

「北欧のフリーソフトDALTONの紹介と応用事例」

講演者氏名	望月祐志
所属	科技団・原研
講演タイトル	「北欧のフリーソフトDALTONの紹介と応用事例」
講演概略	北欧諸国の研究者を中心に開発されているDALTONは、分子の非線型光学特性や磁気特性あるいは内殻イオン化の取扱いに特徴を持つフリーソフトで、積分 駆動型の並列実行により大型分子の計算も容易です。この講演では、DALTONの機能紹介と共に、小職が手がけている応用事例について並列計算のメリット を示しつつお話しさせていただきますと思います。