



# SMASHと量子化学

石村 和也

(分子科学研究所 計算分子科学研究拠点(TCCI))

【配信講義】CMSI計算科学技術特論C 第11回

2015年12月10日



# Agenda

- ・ 自己紹介
- ・ SMASHプログラムについて
- ・ 量子化学分野のプログラム紹介
- ・ 開発を始めた経緯
- ・ SMASHのアルゴリズムとパフォーマンス
- ・ プログラム公開
- ・ 今後の開発の課題
- ・ まとめ