

課題名 (タイトル) :

大規模分子理論の開発と応用

利用者氏名 : 中嶋 隆人

所属 : 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム

報告内容

1. 利用がなかった場合の理由

われわれは、京コンピュータの能力を最大限に発揮することのできる理論分子科学の計算手法とその計算プログラム「NTChem」を開発している。本年度は、とりわけ京コンピュータ上でのソフトウェア開発と高度化に注力したため、RICC を利用しなかった。