

岡山理科大学直島好伸研究室・キヤノン株式会社

## タンパク質の量子化学計算に挑む

*Itanium2-Gaussian・BioStation* 生命分子計算システム

**Keywords :** タンパク質、生体分子、医薬、生命分子計算、量子化学計算、生命情報

### コンピュータによるシミュレーション 生体分子の全電子量子化学計算

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

#### 生体分子シミュレーションによる高精度機能物質開発

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

#### 生命分子計算サーバ

Itanium2 1.6GHz/3MB  
4CPU 32GB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

#### 管理マシン

Pentium4 3.4GHz/1MB  
2GBメモリ

