

直島好伸、森 義裕 (岡山理科大学)、HPCシステムズ株式会社

連成分子化学計算プラットフォーム

Hybrid QM/MD Platform の開発

～簡便でクラウドな分子シミュレーションシステム～

Keywords : シミュレーション・生体分子・ソフトウェア・クラウドコンピューティング

“誰でも”、“簡単に”計算化学を行える環境を

生体分子と有機化合物およびそれらの複合体のための分子(動)力学・量子化学計算を支援するシステム

『計算化学は難しい！』
はもう過去の事！！

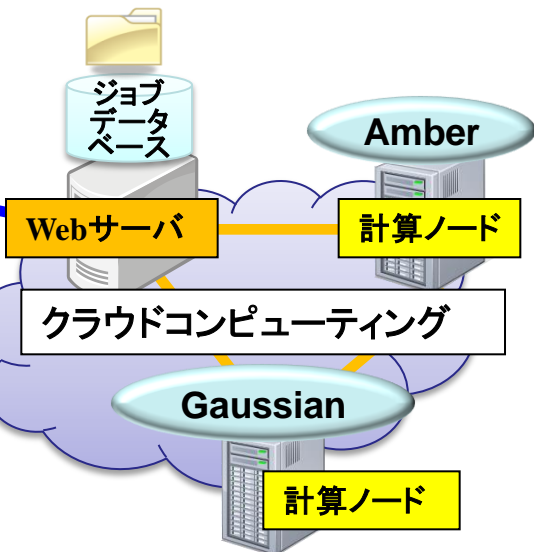
クライアント端末

・端末の性能やOS、ブラウザに依存しない



インターネット

・複数の計算機間のファイルの受け渡しの手間を省く

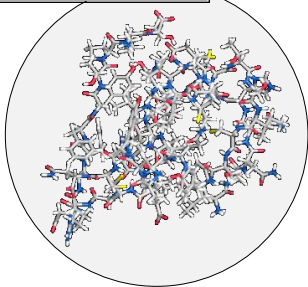


・複雑な Linux コマンド入力の排除
・ファイル修正の自動化
・計算データの一元管理

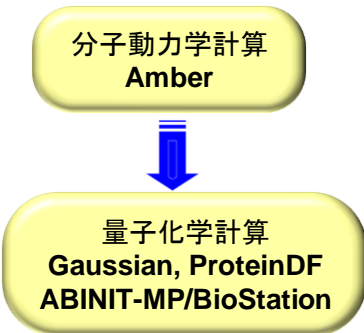
計算機・ソフトウェアの面倒な保守管理から解放

Webにて公開中 (要 Amberライセンス) <https://www.keisankagaku.com/engineer/>

評価実験

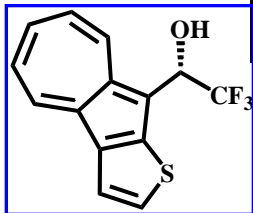


インスリン単量体
(原子数:785、アミノ酸残基数:51)

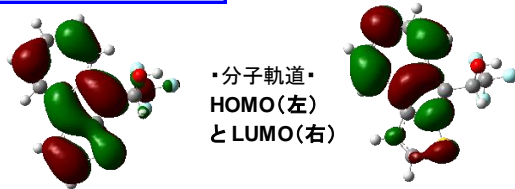


全機能が正常動作した
～煩雑さ、問題点の解消～

評価実験



アズレノチオフェン化合物
新規機能性物質



・分子軌道・HOMO(左)とLUMO(右)