

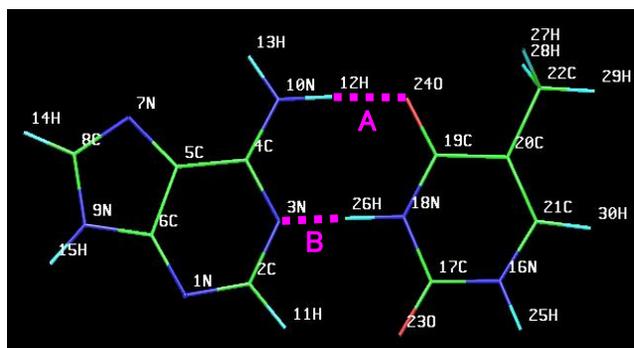
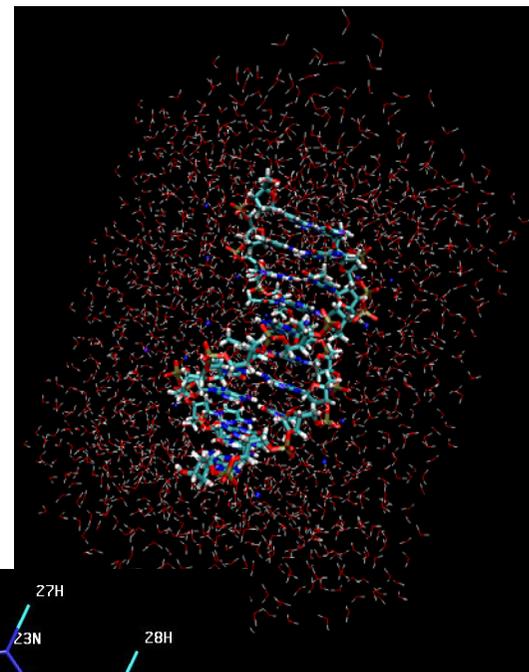
オーダーN法DFT計算プログラムCONQUEST を用いたDNAの構造に対する理論研究

物質・材料研究機構: 大塚教雄、宮崎剛、大野隆央

University College London: D. R. Bowler and M. J. Gillan

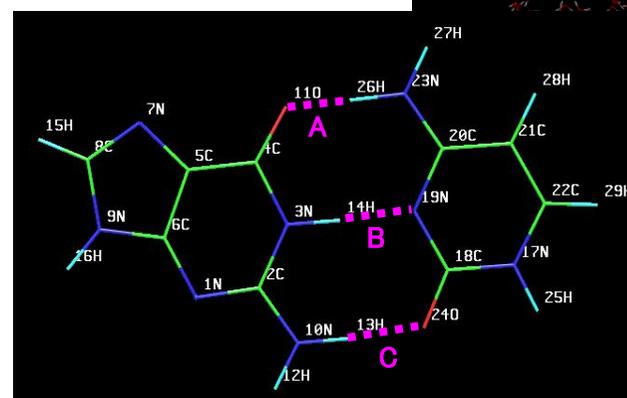
CONQUEST: O(N) DFT method

- 数万原子を含む系に対する計算が可能
- 密度行列+局在軌道
- DNAの系に対する計算精度のチェック
 - 他の手法との比較
 - 水素結合に対する精度
- 研究計画



adenine

thymine



guanine

cytosine