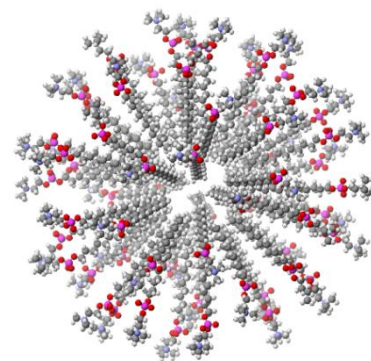


分子シミュレーション用ソフトウェア SCIGRESS (サイグレス) V2 無料体験ワークショップのご案内

分子シミュレーションソフト「SCIGRESS V2」を使用した無料体験ワークショップを開催します。入力データの作成から計算の実行、結果の解析までご自身の手で一つ一つご確認いただくことで、製品の使用方法を効率よく習得いただけます。製品にご興味をお持ちの方は是非この機会をご利用ください。今回からお客様のニーズに合わせてご選択いただけるよう、基本編、分子軌道編、分子動力学編の3つのコースを用意いたしました。

SCIGRESS

SCIGRESS (サイグレス) は、使いやすいモデリング機能、多様な計算機能、強力な解析機能を操作性の高いGUI環境から利用できる分子シミュレーションソフトです。低分子から高分子、液体、結晶まで幅広い材料に適用でき、実験研究者からシミュレーションの専門家ならびに教育現場においてご利用いただけます。



■ SCIGRESSカタログ :

http://www.scigress.jp/scigress/info/SCIGRESS2.0_Brochure.pdf

■ 基本編

- 日時 : 2014年8月22日 (金) 13:00~16:20
- 場所 : 貸し会議室 大阪研修センター江坂 会議室E
大阪府吹田市江坂町1-13-41 SRビル江坂 (旧 NF江坂ビル)
<http://www.esakakensyu.com/access/index.html>
TEL : 06-6386-4040
- 定員 : 10名 (申込受付は8月20日 (水) まで)
- お申込み : 下記サイトからお申込みいただけます。
<https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/2505>

■ 分子軌道編 (GAMESS連携機能の実習もあります)

- 日時 : 2014年8月28日 (木) 13:30~16:50
- 場所 : ティーズ渋谷フラッグ Room8A
東京都渋谷区宇多川町33番6号 Shibuya Flag 8階
<http://www.ts-kaigishitu.com/wp-content/themes/ts/pdf/flag/map.pdf>
TEL : 03-5457-7881
- 定員 : 10名 (申込受付は8月26日 (火) まで)
- お申込み : 下記サイトからお申込みいただけます。
<https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/2506>

GAMESSの実習は
希望者のみご参加ください。
また、参加を希望される方は、
GAMESS (64bit用)をダウンロードし、
PCとともにご持参ください。

■ 分子動力学編 (LAMMPS連携機能の実習もあります)

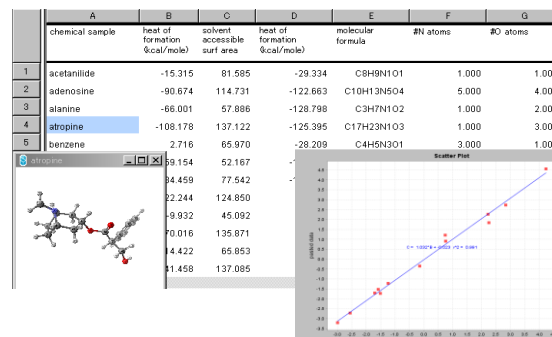
- 日時 : 2014年8月29日 (金) 13:30~16:50
- 場所 : ティーズ渋谷フラッグ Room8A
東京都渋谷区宇多川町33番6号 Shibuya Flag 8階
<http://www.ts-kaigishitu.com/wp-content/themes/ts/pdf/flag/map.pdf>
TEL : 03-5457-7881
- 定員 : 10名 (申込受付は8月26日 (火) まで)
- お申込み : 下記サイトからお申込みいただけます。
<https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/2507>

LAMMPSの実習は
希望者のみご参加ください。
また、参加を希望される方は、
LAMMPSインストール済みのPCを
ご持参ください。

■ ワークショップ内容

基本編

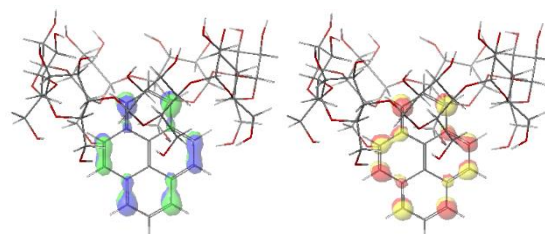
- 基本操作：モデル構築
- MO計算：構造最適化、計算結果の確認（部分電荷、分子軌道）
- Spreadsheet 基本操作：複数化合物に対するバッチ計算
- MD計算（結晶）：モデル構築、計算実行
- MD計算（2分子混合系）：MO計算による電荷決定、モデル構築、計算実行
- 事例紹介、質疑応答



Spreadsheetによる構造活性相関

分子軌道編

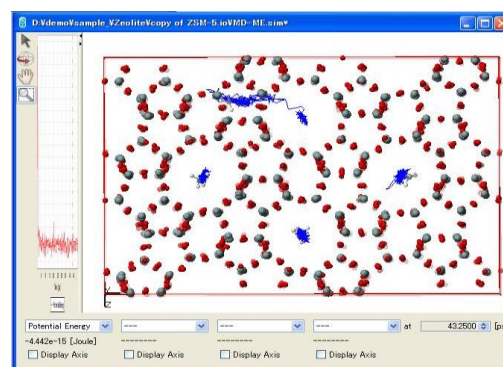
- MO計算：モデル構築、構造最適化、結果の確認（部分電荷、分子軌道）
- Spreadsheet 基本操作：複数化合物に対するバッチ計算
- 反応解析：モデル構築、計算実行
- GAMESS連携実習（希望者のみ）：GAMESSのインストール、計算実行（構造最適化、IRスペクトル、UV-Visスペクトル）
- 事例紹介、質疑応答



ピレンとシクロデキストリンの包接錯体の分子軌道

分子動力学編

- MD計算（有機分子系）：MO計算による電荷決定、モデル構築（ランダムセルモデル）、計算実行
- MD計算（無機結晶系）：モデル構築、計算実行
- MD計算（無機結晶成長）：原子発生機能
- LAMMPS連携実習（希望者のみ）：無機結晶系のMD計算、有機分子系のMD計算
- 事例紹介、質疑応答



MD計算によるゼオライト空洞中のメタン分子の軌跡

■ ご持参いただくもの

■ ノートパソコン：

本WSは実習形式です。以下の動作環境を満たすPCをご用意ください。

- OS : Windows Vista(32bit), 7(32bit / 64bit), 8(64bit)
- CPU : PentiumM 1GHz以上
- メモリ : 2GB以上

開催日の一週間ほど前になりましたら、体験版をご案内させていただきますので、**事前にインストールを済ませていただくようお願いいたします。**

- GAMESS実習に参加を希望される方はGAMESS（64bit版）をダウンロードし、PCとともにご持参ください。
- LAMMPS実習に参加を希望される方はLAMMPSをインストール済みのPCをご持参ください。

GAMESSとLAMMPSの入手方法は下記をご確認ください。

- <http://www.scigress.jp/temp/HowToGetGAMESSandLAMMPS.pdf>

■ 無料体験ワークショップお問い合わせ窓口

無料体験ワークショップに関するお問い合わせは以下の問い合わせ窓口までご連絡ください。

◆お問い合わせ窓口：

富士通株式会社テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部
 SCIGRESS無料体験ワークショップ担当
 TEL : 043-299-3680 / Email : tcsu-sg@ml.css.fujitsu.com