

「密度汎関数法プログラム ProteinDF を用いた並列処理によるシトクロム c の全電子計算」

講演者氏名	○佐藤文俊、吉廣保、恵良信、柏木浩
所属	九工大情報工
講演タイトル	「密度汎関数法プログラム ProteinDF を用いた並列処理によるシトクロム c の全電子計算」
講演概略	当研究グループではタンパク質などの巨大分子の電子状態を研究するために、密度汎関数法による独自のプログラム ProteinDF を開発してきた。このたび、ワークステーションクラスタを使用して金属タンパク質シトクロム c の全電子計算を達成したので、その結果を報告するとともに、さらに大きな分子における計算見積もりを行う。