バイオ・ナノ系の手軽な数理設計～超高速・高精度量子計算～

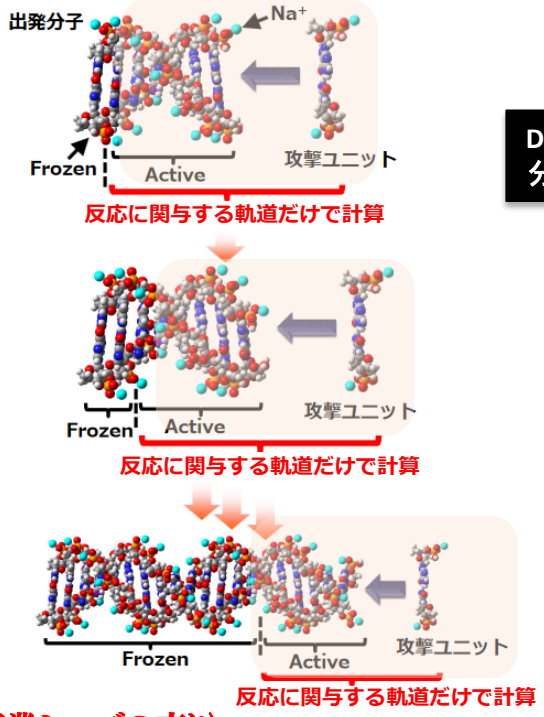
2019年度 大学発ベンチャー事業シーズ育成支援プログラム
「Elongation法によるDNA損傷修復解明のための見える化システムの構築」

総合理工学研究院
青木 百合子 教授

PC上でも高速 & 高精度で走る量子化学計算プログラムを独自開発し、バイオ系やナノ系の材料設計の手軽な予測手段を構築します

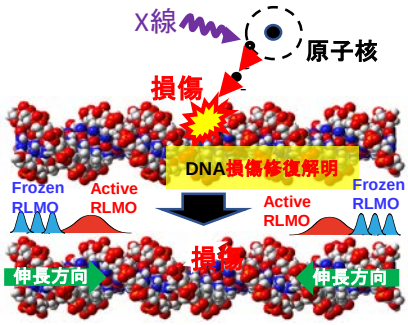
巨大系の高精度・高効率電子状態計算法
3D-Elongation法

巨大系の電子状態計算では、膨大な計算コストに加え、系が大きすぎて計算そのものが不可能となる点が大きな課題です。
当グループで開発したElongation法は、高分子の重合反応のようにユニットを逐次的につないでいき、毎回、反応部位だけを計算することで効率計算を可能としています。

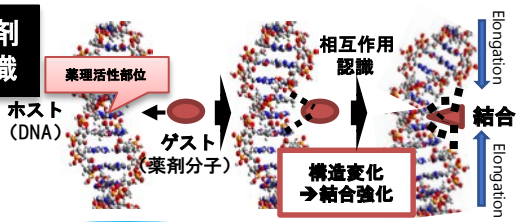


応用例

DNA損傷

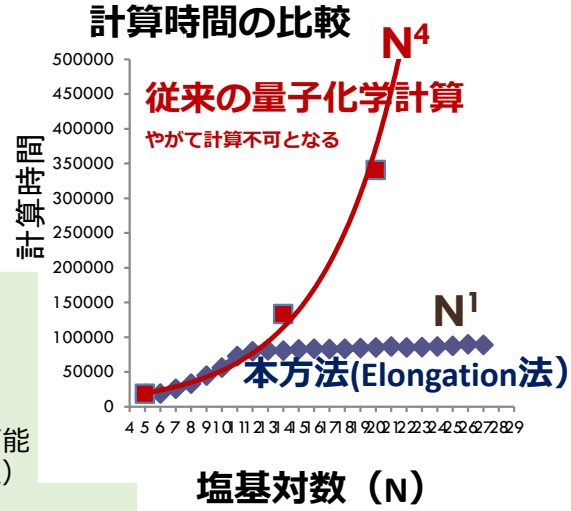


DNA-薬剤分子認識



ミクロな電子の振舞を“見える”ようにしよう

計算時間の比較



(事業シーズの売り)

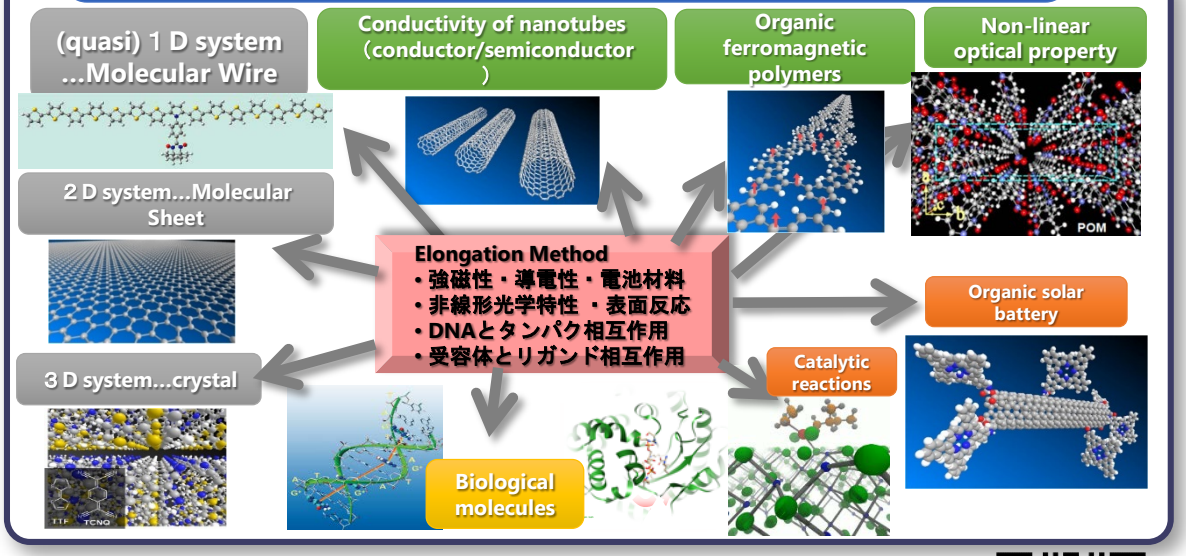
これからは計算で物性を予測する時代！

電子状態からしか予測できない特性と材料設計

【本手法の特色】

- 従来の量子化学計算で解けない系が解ける
- １コア～メニーコアまで対応 → PCでも計算可能
- オーダーN高速法かつ正確（従来N^4法と同結果）
- 全体中の局所変化の解析が効率的に行える
- 多くのサンプリングが一気に取れる → 機械学習と好相性

生体材料・ナノ材料設計のための新しい超効率的計算



AiRIMaQ
九州大学 学術研究・産学官連携本部
Academic Research and Industrial Collaboration Management Office of Kyushu University

九州大学

（お問い合わせ窓口）
九州大学 学術研究・産学官連携本部 ベンチャー創出推進グループ
MAIL: startup@airimaq.kyushu-u.ac.jp, Tel: 092-832-2168
aoki.yuriko.397@m.kyushu-u.ac.jp, Tel: 092-583-8834

計算化学(科学)の現状

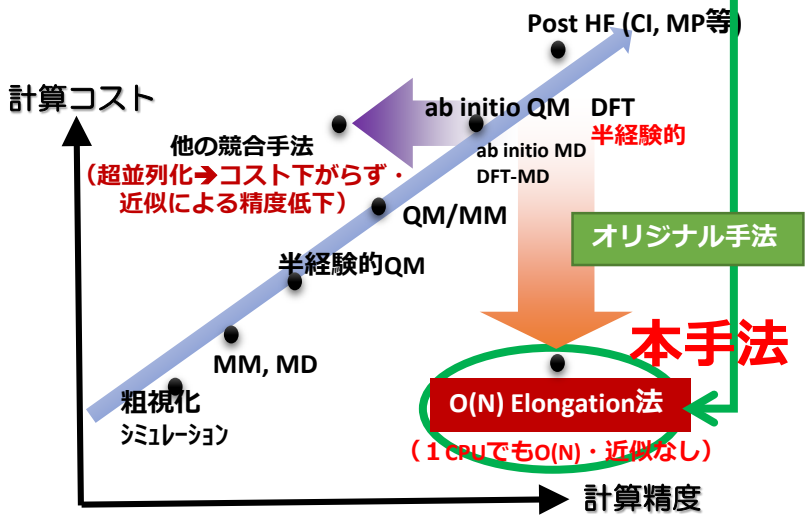
- **QM法（MO,DFT）**
  - 基底状態、励起状態
  - 安定構造、遷移状態構造
  - (超)分極率、電子密度
  - 導電性、磁性
  - (非線形)光学特性、吸収スペクトル
  - 反応経路解析、など
- **MD法**
  - 特定の温度・圧力下の原子・分子運動の経時変化、相変化
  - 基底状態の平衡構造
  - 動径分布
  - 拡散係数、熱伝導率、粘性係数、など
- **MM法**
  - 基底状態の安定構造
- **粗視化シミュレーション**
  - 溶融高分子のダイナミクス
  - 相分離
  - レオロジー
  - ゲル化
  - せん断・凝着特性、など

高信頼性

扱える系のサイズ

事業シーズ(Elongation法）の狙い

信頼性の高い電子状態計算（MO,DFT)を高速に大規模系にも使えるようにElongation法を開発



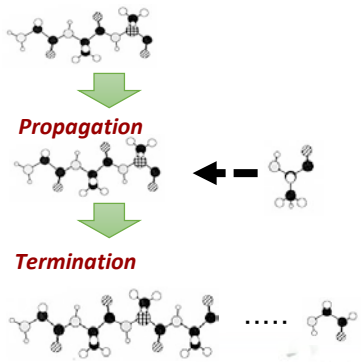
O(N) 法：系の分子サイズに正比例（Nの一乗）する計算時間で演算可能な方法
通常の量子化学計算は通常$N^{4\sim8}$の計算時間を要する

スパコンでも計算化学では取扱いが困難とされる複雑な構造を有した高分子化合物を、PC上で処理可能な高精度量子計算化学ソフトを開発します

分子軌道の形を数理的に正しく変形し、高分子局所反応を計算機上で実現

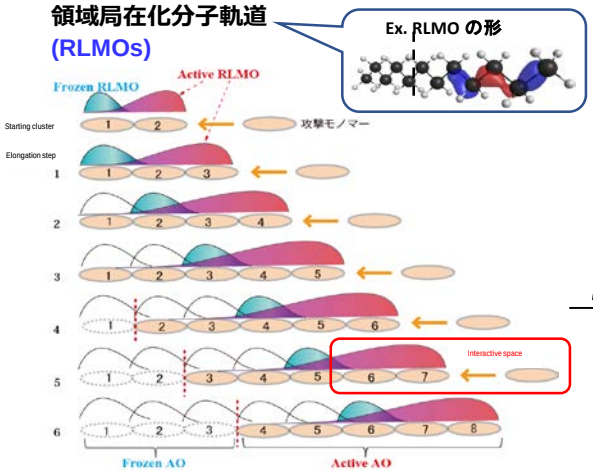
Elongation (ELG) method

高分子の理論的重合法

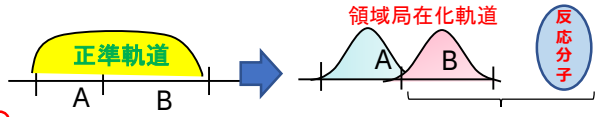


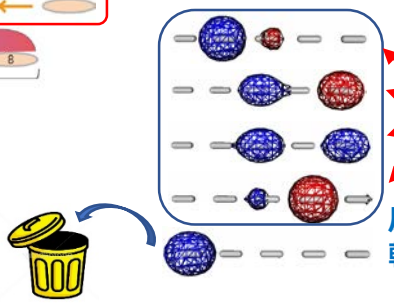
三次元系へも拡張

領域局在化分子軌道 (RLMOs)



分子軌道数、原子軌道数が、最初から最後まで一定数（増大しない）





これらの軌道とだけ相互作用

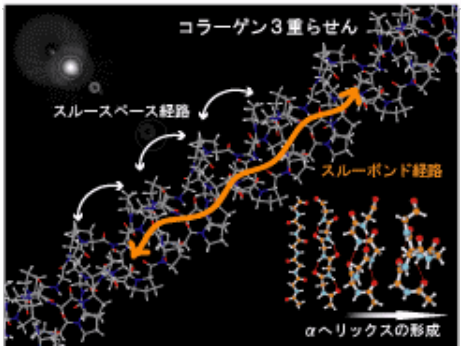
反応分子

反応に関与しない不要な軌道は常に捨てられる
→　高速化

生体高分子への応用

タンパク質内電子移動メカニズムの解明

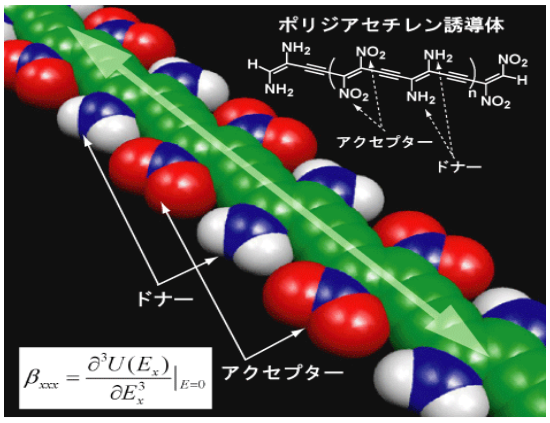
- 電子移動経路の解析
- 分子構造と電子移動反応の関係（ヘリックス形成の効果）
- 局所状態密度の解析



機能性高分子の設計

非線形光学材料の設計

- ポリマー系の超分極率 β 値を効率的に算出
- 分子構造と超分極率の定量的解析により、大きな超分極率をもつポリマーを理論的に設計

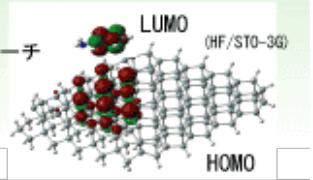


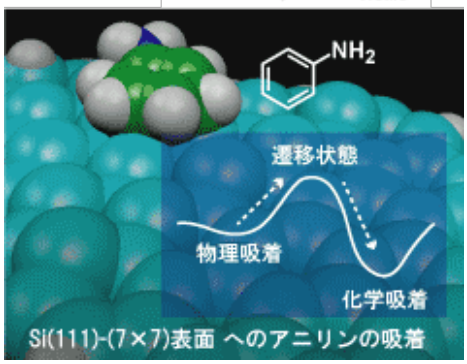
$$\beta_{xxx} = \frac{\partial^3 U(E_x)}{\partial E_x^3}\Big|_{E=0}$$

表面系への展開

固体表面における分子の物理・化学吸着機構の解明

電子状態理論によるアプローチ





Si(111)-(7×7)表面 へのアニリンの吸着