

「タンパク質の電子状態計算」

| | |
|---------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 講演者氏名 | 北浦和夫 |
| 共同研究者氏名 | Dmitri G.Fedorov |
| 所属 | 産総研・計算科学 |
| 講演タイトル | 「タンパク質の電子状態計算」 |
| 講演概略 | <p>私たちが開発しているフラグメント分子軌道法 (FMO法)は、タンパク質のような数千原子からなる巨大分子の電子状態を ab initio quality で計算できる方法である。本方法は、超並列計算処理にも適しており、数百台のCPUによる並列計算においても、効率80%を達成している。最近、55台のパソコンによる並列計算で、600原子のポリペプチドのFMO-HF/3-21Gレベルでの構造最適化計算に成功した。数百台の計算機が使えるれば、数千原子からなるタンパク質の構造最適化計算も可能な状況にある。本講演では、私たちの、タンパク質の構造計算に向けた取り組みと現状を紹介する。</p> |