

分子シミュレーション用ソフトウェア

SCIGRESS (サイグレス) V2

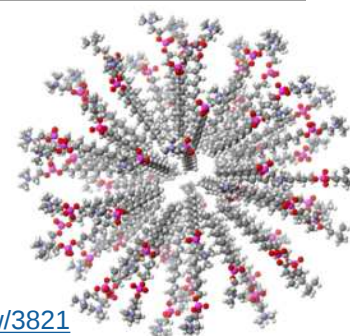
無料体験ワークショップのご案内

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東京、福岡、大阪、名古屋で開催します。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。分子軌道編、分子動力学編の2つのコースからお好みのコースをご選択いただけます。

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

■ 東京会場 (分子軌道編 / 分子動力学編)

- 日時 : 分子軌道編 2015年11月19日 (木) 13:30~16:50
分子動力学編 2015年11月20日 (金) 13:30~16:50
- 場所 : アワーズイン阪急 ツイン館 第8会議室
東京都品川区大井1-50-5 ツイン館 4階
<http://www.oursinn-hankyu.co.jp/ja/service/access>
TEL : 03-3775-7121
- 定員 : 各10名 (申込受付は11月17日 (火) 17:30まで)
- お申込み : 下記サイトからお申込みいただけます。
分子軌道編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3821>
分子動力学編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3822>



■ 福岡会場 (分子軌道編 / 分子動力学編)

- 日時 : 分子軌道編 2015年11月26日 (木) 13:00~16:20
分子動力学編 2015年11月27日 (金) 13:00~16:20
- 場所 : 富士通株式会社 九州支社 Conference Room3
福岡県福岡市博多区東比恵3-1-2 東比恵ビジネスセンター 2階
<http://www.fujitsu.com/jp/about/corporate/facilities/branches/kyushu/>
TEL : 092-411-6311
- 定員 : 各10名 (申込受付は11月24日 (火) 17:30まで)
- お申込み : 下記サイトからお申込みいただけます。
分子軌道編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3823>
分子動力学編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3824>

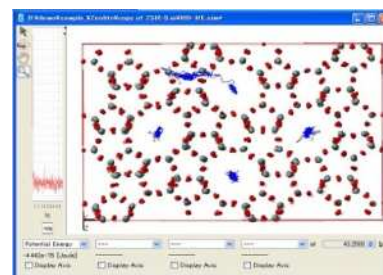
■ 大阪会場 (分子軌道編 / 分子動力学編)

- 日時 : 分子軌道編 2015年12月3日 (木) 13:00~16:20
分子動力学編 2015年12月4日 (金) 13:00~16:20
- 場所 : 貸し会議室 大阪研修センター 会議室D
大阪府大阪市淀川区十三本町1-12-15 ドルチェヴィータファースト 3階
<http://www.kaigishitsu.ne.jp/accessmap/index.html>
TEL : 06-6302-4040
- 定員 : 各10名 (申込受付は12月1日 (火) 17:30まで)
- お申込み : 下記サイトからお申込みいただけます。
分子軌道編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3827>
分子動力学編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3828>

名古屋会場は裏面

■ 名古屋会場（分子軌道編 / 分子動力学編）

- 日時 : 分子軌道編 2015年12月10日（木）13:00～16:20
分子動力学編 2015年12月11日（金）13:00～16:20
- 場所 : 富士通株式会社 東海支社 セミナールームA
愛知県名古屋市中区錦1-10-1 マルカン酢伏見ビル 1階
<http://jp.fujitsu.com/branches/tokai/>
TEL : 052-239-1103
- 定員 : 各10名（申込受付は12月8日（火）17:30まで）
- お申込み : 分子軌道編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3825>
分子動力学編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/3826>



■ ワークショップ内容

【分子軌道編】

- MO計算基本：モデル構築、構造最適化、結果の確認（部分電荷、分子軌道）
- IR及びUV-Visスペクトル計算：振動計算、励起状態計算
- 反応解析：モデル構築、計算実行
- **GAMESS連携実習（希望者のみ）**：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

【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）、計算実行
- MD計算（無機結晶系）：結晶モデル構築、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

■ ご持参いただくもの

■ ノートパソコン：

本ワークショップは実習形式です。以下の動作環境を満たすPCをご用意ください。
GAMESS実習に参加される方は、64bit版のPCをご用意くださいませ。

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

■ SCIGRESS体験版：

開催日の一週間ほど前になりましたらご案内いたします。
事前にインストールをお済ませください。

■ GAMESS：

GAMESS実習に参加される方は、事前にGAMESSのインストールをお済ませください。

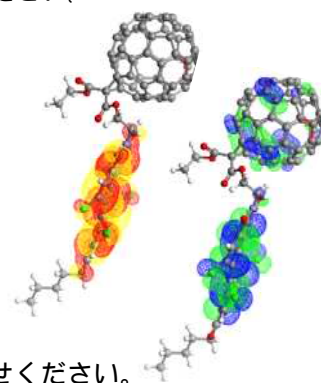
SCIGRESSは64bit版のGAMESSのみに対応しております。

64bit版のGAMESSをご準備ください。

■ LAMMPS：

LAMMPS実習に参加される方は、事前にLAMMPSのインストールをお済ませください。

GAMESSとLAMMPSのインストール方法はこちら
http://www.scigress.jp/temp/GAMESS_LAMMPS.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合せは以下の問い合わせ窓口までご連絡ください。

富士通株式会社 テクニカルコンピュータ・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 : 043-299-3240 / Email : tcsu-sg@ml.css.fujitsu.com