

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

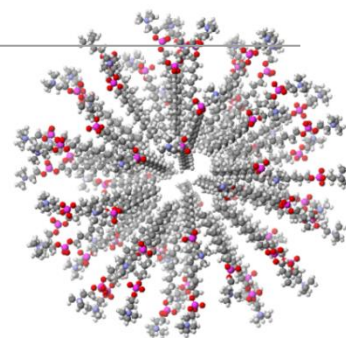
分子シミュレーションソフト「SCIGRESS V2」の無料体験ワークショップを**東京、大阪、名古屋**で開催いたします。入力データの作成から計算の実行、結果の解析までご自身の手で一つ一つご確認くださいことで、製品の使用方法を効率よく習得いただけます。製品にご興味をお持ちの方は是非この機会をご利用ください。

分子軌道&バンド編、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。

※世界的に著名なフリーの分子シミュレーションソフト (**GAMESS、Quantum ESPRESSO、LAMMPS**) との連携機能に関する実習もございます。

■ 東京会場 (分子軌道&バンド編 / 分子動力学編)

- 日時 : 分子軌道&バンド編 2016年10月13日 (木) 13:30~16:50
分子動力学編 2016年10月14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 : 03-3775-6121
- 定員 : 各10名 (申込受付は10月11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&バンド編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/4887>
分子動力学編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/4888>

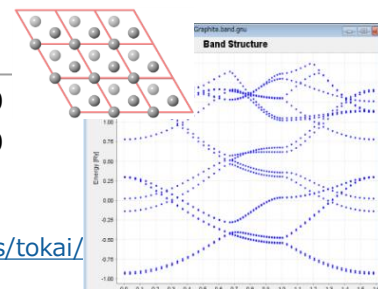


■ 大阪会場 (分子軌道&バンド編 / 分子動力学編)

- 日時 : 分子軌道&バンド編 2016年10月20日 (木) 13:00~16:20
分子動力学編 2016年10月21日 (金) 13:00~16:20
- 場所 : 大阪研修センター 会議室A
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/>
TEL : 06-6302-4040
- 定員 : 各10名 (申込受付は10月18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&バンド編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/4889>
分子動力学編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/4890>

■ 名古屋会場 (分子軌道&バンド編 / 分子動力学編)

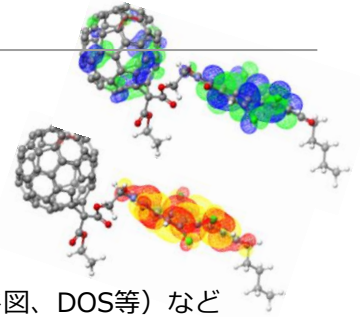
- 日時 : 分子軌道&バンド編 2016年10月27日 (木) 13:00~16:20
分子動力学編 2016年10月28日 (金) 13:00~16:20
- 場所 : 富士通株式会社 東海支社 セミナールームA
愛知県名古屋市中区錦1-10-1 名古屋伏見ビル 1階
<http://www.fujitsu.com/jp/about/corporate/facilities/branches/tokai/>
TEL : 052-239-1103
- 定員 : 各10名 (申込受付は10月25日 (火) 17:30まで)
- お申込み : 下記サイトからお申込みいただけます。
分子軌道編&バンド <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/4891>
分子動力学編 <https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/4892>



■ ワークショップ内容

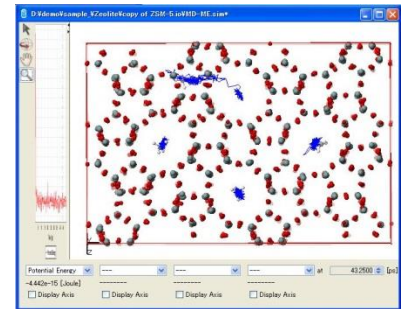
【分子軌道&バンド編】

- **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**：構造最適化、IR及びUV-Visスペクトル
- **Quantum ESPRESSO連携実習^{New!!}**：内部座標の最適化、結果確認（バンド図、DOS等）など
- 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**：無機結晶系のMD計算、有機分子系のMD計算
- **Quantum ESPRESSO連携機能の説明^{New!!}**：第一原理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 / 8.1 (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済ませていただくようお願いいたします。

■ 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。**

■ Quantum ESPRESSO：

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

■ 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、Quantum ESPRESSO、LAMMPSのインストール方法はこちら

http://www.scigress.jp/temp/GAMESS_QE_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い合わ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：contact-tcsupport@cs.jp.fujitsu.com