

富士通計算化学ユーザーフォーラム2016のご案内

本フォーラムでは、計算化学を活用し、優れた研究を行っているお二方に、分子軌道法や分子動力学法を用いた最先端の研究についてご講演いただきます。計算化学分野の第一人者である講師の方々をはじめ、皆様方に活発な意見交換を行っていただく場を提供することで、計算化学を研究に活用する際の問題解決の一助にさせていただきたいと考えております。多くの皆様方のご参加を心よりお待ちしております。

■ 開催日時・会場

- **日時** : 2016年12月15日 (木) 13:00~16:30 (受付12:00~13:00)
- **場所** : 富士通デジタル・トランスフォーメーション・センター Seminar Room3
東京都港区浜松町2-4-1 世界貿易センタービル 30階
<http://www.fujitsu.com/jp/about/corporate/facilities/dtc/access/>
TEL : 0120-933-200
- **定員** : 40名 (お申込み受付は、12月14日 (水) 正午まで)
- **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/5047>

■ 招待講演

- 「HCP金属ナノワイヤーの引張り破断のMDシミュレーション」
京都大学工学研究科 材料工学専攻 教授 酒井 明 様
【キーワード】 金属ナノワイヤー、単原子接点形成、正20面体ナノワイヤー
- 「分子動力学シミュレーションによる分子系の相転移」
法政大学 片岡 洋右 様
【キーワード】 NPHアンサンブルによる相境界、定積融解エントロピーと分子運動、荷電コロイド分散系における相転移

■ 技術紹介

- 「Grid Inhomogeneous Solvation Theoryを用いた血液凝固因子Xaの水和サイト解析」
株式会社富士通研究所 ものづくり技術研究所 佐藤 博之
【キーワード】 水和サイト、分子動力学計算、GIST、エントロピー、相互作用エネルギー

■ 製品紹介

- 「SCIGRESS V2.8.1のご紹介」
富士通株式会社 TCソリューション事業本部 SCIGRESS担当

■ 技術相談

技術相談をご希望の方は、フォーラムの参加申込とは別に、右記のフォーラム担当までメールでご連絡くださいませ (先着2名様まで)。

お問い合わせ

富士通計算化学ユーザーフォーラム2016担当
TEL : 043-299-3680
mail : contact-tcsupport@cs.jp.fujitsu.com