

令和 5 年 6 月 14 日現在

機関番号：32689

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2018～2022

課題番号：18H05264

研究課題名(和文) 光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明

研究課題名(英文) Clarification of Ubiquitous Proton Function in Photoreceptive Proteins by Quantum Molecular Dynamics Simulations

研究代表者

中井 浩巳 (Nakai, Hiromi)

早稲田大学・理工学術院・教授

研究者番号：00243056

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 151,340,000円

研究成果の概要(和文)：生体分子系においてプロトンは多様な形態で遍在し(遍在プロトン)、周囲の構造や電子状態の変化に伴って複雑な動態を示す。その結果生じるプロトン移動は生命現象において重要な寄与を果たす。本研究では、生体分子系全体を量子的に取り扱うための基盤技術の開発と、光受容タンパク質を対象とした応用を実施し、生命現象の微視的機構を遍在プロトンの観点から解明することを目指した。開発では、独自の量子分子動力学法に対して大規模・長時間化、励起状態への拡張、状態間遷移の実現を達成した。応用では、プロトンポンプやチャネルにおいて遍在プロトンがオキシニウムイオンや水酸化物イオンを経由して機能発現に関与する分子機構を解明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で確立した量子分子動力学法によって、光受容タンパク質を含む多様な生体分子系において遍在プロトンに関わる機能発現機構を、実験では観測困難な高い時空間分解能で解明するための理論基盤技術を創出することに成功した。実際、当初計画にはなかったが、コロナ禍において本手法を駆使した応用として、新型コロナウイルス感染症に対する創薬研究を実施した。その結果、遍在プロトンを戦略として、標的タンパク質に対して高い親和性・反応性を有する候補化合物を選定した。本手法の公開プログラムは世界中で利用されており、バイオに限らず電池や触媒など幅広い分野で成果を挙げている。以上より、本研究の学術的・社会的意義は極めて高い。

研究成果の概要(英文)：In biomolecular systems, protons ubiquitously exist in various forms, and show complex dynamical behavior coupled with the electron-state changes and structural changes in the surrounding environment. The resulting proton transfer reactions play a vital role in the mechanisms for achieving functions on life phenomena. In this study, we developed a theoretical framework based on our original quantum molecular dynamics (QMD) method for clarifying the microscopic mechanisms in biological processes, and applied it to photoreceptive proteins. As a result, we succeeded in extending the QMD method for huge, long-time, excited-state, or nonadiabatic dynamics. Moreover, we revealed the molecular mechanisms involving ubiquitous protons via hydronium or hydroxide ions for achieving biological functions in proton pumps and channels.

研究分野：理論化学

キーワード：光受容タンパク質 量子的分子動力学法 遍在プロトン バクテリオロドプシン FoF1-ATP合成酵素
光活性イエロータンパク質 励起状態 非断熱遷移

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

生体分子に備わっている機能発現機構は長い年月をかけて洗練された進化の産物であり、その制御の鍵となるのは生体分子系の相互作用によって生じる原子配置および電子状態の複雑多様な揺らぎ・変化である。生体分子系を含むあらゆる環境下において、プロトンは形態・振舞いを柔軟に変えて周囲の電子状態変化や化学反応の駆動に重要な寄与を果たしている。したがって、生体分子系の至る所に存在するプロトン(遷在プロトン)の位置や動的挙動を精緻に捉えることができれば、生命現象の微視的機構解明の大きな進展が期待される。

実験的には、X線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡(2017年ノーベル化学賞)などを用いて生体分子の立体構造を明らかにすることで、その機能の理解を目指す研究(構造機能相関)が数多くなされてきた。決定された生体分子の立体構造はProtein Data Bank (PDB)に蓄積され、申請時点(2017年10月)で約134,000件のデータが登録されていた。しかし、空間解像度の制約によりプロトンの位置が特定された構造は10%以下にとどまっていた。

理論的には、生体分子の構造変化を解析するために経験力場に基づく古典分子動力学(CMD)法が、また生体分子中で局所的に起こる化学反応を効率よく記述するために量子力学と経験力場のハイブリッド法である量子力学/分子力学(QM/MM)法(2013年ノーベル化学賞)が広く用いられてきた。従来のアプローチでは遷在プロトンの散発的な移動の取り扱いが困難であり、その対処には量子的分子動力学(QMD)法が必須であった。しかし、QMD計算では計算コストが格段に増加するため、取り扱える系のサイズが数百原子程度に限定されていた。

このように生体分子系における遷在プロトンの動態は、基本的かつ本質的であるにも関わらず実験的にも理論的にも探究することが困難な問題であった。

2. 研究の目的

光受容タンパク質は、遍在的なプロトン移動が関与して様々な機能を発現することが知られている。しかし、生体分子系全域における遷在プロトンの反応ダイナミクスの微視的起源の探求には、大規模系での化学反応を適切に取り扱うことが可能なQMD法が求められる。本研究の準備状況として研究代表者らは実用的なQMD法の分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法を開発していた。DC-DFTB-MD法をスーパーコンピュータ「京」上で実行することで、エネルギー計算で500万原子、分子動力学計算で10万原子を取り扱うことに挑戦していた。これは、CMD法とQMD法の間に存在する取り扱える系のサイズ(原子数)のギャップを橋渡しする成果として、国内外の研究者に大きなインパクトを与えていた。

光受容タンパク質は生体分子系において光をエネルギー・情報に変換する重要な役割を担う。最も代表的な光受容タンパク質であるバクテリオロドプシン(BR)では、発色団の光異性化を起点とした生体膜内外の能動的プロトン輸送がエネルギー変換の原動力である。2016年にX線自由電子レーザー(XFEL)を用いた時間分解結晶構造解析によって、BRを光で励起した後の連続した構造変化が捉えられた。しかし、時空間解像度の制約のためプロトン移動の直接的観測はなされていない。そのため、プロトン移動の反応経路・タイミングは未解明のままであった。

本研究では、光受容タンパク質全系を量子的に取り扱い、遍在的に起こり得るプロトン移動を網羅的に解析することで、生命現象の微視的機構を理論的に解明することを目指した。また、そのために必要となる革新的なQMD法の開発も併せて行うこととした。

3. 研究の方法

本研究では、理論およびプログラム開発に関する基礎テーマ(T1)、(T2)、基底状態に関する応用テーマ(G1)、(G2)、(G3)ならびに励起状態に関する応用テーマ(E1)、(E2)を遂行した。また、当初に予見していなかった新たな展開として、理論およびプログラム開発に関する基礎テーマ(T3)、(T4)ならびに基底状態に関する応用テーマ(G4)を遂行した。

(T1) GPUアクセラレータによる長時間シミュレーション手法の開発

DC-DFTB-MD法は、QMD法の中で最も高速に大規模系を取り扱える手法である。更なる大規模化・長時間化によって生体分子系への応用を実現するため、通常のCPUよりも数十倍の演算処理が可能なGPUアクセラレータを活用した理論基盤技術を確立する。このために、DC-DFTB-MD法のプログラムであるDCDFTBMDをGPUアクセラレータに適したアルゴリズムに変更する。

(T2) 大規模励起状態シミュレーション手法の開発

光受容タンパク質における光反応を起点とした機能発現機構の解明には、光照射後の励起状態ダイナミクスを高い時空間分解能で追跡することが不可欠である。基底状態のみに対応したDC-DFTB-MD法の時間依存(TD)型への拡張により励起状態にも対応したDC-TDDFTB-MD法を開発する。また、長距離補正(LC)法の導入により精度改善も行う。さらに、GPUアクセラレータへの対応も行う。これにより、大規模励起状態QMD計算の理論基盤技術を確立する。

(G1) バクテリオロドプシンのプロトン移動ダイナミクス

BRでは、発色団の光異性化を始点とした光反応サイクル上での複数のプロトン移動によって能動的プロトン輸送機能が発現し、細胞内外のプロトン濃度勾配ならびにアデノシン三リン酸(ATP)の合成反応が実現する。脂質二重膜および水溶媒を含むBR全系(~50,000原子)を量子

的に取り扱った上で、2016年にXFELによって得られた連続スナップショットを初期構造とした**QMD計算**を実行する。これにより、すべての遍在的プロトン移動を実際に捉え、移動経路、反応障壁および反応サイクル上でのタイミングに関して詳細な知見を獲得する。

(G2) イオン輸送機能を持つ微生物型ロドプシンにおけるプロトン移動ダイナミクス

光開閉カチオンチャンネル (ChR2) および **光駆動ナトリウムポンプ (KR2)** では、光反応サイクル上での解離性アミノ酸残基 (Asp/Glu) のプロトン脱着に伴ってそれぞれ受動的および能動的カチオン輸送機能が実現する。脂質二重膜および水溶媒を含む**ChR2/KR2**全系 (~50,000原子) に対する**CMD計算**ならびに**QMD計算**によりカチオン透過機構と遍在的プロトン移動との関連性に関する新たな知見を獲得する。

(G3) FoF₁-ATP合成酵素における機能発現ダイナミクス

FoF₁-ATP合成酵素は、細胞内外のプロトン濃度勾配を利用してATPを合成するエネルギー変換機能を担う。**Fo**部位を対象とし、脂質二重膜および水溶媒を含む全系 (~180,000原子) に対する**CMD計算**ならびに**QMD計算**を実行し、プロトン伝導・リング回転部位に位置するGluのプロトン脱着や付随するリング回転運動の微視的機構に関して新たな知見を獲得する。

(E1) 光活性イエロータンパク質における光異性化ダイナミクス

光情報変換機能を持つ**光活性イエロータンパク質 (PYP)**を対象とし、水溶媒を含む全系 (約20,000原子) の**励起状態QMD計算**を実行する。これにより、発色団の光異性化反応に伴う活性部位の構造変化・電子状態変化・エネルギー移動 (緩和) を解析し、高効率・高速・部位特異的に起きる光異性化反応の微視的機構を解明する。

(E2) バクテリオロドプシンの光異性化ダイナミクス

(G1)の系に対して(E1)と同様の解析を実行し、BRの光異性化反応過程の詳細を解明する。

4. 研究成果

(T1) GPUアクセラレータによる長時間シミュレーション手法の開発

GPUアクセラレータを用いた**DC-DFTB-MD法**の高速化を行い、長時間の**QMDシミュレーション**を実現する手法開発を目指した(図1)。4種類の**GPU搭載ワークステーション**に対して各性能評価を行い、単精度・倍精度ハイブリッド型の実装により更なる高速化を図った。また、自由エネルギー曲面を更に高効率に求めるため、メタダイナミクス (MetaD) 法やレプリカ交換法などの拡張サンプリング手法を導入し、これらの手法を**DC-DFTB法**と組み合わせた階層的並列計算アルゴリズムを開発した。さらに、複数のMetaDシミュレーションを実行した後に自由エネルギー曲面の収束性を改善する統計的手法も開発した。

(T2) 大規模励起状態シミュレーション手法の開発

大規模系に対する励起状態シミュレーションを可能にするため、TD型を導入した**DC-TDDFTB法**を開発した。また、電子間相互作用を補正する**LC法**を導入した**DC-TDLCDFTB法**を開発し、精度向上を図った。励起状態計算は基底状態と比較して4倍以上の計算時間が必要となるため、実用のためには**GPUアクセラレータ**による高速化が必須である。そのため、**GPUアクセラレータ**に適した**DC-TDDFTB法**を開発した(図1)。実装にあたり、通信と演算のオーバーラップを効率的に行わせるよう工夫を施した。ベンチマークとして、**PYP**の励起エネルギーに対する**DC-TDDFTB計算**をCPUおよびGPU上で実行して計算時間を比較した結果、DC法を用いることにより約4,500倍、さらに**マルチGPUアクセラレータ**により約80倍の高速化に成功した。

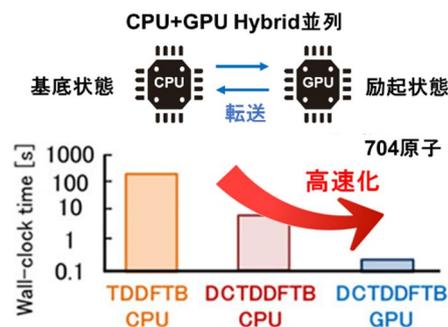


図1. GPUを用いた高速化ならびにDC-TDLCDFTB法の開発とGPU化。

(T3) 巨大系の基底状態計算を扱うための手法開発

演算のボトルネックを改良するプログラム最適化手法の調整と省メモリ化により、BR 全系の **QMD 計算**において「京」利用時と同程度の計算時間の達成に必要な計算機台数を「富岳」では約 20 分の 1 に抑えることに成功した。さらに、従来からメモリ使用量を大幅に削減するアルゴリズムを開発・実装し、「富岳」上で量子化学計算では世界最大クラスとなる**1 億原子系**に対する超並列計算を世界で初めて達成した(図2)。

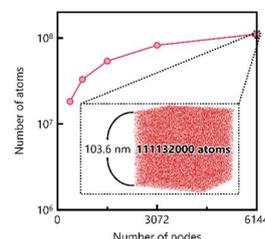


図2. 系のサイズに関する「富岳」上でのベンチマーク計算結果。

(T4) 状態間遷移を伴うダイナミクスを扱うための手法拡張

DC-TDDFTB 法による励起状態ダイナミクス計算手法を拡張し、**状態間遷移**を扱えるようにした。このため、**状態間遷移**を扱えるダイナミクス手法である **surface hopping (SH)** 法を導入した。(DC-)TDDFTB 法に基づく励起状態計算は、励起状態と基底状態がエネルギー的に近接する

状況下では破綻することが知られている。そこで、この問題を解消するスピン反転(SF)理論を導入した。これにより、励起状態から基底状態への無輻射失活過程を扱うことを可能とした。**DC-TDDFTB 法**は色素中心に局在した励起状態に特化した手法であるため、非局在化した励起状態を扱うには新たなアプローチが求められる。そこで、SHと同様に複数状態が関与するダイナミクスを扱う手法である Ehrenfest 法をベースに、DC の概念を基にした近似を適用することで、非局所励起に対しても効率的な計算が可能な励起状態ダイナミクス手法を開発・実装した。

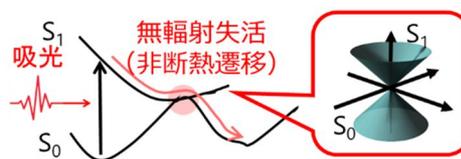


図3. ポテンシャル曲面と非断熱遷移。

(G1) バクテリオロドプシンのプロトン移動ダイナミクス

BRのL型中間体におけるシッフ塩基(SB)から Asp85 への1段階目のプロトン移動を解析するため、L型4種類の結晶構造を対象として**CMD計算**による平衡化の後**QMD計算**を実行した。前半2種類の構造において、水分子 Wat452 が Thr89 を介して Asp85 へとリレー形式でプロトンを受け渡した後、生じた水酸化物イオン(OH⁻)中間体がSBからプロトンを受け取ることによって反応が進む全く新しい機構を明らかにした。次にM型中間体におけるプロトン放出基から細胞外側への2段階目のプロトン移動の解析に着手した。この反応ではプロトン受容体が水溶媒であるため、**遠在プロトン**を取り扱うことが可能な本手法が真価を発揮する。M型5種類の結晶構造を対象とした**QMD計算**を実行したところ、特定の構造において放出基出口付近の空隙に水分子が出現した。その水分子が放出基と水溶媒との間を水素結合ネットワークで繋ぎ、その上でオキソニウムイオン(H₃O⁺)を介したプロトンリレーにより反応が進むことを明らかにした。最後にN型中間体における Asp96 から RSB への3段階目のプロトン移動を解析するため、供与体と受容体の間を長距離にわたって繋ぐ水分子の鎖が観測された結晶構造を対象とする**QMD計算**を実行した。SBのプロトン化を始点とし、水分子の鎖上でOH⁻中間体が Asp96 の方向へ順次生成されるプロトンリレー形式により反応が進むことを明らかにした(図4)。以上より、**XFEL**の時空間分解能や**QM/MM計算**の制約下では捉えることができなかった全く新しい機構によってプロトン能動輸送が実現していることを初めて見出した(図4)。

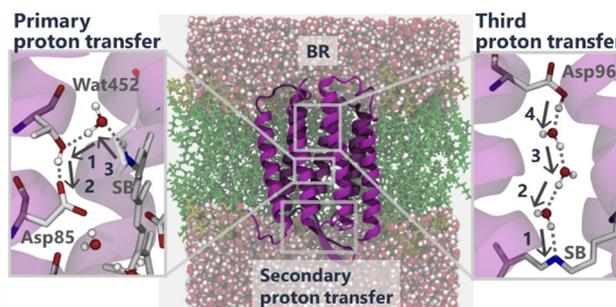


図4. BRにおける1, 2および3段階目のプロトン移動。

この反応ではプロトン受容体が水溶媒であるため、**遠在プロトン**を取り扱うことが可能な本手法が真価を発揮する。M型5種類の結晶構造を対象とした**QMD計算**を実行したところ、特定の構造において放出基出口付近の空隙に水分子が出現した。その水分子が放出基と水溶媒との間を水素結合ネットワークで繋ぎ、その上でオキソニウムイオン(H₃O⁺)を介したプロトンリレーにより反応が進むことを明らかにした。最後にN型中間体における Asp96 から RSB への3段階目のプロトン移動を解析するため、供与体と受容体の間を長距離にわたって繋ぐ水分子の鎖が観測された結晶構造を対象とする**QMD計算**を実行した。SBのプロトン化を始点とし、水分子の鎖上でOH⁻中間体が Asp96 の方向へ順次生成されるプロトンリレー形式により反応が進むことを明らかにした(図4)。以上より、**XFEL**の時空間分解能や**QM/MM計算**の制約下では捉えることができなかった全く新しい機構によってプロトン能動輸送が実現していることを初めて見出した(図4)。

(G2) イオン輸送機能を持つ微生物型ロドプシンにおけるプロトン移動ダイナミクス

ChR2におけるレチナールの熱異性化を対象とした**CMD計算**を実施した結果、発色団レチナールの C₁₃=C₁₄ における異性化 (*trans* → *cis* 転移) に伴って C₁₅=N_ε における異性化 (*anti* → *syn* 転移) も生じることが判明した。本結果は、最近の実験結果 [Khune et al., Proc. Natl. Acad. Sci. (2019)] と一致した。また、**CMD計算**で得られた構造群を初期構造とした**QMD計算**を実行した結果、13*trans*/15*anti* → 13*cis*/15*syn* の二重異性化において SB と Asp253 とのクーロン相互作用が重要であること、13*cis*/15*syn* 状態ではSBのプロトン解離が起きやすいことを明らかにした。以上より、**ChR2** の実際の光異性化においても、従来想定されていた 13*cis*/15*anti* 状態ではなく 13*cis*/15*syn* 状態への転移が起き、SB の脱プロトン化反応の受容体が従来論争となっていた Glu123 ではなく Asp253 であることが示唆された。本結果は、**ChR2** の光反応サイクル全容解明に不可欠な初期反応過程の理解を大きく前進させるものである。

(G3) FoF1-ATP 合成酵素における機能発現ダイナミクス

高分解能の電子顕微鏡構造を用い、回転子である c リング (サブユニット c の環状重合体) に存在する Glu56 のプロトン化状態を系統的に変え、**CMD計算**によって水チャネル形成と c リング回転のダイナミクスを解析した。その結果、膜内外をつなぐ水チャネル形成を明確に捉えることができ、チャンネル中央に位置するサブユニット a の Arg169 のクーロンポテンシャルがプロトンのリークを防いでいることを明らかにした(図5)。また、

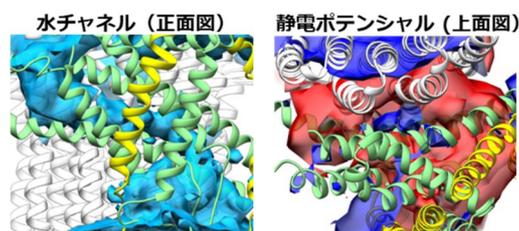


図5. Fo の水チャネルと静電ポテンシャル。

脱プロトン化した Glu56 と Arg169 間とのクーロン引力が回転運動を駆動すること、脱プロトン化した Glu56 の静電自己エネルギーの膜内での上昇(脱水和ペナルティー)によるラチェット機構が c リングの回転ブラウン運動を整流してトルク発生に寄与することも示した(図6)。

さらに、**CMD 計算**で得られた多数の構造群を用い、**QMD 計算**によってプロトン解離過程を解析した。その結果、出口の水チャンネルに面する Glu56 からプロトンが Grotthuss 機構によって高速に解離する様子を捉えることに成功した。水チャンネル中でのオキソニウムイオン (H_3O^+) 単体の拡散によってプロトン輸送が実現する機構も提唱されていた中で、**CMD 計算**と**QMD 計算**を組み合わせた本研究によって Grotthuss 機構による Fo の水チャンネル内高速プロトン移動を世界で初めて実証した。

(E1) 光活性イエロータンパク質における光異性化ダイナミクス

発色団モデル分子について S_1 - S_0 遷移前後の構造変化を **QMD 計算**により追跡した結果、共役二重結合部位の回転による *trans* *cis* 異性化の進行とあらゆる水溶媒の存在による S_0 状態でのフェニル基の反転の阻害を見出した。光励起前と光照射直後の結晶構造を対象として、気相中で得られた発色団の CI 構造を起点とする PYP 中での緩和過程に着目した **QMD 計算**を実行した。光照射直後の結晶構造のみ *trans* *cis* 異性化と主鎖との結合の根元となるチオエステル部位の回転が進むこと (図7)、周辺アミノ酸残基との相互作用により One-bond flip 機構での異性化の進行は困難であることを明らかにした。

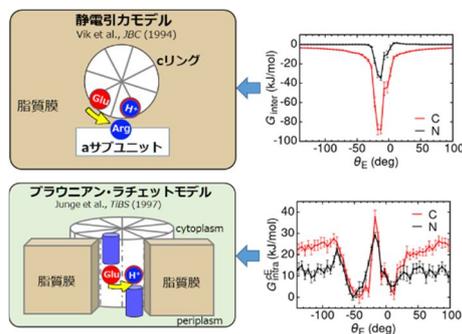


図6. Foでの2つのトルク発生機構。

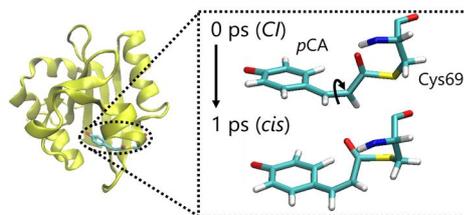


図7. PYPの光異性化過程。

(E2) バクテリオロドプシンの光異性化ダイナミクス

BR の光異性化過程において、CI 通過後の構造変化とエネルギー再分配に着目し、XFELによって観測された光異性化直後の結晶構造 16 点に対して **QMD 計算**を実行した。その結果、一部の結晶構造で、隣接する二重結合が協奏的に回転する Bicycle pedal 機構によって異性化が進行した。この結果をもとに、各々の結晶構造が CI 到達前の励起 (S_1) 状態か CI 通過後の基底 (S_0) 状態かを決定した (図8)。また、異性化に伴うエネルギー移動の解析から、発色団の余剰エネルギーが近傍のアミノ酸残基の伸縮振動モードへと散逸することを明らかにした。エネルギー移動に付随する発色団近傍の集団的ダイナミクスに注目したところ、SB に特異的に配位する内部水分子 (Wat402) と Asp212 との間の水素結合が異性化に伴って破断することを明らかにした。以上より、XFEL では得られない電子状態、エネルギー移動および時間分解能を超えた超高速ダイナミクスに関する情報を理論研究により導くことに成功した [H. Nakai, H. Uratani, T. Morioka, J. Ono, Phys. Chem. Chem. Phys., 投稿中]。

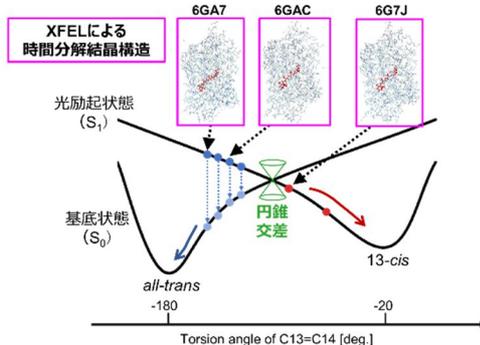


図8. BRの光異性化過程の追跡。

(G4) SARS-CoV-2 メインプロテアーゼ (M^{pro}) におけるプロトン移動ダイナミクス

M^{pro} に対する **QMD シミュレーション**を実行した結果、基質非存在下の活性部位では触媒反応に有利なイオンペア状態が最安定であることを明らかにした。本結果は中性子結晶構造解析の実験結果と一致した。また、基質存在下では、プロトン移動を伴った複数の異なる経路によって酵素反応過程が進行することを明らかにした。これらの **QMD シミュレーション**によって得られた構造群を受容体として仮想スクリーニングおよびアンサンブルドッキングを実行した結果、既知経口治療薬である nirmatrelvir (ファイザー社) および ensitrelvir (塩野義製薬) よりも高い結合親和性を有する新規候補化合物を見出した。さらに候補化合物と M^{pro} の相互作用系に対して **QMD シミュレーション**を実行した結果、水分子を介したプロトン移動を伴って M^{pro} 活性部位の Cys145 と共有結合を形成することを解明した (図9)。本化合物は高い結合親和性ならびに結合反応性を有する新たな共有結合阻害剤の候補として期待される。

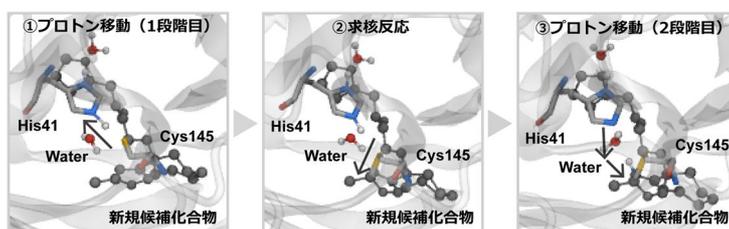


図9. 新規候補化合物と M^{pro} との間でのプロトン移動を伴った共有結合形成過程。

これらの **QMD シミュレーション**によって得られた構造群を受容体として仮想スクリーニングおよびアンサンブルドッキングを実行した結果、既知経口治療薬である nirmatrelvir (ファイザー社) および ensitrelvir (塩野義製薬) よりも高い結合親和性を有する新規候補化合物を見出した。さらに候補化合物と M^{pro} の相互作用系に対して **QMD シミュレーション**を実行した結果、水分子を介したプロトン移動を伴って M^{pro} 活性部位の Cys145 と共有結合を形成することを解明した (図9)。本化合物は高い結合親和性ならびに結合反応性を有する新たな共有結合阻害剤の候補として期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計60件（うち査読付論文 60件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Ono Junichi, Okada Chika, Nakai Hiromi	4. 巻 23
2. 論文標題 Hydroxide Ion Mechanism for Long Range Proton Pumping in the Third Proton Transfer of Bacteriorhodopsin	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ChemPhysChem	6. 最初と最後の頁 e202200109-1~11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cphc.202200109	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 Onabuta Yusuke, Kunimoto Masahiro, Ono Fumimasa, Fukunaka Yasuhiro, Nakai Hiromi, Zangari Giovanni, Homma Takayuki	4. 巻 138
2. 論文標題 Analysis of the behavior of Zn atoms with a Pb additive on the surface during Zn electrodeposition	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Electrochemistry Communications	6. 最初と最後の頁 107291 ~ 107291
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.elecom.2022.107291	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 Yoshikawa Takeshi, Takanashi Tomoya, Nakai Hiromi	4. 巻 18
2. 論文標題 Quantum Algorithm of the Divide-and-Conquer Unitary Coupled Cluster Method with a Variational Quantum Eigensolver	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 5360 ~ 5373
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jctc.2c00602	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 Onabuta Yusuke, Kunimoto Masahiro, Wang Songyi, Fukunaka Yasuhiro, Nakai Hiromi, Homma Takayuki	4. 巻 169
2. 論文標題 Effect of Li ⁺ Addition during Initial Stage of Electrodeposition Process on Nucleation and Growth of Zn	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of The Electrochemical Society	6. 最初と最後の頁 092504 ~ 092504
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1149/1945-7111/ac8c03	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 Takashima Chinami, Kurita Hisaki, Takano Hideaki, Ikabata Yasuhiro, Shibata Takanori, Nakai Hiromi	4. 巻 126
2. 論文標題 Experimental and Theoretical Evidence for Relativistic Catalytic Activity in C ₂ H Activation of <i>N</i> -Phenylbenzamide Using a Cationic Iridium Complex	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 7627 ~ 7638
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c04747	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 Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 158
2. 論文標題 Species-selective nanoreactor molecular dynamics simulations based on linear-scaling tight-binding quantum chemical calculations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 054106 ~ 054106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0132573	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 Uratani Hiroki, Nakai Hiromi	4. 巻 14
2. 論文標題 Nanoscale and Real-Time Nuclear?Electronic Dynamics Simulation Study of Charge Transfer at the Donor?Acceptor Interface in Organic Photovoltaics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2292 ~ 2300
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.2c03808	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 Nakai Hiromi, Kobayashi Masato, Yoshikawa Takeshi, Seino Junji, Ikabata Yasuhiro, Nishimura Yoshifumi	4. 巻 127
2. 論文標題 Divide-and-Conquer Linear-Scaling Quantum Chemical Computations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 589 ~ 618
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c06965	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 KOSHIMIZU Uika, ONO Junichi, FUKUNISHI Yoshifum, NAKAI Hiromi	4. 巻 21
2. 論文標題 Hybrid $\<i\>$ in Silico $\</i\>$ Drug Discovery Study toward the Development of Oral Antivirals for COVID-19	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 48 ~ 51
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2022-0029	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 Takashima Chinami, Seino Junji, Nakai Hiromi	4. 巻 777
2. 論文標題 Database-assisted local unitary transformation method for two-electron integrals in two-component relativistic calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 138691 ~ 138691
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2021.138691	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 Maier Toni M., Ikabata Yasuhiro, Nakai Hiromi	4. 巻 154
2. 論文標題 Assessing locally range-separated hybrid functionals from a gradient expansion of the exchange energy density	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 214101 ~ 214101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0047628	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 Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 50
2. 論文標題 Quantum Chemical Calculations for up to One Hundred Million Atoms Using D $\<sc\>$ cdft $\<sc\>$ Code on Supercomputer Fugaku	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1546 ~ 1550
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210263	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 Shoji Yoshiaki, Ikabata Yasuhiro, Ryzhii Ivan, Ayub Rabia, El Bakouri Ouissam, Sato Taiga, Wang Qi, Miura Tomoaki, Karunathilaka Buddhika S. B., Tsuchiya Youichi, Adachi Chihaya, Ottosson Henrik, Nakai Hiromi, Ikoma Tadaaki, Fukushima Takanori	4. 巻 60
2. 論文標題 An Element Substituted Cyclobutadiene Exhibiting High Energy Blue Phosphorescence	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 21817 ~ 21823
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202106490	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 Kashida Junki, Shoji Yoshiaki, Ikabata Yasuhiro, Taka Hideo, Sakai Hayato, Hasobe Taku, Nakai Hiromi, Fukushima Takanori	4. 巻 60
2. 論文標題 An Air and Water Stable B ₄ N ₄ Heteropentalene Serving as a Host Material for a Phosphorescent OLED	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 23812 ~ 23818
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202110050	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 Nakai Hiromi, Takemura Toshiaki, Ono Junichi, Nishimura Yoshifumi	4. 巻 125
2. 論文標題 Quantum-Mechanical Molecular Dynamics Simulations on Secondary Proton Transfer in Bacteriorhodopsin Using Realistic Models	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 10947 ~ 10963
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c06231	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 Shoji Yoshiaki, Tanaka Naoki, Ikabata Yasuhiro, Sakai Hayato, Hasobe Taku, Koch Norbert, Nakai Hiromi, Fukushima Takanori	4. 巻 61(1)
2. 論文標題 Tetraaryldiborane(4) Can Emit Dual Fluorescence Responding to the Structural Change around the B ₂ B Bond	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202113549-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202113549	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 Katsurayama Yoshino, Ikabata Yasuhiro, Maeda Hajime, Segi Masahito, Nakai Hiromi, Furuyama Taniyuki	4. 巻 28(2)
2. 論文標題 Direct Near Infrared Light-Activatable Phthalocyanine Catalysts	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202103223-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202103223	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 Uratani Hiroki, Nakai Hiromi	4. 巻 17
2. 論文標題 Scalable Ehrenfest Molecular Dynamics Exploiting the Locality of Density-Functional Tight-Binding Hamiltonian	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 7384 ~ 7396
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.1c00950	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 Ono Junichi, Koshimizu Uika, Fukunishi Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 794
2. 論文標題 Multiple protonation states in ligand-free SARS-CoV-2 main protease revealed by large-scale quantum molecular dynamics simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 139489 ~ 139489
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2022.139489	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 Onabuta Yusuke, Kunimoto Masahiro, Wang Songyi, Fukunaka Yasuhiro, Nakai Hiromi, Homma Takayuki	4. 巻 126
2. 論文標題 Multiscale Simulation of Irregular Shape Evolution during the Initial Stage of Zn Electrodeposition on a Negative Electrode Surface	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 5224 ~ 5232
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c09569	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 Fujinami Mikito, Maekawara Hiroki, Isshiki Ryota, Seino Junji, Yamaguchi Junichiro, Nakai Hiromi	4. 巻 93
2. 論文標題 Solvent Selection Scheme Using Machine Learning Based on Physicochemical Description of Solvent Molecules: Application to Cyclic Organometallic Reaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 841 ~ 845
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20200045	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 Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 41
2. 論文標題 Hierarchical parallelization of divide and conquer density functional tight binding molecular dynamics and metadynamics simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1759 ~ 1772
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26217	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 Toko Kenta, Ito Kazuharu, Saito Hikaru, Hosono Yukiko, Murakami Kota, Misaki Satoshi, Higo Takuma, Ogo Shuhei, Tsuneki Hideaki, Maeda Shun, Hashimoto Kunihide, Nakai Hiromi, Sekine Yasushi	4. 巻 124
2. 論文標題 Catalytic Dehydrogenation of Ethane over Doped Perovskite via the Mars-van Krevelen Mechanism	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 10462 ~ 10469
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c00138	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 Maier Toni M., Iwabata Yasuhiro, Nakai Hiromi	4. 巻 152
2. 論文標題 Relativistic local hybrid functionals and their impact on 1s core orbital energies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 214103 ~ 214103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0010400	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 Uratani Hiroki, Nakai Hiromi	4. 巻 11
2. 論文標題 Simulating the Coupled Structural?Electronic Dynamics of Photoexcited Lead Iodide Perovskites	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 4448 ~ 4455
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c01028	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 Uratani Hiroki, Nakai Hiromi	4. 巻 152
2. 論文標題 Non-adiabatic molecular dynamics with divide-and-conquer type large-scale excited-state calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 224109 ~ 224109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0006831	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 Yoshikawa Takeshi, Doi Toshiki, Nakai Hiromi	4. 巻 152
2. 論文標題 Finite-temperature-based time-dependent density-functional theory method for static electron correlation systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 244111 ~ 244111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5144527	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 Ono Junichi, Imai Minori, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 124
2. 論文標題 Hydroxide Ion Carrier for Proton Pumps in Bacteriorhodopsin: Primary Proton Transfer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 8524 ~ 8539
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpccb.0c05507	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 Ikabata Yasuhiro, Fujisawa Ryo, Seino Junji, Yoshikawa Takeshi, Nakai Hiromi	4. 巻 153
2. 論文標題 Machine-learned electron correlation model based on frozen core approximation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 184108 ~ 184108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0021281	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 Wang Feng, Langford Steven, Nakai Hiromi	4. 巻 102
2. 論文標題 Robust design of D- -A model compounds using digital structures for organic DSSC applications	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Graphics and Modelling	6. 最初と最後の頁 107798 ~ 107798
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmgs.2020.107798	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 Uratani Hiroki, Morioka Toshiki, Yoshikawa Takeshi, Nakai Hiromi	4. 巻 16
2. 論文標題 Fast Nonadiabatic Molecular Dynamics via Spin-Flip Time-Dependent Density-Functional Tight-Binding Approach: Application to Nonradiative Relaxation of Tetraphenylethylene with Locked Aromatic Rings	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 7299 ~ 7313
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.0c00936	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 Sakti Aditya Wibawa, Chou Chien-Pin, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 50
2. 論文標題 Is Oxygen Diffusion Faster in Bulk CeO ₂ or on a (111)-CeO ₂ Surface? A Theoretical Study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 568 ~ 571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.200895	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 Murakami Kota, Mizutani Yuta, Sampei Hiroshi, Ishikawa Atsushi, Tanaka Yuta, Hayashi Sasuga, Doi Sae, Higo Takuma, Tsuneki Hideaki, Nakai Hiromi, Sekine Yasushi	4. 巻 23
2. 論文標題 Theoretical prediction by DFT and experimental observation of heterocation-doping effects on hydrogen adsorption and migration over the CeO ₂ (111) surface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 4509 ~ 4516
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP05752E	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 Uratani Hiroki, Yoshikawa Takeshi, Nakai Hiromi	4. 巻 17
2. 論文標題 Trajectory Surface Hopping Approach to Condensed-Phase Nonradiative Relaxation Dynamics Using Divide-and-Conquer Spin-Flip Time-Dependent Density-Functional Tight Binding	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 1290 ~ 1300
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.0c01155	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 Tanaka Yuta, Murakami Kota, Doi Sae, Ito Kazuharu, Saegusa Koki, Mizutani Yuta, Hayashi Sasuga, Higo Takuma, Tsuneki Hideaki, Nakai Hiromi, Sekine Yasushi	4. 巻 11
2. 論文標題 Effects of A-site composition of perovskite (Sr _{1-x} Ba _x ZrO ₃) oxides on H atom adsorption, migration, and reaction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 7621 ~ 7626
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1ra00180a	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 TAKASHIMA Chinami, SEINO Junji, NAKAI Hiromi	4. 巻 19
2. 論文標題 Implementation of Picture Change Corrected Density Functional Theory Based on Infinite-Order Two-Component Method to GAMESS Program	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 128 ~ 130
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2021-0002	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 Yoshikawa Takeshi, Komoto Nana, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 40
2. 論文標題 GPU Accelerated Large Scale Excited State Simulation Based on Divide and Conquer Time Dependent Density Functional Tight Binding	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 2778 ~ 2786
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26053	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 Uratani Hiroki, Chou Chien-Pin, Nakai Hiromi	4. 巻 22
2. 論文標題 Quantum mechanical molecular dynamics simulations of polaron formation in methylammonium lead iodide perovskite	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 97 ~ 106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cp04739e	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 Murakami Kota, Ogo Shuhei, Ishikawa Atsushi, Takeno Yuna, Higo Takuma, Tsuneki Hideaki, Nakai Hiromi, Sekine Yasushi	4. 巻 152
2. 論文標題 Heteroatom doping effects on interaction of H2O and CeO2 (111) surfaces studied using density functional theory: Key roles of ionic radius and dispersion	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 014707 ~ 014707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5138670	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 Yoshikawa Takeshi, Yoshihara Jyunya, Nakai Hiromi	4. 巻 152
2. 論文標題 Large-scale excited-state calculation using dynamical polarizability evaluated by divide-and-conquer based coupled cluster linear response method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 024102 ~ 024102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5124909	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 Komoto Nana, Yoshikawa Takeshi, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 16
2. 論文標題 Large-Scale Molecular Dynamics Simulation for Ground and Excited States Based on Divide-and-Conquer Long-Range Corrected Density-Functional Tight-Binding Method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 2369 ~ 2378
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.9b01268	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 Sakti Aditya W., Chou Chien-Pin, Nakai Hiromi	4. 巻 5
2. 論文標題 Density-Functional Tight-Binding Study of Carbonaceous Species Diffusion on the (100)-Al2O3 Surface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 6862 ~ 6871
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c00203	査読の有無 有
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 Inamori Mayu, Yoshikawa Takeshi, Ikabata Yasuhiro, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 41
2. 論文標題 Spin flip approach within time dependent density functional tight binding method: Theory and applications	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1538 ~ 1548
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26197	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 Inamori Mayu, Ikabata Yasuhiro, Yoshikawa Takeshi, Nakai Hiromi	4. 巻 152
2. 論文標題 Unveiling controlling factors of the S0/S1 minimum energy conical intersection (2): Application to penalty function method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 144108 ~ 144108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5142592	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 Ono Junichi, Nakai Hiromi	4. 巻 751
2. 論文標題 Weighted histogram analysis method for multiple short-time metadynamics simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 137384 ~ 137384
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2020.137384	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 NAKAI Hiromi, NISHIMURA Yoshifumi, SAKTI Aditya Wibawa, MUDCHIMO Tanabat, CHOU Chien-Pin	4. 巻 62
2. 論文標題 Surface Reaction Simulation based on Divide-and-Conquer Type Density Functional Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Method?: Case for Proton Diffusion on Pt(111) Surface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Vacuum and Surface Science	6. 最初と最後の頁 486 ~ 491
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/vss.62.486	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 URATANI Hiroki, CHOU Chien-Pin, NAKAI Hiromi	4. 巻 18
2. 論文標題 Quantum Mechanical Molecular Dynamics Simulations of Polaron Formation in a Perovskite Solar Cell Material	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 142 ~ 144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2019-0025	査読の有無 有
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 Sakti Aditya W, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 10
2. 論文標題 Recent advances in quantum mechanical molecular dynamics simulations of proton transfer mechanism in various water based environments	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 WIREs Computational Molecular Science	6. 最初と最後の頁 e1419 ~ e1419
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/wcms.1419	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 Iijima Mikuru, Ohnuki Jun, Sato Takato, Sugishima Masakazu, Takano Mitsunori	4. 巻 9
2. 論文標題 Coupling of Redox and Structural States in Cytochrome P450 Reductase Studied by Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 9341-9341
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-45690-2	査読の有無 有
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 Ohnuki Jun, Sato Takato, Sasaki Tohru, Umezawa Koji, Takano Mitsunori	4. 巻 123
2. 論文標題 Reply to the comment on Hydrophobic surface enhances electrostatic interaction in water	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 049602-049602
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.123.049602	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 Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 40
2. 論文標題 D cdfbmd : Divide and Conquer Density Functional Tight Binding Program for Huge System Quantum Mechanical Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1538 ~ 1549
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25804	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 Komoto Nana, Yoshikawa Takeshi, Ono Junichi, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 15
2. 論文標題 Development of Large-Scale Excited-State Calculations Based on the Divide-and-Conquer Time-Dependent Density Functional Tight-Binding Method	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 1719 ~ 1727
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.8b01214	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 Nakai Hiromi、Inamori Mayu、Ikabata Yasuhiro、Wang Qi	4. 巻 122
2. 論文標題 Unveiling Controlling Factors of the S0/S1 Minimum Energy Conical Intersection: A Theoretical Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 8905 ~ 8910
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.8b07864	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 Yoshikawa Takeshi、Nakai Hiromi	4. 巻 712
2. 論文標題 Fractional-occupation-number based divide-and-conquer coupled-cluster theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 184 ~ 189
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2018.09.056	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 DOI Toshiki、YOSHIKAWA Takeshi、NAKAI Hiromi	4. 巻 17
2. 論文標題 Development of the Divide-and-Conquer Based Single Reference Theory for Static Correlation Systems with Finite Temperature Scheme	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 212 ~ 214
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2018-0057	査読の有無 有
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 NISHIMURA Yoshifumi、YOSHIKAWA Takeshi、NAKAI Hiromi	4. 巻 17
2. 論文標題 Release of DCDFBMD Program	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 A21 ~ A27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2018-0052	査読の有無 有
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 Chou Chien Pin, Sakti Aditya Wibawa, Nishimura Yoshifumi, Nakai Hiromi	4. 巻 19
2. 論文標題 Development of Divide and Conquer Density Functional Tight Binding Method for Theoretical Research on Li Ion Battery	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Chemical Record	6. 最初と最後の頁 746 ~ 757
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/tcr.201800141	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 KOMOTO Nana, YOSHIKAWA Takeshi, ONO Junichi, NAKAI Hiromi	4. 巻 17
2. 論文標題 Development of the Divide-and-Conquer Time-Dependent Density Functional Tight-Binding Method for Photoreceptor Protein	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 127 ~ 129
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2018-0032	査読の有無 有
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 INAMORI Mayu, IKABATA Yasuhiro, WANG Qi, NAKAI Hiromi	4. 巻 17
2. 論文標題 Theoretical Study on the Intersection Structures between Potential Energy Surfaces	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 124 ~ 126
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2018-0021	査読の有無 有
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 Sato Takato, Sasaki Tohru, Ohnuki Jun, Umezawa Koji, Takano Mitsunori	4. 巻 121
2. 論文標題 Hydrophobic Surface Enhances Electrostatic Interaction in Water	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 206002-1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.121.206002	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139件(うち招待講演 24件/うち国際学会 40件)

1. 発表者名 中井浩巳
2. 発表標題 量子化学計算 / 材料開発のための構造・反応性・物性の理論評価
3. 学会等名 計算材料科学連続セミナー・化学材料第1シリーズ(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 浦谷浩輝, 中井浩巳
2. 発表標題 非局在化した励起状態を扱えるスケーラブルなEhrenfest動力学手法の開発
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大島玲生, 高島千波, 中井浩巳
2. 発表標題 高効率電子相関計算のための2電子相互作用に対するHess法の拡張
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤澤遼, 藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳
2. 発表標題 機械学習型電子相関モデルの開殻系への拡張
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小清水 初花, 小野 純一, 福西 快文, 中井 浩巳
2. 発表標題 SARS-CoV-2メインプロテアーゼの共有結合阻害剤開発に向けたハイブリッド型in-silico創薬研究
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高島千波, 中井浩巳
2. 発表標題 無限次2成分法におけるLU分解を用いた2電子積分の実装
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小清水初花, 小野純一, 福西快文, 中井浩巳
2. 発表標題 SARS-CoV-2メインプロテアーゼを対象としたハイブリッド型in-silico創薬研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐々木良輔, 藤波美起登, 中井浩巳
2. 発表標題 化学実験画像データセットの作成と物体検出の数値検証
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大野 彰太, 浦谷浩輝, 中井浩巳
2. 発表標題 スピン軌道相互作用を考慮した時間依存密度汎関数強束縛法の実装
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大島玲生, 高島千波, 中井浩巳
2. 発表標題 ジェミナル型固有関数によるResolution of Identity近似
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiromi Nakai
2. 発表標題 Picture-change corrected relativistic density functional theory
3. 学会等名 The 10th Molecular Quantum Mechanics (MQM) conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiromi Nakai
2. 発表標題 Unveiling Controlling Factors of the S0/S1 Minimum Energy Conical Intersection
3. 学会等名 12th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroki Uratani, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Reduced-scaling nonadiabatic molecular dynamics techniques in the framework of density-functional tight binding
3. 学会等名 12th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2020) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小野純一, 小清水初花, 福西快文, 中井浩巳
2. 発表標題 SARS-CoV-2メインプロテアーゼに対する量子分子動力学法に基づく in silico創薬研究
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 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 複雑反応過程のための選択的量子ナノ反応器分子動力学法の実装と応用
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 秋山広夢, 三瓶大志, 山口正浩, 高島千波, 中井浩巳, 小河脩平, 上田忠治, 関根泰
2. 発表標題 ケギン型ポリオキシメタレートへのプロトン吸着における支配因子の理論化学的検討
3. 学会等名 長野大会 (第52回石油・石油化学討論会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Junichi Ono, Minori Imai, Toshiaki Takemura, Chika Okada, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Bacteriorhodopsin utilizes hydronium and hydroxide ions for proton pumping
3. 学会等名 19th International Conference on Retinal Proteins (ICRP19) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐々木良輔, 藤波美起登, 中井浩巳
2. 発表標題 物体検出と行動認識を用いた化学実験の画像認識に関する数値検証
3. 学会等名 第45回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤波美起登, 清水伊織, Feng Wang, 中井浩巳
2. 発表標題 時間依存密度汎関数強束縛法と機械学習を用いた色素増感太陽電池のための色素分子の探索
3. 学会等名 第45回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大島玲生, 高島千波, 藤波美起登, 中嶋裕也, 中井浩巳
2. 発表標題 汎用原子レベルシミュレータMatlantisと波動関数理論および密度汎関数理論による分子物性の比較検証
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年秋季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森 直輝, 小野純一, 小島隆嗣, 中井浩巳
2. 発表標題 汎用原子レベルシミュレータMatlantisを用いた動力学計算による溶液系における動的物性の検証
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年秋季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小野純一, 小清水初花, 福西快文, 中井浩巳
2. 発表標題 量子分子動力学法によるSARS-CoV-2メインプロテアーゼ阻害薬の反応機構の解明
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石田賢亮, 西村好史, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 光活性イエロータンパク質の光異性化過程に対する量子的分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 DCDFTBMDと分子シミュレーションプログラムの接続: 大規模量子的経路積分分子動力学計算への展開
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小清水初花, 小野純一, 福西快文, 中井浩巳
2. 発表標題 SARS-CoV-2メインプロテアーゼの新規共有結合阻害剤の開発に向けたハイブリッド型in silico創薬
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Recently added features in DCDFTBMD program
3. 学会等名 New Horizons in Scientific Software: THE NEW COLLABORATIVE PLATFORM GOES LIFE (NHISS2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiromi Nakai, Yoshifumi Nishimura
2. 発表標題 Recent updates of DCDFTBMD program: Theory, implementation, and applications
3. 学会等名 Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Chinami Takashima, Junji Seino, and Hiromi Nakai
2. 発表標題 Implementation of picture-change corrected density functional theory based on infinite-order two-component relativistic method into GAMESS program
3. 学会等名 Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Fujisawa, Mikito Fujinami, Junji Seino, Yasuhiro Ikabata, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Applicability domain for machine-learned electron correlation model
3. 学会等名 Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Species-selective nanoreactor molecular dynamics simulations based on linear-scaling tight-binding quantum chemical calculations
3. 学会等名 Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryosuke Sasaki, Mikito Fujinami, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Application of image recognition methods for chemical experiment images and videos
3. 学会等名 Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 石丸優樹, 高島千波, 柴田高範, 中井浩巳
2. 発表標題 カチオン性イリジウム触媒を用いた α -置換 β -不飽和エステルに対するエナンチオ選択的の不斉共役付加反応に関する理論的研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 花田達希, 浦谷浩輝, 中井浩巳
2. 発表標題 有機分子錯体TTF-CAにおける光誘起中性 - イオン相転移の非断熱分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 西村龍星, 吉川武司, 坂田健, 中井浩巳
2. 発表標題 全電子数保存条件と非整数占有数を用いた分割統治型時間依存結合摂動法の開発
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小野純一, 中井浩巳
2. 発表標題 SARS-CoV-2メインプロテアーゼのプロトン化状態に関する量子分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 浦谷浩輝, 森岡俊貴, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型励起状態計算に基づく非断熱分子動力学法: 凝縮系における無輻射失活過程への展開
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中井浩巳, 西村好史, 吉川武司, 浦谷浩輝, 五十幡康弘, 河本奈々, 稲森真由
2. 発表標題 DCDFTBMDプログラムによる励起状態ダイナミクス研究への展開
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤澤遼, 五十幡康弘, 藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳
2. 発表標題 k最近傍法とアンサンブル学習を用いた機械学習型電子相関モデルの適用領域判定手法
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 西村好史, 中井浩
2. 発表標題 富岳での大規模計算に向けた量子分子動力学シミュレーションプログラムDCDFTBMDの高度化
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉川武司, 五十幡康弘, 中井浩巳, 小川賢太郎, 坂田健
2. 発表標題 スピン反転法に基づく凍結軌道解析を用いたS0/S1円錐交差構造の理論的解明
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 富岳での大規模計算に向けた量子分子動力学シミュレーションプログラムDCDFTBMDの高度化
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiroki Uratani, Toshiki Morioka, Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Large-scale excited-state nonadiabatic molecular dynamics simulations with divide-and-conquer approach
3. 学会等名 第36回化学反応討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉川武司, 五十幡康弘, 中井浩巳, 小川賢太郎, 坂田健
2. 発表標題 スピン反転凍結軌道解析を用いた円錐交差構造における支配因子の理論的解明とその応用
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 大規模量子化学計算プログラムDCDFTBMDの富岳における性能評価
3. 学会等名 第8回HPCIシステム利用研究課題 成果報告会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高梨倫哉, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 動的分極率による励起状態計算へ向けた量子アルゴリズムqUCC-LR開発
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小清水初花, 小野純一, 福西快文, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型密度汎関数強束縛メタダイナミクスによるSARS-CoV-2メインプロテアーゼの切断反応機構の解明
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小清水初花, 小野純一, 福西快文, 中井浩巳
2. 発表標題 大規模量子メタダイナミクス法によるSARS-CoV-2メインプロテアーゼの酵素反応機構の解明
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Junichi Ono, Yuta Tsuchiya, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Quantum molecular dynamics simulations for diffusion processes in concentrated electrolyte solutions for sodium-ion batteries
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiromi Nakai
2. 発表標題 Recent developments in DCDFTBMD program
3. 学会等名 Pacifichem2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiromi Nakai
2. 発表標題 Grid-to-grid type machine-learned quantum chemistry
3. 学会等名 Pacifichem2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshifumi Nishimura, Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Recent developments in divide-and-conquer density functional tight-binding method
3. 学会等名 Pacifichem2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Junji Seino, Mikito Fujinami, Yasuhiro Ikabata,
2. 発表標題 AI-assisted orbital-free density functional theory calculation
3. 学会等名 Pacifichem2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yasuhiro Ikabata, Toni M. Maier, Junji Seino, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Picture-change-corrected relativistic density functional theory based on transformation of density operator and density matrix
3. 学会等名 Pacifichem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryo Fujisawa, Yasuhiro Ikabata, Mikito Fujinami, Junji Seino, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Assessment and improvement of machine-learned electron correlation model based on applicability domain determination
3. 学会等名 China-Japan-Korea Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-V) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Chinami Takashima, Junji Seino, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Acceleration of local unitary transformation method by utilizing database of atomic two-electron integrals
3. 学会等名 China-Japan-Korea Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-V) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroki Uratani, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Nanoscale Excited-State Dynamics Simulations Using Semiempirical Quantum Chemical Calculations and Reduced-Scaling Approaches
3. 学会等名 China-Japan-Korea Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-V) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 広本拓麻, パーキン暖, 神山幸成, 大貫隼, 小野純一, 西村好史, 中井浩巳, 高野光則
2. 発表標題 Fo回転分子モーターにおけるプロトン伝導機構解明に向けた量子的分子動力学計算の適用
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 竹村俊晃, 小野純一, 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 分子動画に基づく全量子分子動力学法によるバクテリオロドプシンのプロトン貯蔵、放出および拡散過程に関する理論的研究
3. 学会等名 分子科学会 オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 浦谷浩輝, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型励起状態計算に基づく大規模非断熱分子動力学手法の開発
3. 学会等名 分子科学会 オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤澤遼, 五十幡康弘, 清野淳司, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 機械学習型電子相関モデルの開発 : 凍結内殻近似の適用
3. 学会等名 分子科学会 オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤澤遼, 五十幡康弘, 清野淳司, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 機械学習を用いた価電子の相関エネルギー予測
3. 学会等名 第10回CSJ化学フェスタ2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 竹村俊晃, 小野純一, 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 バクテリオロドプシンの分子動画に基づく全量子分子動力学シミュレーションを用いたプロトン放出機構の解明
3. 学会等名 第10回CSJ化学フェスタ2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤稔也, 清野淳司, 中井浩巳
2. 発表標題 形式酸化数の量子化学的解釈
3. 学会等名 第10回CSJ化学フェスタ2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高島千波, 清野淳司, 中井浩巳
2. 発表標題 2成分相対論におけるPicture Change補正法のGAMESSへの実装
3. 学会等名 第10回CSJ化学フェスタ2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高島千波, 清野淳司, 中井浩巳
2. 発表標題 無限次2成分法に基づくPicture Change補正密度汎関数理論のGAMESSへの実装
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2020年秋季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高梨倫哉, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型ユニタリー変換結合クラスター (DC-UCC) 計算のための量子アルゴリズムの開発
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2020年秋季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiromi Nakai, Yoshifumi Nishimura
2. 発表標題 CDFTBMD: Divide-and-conquer density functional tight-binding program for huge-system quantum mechanical molecular dynamics simulations
3. 学会等名 New Horizons in Scientific Software -From Legacy Codes to Modular Environments (NHISS 2020) (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清野淳司, 中井浩巳
2. 発表標題 オンライン機械学習に基づくDFT汎関数構築システムの開発
3. 学会等名 第43回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤稔也, 清野淳司, 中井浩巳
2. 発表標題 量子化学計算による金属錯体における形式酸化数の解釈
3. 学会等名 第43回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 土屋佑太, 小野純一, 中井浩巳
2. 発表標題 難燃性濃厚電解液におけるNaイオン拡散の理論的解析
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 浦谷浩輝, 森岡俊貴, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型励起状態計算に基づく凝縮系非断熱分子動力学シミュレーション手法の開発と応用
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学・メタダイナミクス計算の階層的並列化
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小野純一, 竹村俊晃, 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型密度汎関数強束縛メタダイナミクス計算の効率化とバクテリオロドプシンのプロトン輸送への応用
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水伊織, 長門澄香, 藤波美起登, 中井浩巳
2. 発表標題 CO ₂ 化学吸収法に対するアミン混合溶液の理論設計
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森岡俊貴, 浦谷浩輝, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 Spin-flip型密度汎関数強束縛法のダイナミクスシミュレーションへの拡張及び光活性タンパク発色団の光異性化への応用
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤代天佑, 小野純一, 中井浩巳
2. 発表標題 CeO ₂ 表面におけるNO-CO反応に対する遷移金属置換効果の理論的解析
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中村崇玖, 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 石炭の熱分解過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 菓子田淳輝, 庄子良晃, 五十幡康弘, 高秀雄, 酒井隼人, 羽曾部卓, 中井浩巳, 福島孝典
2. 発表標題 新規元素置換ペンタレン誘導体の合成および性質
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 浦谷浩輝, 周健斌, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型密度汎関数強束縛法によるペロブスカイト太陽電池材料におけるポーラロン形成動力学シミュレーション
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小野純一, 岡田千果, 西村好史, 中井浩巳
2. 発表標題 DC-DFTB-MD法によるバクテリオロドプシンの長距離プロトン移動反応の理論的解析
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中井浩巳
2. 発表標題 Theoretical Analyses of Condensed-Phase Chemical Reactions Based on Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics (DC-DFTB-MD) Simulations
3. 学会等名 第35回化学反応討論会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 浦谷浩輝、周健斌、中井浩巳
2. 発表標題 ペロブスカイト太陽電池材料におけるポーラロン形成の量子的分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019年春季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Uratani, Chien-Pin Chou, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Divide-and-conquer DFTB-MD simulations of polaron formation process in a lead halide perovskite material
3. 学会等名 10th congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics (ISTCP-X) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 浦谷浩輝、周健斌、中井浩巳
2. 発表標題 鉛ハライドペロブスカイト材料におけるポーラロン形成過程の量子分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中村崇玖、周健斌、吉川武司、大越昌樹、小野純一、Aditya Wibawa Sakti、中井浩巳
2. 発表標題 密度汎関数強束縛法によるPhナノクラスター上のNO解離過程の理論的解析
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 河本奈々、吉川武司、中井浩巳
2. 発表標題 長距離補正法に基づく分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の開発と光異性化への応用
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 稲森真由、五十幡康弘、中井浩巳
2. 発表標題 円錐交差構造の電子状態に関する知見の探索とその応用
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Junichi Ono, Chika Okada, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Clarification of proton transfer reactions in photoreceptive proteins using large-scale quantum molecular dynamics simulations
3. 学会等名 第57回日本生物物理学会年会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiromi Nakai
2. 発表標題 How Can Artificial Intelligence Help Quantum Chemists?
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Aditya W.Sakti , Chien-Pin Chou, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Density-Functional Tight-Binding Metadynamics Study of Oxy-Carbon Diffusion on(100)- Al2O3 Surface
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Junichi Ono, Chika Okada, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Large-scale quantum-mechanical molecular dynamics simulations for the long-distance proton transfer in bacteriorhodopsin
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Chien-Pin Chou, Aditya W.Sakti , Hiromi Nakai
2. 発表標題 Recent Development of Automatized Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Metal-Containing Systems
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mayu Inamori, Yasuhiro Ikabata, Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Key factor of S0/S1 minimum energy conical intersection
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Nana Komoto, Takeshi Yoshikawa, Junichi Ono, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Practical excited-state simulation of thousands of atoms
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Uratani, Chien-Pin Chou, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Large-scale quantum-mechanical molecular dynamics simulations of polaron formation process in a lead halide perovskite material using divide-and-conquer type density-functional tight-binding method
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Yoshikawa, Toshiki Doi, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Linear-scaling divide-and-conquer finite-temperature self-consistent field for static correlation systems
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists(APATCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Aditya W.Sakti , Chien -Pin Chou, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Density-Functional Tight-Binding Metadynamics Study of Oxy-Carbon Diffusion on(100)- Al2O3 Surface
3. 学会等名 CECAM-Workshop "Thinking outside the box-beyond machine learning for quantum chemistry" (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Junichi Ono, Chien-Pin Chou, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Long-time quantum molecular dynamics simulations based on divide-and-conquer density-functional tight-binding method for sodium-ion transport in electrolyte solutions
3. 学会等名 CECAM-Workshop "Thinking outside the box-beyond machine learning for quantum chemistry" (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Hierarchical parallelization of DFTB simulations with DCDFTBMD
3. 学会等名 CECAM-Workshop "Thinking outside the box-beyond machine learning for quantum chemistry" (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 竹村俊晃、小野純一、西村好史、中井浩巳
2. 発表標題 バクテリオロドプシンのプロトン貯蔵・放出過程に関する大規模量子的分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第9回CSJ化学フェスタ2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Yoshikawa
2. 発表標題 GPU-Accelerated Large-Scale Excited-State Simulation Based on Divide-and-Conquer Time-Dependent Density-Functional Tight-Binding
3. 学会等名 8th ADAC Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 竹村俊晃、小野純一、西村好史、中井浩巳
2. 発表標題 バクテリオロドプシンのプロトン貯蔵・放出過程に関するDC-DFTB-MDシミュレーション
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土屋佑太、周健斌、Aditya W.Sakti、中井浩巳
2. 発表標題 Mg-MOF-74による二酸化炭素固定化反応のDFTB-MD, MetaDシミュレーション
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Aditya W.Sakti, Chien -Pin Chou, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Density-Functional Tight-Binding Study on Oxygen Vacancy Diffusion in Ceria Systems
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019(MRM2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法～コピキタス(遍在的)なプロトンを理解する～
3. 学会等名 東北大学「スパコンプロフェッショナル」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中井浩巳
2. 発表標題 理論化学から見たレチナル蛋白質の魅力
3. 学会等名 日本化学会第100春季大会(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 D. Parkin, G. Nakagawa, D. Yamakoshi, M. Takano
2. 発表標題 Free energy landscape for stator-rotor interaction in Fo rotary motor
3. 学会等名 日本生物物理学会第57 回年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Iijima, J. Ohnuki, T. Sato, M. Takano
2. 発表標題 Dielectric allostery in cytochrome P450 reductase on the surface of lipid membrane
3. 学会等名 日本生物物理学会第57 回年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Uchida, J. Ohnuki, T. Sato, M. Takano
2. 発表標題 Validation of second phosphate binding site in myosin studied by molecular dynamics simulation
3. 学会等名 日本生物物理学会第57 回年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Kuroishi, A. Yodogawa, D. Parkin, M. Takano
2. 発表標題 Over-stabilization of protein - protein interaction in solvent accessible surface area model
3. 学会等名 日本生物物理学会第57 回年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小野純一, 西村好史, 黄毅聰, 鹿又宣弘, 中井浩巳
2. 発表標題 重み付きヒストグラム解析法のメタダイナミクスへの拡張とシクロファン異性化反応への応用
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 河本奈々, 吉川武司, 小野純一, 中井浩巳
2. 発表標題 分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法に基づく大規模励起状態ダイナミクス
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土井俊輝, 吉川武司, 中井浩巳
2. 発表標題 有限温度における時間依存密度汎関数法の開発
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 稲森真由, 五十幡康弘, 王祺, 中井浩巳
2. 発表標題 円錐交差構造における電子状態に関する理論的研究
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiromi Nakai
2. 発表標題 Artificial Intelligence for Quantum Chemistry
3. 学会等名 7th JCS symposium 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Chien-Pin Chou
2. 発表標題 Fast Quantum Chemical Simulations using the Density-Functional Tight-Binding Method
3. 学会等名 The 2018 Chemistry Research Symposium, ChRS2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小野純一, 西村好史, 黄毅聰, 鹿又宣弘, 中井浩巳
2. 発表標題 メタダイナミクスに基づく重み付きヒストグラム解析法の開発とシクロファン異性化反応への応用
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会 2018 春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 河本奈々, 吉川武司, 小野純一, 中井浩巳
2. 発表標題 光受容タンパク質の機構解明に向けた分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の開発
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会 2018 春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 稲森真由, 五十幡康弘, 王祺, 中井浩巳
2. 発表標題 ポテンシャルエネルギー曲面の交差構造に関する理論的研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会 2018 春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中井 浩巳
2. 発表標題 大規模化学反応シミュレーション手法の実現に向けて ~分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD) 法の開発と応用~
3. 学会等名 東工大講演会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiromi Nakai
2. 発表標題 What is the Best Choice of Embedding-Fragmentation Scheme for Practical Quantum Chemical Simulation?
3. 学会等名 16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasuhiro Ikabata, Takuro Oyama, Masao Hayami, Junji Seino, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Development of picture-change corrected relativistic density functional theory
3. 学会等名 16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Divide-and-conquer-based higher-order electron-correlation methods
3. 学会等名 16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Junichi Ono
2. 発表標題 Divide-and-Conquer density-functional tight-binding molecular dynamics simulations for the primary proton transfer in bacteriorhodopsin
3. 学会等名 Telluride workshop on "Multi-scale quantum mechanical analysis of condensed phase systems: methods and applications" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 浦谷浩輝, 周建斌, 中井浩巳
2. 発表標題 密度汎関数強束縛法に基づくペロブスカイト太陽電池におけるキャリア特性の研究
3. 学会等名 分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Junichi Ono, Minoru Imai, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Large-scale quantum-mechanical molecular dynamics simulations for the primary proton transfer in bacteriorhodopsin
3. 学会等名 第56回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nana Komoto, Takeshi Yoshikawa, Junichi Ono, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Development of large-scale excited-state calculation method and applied research on photoactive yellow protein
3. 学会等名 第56回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中井浩巳、西村好史、吉川武司
2. 発表標題 DC-DFTB-MDプログラムの公開
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018秋季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土井俊輝、吉川武司、中井浩巳
2. 発表標題 分割統治法に基づく有限温度型単参照静的相關手法の開発
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018秋季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中井 浩巳
2. 発表標題 表面触媒反応に対する大規模シミュレーション
3. 学会等名 2018年日本表面真空学会学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小野 純一，今井 みの莉，西村 好史，中井 浩巳
2. 発表標題 バクテリオロドプシンの1段階目のプロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 西村 好史，吉川 武司，中井 浩巳
2. 発表標題 DC-DFTB-MDプログラムの開発と公開
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 周建斌, 中井 浩巳
2. 発表標題 Density-Functional Tight-Binding Parameterization: Accumulated Wisdom and New Directions
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Aditya Wibawa Sakti, Chien-Pin Chou, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Density-Functional Tight-Binding Metadynamics Study of Carbonaceous Species Diffusion on (100)-Al ₂ O ₃ Surface
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡田 千果, 小野 純一, 西村 好史, 中井 浩巳
2. 発表標題 バクテリオロドプシンの長距離プロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Chien-Pin Chou
2. 発表標題 Development of Automatized Density-Functional Tight-Binding Parameterization
3. 学会等名 CJK - WTCC - IV (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中井浩巳
2. 発表標題 データ科学と理論・計算化学の融合
3. 学会等名 日本化学会 第99春季年会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土井俊輝、吉川武司、中井浩巳
2. 発表標題 大規模単参照型静的相関手法の開発
3. 学会等名 日本化学会 第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Acceleration of divide-and-conquer density tight-binding method on GPU
3. 学会等名 GTC 2019(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 中井 浩巳	4. 発行年 2022年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 224
3. 書名 手で解く量子化学 I	

1. 著者名 藤波 美起登, 中井 浩巳	4. 発行年 2021年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 500
3. 書名 マテリアルズ・インフォマティクスのためのデータ作成とその解析、応用事例 第9章 合成経路, 反応条件, プロセス設計への応用事例; 第4節 機械学習と電子状態情報を用いた反応予測	

〔産業財産権〕

〔その他〕

DCDFBMD http://www.chem.waseda.ac.jp/dcdfbmd/
--

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
研究分担者	吉川 武司 (Yoshikawa Takeshi) (10754799)	東邦大学・薬学部・准教授 (32661)	
研究分担者	高野 光則 (Takano Mitsunori) (40313168)	早稲田大学・理工学術院・教授 (32689)	
研究分担者	小野 純一 (Ono Junichi) (30777991)	京都大学・実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット・特定研究員 (14301)	

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
---------	---------