

「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。 |