



第125回 OPERA研究交流セミナー

第117回 ISIT有機光エレクトロニクス研究特別室セミナー

第184回 未来化学創造センターセミナー



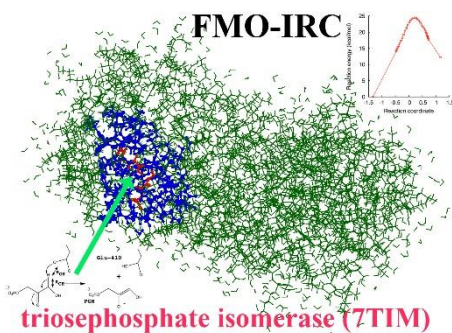
日時: 2015年6月30日(火) 15:30-

場所: 共進化社会システムイノベーション施設 2階大会議室

## フラグメント分子軌道法を用いて巨大分子系の量子化学計算を高速に

産総研・ナノ材料研究部門 Senior Researcher Dmitri G. Fedorov

量子化学計算を高速に行う為、フラグメント化が魅力的である。フラグメント分子軌道法(FMO法)は2004年からGAMESSで無償公開されている [1]。FMO法を用いて、巨大分子系の構造最適化、遷移状態探索、振動数計算、動力学等が出来る。半経験法(FMO-DFTB法)を以って百万原子以上の系の全原子の構造最適化に成功した。又は、閉殻基底状態のみならず、開殻電子状態、或いは励起状態の計算も可能である。溶媒中小分子と蛋白質の電子励起は計算されている。



FMO-IRC(intrinsic reaction coordinate)法を用いて、7TIMの酵素化学反応経路を計算した[2]。又は、多数ラジカル含有分子集合体の動力学計算で動径分布関数を算出し、実験値と比較した[3]。FMOを用いて、赤外、Raman、イオン易動度、吸収の分光模擬は実現された。

参照

[1] <http://staff.aist.go.jp/d.g.fedorov/fmo/main.html>.

[2] H. Nakata, D. G. Fedorov, T. Nagata, K. Kitaura, S. Nakamura, J. Chem. Theory Comput., 印刷中。

[3] H. Nakata, M. W. Schmidt, D. G. Fedorov, K. Kitaura, S. Nakamura, M. S. Gordon, J. Phys. Chem. A 118 (2014) 9762-9771.

主催:九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター  
:財団法人九州先端科学技術研究所(ISIT)  
共催:九州大学 未来化学創造センター