

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 17 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20H00588

研究課題名(和文) 機能性高分子材料設計のためのマイクロ～メソ・マルチスケール量子シミュレータの開発

研究課題名(英文) Development of micro-meso multiscale quantum simulator for functional polymer material design

研究代表者

青木 百合子 (Aoki, Yuriko)

九州大学・総合理工学研究院・教授

研究者番号：10211690

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 34,900,000円

研究成果の概要(和文)：計算科学シミュレーションは、量子化学による微視的な電子状態と、メソからマクロ領域における巨視的な物性を旨とする粗視化ダイナミクスとが、別々の世界で展開されている。スーパーコンピュータや量子コンピュータのハードウェア開発は急速に進んでいるが、それらをつなぐソフトウェアはほぼ存在しない。

超高効率・高精度Elongation(ELG)法は、従来の量子科学の欠点(大量のデータ計算が困難)を克服する方法で、ELG法と機械学習を組み合わせることで、汎用性の高い独自のマルチスケール量子シミュレータを構築する。応用としてDNA-小分子探索、高分子間架橋反応、光分解、絡み合い高分子の機構・機能解明と設計を行う。

研究成果の学術的意義や社会的意義

計算化学および計算物理の分野はスパコンの発展とともに急速な進歩を遂げたものの、計算対象として、マイクロスケールとメソスケールを連結する計算ソフトは未だ存在しない。機械学習等のAIが科学技術にも取り入れられる昨今にあるが、材料設計を行う上で、記述子として実験データしか頼れない状況ではAIの利用価値は低い。現実の材料が発現する物性はマクロ的に目に見える性質であっても、その原理は目に見えないミクロな電子構造分子構造に起因するものがある。マイクロ～メソ～ひいてはマクロをつないで計算するソフトを構築することは、企業が材料合成前に計算科学で設計できる意義、マイクロ情報から物性原理を見出す学理構築の意義がある。

研究成果の概要(英文)：Simulations in the field of computational science are developed in a different world between microscopic electronic states by quantum chemical treatment and coarse-grained dynamics that aim at macroscopic properties. However, although the development of hardware for supercomputers and quantum computers is under rapid progress, the software to link them hardly exists. The super-efficient and precise Elongation(ELG) method is a unique and innovative method that overcomes the disadvantages of conventional quantum chemistry (difficulty in calculating a large amount of data). Furthermore, by combining the ELG method with machine learning, we will construct a unique multi-scale quantum simulator with high generality. As practical applications, we will perform DNA-molecules searching, cross-linking reactions between polymers, analyze photodegradation, and elucidate and design the mechanism and functionals of entangled polymers.

研究分野：量子化学

キーワード：量子化学
分子設計 Elongation法 粗視化シミュレーション 散逸分子動力学 マルチスケール計算 機能性高

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。

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

量子化学・理論化学の分野は1981年の福井謙一教授のノーベル化学賞受賞以来、コンピュータの発展とタイアップして大きな発展を遂げた。しかしながら、「モノづくり」を得意とする国内では、未だに技術者が、経験に基づく予想と、実験による検証を繰り返すことで最適な構造や組成を求めているという実態はあまり変わらない。海外のAIブームに押されて計算も取り入れるようになってきているが、知る限り殆どが、地盤のない所での既存海外ソフトに頼った状態である。今後も新しい機能性材料を効率よく創出し続けていくには、独自に築いてきた理論計算手法および国産ソフトを発展させ、従来型の実験的手法に代わる高精度な計算科学を融合させた革新的な材料開発手法を構築していく必要がある。

量子の世界で得られるマイクロ量の計算については我々は、DNAやタンパク質、ナノチューブ等の巨大原子分子系を、本来なら原子数(N)の4~7乗の計算時間を要する非経験的量子化学や密度汎関数法を、計算精度を落とすことなくNの一乗(オーダーN)で計算するElongation(ELG)法を30年以上の長い年月を掛けて開発してきた。大規模系に対して効率が高まるため、これをマルチスケールへと展開しようという計画に至った。

一方、材料シミュレーションとして、高分子等凝集体のマクロ量を計算する粗視化シミュレーションを多くの企業が用いている。しかし、分子ユニットをビーズに置き換えているため、定性的な物性予測の道具としての利点はあるものの、原子・分子構造や電子状態を無視しているがために個性が出せない。

要するに、前述の厳密な量子化学計算手法では小さな有限原子分子系にしか適用できなく、後述の粗視化モデルでは、細かい分子構造を無視して、数モノマーを1つの粒子で置き換えたような“粗く見る”ことを行っているため、最小単位を原子から粗視化粒子に変えている。よって電子状態などの微細電子構造を抽出することは不可能である。**どちらの手法にも長所と短所があるが、扱えるサイズや物理量は、ほぼ完全に壁で仕切られたように別世界として区別されているのが現状である。**

よって、量子化学的手法からメソ~マクロ量を得ることが可能になるように、また逆にマイクロ量を反映した粗視化モデルとなるように展開する。両者の壁を取り除くマルチスケール計算法の展開は、今後の材料・生体分野の学理の面からも、産業界や将来期待される量子コンピュータ利用にも、極めて重要な領域である。このような学問的背景と課題、今後の材料・生体分野の計算科学の立場からの学問的問いを少しでも解決できるよう、申請者らの国産オリジナル手法(1コア~メニーコアに対応)に対して、全く別の扱いを導入することにより応用性を広げる。

2. 研究の目的

上記の状況を解決する計算手法の構築とその応用を目的とする。無限に近い有限系に対して、局所的な相互作用や反応や切断などを効率よくかつ高精度に電子状態を計算し、高分子材料設計や合成のための反応解析や機能予測ができる信頼性の高いシミュレータを開発することであった。

1988年頃から30年以上開発を続けてきた我々独自の複雑系のための計算手法-3次元-Elongation(3D-ELG)法-は、世界中で当研究室のみ長期戦で開発してきた。この手法には独自理論計算手法であるが故に、特殊な線形代数処理によるアルゴリズムや量子化学と数理の接点における高度な技術がふんだんに含まれており、他の研究者が容易に真似を出来なくなっていることが、未だ世界中で当研究室のみしか開発できない状況にある。よって知る限り、我々以外に世界中で本手法に関する研究は見られないが、2006年にプログラムを公開したため、一部サブルーティンを利用した研究は、国際誌に数報見られていた程度である。

そこで、我々の完全オリジナルな手法の利点を生かして、次世代材料開発や核酸創薬のための「高精度ELG法量子シミュレータ」として展開し、さらに粗視化MDにも適用しうるよう展開してマクロ量に結びつけ、膨大なサンプルを一度に算出できるElongation法の特徴を生かしたニューラルネットワークによるデータサイエンスも行う。将来的には国内外産官学の材料開発分野、創薬分野に提供できる信頼度の高いマイクロからマクロにつながる機能設計マルチスケールシミュレータの構築を目指した。

特に、多成分ポリマー系やソフトマテリアルのメソスケール内部構造(相分離・分散構造など)を把握することは、材料合成をはじめその特性・機能制御に不可欠である。粗視化シミュレーションの中でも成分間の相溶性や相分離解析が可能な散逸粒子動力学(DPD)法は当目的

に有用であるが、粗視化ビーズ間の反発パラメータ(a_{ij})に強く依存した結果のため、その信頼性には注意が必要である。様々なパラメータ決定法が提案されているが確立した方法はない。本研究では、巨大系の電子状態を超高速・高精度演算できる ELG 法を DPD 反発パラメータ算出に利用した高精度粗視化シミュレーション法の構築を目指した。

3. 研究の方法

【ELG法の高度化のための方法論の開発】

1) DFT-PyELG, TDHF-PyELG, TDDFT-PyELG 法

これまで開発してきた独自の純国産 ELG 法を機能探索に向けて、高分子の基底状態・励起状態の両方に適用しうよう高度化する。Hartree-Fock レベルを超えた展開と合わせて、密度汎関数(DFT)法で効率よく稼働するかどうかの検証を行い、励起状態計算が可能となるよう Time-Dependent TD-DFT 法を導入し、ミクロな視点での吸収スペクトルや現実に提唱されている実験事実との対応やメカニズム解明を行う。このようなミクロ物性が、材料合成の過程に対する指標となり光による劣化などのマクロ物性につながる。これまでの GAMESS-ELG 法の母体を PySCF に変更したプログラムには PyELG 法と名付けた。TDDFT-PyELG 法の方が光吸収スペクトル計算には向いており、効率上の観点から、開発は TDDFT 法中心となった。

2) TDDFT-PyELG gradient

時間発展を導入する上で、DFT 法のレベルで稼働するように展開した TDDFT - PyELG 法に対して、エネルギー勾配(gradient)が解析的に得られるように展開し、高分子中の局所的な光励起による結合切断や高分子の劣化を高精度かつ高効率に描写できるように開発した。

3) 階層的-T2C-ELG 法

ELG 法をこれまでの一方向のみならず、末端(T)から中心(C)に向けて同時に高分子の電子状態を伸長できるように発展させた。特に注目する部分がある場合は、それを中心に置き、周囲の電子状態をきちんと導入した上で、中心領域に対して構造最適化や電子相関効果の導入や、より大きな基底関数に置き換える等の高精度化を行うことができる。本手法では周囲の電子状態を DISK に保存し、それらを再利用した上で、中心部を多くの分子に変更して精度を落とさず計算可能となり、大規模な中心部の置換えに対して超効率的な計算を実現できる。本手法をニューラルネットワークに用いる記述子として用いた。

4) 交互 ELG 法による物性最適化法

3)をさらに発展させ、目的の高分子に対して、付加ユニットを交互あるいはランダムに系を伸長できるように展開した。これにより、上記階層的-T2C-ELG 法をさらに高速化するとともに、高分子の任意の場所に新しい付加(高)分子を結合させ、その部分の Active 領域だけの SCF 計算により、全系の電子状態と同じ結果が得られるよう開発を行った。

5) ELG-MD 法

局在化分子軌道(RLMO)ベースの ELG 法エネルギー勾配から力の定数を MD のインプットとして連携させている。その際、次の向かうべき構造を決定する際に Gear predictor corrector (GPC)法を導入し、ELG 法による反応末端部分の Active RLMO 部分の構造パラメータを効率的に決定できるアルゴリズム開発を行い、ELG 法による系の伸長と連動させた。DFT-ELG 法についても同様に稼働するが、母体となる GAMESS-DFT 法の計算速度が遅いため、ELG-DFT のエネルギー勾配計算の効率も良くないためさらなる改良が必要となり継続中である。

粗視化では高分子の種類を無視しており、ビーズの形しか情報がないが、本手法では高分子の種類を原子レベルでミクロな性質としてきちんと反映させることができるようになることが大きな特徴であるため、ELG-MD を粗視化 MD に結合している。

6) PCM-ELG-OPT 法

溶媒効果の導入として分極連続体モデル(PCM)法を ELG 法に導入したが、さらに PCM 下で構造最適化が可能となるよう発展させた。

7) 非直交領域局在化分子軌道による ELG 法の高速化

計画外ではあるが、非直交軌道基底で ELG 法全体を書き直し、従来の領域軌道の裾野(Tailing)をなくすことにより、さらに超高速化を図る方法を開発している。

8) 量子コンピュータ利用に向けた ELG-CASSCF 法

特許出願検討中につき非公開

【マルチスケール計算への展開】

本課題の最も重要なマルチスケールに向けた基本的な電子状態の部分で粗視化と結び付ける前段階として利用で、上記 1~6 による高度化 ELG 法を利用している。

マルチスケール計算に向けた粗視化シミュレーションに用いる DPD 法では、粗視化ビーズの運動を Newton 運動方程式で記述する。ビーズの受ける力のうち保存力 F^c はカットオフ距離 r_c およびビーズ間反発を表す a_{ij} パラメータより $F_{ij}^c = a_{ij}(1 - r_{ij}/r_c)(r_{ij}/|r_{ij}|)$ ($r_{ij} < r_c$) と表現される。本研究では ELG 法と DPD 法の結合のため、Valdivia と Jaime が脂質分子に対して最適化した量子化学計算による水和エネルギー E_{solv} と a_{iW} (ビーズ i と水の相互作用) の変換式 $a_{iW} = 1.6008E_{\text{solv}} + 79.711$ を利用し、さらにビーズ i, j 間パラメータを $a_{ij} = |a_{iW} - a_{jW}| + 25$ より見積もった。

ELG 法では、重合反応のようにモノマー分子を反応末端に順次付加させて電子状態を伸長させる。出発分子から得た系に広がった正準分子軌道(CMO)をモノマーに近い active 領域局在化軌道(RLMO)と、モノマーから遠く相互作用の及ばない Frozen RLMO にユニタリ変換する。Active RLMO とモノマーの軌道のみから成る固有値問題を解くことで、精度を落とさず電子状態を伸長できる。軌道局在化と部分固有値問題を繰り返し、非周期系ポリマーの電子状態を高速・高精度に演算できる。本研究では、高分子のユニット当たりの水和エネルギー $E_{\text{solv}} (= [E_{\text{total,PCM}} - E_{\text{total,gas}}] / \text{unit 数})$ を得るため、構造最適化および連続誘電体モデルと結合させた PCM-ELG-OPT 法を適用した。ELG 計算より得た E_{solv} から変換式によって a_{ij} パラメータを獲得し、統合プラットフォーム J-OCTA 下で DPD シミュレーションを行った。

4. 研究成果

ELG 法の高度化に関する上記 1~6 は完了し、機械学習にもちいる記述子としても利用している。7,8 については、当初は予定外ではあったが、その必要性和重要性から展開中である。

まず、ミクロな電子状態計算において、高精度適用がかなり困難な部分である高分子と光との相互作用に注目し、周囲効果を導入した上で局所的ながら全系計算と同じ励起エネルギーおよび励起振動子スペクトルが得られる、UV-Vis 局所励起状態計算法を確立した。さらに本手法に構造最適化を導入し、領域局在化分子軌道に基づくエネルギー勾配から、ELG 法ならではの局所 TDDFT 計算法を新しく開発した。本手法により、系全体の励起状態を計算することなく、励起部分(元々局所的現象)に局在化した領域軌道を基底とした基底状態および励起状態を正確かつ効率的に得る方法となった。本手法は一般性が高いため、TDHF法および Coupled Perturbed (CP)HF 法等にも展開中であると共に、他の系に対しても検証中である。

上記で高度化した ELG 法によるとワンコア-オーダーN法であることから大量のデータを抽出できるため、ニューラルネットワークを用いた機械学習への適用に展開した。特に階層的-T2C-ELG 法では、DNA の末端から中心部に向けて電子状態を伸長して求めて保存しておき、最後に中心部の塩基対数個を接合する際に、多くの種類の小分子を交換して何度も解き直すことにより膨大なデータを正確に効率よく抽出できる。また種々の塩基対からなるブロック DNA に適用し、ELG 法による領域軌道ベースによる局所バンド構造を抽出する際に、学習させたデータから新しく生成した ELG データについてその正確さ、大幅な計算時間の削減を確認することができた。

特に上記交互 ELG 法による物性最適化法は、従来の ELG 法をさらに一般化し、系の任意の場所からさらに新しい系の電子状態を伸長できるようにプログラム開発を行い、自由自在な系の拡張を可能にした。例としてポリジアセチレンの側鎖の多様な修飾に適用し、多数の異なる種類のユニットに対して、非超分極率の最大値(または最低値)を与える側鎖の探索を効率的に行った。本手法は、構造最適化のみならず、物性最適化探索法として非常に有効であり、それゆえ、目的とする特性を実現する分子構造予測、いわば材料構造の逆デザインが可能となり、遺伝的アルゴリズムと好相性であることが認められた。非超分極率に限らず、如何なる物性に対しても、その性質を最大限に発現しうる構造を、多数のあらゆる構造を計算することなく、有利な分子構造や種類を各伸長ステップで選びながらショートカットで時々刻々追跡できることが、本手法の大きな特徴である。本方法は求める物性を与える系の探索に有効となる。

一方、マルチスケール化に向けて展開している ELG-DPD 法の有効性検証のため、アミン含有 CO_2 分離膜の相分離による膜劣化の解析に適用した。一例として、ELG-DPD 法によって得た 2-(2-aminoethylamino)ethanol (AEEA)とポリビニルアルコール PVA (質量比 4:6)の結果からアミンの球状島構造が発生しており膜性能劣化につながる可能性を示すことが実験的に報告されている。ジアミン AEEA とモノアミン Mono-ethanolamine (MEA)における等値面から、AEEA の第二級アミンが相分離を抑える効果を持つことが示された。また AEEA の比率低下により相分離が抑えられ混合が進んでいることも妥当な結果である。さらに、ハイドロゲルの比較では、ポリエチレングリコール PEG に対して PVA は相分離を大きく低減させており、実験

結果を再現した。まだ数例の検証ではあるが、既存手法では再現できていなかった実験結果を、高精度 ELG 法と組み合わせることにより水和エネルギーを高精度に算出したことから、本マルチスケール法としての有効性を確認した。

別の例として、シリコンゴムへの適用も行っている。高分子材料は複数の空間スケールが階層的に存在・相互作用しており、各スケールは別個の物理法則に支配されている。近年コンタクトレンズ材料として誕生したシリコンハイドロゲル(Si-Hy)は、ガス透過性に優れるシリコンとハイドロゲルの共重合体で、高い酸素透過性を示す。粗視化では高分子の種類を無視しており、ビーズの形しか情報がないが、本手法では高分子の種類を原子レベルでミクロな性質として反映させることができるようになることが大きな特徴である。本応用では、シリコン相の島構造、酸素分子の自己拡散係数と酸素分子の電子状態を含む相互作用をマルチスケールの求め、実験結果と比較することによりミクロ相分離構造内のガス透過性の関係が確認できた。Si-Hy の高酸素透過性の要因として、シリコン(島)とハイドロゲル(海)がミクロ層分離による海島構造を形成し、酸素分子が島内部を拡散することが計算上示された意味は大きい。計算科学によって島構造とガス拡散性の関係を予測できれば、高ガス透過性高分子膜の設計に有効であり、高分子の有害ガス吸着等への環境問題への展開も期待できる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 5件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hisama Keisuke, Orimoto Yuuichi, Pomogaeva Anna, Nakatani Kazuhiko, Aoki Yuriko	4. 巻 155
2. 論文標題 Ab initio multi-level layered elongation method and its application to local interaction analysis between DNA bulge and ligand molecules	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044110 ~ 044110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0050096	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 該当する
1. 著者名 Ivonina Mariia V., Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 154
2. 論文標題 Quantum chemistry?machine learning approach for predicting and elucidating molecular hyperpolarizability: Application to [2.2]paracyclophane-containing push-pull polymers	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124107 ~ 124107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0040342	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 該当する
1. 著者名 Zhang Guozhu, Hosomi Takuro, Mizukami Wataru, Liu Jianguang, Nagashima Kazuki, Takahashi Tsunaki, Kanai Masaki, Sugiyama Takeharu, Yasui Takao, Aoki Yuriko, Baba Yoshinobu, Ho Johnny C., Yanagida Takeshi	4. 巻 9
2. 論文標題 A thermally robust and strongly oxidizing surface of WO ₃ hydrate nanowires for electrical aldehyde sensing with long-term stability	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 5815 ~ 5824
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0TA11287A	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 該当する
1. 著者名 Huang Xiao, Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 125
2. 論文標題 Theoretical Analysis of Properties of Ground and Excited States for Photodissociation of the C-O Bond in Polycarbonates	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 6662 ~ 6673
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c03074	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 該当する

1. 著者名 Aso Daiki, Orimoto Yuuichi, Higashino Makoto, Taniguchi Ikuo, Aoki Yuriko	4. 巻 783
2. 論文標題 Computational approach for investigating the mechanism of carbon dioxide interaction by 2-(2-aminoethylamino)ethanol: A significant role of water molecule	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 139070 ~ 139070
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2021.139070	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 Orimoto Yuuichi, Hisama Keisuke, Aoki Yuriko	4. 巻 156
2. 論文標題 Local electronic structure analysis by ab initio elongation method: A benchmark using DNA block polymers	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204114 ~ 204114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0087726	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 Aso Daiki, Orimoto Yuuichi, Higashino Makoto, Taniguchi Ikuo, Aoki Yuriko	4. 巻 24
2. 論文標題 Why does 2-(2-aminoethylamino)ethanol have superior CO2 separation performance to monoethanolamine- A computational study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 14172 ~ 14176
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP01136K	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 Higashino Makoto, Aso Daiki, Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 201
2. 論文標題 Multiscale investigation for CO2 capture using membrane with AEEA: Significance of fluid flow and AEEA content to CO2 permeance	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 123564 ~ 123564
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123564	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 Ivonina Mariia V., Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 755
2. 論文標題 Nonlinear optical properties of push-pull systems containing [2.2]paracyclophane: Theoretical study via elongation method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 137760 ~ 137760
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2020.137760	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 Mashkovtsev Denis, Mizukami Wataru, Korchowicz Jacek, Stachowicz Kusnierz Anna, Aoki Yuriko	4. 巻 41
2. 論文標題 Elongation method with intermediate mechanical and electrostatic embedding for geometry optimizations of polymers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 2203 ~ 2212
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26389	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 該当する

1. 著者名 Liu Jiangyang, Nagashima Kazuki, ..., Aoki Yuriko, ...Yanagida Takeshi	4. 巻 1
2. 論文標題 Face-selective tungstate ions drive zinc oxide nanowire growth direction and dopant incorporation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-020-00063-5	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 Shiota Tomoya, Mizukami Wataru, Tochihiro Hiroshi, Yagyu Kazuma, Suzuki Takayuki, Aoki Yuriko	4. 巻 124
2. 論文標題 Microscopic Hopping Mechanism of an Isolated PTCDA Molecule on a Reactive Ge(001) Surface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 24704 ~ 24712
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c05858	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 Ivonina Mariia V., Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 154
2. 論文標題 Quantum chemistry-machine learning approach for predicting and elucidating molecular hyperpolarizability: Application to [2.2]paracyclophane-containing push?pull polymers	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124107 ~ 124107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0040342	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 Higashino Makoto, Aso Daiki, Yamashita Yosei, Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 11
2. 論文標題 Effects of fluid flow on the rate limiting for CO2 capture by an AEEA containing membrane	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Environmental Chemical Engineering	6. 最初と最後の頁 110820 ~ 110820
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jece.2023.110820	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 Mashkovtsev Denis, Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 19
2. 論文標題 Fast and Accurate Calculation of the UV?Vis Spectrum with the Modified Local Excitation Approximation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 5548 ~ 5562
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.3c00266	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 Huang Xiao, Orimoto Yuuichi, Aoki Yuriko	4. 巻 26
2. 論文標題 Theoretical design of durable and strong polycarbonates against photodegradation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 57 ~ 61
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP03533F	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20件(うち招待講演 2件/うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Y. Aoki
2. 発表標題 Material Science
3. 学会等名 Material Science in HPC, Riken International HPC Summer School 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Ivonina, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Elongation method and machine learning for computational design of functional organic polymers
3. 学会等名 Riken International HPC Summer School 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 D. Mashkovtsev, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Fast calculation of electron excitations based on Regional Localized Molecular Orbitals
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 X. Huang, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Theoretical analysis on properties of ground and excited states for photodissociation of C-O bond in polycarbonate
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 久間 圭祐, 折本 裕一, Pomogaeva Anna, 中谷 和彦, 青木 百合子
2. 発表標題 多階層エロンゲーション法の構築及びDNAパルジ認識分子探索への応用
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Ivonina, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Quantum chemistry-machine learning combined approach for computational design of functional polymers for nonlinear optics application
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 折本 裕一, 青木 百合子
2. 発表標題 Elongation法による巨大系電子状態の高精度ハイスループット演算と機械学習連携
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 久間 圭祐, 折本裕一, 青木 百合子
2. 発表標題 エロンゲーション法と機械学習の連携によるDNAブロックポリマーの高効率局所電子構造解析
3. 学会等名 第70回高分子討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 塩田知弥, 栢原浩, 水上涉, 折本裕一, 青木百合子
2. 発表標題 Si及びGe(001)表面ダイマーのフリップフロップ運動の原子レベルメカニズム
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Ivonina, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Exploring the mutagenesis mechanism in DNA damaged by O6-methylguanine via through-space/bond orbital interaction analysis
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 D. Mashkovtsev, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Modified Local Excitation Approximation for fast and accurate TDDFT calculations in photoactive center of macromolecules
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 X. Huang, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Theoretical exploitation of novel light-resistant polycarbonate material design
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 折本 裕一, 麻生 大樹, 青木 百合子
2. 発表標題 Elongation法と散逸粒子動力学法の結合による高精度粗視化シミュレーション法の開発
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 Y. Aoki, Y. Orimoto
2. 発表標題 Order-N Elongation method for highly accurate bio/material design
3. 学会等名 The 10th edition of the conference of The Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M. Ivonina, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Through-space/Through-bond method for analyzing molecular orbital interactions and its application to DNA mutations
3. 学会等名 The 10th edition of the conference of The Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 X. Huang, Y. Orimoto, Y. Aoki
2. 発表標題 Novel Polycarbonate Material Design of Light-Resistance: a Theoretical Investigation
3. 学会等名 The 10th edition of the conference of The Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 塩田知弥, 水上涉, 栃原浩, 柳生数馬, 鈴木孝将, 青木百合子
2. 発表標題 第一原理計算と動的モンテカルロ・シミュレーションによるGe(001)表面上のPTCDA分子の研究
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M. Ivonina, Y. Orimoto, Y. Aoki合子
2. 発表標題 Mutagenesis in methylated DNA: a quantum chemical insight via Through-space/bond orbital interaction analysis
3. 学会等名 第17回分子科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 折本 裕一, 青木 百合子
2. 発表標題 軌道間相互作用を記述子とした分子構造と導電特性の関係予測
3. 学会等名 第17回分子科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuriko Aoki, Yuuichi Orimoto
2. 発表標題 Order-N Elongation method toward multiscale calculations
3. 学会等名 TACCD2023
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
ポーランド	Jagiellonian University			
中国	South China Normal University			
ドイツ	University of Saarland			
ロシア連邦	Saint Petersburg State University			