

機関番号：17102

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2007～2010

課題番号：19350012

研究課題名（和文） DNA シーケンスと導電性の関係の理論化学的研究

研究課題名（英文） Study on theoretical chemistry to the relationship between DNA sequence and electronic conductivity.

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

研究成果の概要（和文）：当グループで開発してきた超高精度高速オーダーN法を用いるとともに、有限系オリゴマーの電子状態からエネルギーバンドを抽出する方法を構築し、DNA の塩基配列データと導電性の関係が得られるように開発した。例えばA-type, B-type のGC-DNA およびAT-DNA のNa対イオンがある場合とない場合などに適用し、導電性と構造の関係を議論した。

研究成果の概要（英文）：Band structures of DNA were examined using both highly accurate and efficient  $O(N)$  method and band extraction method that were developed in our laboratory. This treatment was applied to GC- and AT-DNAs of A- and B-types with and without counter ions to investigate the relationship between conductivity and molecular structures.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	7,000,000	2,100,000	9,100,000
2008年度	3,200,000	960,000	4,160,000
2009年度	2,400,000	720,000	3,120,000
2010年度	2,400,000	720,000	3,120,000
総計	15,000,000	4,500,000	19,500,000

研究分野：理論化学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：電子状態・生体高分子・導電性・DNA

## 1. 研究開始当初の背景

DNA 等の大規模系の高精度な量子化学計算は現代のコンピュータをもって困難である。しかも、DNA の電気伝導性については、実験的および理論的に様々な報告がなされており、絶縁体説、半導体説、導電体説、さらには超伝導体説も提出されている。実験条件や計算モデルに依存する部分は多く、また電子伝導のみでなくリン酸部に配位した対イオンが伝導性に関与している可能性など、導電メカニズムには不明瞭な点が多い。当時オーダーN法という言葉すら存在しなかった1990年より本研究に着手し、世界にさきがけて巨大系に対する計算方法を提唱してきた。その後も発展をつづけ、ようやく最近になってDNAやタンパク質等の巨大生体系に対しても *ab initio* 法のレベルでのプログラムが実行可能となってきたため、これから実

際の系への適用や設計に向けて結果を出し、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。

## 2. 研究の目的

現在までに開発してきたオーダー(N)の計算方法—高分子の理論的重合—を用いて、特にDNAに焦点をあて、大規模生体系とその局所的相互作用解析のための量子化学の新しい方法論的基礎を構築し、ミクロな立場からのバイオ機能の電子論的解明および薬剤設計モデリングを行い、生体材料設計に役立つ。

## 3. 研究の方法

本計算手法では各塩基対に局在化した領域軌道を作成するため、任意の場所における

局所状態密度を計算することができる。電子伝導メカニズムの解明につながるいわゆる局所的エネルギーバンド構造を効率的かつ高精度に算出できるものである。本方法によって種々のDNA鎖とその一部修飾された系の局所的バンド構造、および修飾部の周囲の塩基対の効果を高精度で効率よく算出可能であるため、DNAシーケンスおよびその分子構造と電気伝導性の可能性の関係、およびメカニズム解析を行う。

一方、生体高分子の機能を溶媒の影響のもとで抽出することは現実の生体反応を理解し設計するためには必須である。当グループで開発しているElongation法にPCM法を導入したが、高分子鎖の伸長過程で、各ステップごとのSCF計算後にCI法やMP2法を導入する。また、局所状態密度等により局所状態密度が得られるように開発し、溶媒中におけるDNAの塩基配列と局所的バンド構造の関係、電子移動反応の選択性と電気伝導性との関係を明らかに出来るように発展させる。さらにElongation法において導入済みである電場効果と局所バンド構造とDNAシーケンスとの関係も明らかにしていく。

#### 4. 研究成果

本方法を、限られた系だけでなく、あらゆる生体系に対して応用を可能とするためには、まず方法論を一般化することの方が重要であるため、基盤の構築に時間を掛けた。

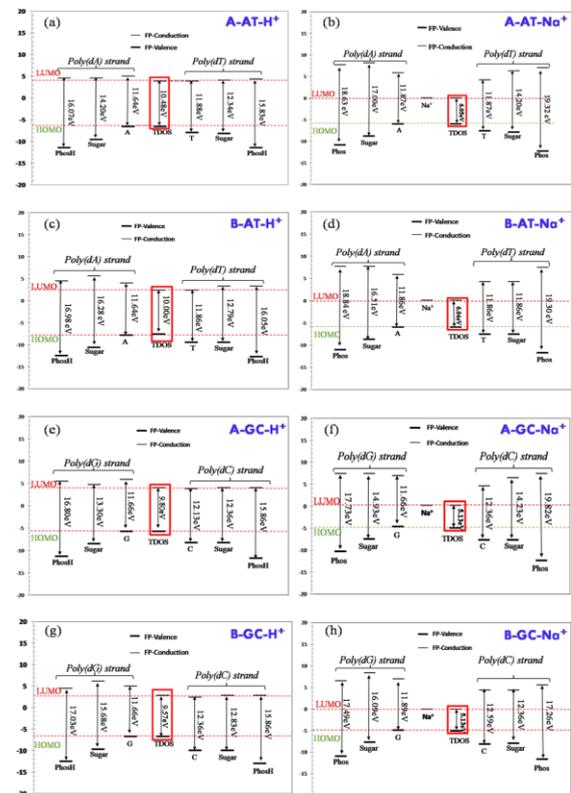
本方法は、一次元系のみならず、絡み合いタンパク質などの三次元系にも適用可能となるよう根本的に手法を変え、プログラムを開発した。また、本法では軌道を局在化しながら系の電子状態を伸長させるものであるが、これまでは、系全体に広がってしまう軌道が出てくると、途端に計算精度が落ちるといった難点があった。よってこれまでは非局在系への高精度計算が困難であったが、非局在軌道を自動選択して相互作用計算に含めることにより、計算精度の大幅な改善が得られたという大きな進歩があった。さらに電子相関効果や励起状態計算の導入も行った。これらの開発により応用性は広がり、方法論的にもほぼ達成しているが、まだ幾つか課題が残されている。DNAのホットスポットなどに適用するためには、大規模系を効率よく構造最適化する必要があり、Elongation法に組み込んだ領域局在化軌道基底のエネルギー勾配法のさらなる高精度化と高効率化が必要となる。現状では、他の類似方法よりは格段精度は良いものの本プロジェクトの基準としては十分とは言えないため、現在も改良を続けている。また、導電性評価の手法の構築は一次元系に対してはほぼ終了しているので、これをElongation法に組み込むことにより、通常の周期境界条件を用いる計算に頼らな

くても容易にバンド構造を描くことができるようになった。本方法をElongation法によって計算したDNAの電子状態と結び付け、構造と導電性の関係を議論した。上記のDNAなどの大規模生体系を目指した高精度高速計算法とエネルギーバンド抽出法の発展状況は、それぞれ当初の計画をかなり上回る成果であり、予想外の展開もあった。

本方法を応用に向けてより有効にするために、領域局在化軌道基底による局所的構造最適化法の精度と計算効率についてさらなる改良を行い、A-type, B-Type,  $\lambda$ -Type DNA、種々のタンパク質やグラミシジンなどイオンチャンネルなどへの応用を行うとともに、機能解析を行った。なお、方法論の開発も伴う部分が多々あるため、計算対象は必ずしもDNAには限っていない。

大規模系への応用にはスーパーコンピュータを利用した並列計算が必須である。本方法を並列用にプログラミングし、研究室レベルの並列計算機で並列効率を検証するとともに、九大情報基盤研究開発センターにより、大規模並列計算に取り組んだ。

結果の例として、A-type, B-TypeのGCおよびAT-DNAのNa対イオンがある場合とない場合(H原子でキャップ)の局所状態密度から算出した、各DNAの導電性の鍵を握るHOMOとLUMOを決める場所を解析した結果のグラフを以下に示す。対イオンの効果によりLUMOが極端に下がることによりエネルギーギャップが小さくなることを示しており、塩基対から対イオンへの電子移動が示唆された。



## 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 31 件)

1. G. Mazur, M. Makowski, R. I. Wlodarczyk, and Y. Aoki, Dressed TDDFT Study of Low-Lying Electronic Excited States in Selected Linear Polyenes and Diphenylpolyenes, *Int. J. Quantum Chem.*, 111(4) 819-825, 2011. 査読有
2. J. Korchowiec, P. D. Silva, M. Makowski, F. L. Gu, and Y. Aoki, Elongation Cutoff Technique at Kohn-Sham Level of Theory, *Int. J. Quantum Chem.*, 110 (12) 2130-2139, 2010. 査読有
3. A. Pomogaeva, F. L. Gu, A. Imamura, and Y. Aoki, Electronic structures and nonlinear optical properties of supramolecular associations of benzo-2, 1, 3-chalcogendiazoles by the elongation method, *Theor. Chem. Acc.*, 125(3-6), 453-460, 2010. 査読有
4. Y. Orimoto, F. L. Gu, J. Korchowiec, A. Imamura, and Y. Aoki, Application of the elongation method to the electronic structure of spin-polarized molecular wire under electric field, *Theor. Chem. Acc.*, 125(3-6), 493-501, 2010. 査読有
5. L. K. Yan, A. Pomogaeva, F. L. Gu, and Y. Aoki, Theoretical study on nonlinear optical properties of metalloporphyrin using elongation method, *Theor. Chem. Acc.*, 125(3-6), 511-520, 2010. 査読有
6. M. Miura and Y. Aoki, Linear-scaled excited state calculations at Linear Response Time-Dependent Hartree-Fock theory, *Mol. Phys.*, 108(2), 205-210, 2010. 査読有
7. G. -T. Yu, W. Chen, F. L. Gu, and Y. Aoki, Theoretical Study on Nonlinear Optical Properties of the Li+[calix[4]pyrrole]Li-Dimer, Trimer and its Polymer with Diffuse Excess Electrons, *J. Comput. Chem.*, 31(4), 863-870, 2009. 査読有
8. M. Makowski, J. Korchowiec, F. L. Gu, and Y. Aoki, Describing Electron Correlation Effects in the Framework of the Elongation Method-Elongation-MP2: Formalism, Implementation and Efficiency, *J. Comput. Chem.*, 31(8), 1733-1740, 2009. 査読有
9. J. Korchowiec, J. Lewandowski, M. Makowski, F. L. Gu, and Y. Aoki, Elongation Cutoff Technique Armed with Quantum Fast Multipole Method for Linear Scaling, *J. Comput. Chem.*, 3(15), 2515-2525, 2009. 査読有
10. M. Miura and Y. Aoki, Ab initio theory for treating local electron excitations in molecules and its performance for computing optical properties, *J. Comput. Chem.*, 30(14), 2213-2230, 2009. 査読有
11. Y. Aoki and F. L. 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), (in press), 2009. 査読有
12. Y. Aoki and F. L. Gu, Elongation Method for Linear Scaling, AIP, (in press), 2009. 査読有
13. A. Pomogaeva, M. Springborg, B. Kirtman, F. L. Gu, and Y. Aoki, Band Structure of Polymer Extracted from Oligomer Calculations by Elongation Method and Its Applications to Nanosystems, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009 (ICCMSE 2009), (in press), 2009. 査読有
14. O. Loboda, F. L. Gu, A. Pomogaeva, M. Makowski, and Y. Aoki, Efficient algorithm for computing orbital energies within elongation method, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009 (ICCMSE 2009), (in press), 2009. 査読有
15. W. Chen, G. -T. Yu, F. L. Gu, and Y. Aoki, Investigation on Nonlinear Optical Properties of Ladder-structure Polydiacetylenes Derivatives by Using the Elongation Finite-Field Method, *Chem. Phys. Lett.*, 474(1-3), 175-179, 2009. 査読有
16. A. Pomogaeva, M. Springborg, B. Kirtman, F. L. Gu, and Y. Aoki, Band Structures Built by the Elongation Method, *J. Chem. Phys.*, 130(19), 194106 1-8, 2009. 査読有
17. V. Pomogaev, F. L. Gu, A. Pomogaeva, and Y. Aoki, Elongation Method for Calculating Excited States of Aromatic Molecules Embedded in Polymers, *Int. J. Quantum Chem.*, 109(6), 1328-1340, 2009. 査

読有

18. W. Chen, G. -T. Yu, F. L. Gu, and Y. Aoki, Investigation on the Electronic Structures and Nonlinear Optical Properties of Pristine Boron Nitride and BN/C Heterostructured Single-Wall Nanotubes by the Elongation Method, *J. Phys. Chem. C*, 113(19), 8447-8454, 2009. 査読有
19. G. -T. Yu, W. Chen, F. L. Gu, Y. Orimoto, and Y. Aoki, Theoretical Study on Static (Hyper)polarizabilities for Polyimide by the Elongation Finite-Field Method, *Mol. Phys.*, 107(1), 81-87, 2009. 査読有
20. V. Pomogaev, A. Pomogaeva and Y. Aoki, Absorption spectra of estradiol and tryptophan constructed by the statistical and elongation methods, *J. Phys. Chem. A*, 113(8), 1429-1433, 2009. 査読有
21. M. Miura, Y. Orimoto, and Y. Aoki, Efficient analytical approach for predicting the Peierls distortion in molecular crystals, *Phys. Rev. B*, 77(16), 165105 1-12, 2008.
22. A. Pomogaeva, B. Kirtman, F. L. Gu, and Y. Aoki, Band structure built from oligomer calculations, *J. Chem. Phys.*, 128(7), 074109 1-7, 2008. 査読有
23. A. Pomogaeva, F. L. Gu, B. Kirtman, and Y. Aoki, Band Structure of Polymer Extracted from Oligomer Calculations, *Computation in Modern Science and Engineering, Proceedings of the ICCMSE 2007*, 963(2), 118-121, 2007. 査読有
24. Y. Aoki, F. L. Gu, Y. Orimoto, S. Suhai and A. Imamura, Elongation Method Applied to Aperiodic Systems - Random Polypeptides, High Spin Alignment, Polymer in Solvent, and DNA, *Computational Methods in Science and Engineering: Theory and Computation: Old Problems and New Challenge, Lectures Presented at the ICCMSE 2007*, 963(1), 120-137, 2007. 査読有
25. S. Ohnishi, Y. Orimoto, F. L. Gu, and Y. Aoki, Nonlinear optical properties of polydiacetylene with donor-acceptor substitution block, *J. Chem. Phys.*, 127(8), 084702, 1-11, 2007. 査読有
26. M. Miura, Y. Aoki, and B. Champagne, Assessment of time-dependent density functional schemes for computing the oscillator strengths of benzene, phenol, aniline, and fluorobenzene, *J. Chem. Phys.*, 127(8), 084103, 1-16, 2007. 査読有

27. Y. Orimoto and Y. Aoki, Strong Electron Correlation Effects on First- and Second-order Hyperpolarizabilities in Zwitterionic  $\sigma$ -conjugated Systems: its Dependence on Substituents, Conformations, Spacer Size, and Basis Sets, *J. Phys. Chem. A*, 111(33), 8241-8249, 2007. 査読有
28. Y. Orimoto, F. L. Gu, A. Imamura, and Y. Aoki, Efficient and accurate calculations on the electronic structure of B-type poly(dG)-poly(dC) DNA by elongation method: First step toward the understanding of the biological properties of aperiodic DNA, *J. Chem. Phys.*, 126(21), 215104, 1-7, 2007. 査読有
29. S. Ohnishi, F. L. Gu, K. Naka, and Y. Aoki, Parallelization Efficiency of the Elongation Method and its Application to NLO Design for Urea Crystal, *Computing Letters*, 3(4), 231-241, 2007. 査読有
30. R. Zhang, W. Q. Tian, F. L. Gu, and Y. Aoki, Theoretical studies on the adsorption of Si and C chains onto the unfaulted and faulted Si(111) surface, *J. Phys. Chem. C*, 111(17), 6350-6356, 2007. 査読有
31. H. -L. Xu, Z. -R. Li, D. Wu, B. -Q. Wang, Y. Li, F. L. Gu, Y. Aoki, Structures and Large NLO Responses of New Electrides: Li-doped Fluorocarbon Chain, *J. Am. Chem. Soc.*, 129(10), 2967-2970, 2007. 査読有

[学会発表] (計 36 件)

1. Y. Aoki, F. L. Gu, A highly accurate 3D-elongation method for Bio Systems, The 51st Sanibel Symposium, 2011.02.28. St. Simons Island (U.S.A)
2. Y. Aoki, P. Xie, A. Imamura, F. L. Gu, Highly Accurate  $O(N)$  quantum chemical approach for DNA electron transfer and optical property analysis, Pacificchem 2010, 2010.12.18. Honolulu (U.S.A)
3. Y. Aoki, M. Makowski, O. Loboda, K. Liu, F. L. Gu, Elongation method at Hartree-Fock and post Hartree-Fock levels for its applications to 1D-3D large systems, Pacificchem 2010, 2010.12.20. Honolulu (U.S.A)
4. F. L. Gu, M. Makowski, J. Korchowiec, K. Liu, Y. Aoki, Proposal of linear scaling ELG-LMP2 method for conjugated polymers, organic materials, and biosystems, Pacificchem 2010, 2010.12.16. Honolulu (U.S.A)
5. Y. Aoki, Highly accurate  $O(N)$  method for Nano-Bio systems, ICCMSE

- 2010, 2010. 10. 04. Kos (Greece)
6. K. Liu, F. L. Gu, M. Makowski, O. Loboda, 青木 百合子, 巨大生体分子の効率的超高精度電子状態計算, 第4回分子科学討論会, 2010. 09. 15. 大阪
  7. 青木 百合子, F. L. Gu, 高精度 Linear-scaling-ELG 法の開発と巨大系への応用, 第4回分子科学討論会, 2010. 09. 14. 大阪
  8. 青木 百合子, 生体高分子系の高精度電子状態計算のための3D-Elongation法の基礎と応用, 日本化学会第4回関東支部大会, 2010. 08. 30. 茨城
  9. Y. Aoki and F. L. Gu, Generalized Elongation Method: From One-Dimension to Three-Dimension, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009 ( ICCMSE 2009 ), 2009. 09. 29. Rhodes (Greece)
  10. Y. Aoki and F. L. Gu, Elongation Method for Linear Scaling, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009 ( ICCMSE 2009 ), 2009. 09. 29. Rhodes (Greece)
  11. A. Pomogaeva, M. Springborg, B. Kirtman, F. L. Gu, and Y. Aoki, Band Structure of Polymer Extracted from Oligomer Calculations by Elongation Method and Its Applications to Nanosystems, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering ( ICCMSE 2009 ), 2009. 09. 29. Rhodes (Greece)
  12. O. Loboda, F. L. Gu, A. Pomogaeva, M. Makowski, and Y. Aoki, Efficient algorithm for computing orbital energies within elongation method, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering ( ICCMSE 2009 ), 2009. 09. 29. Rhodes (Greece)
  13. F. L. Gu, 吉澤 輝高, 青木 百合子, Elongation-TDHF 法の開発と大規模一次元系への応用, 第3回分子科学討論会, 2009. 09. 23. 名古屋
  14. 青木 百合子, F. L. Gu, 物質設計のための二・三次元系用 Generalized Elongation 法の開発, 第3回分子科学討論会, 2009. 09. 22. 名古屋
  15. A. Pomogaeva, L. K. Yan, F. L. Gu, 青木 百合子, Elongation 法による有限鎖からの超効率的バンド構造抽出と共役分子ワイヤ系への応用, 第3回分子科学討論会, 2009. 09. 23. 名古屋
  16. 青木 百合子, F. L. Gu, 絡み合い高分子系に向けた超効率的量子化学計算, 第58回高分子討論会, 2009. 09. 16. 熊本
  17. 青木 百合子, 高分子をターゲットにした分子軌道法, 第13回高分子計算機科学研究会講座, 2009. 03. 10. 東京
  18. L. K. Yan, A. Pomogaeva, F. L. Gu, and Y. Aoki, Theoretical study on nonlinear optical properties of metalloporphyrin arrays by elongation method, The 10th Cross Straits Symposium (CSS-10), 2008. 11. 14. 福岡
  19. A. Pomogaeva, B. Kirtman, F. L. Gu, and Y. Aoki, Efficient band structure construction for composite  $B_xC_yN_z$  nanotubes, The 10th Cross Straits Symposium (CSS-10), 2008. 11. 13. 福岡
  20. Y. L. Ren, F. L. Gu, M. Makowski, J. Korchowiec, 青木 百合子, 一般化並列 Elongation 法の開発とDNA・タンパク質への応用, 第2回分子科学討論会 2008, 2008. 09. 27. 福岡
  21. V. Pomogaev, A. Pomogaeva, F. L. Gu, 青木 百合子, Elongation 法を用いた電子スペクトル計算のためのMD法, 第2回分子科学討論会 2008, 2008. 09. 24. 福岡
  22. F. L. Gu, Y. L. Ren, 青木 百合子, Generalized Elongation 法の開発と応用, 第2回分子科学討論会 2008, 2008. 09. 24. 福岡
  23. A. Pomogaeva, F. L. Gu, B. Kirtman, 青木 百合子, 有限系から無限系バンド構造構築法と含重原子分子集合系への応用, 第2回分子科学討論会 2008, 2008. 09. 24. 福岡
  24. J. Lewandowski, M. Makowski, J. Korchowiec, Y. Aoki, and F. L. Gu, Elongation cutoff technique: an efficient sparse matrix algebra approach to linear scaling, Current Trends in Theoretical Chemistry V (CTTC V), 2008. 07. 07. Krakow (Poland)
  25. Y. Aoki, F. L. Gu, M. Makowski, and J. Korchowiec,  $O(N)$  Quantum Chemistry Approach to Gigantic Systems by the Elongation Method, Current Trends in Theoretical Chemistry V (CTTC V), 2008. 07. 09. Krakow (Poland)
  26. A. Pomogaeva, V. Pomogaev, and Y. Aoki, Efficient Band Structure Calculations of Molecular Chains Including Heavy Atoms, International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM 2008), 2008. 06. 19. 東京
  27. V. Pomogaev and Y. Aoki, Statistical method to build molecular electronic spectra with applying MD, International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM 2008), 2008. 06. 19. 東京
  28. A. Pomogaeva, B. Kirtman, F. L. Gu and Y. Aoki, Band structure Calculations

For Quasi-one-Dimensional Systems By The Elongation Method, 9th Cross Straits Symposium on Materials, Energy and Environmental Engineering (CSS9), 2007. 11. 21. Pohang (Korea)

29. A. Pomogaeva, F. L. Gu, B. Kirtman, and Y. Aoki, Band structure built from oligomer calculations by the elongation method, VIII International Conference ATOMIC AND MOLECULAR PULSED LASERS (AMPL 2007), 2007. 09. 10. Tomsk (Russia)

30. Y. Aoki, S. Ohnishi, and F. L. Gu, NLO material design of organic crystals by Elongation method, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2007 (ICCMSE 2007), 2007. 09. 29. Corfu (Greece)

31. A. Pomogaeva, F. L. Gu, B. Kirtman, and Y. Aoki, Band Structure of Polymer Extracted from Oligomer Calculations, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2007 (ICCMSE 2007), 2007. 09. 26. Corfu (Greece)

32. Y. Aoki, Large-scale computation by Elongation method and its application to NLO material design, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2007 (ICCMSE 2007), 2007. 09. 26. Corfu (Greece)

33. 青木 百合子、折本裕一、Gu FengLong, Elongation 法による巨大系の計算-DNA の導電性解析, 第 1 回分子科学討論会 2007, 2007. 09. 18. 仙台

34. Pomogaeva Anna, Gu FengLong、Kirtman Bernard、青木 百合子, 有限系電子状態からの ab initio エネルギーバンドの構築と有機導体設計への応用, 第 1 回分子科学討論会 2007, 2007. 09. 17. 仙台

35. 青木百合子、大西 真一、折本 裕一、Gu Feng Long, 高分子の超効率的電子状態計算法-Elongation 法-の開発, 第 56 回高分子学会年次大会, 2007. 05. 30. 京都

36. 折本 裕一、Gu Feng Long、青木 百合子, 局所状態密度の高速演算による DNA・有機高分子材料の効率的機能設計, 第 56 回高分子学会年次大会, 2007. 05. 30. 京都

[図書] (計 2 件)

1. F. L. Gu, B. Kirtman, and Y. Aoki, Elongation Method: TOWARDS LINEAR SCALING FOR ELECTRONIC STRUCTURE OF RANDOM POLYMERS AND OTHER QUASILINEAR MATERIALS, Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics, Methods and Applications, Series: Challenges and Advances in Computational

Chemistry and Physics, Vol. 13 edited by Robert Zalesny, Manthos G. G. Papadopoulos, Paul G. G. Mezey and Jerzy Leszczynski, Springer, 175-198, 2011 (DOI: 10.1007/978-90-481-2853-2)

2. F. L. Gu and Y. Aoki, Elongation method and its applications to NLO materials, Chemical Modeling: Applications and Theory, Volume 7, edited by M. Springborg, Royal Society of Chemistry, 163-191, 2010 (DOI: 10.1039/9781849730884-000163)

[その他]

ホームページ等

## 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) 研究分担者

( )

研究者番号:

### (3) 連携研究者

F. L. Gu (GU FENG LONG)  
華南師範大学・化学&環境学院・教授  
研究者番号: 80404036

今村 諄 (IMAMURA AKIRA)  
広島国際学院大学・工学部・教授  
研究者番号: 70076991

仲 一成 (NAKA KAZUNARI)  
広島大学・大学院理学研究科・助教  
研究者番号: 30314727

研究協力者

Y. Ren (REN YANLIANG)  
華中師範大学・化学院・助教  
研究者番号:

J. Korchowicz (KORCHOWIEC JACEK)  
Jagiellonian 大学・化学部・准教授  
研究者番号:

M. Makowski (MAKOWSKI MARCIN)  
Jagiellonian 大学・化学部・助教  
研究者番号:

B. Kirtman (KIRTMAN BERNARD)  
California 大学・化学生物学部・教授  
研究者番号: