局在化分子軌道の局在性は自ずと劣ってくる。その際、軌道を強引に Frozen してしまうと、全系計算との計算誤差が大きくなる。さらに広がった電子状態をもつ DNA にも対応できるよう、広がった軌道はそのまま Active 領域に帰属して計算精度を落とさないように工夫した Orbital Shift 法を導入した。また、DNA が関わる生体スピンを扱う上で、Elongation 法を開殻系に対して適用可能にしておく必要がある。そのために、Active 部分のみのスピン多重度の指定で稼動する Elongation-UHF 法を開発した。

(5) DNA 塩基対シーケンスのカウンターイオン、エネルギーバンド構造への影響の解析

プロトンやナトリウムカウンターの存在下にて様々な DNA のバンド構造を局所状態密度計算から解析する手法を導入した。

周期境界条件下で DNA を計算することによりエネルギーバンド構造を算出し、DNA の結晶軌道がどのように表現されるのかを解析する手法を導入した。

(6) 高分子重合反応の効率的な局所的分子動力学法の開発

Elongation 法を生体系に応用するに当たっては、領域局在化分子軌道を基底とした分

子動力学法の構築が、効率的にその動的な変化を追う上では新しい分野の開拓につながるため、これをプログラム化した。一方、DNA 上での反応（たとえばタンパク質との相互作用など）を論じる上での反応解析のための Through Space/Bond(TS/TB)相互作用解析法の導入を試みた。ただし、それ以前に TS/TB 法の適用が小さな基底関数にしか対応していなかったため大きな基底関数に適用可能となるよう改良を行なった。

(7) Elongation-B SSE 補正相互作用解析

DNA を構築する 2 本のヘリックス鎖間の水素結合効果を論じるためには、一本鎖で計算する必要が出てきた。その際に問題となるのは基底関数の Superposition error である。

(8) 中間静電場下での Elongation 法の開発

生体分子では周囲の溶媒効果のほか、様々な静電場の元で効率よく計算する必要がある。さらに、DNA 鎖を伸長する過程において、攻撃塩基対の電荷を予め置いておいた上で、Active 部分の相互作用計算を行う方が SCF の収束性が早い。よって遠距離クーロン相互作用を予め既知の情報を書いた状態で SCF 計算を実行する手法の導入を行なった。

4. 研究成果

(1) Elongation-LCIS 法の開発

開発した本方法に対して DNA に適用するには系が巨大であるため、まず色素ドナーおよびアクセプタを末端に有するワイヤ系に適用し、局所励起状態が高精度かつ高速に得られることを確認した。本手法により、CI 計算に用いる参照関数の数が従来法に比べて格段に減少し、効率の高い局所 CI 計算とともに、励起エネルギーは従来法による全系計算と比べて 10^{-4} Hartree と、励起状態としては極めてよい一致を与えることを確認した。

(2) Elongation-LMP2 法の開発

電子相関効果

開発した本方法に対して様々なタンパク質に適用し、高精度かつ高速に得られることを確認した。Local MP2 法における電子相関効果の影響の局所性と Elongation 法での領域局在化分子軌道との愛唱が非常に良く、従来法による相関エネルギーとの誤差を 10^{-8} Hartree/atom を保持したまま、全系計算に比べると無視できるほどの超効率的計算が可能であることを示した。また、大きな基底関数に対しても対応しうることを確認している。

(3) Elongation-OPT 法の開発

構造最適化に関わるエネルギー勾配の認識を Elongation 法による領域局在化分子軌道を基底として表現することで、Frozen 部分の構造を固定すること以外には何も変化はないはずであったが、DNA に適用したところ、しばしば Elongation-OPT による最安定構造が従来法による全系の最安定構造とのずれが目立ち、Elongation-OPT による最安定構造の方がむしろ安定であることを見出した。こ

の原因を調査したところ、Elongation-OPT 法では局所的に構造を最適化するために、反応部位付近とは無関係な構造パラメータを固定することで、むしろ最終的な系全体としてはより安定な構造に到達することを見出した。よって、従来の構造最適化法にはない本手法の利点を確認したことになる。

(4) 一般化のための 3D-ELG 法の開発

応用性を高めるために DNA が三次元的に絡み合ったり、タンパク質との相互作用を行なう場合を想定し、一旦 Frozen した領域に反応末端が近づいてきた際に再度その部分を Re-activate する、つまり自動的に必要な領域軌道を認識して固有値問題に含める手法を開発した。合わせて、Orbital shift 法も導入し、より広がった電子を有する DNA 系にも適用可能となった。本手法は既に手がけていたが、計算精度がより改善されるようプログラムの改善を行なった。なお、金属等が DNA に混入したときなどを想定し、閉殻系のみではなく開殻系にも対応するよう一般化を行ない、まず簡単な高分子に対して開殻系の計算が可能となるようプログラム化し、正常に稼動することを確認した。ただし、Active 領域内のスピン多重項を、各領域に対してそのスピンの向きを一義的に決定できないという問題に直面した。解決方法の一つとして、Constrained DFT 法の導入により、特定の領域に対して一度決めたスピン状態を保持する手法を検討している。

(5) DNA 塩基対シーケンスのカウンターイオン、エネルギーバンド構造への影響の解析

A- および B-type poly(dG)·poly(dC)、poly(dA)·poly(dT) DNA の Counter-ion 効果について解析を行ない、A- および B-type poly(dG)·poly(dC) DNA においては、グリシンからシトシンへ、A- および B-type poly(dA)·poly(dT) DNA のいはアデニンからチミンへの電子励起に関わるホッピング伝導が電子移動の役割を担う可能性を示唆した。一方、解析周期境界条件下において量子化学計算を実行する手法と Elongation 法を比較しながら、DNA 塩基対の様々なシーケンスをエネルギーバンド構造と局所状態密度の観点から解析できるように開発した。また、塩基対間での軌道エネルギーの縮重がもたらす HOMO (荷電子バンド) や LUMO (導電バンド) への影響について縮重系におけるユニタリー変換を用いて解析した。

(6) 高分子重合反応の効率的な局所的分子動力学法の開発

系を伸長する過程において、Elongation 法の Active 領域のみで分子力学 (MD) 法を効率よく実行できるようにプログラム開発を行なった。つまり Active 領域の固有値問題を解く段階でエネルギー勾配を MD の入力として用いることにより、反応部位とは関係のない Frozen 領域の構造を動かすことなく末端部分のみで MD を効率的に実行する。全系がダイナミックに動く場合には本手法は

利用できないが、高分子反応のように目的とする反応部位の時間の発展を追跡する場合には非常に有効であることを示し、ポリグリシンや糖鎖（キシレンとその水素化による構造変化）に対して適用した。

また、DNA とタンパク質や有機化合物が反応する場合の解析法として、Through Space 相互作用解析法が利用できるように、MP2 法などの電子相関効果を導入した上で大きな基底関数にも対応しうるように改良し、モデルとしていくつかの有機反応に適用した。

(7) Elongation-BSSE 補正相互作用解析

DNA のそれぞれの一本鎖を計算して、そのあと合体系を計算して相互作用エネルギーを算出する際に、BSSE を導入するプログラム開発として counterpoise 法を組み込んだ。これを用いて DNA における G---C から A---T にミスマッチする現象の解析に適用した。

(8) 中間静電場下での Elongation 法の開発

生体系における遠距離相互作用を効率的に取り込む本手法をプログラム化し、様々な電荷 [with atoms-in-molecules (A), Hirshfeld (H), Mulliken (M), natural orbital (N), and Voronoi (V) population analyses] の元でポリグルタミン酸とアラニンからなるタンパク質系に適用し、計算精度および計算効率の改善を確認した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 35 件)

Yuichi Orimoto, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Elongation method for electronic structure calculations of random DNA sequences, *J. Comput. Chem.*, 36(28), 2103-2113, 2015, DOI:10.1002/jcc.24047, 査読有.

Lin Jin, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Interaction of OH⁻ with Xylan and Its Hydrated Complexes: Structures and Molecular Dynamics Study Using Elongation Method, *J. Mol. Model.*, 21(5), 117(1-10), 2015, doi:10.1007/s00894-015-2666-5, 査読有.

Kai Liu, Jacek Korchowiec, and Yuriko Aoki, Intermediate electrostatic field for the generalized elongation method, *ChemPhysChem*, 16(7), 1551-1556, 2015, DOI:10.1002/cphc.201402901, 査読有.

Yuichi Orimoto, Ryohei Yamamoto, Peng Xie, Kai Liu, Akira Imamura, and Yuriko Aoki, Ab initio O(N) elongation-counterpoise method for BSSE-corrected interaction energy analyses in biosystems, *J. Chem. Phys.*, 142(10), 104111(1-11), 2015,

doi:10.1016/j.poly.2014.11.013, 査読有.

Piotr Kuźniarowicz, Kai Liu, Yuriko Aoki, Feng Long Gu, Anna Stachowicz, and Jacek Korchowiec, Intermediate electrostatic field for the elongation method, *J. Mol. Model.*, 20(6), 2277(1-8), 2014, doi:10.1007/s00894-014-2277-6, 査読有.

Akira Imamura and Yuriko Aoki, Helical molecular orbitals around straight-chain polyyne oligomers as models for molecular devices, *Chem. Phys. Lett.*, 590, 136-140, 2013, DOI:10.1016/j.cplett.2013.10.064, 査読有.

Kai Liu, Yun-an Yan, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, A modified localization scheme for the three-dimensional elongation method applied to large systems, *Chem. Phys. Lett.*, 565, 143-147, 2013, DOI:10.1016/j.cplett.2013.02.039, 査読有.

Peng Xie, Yuichi Orimoto, and Yuriko Aoki, An Efficient Local Molecular Dynamics Polymerization Simulation Combined with an Ab Initio MO Method, *Materials*, 6(3), 870-885, 2013, DOI:10.3390/ma6030870, 査読有.

Peng Xie, Hiroyuki Teramae, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Electronic states of mixed base pairs systems of DNA and the effect of base composition and sequences on the band structures using screw axis translational symmetry, *Int. J. Quantum Chem.*, 113(4), 489-496, 2013, DOI:10.1002/qua.24199, 査読有.

青木 百合子, Elongation 法による巨大系の効率的電子状態・構造シミュレーション, 日本シミュレーション学会, 32(2), 125-135, 2013, 査読有.

Kai Liu, Liang Peng, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, Three dimensional elongation method for large molecular calculations, *Chem. Phys. Lett.*, 560, 66-70, 2013, DOI:10.1016/j.cplett.2012.12.046, 査読有.

Yuriko Aoki and Feng Long Gu, Generalized Elongation Method: From One-Dimension to Three-Dimension, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering: Theory and Computation: Old Problems and New Challenge, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009(ICCMSE 2009),

1504(1), 647-650, 2012, DOI: 10.1063/1.4771778, 査読有.
Kai Liu, Jacek Korcowiec, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, Geometry Optimization for Large Systems by the Elongation Method, *Theor. Chem. Acc.*, 131, 1277 (1-8), 2012, DOI: 10.1007/s00214-012-1277-9, 査読有.
Yuriko Aoki and Feng Long Gu, An elongation method for large systems toward bio-systems, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 14(21), 7640-7668, 2012, DOI: 10.1039/C2CP24033E, 査読有.
Peng Xie, Kai Liu, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, Counter-ion effects of A- & B-type poly(dG)·poly(dC) and poly(dA)·poly(dT) DNA by elongation method, *Int. J. Quantum Chem.*, 112(1), 230-239, 2012, DOI: 10.1002/qua.23230, 査読有.

[学会発表](計 63 件)

Yuriko Aoki, Linear Scaling Method for Large Systems and its Applications to Nano-Bio Systems, The 6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS-2015), 2015.10.13. Bratislava(Slovak Republic)

Yuichi Orimoto and Yuriko Aoki, Computational functional design of artificial DNAs: application of elongation method and through-space/bond interaction analysis, 第42回国際核酸化学シンポジウム, 2015.09.23. イーグレひめじ(兵庫県姫路市)

Yuichi Orimoto and Yuriko Aoki, 機能性人工核酸の理論的分子設計～導電性・強磁性・非線形光学特性～, 第9回分子化学討論会, 2015.09.19. 東京工業大学(東京都目黒区)

Yuriko Aoki, Kai Liu, Wataru Mizukami, and Yuichi Orimoto, 大規模原子分子系に向けた効率的Elongation法の展開と応用, 第9回分子化学討論会, 2015.09.17. 東京工業大学(東京都目黒区)

Yuichi Orimoto and Yuriko Aoki, Highly efficient electronic structure calculations of biomaterials for their functional design, 2015 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR 2015), 2015.08.19. Sun Moon Lake(Taiwan)

Yuriko Aoki, Theoretical design for NLO polymers, 2015 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR 2015), 2015.08.19. Sun Moon Lake(Taiwan)

Yuriko Aoki, An efficient quantum chemical approach for material design, 2015 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR 2015), 2015.08.19. Sun Moon Lake(Taiwan)

Yuriko Aoki, Elongation Method for Functional Design of Nano-Bio Systems, The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), 2015.06.12. Beijing(China)

青木 百合子, Elongation Method for Efficient Quantum Chemical Calculations of Large Systems towards Material Design, The First Joint Symposium of Kyushu University and Yonsei University on Materials Science and Chemical Engineering(SKY-1), 2015.02.06. 九州大学(福岡県福岡市)

青木 百合子, 大規模原子分子系の機能設計のための高速高精度量子化学計算法-Elongation法-の開発, 第12回稲盛フロンティア研究講演会「実践的課題への応用に向けた大規模計算技術の可能性」, 2015.01.23. 九州大学(福岡県福岡市)

Yuichi Orimoto, Yuuki Kawamura, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Order-N electronic structure calculations of natural and artificial DNAs towards their functional design, 第63回高分子討論会, 2014.09.25. 長崎大学(長崎県長崎市)

Yuriko Aoki, Kai Liu, Xun Zhu, Ryota Tsutsui, and Yuichi Orimoto, Development of ELG method for highly accurate molecular design and its applications to large systems, 第8回分子科学討論会, 2014.09.21. 広島大学(広島県東広島市)

Yuichi Orimoto, Yuuki Kawamura, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Theoretical functional design of artificial DNAs by O(N) elongation method and TS/TB interaction analysis, 第8回分子科学討論会, 2014.09.22. 広島大学(広島県東広島市)

Yuriko Aoki, Recent development of highly accurate linear scaling elongation method and its applications to large systems, 2014 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC 2014), 2014.08.22. Quzhou(China)

Yuichi Orimoto, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Functional design of natural and artificial nucleic acids via ab initio order-N elongation method:

- computational approaches, The 40th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, 2013.11.13. 神奈川大学(神奈川県横浜市)
- Yuichi Orimoto, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Highly efficient O(N) calculations of natural and artificial DNAs by elongation method, 第7回分子科学討論会, 2013.09.27. 京都テルサ(京都府京都市)
- Yuriko Aoki, Kai Liu, Peng Xie, and Yuichi Orimoto, An efficient searching of optimized geometries for proteins and DNA by ELG-OPT method, 第7回分子科学討論会, 2013.09.26. 京都テルサ(京都府京都市)
- Yuriko Aoki, Elongation method for efficient and accurate calculations of large systems and applications to DNA, proteins, and nanotubes towards material design, Current Trends in Theoretical Chemistry VI, 2013.09.05. Krakow(Poland)
- Yuichi Orimoto, Peng Xie, Kai Liu, and Yuriko Aoki, Highly efficient quantum chemistry calculations of DNA for designing biomaterials, 14th Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology (CSS-EEST 14), 2013.02.19. 九州大学(福岡県春日市)
- Yuriko Aoki, Highly accurate and efficient quantum chemical method for nano-bio functional designs, The 2nd International Symposium on Large-scale Computational Science and Engineering, 2012.11.08. 日本学術会議講堂(東京都港区)
- 21 Peng Xie, Yuichi Orimoto, Kai Liu, Yun-an Yan, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, Elongation dynamics and local transition state search on reaction site, 第6回分子科学討論会, 2012.09.21. 早稲田大学(東京都新宿区)
- 22 Kai Liu, Yuichi Orimoto, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, Efficient search for optimized geometry of whole system by elongation local optimization method, 第6回分子科学討論会, 2012.09.21. 早稲田大学(東京都新宿区)
- 23 Yuichi Orimoto, Peng Xie, Kai Liu, Feng Long Gu, and Yuriko Aoki, High-efficient DNA electronic structure analysis by ab initio elongation method, 第6回分子科学討論会, 2012.09.18. 早稲田大学(東京都新宿区)
- 24 Yuriko Aoki, Kai Liu, Yun-an Yan, Yuichi Orimoto, and Feng Long Gu,

- Development of elongation optimization method and local vibrational analysis, 第6回分子科学討論会, 2012.09.18. 早稲田大学(東京都新宿区)
- 25 Yuichi Orimoto and Yuriko Aoki, Hydration effects on DNA in water: theoretical ab initio study via elongation-PCM method, 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 2012.06.07. 九州大学(福岡県春日市)
- 26 Kai Liu and Yuriko Aoki, Elongation geometry optimization method for bio-molecule within polarizable continuum model, 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 2012.06.07. 九州大学(福岡県春日市)
- 27 Peng Xie, Yuichi Orimoto, and Yuriko Aoki, A new ab-initio molecular dynamics method for aperiodic bio-polymer: Elongation-MD, 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 2012.06.06. 九州大学(福岡県春日市)

〔産業財産権〕

出願状況(計 1 件)

名称: 多次元系用エロンゲーション法の分子軌道演算装置、該方法、該プログラム及び記録媒体

発明者: 青木 百合子、今村 詮、Liu Kai

権利者: 科学技術振興機構

種類: 特許

番号: 特願 2014-104592

出願年月日: 2014年5月20日

国内外の別: 国内

6. 研究組織

(1) 研究代表者

青木 百合子 (AOKI, Yuriko)

九州大学・大学院総合理工学研究院・教授

研究者番号: 10211690

(2) 連携研究者

Feng Long Gu (GU, Feng Long)

華南師範大学・教授

研究者番号: 80404036

今村 詮 (IMAMURA, Akira)

広島大学・名誉教授

研究者番号: 70076991

(3) 研究協力者

Yuichi Orimoto (Yuichi Orimoto)

Jacek Korcchowicz (KORCZOWIEC, Jacek)

Marcin Makowski (MAKOWSKI, Marcin)

Bernie Kirtman (KIRTMAN, Bernie)

Benoît Champagne (CHAMPAGNE, Benoît)

Michael Springborg (SPRINGBORG, Michael)