

キヤノン株式会社・岡山理科大学直島好伸研究室

高性能計算機システムによる高速量子化学計算
—機能性物質の分子設計とその応用に関する研究—
Itanium2-Gaussian03 量子化学計算システム

Keywords : 機能性物質、色素、プロテオミクス、生命情報、計算化学

非経験的分子軌道法や密度汎関数法による高精度
量子化学計算 医薬・食品・香料・ナノ材料・有機機
能性物質などの設計、開発における強力な研究手法

有機反応の理論的検討—環境調和型反応の設計

分子構造決定計算

HOMO, LUMO 解析計算

遷移状態計算

励起状態計算

生体分子の全電子量子化学計算—生体分子の機能や反応の解明

タンパク質の立体構造解析計算

タンパク質と化学物質の相互作用解析計算

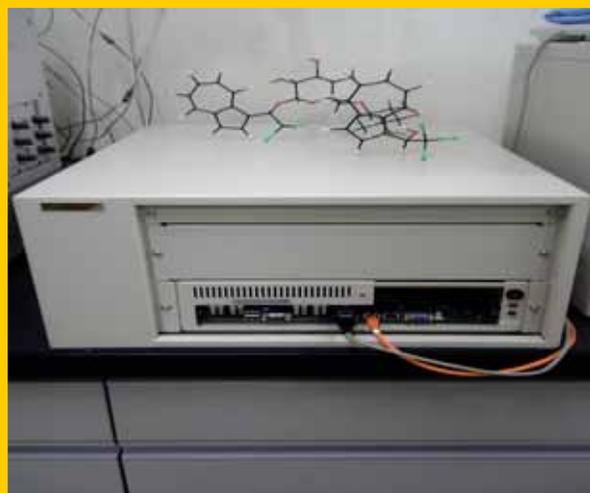
タンパク質とタンパク質の相互作用解析計算

Gaussian03計算サーバ

Itanium2 1.6GHz/3MB
2CPU 16GBメモリ

管理マシン

Pentium4 3.4GHz/1MB
2GBメモリ



計算結果は
Pentium4
マシンに戻っ
て管理される



担当
森 義裕