

「タンパク質全電子計算とスーパーコンピュータ」

講演者氏名	佐藤 文俊
所属	九工大情報工
講演タイトル	「タンパク質全電子計算とスーパーコンピュータ」
講演概略	<p>本研究室では生体分子の電子状態を本来持っている構造をなるべく簡略化せずに理解することを目的に、大型分子や金属錯体の電子状態計算に有効な密度汎関数法に基づく分子軌道法プログラムを作成・発展させてきた。これをワークステーションクラスに適用して小タンパク質の全電子計算が行えるようになった。次の本格的なタンパク質の全電子計算にはスーパーコンピュータが必須であるが、本プログラムが採用したコンピュータ言語の壁のためこれを使用できずにいる。(個人的観点であることを否めないが)本研究ではどのようなシステムが望ましいか希望を述べたい。</p>