

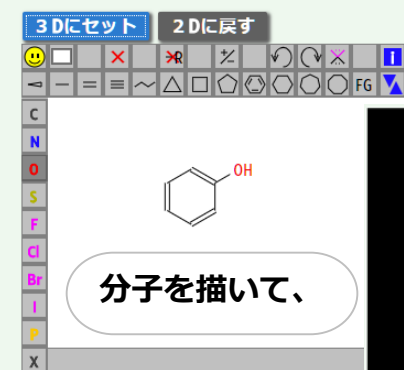
# 第32回分析センターワークショップ

## 計算化学入門

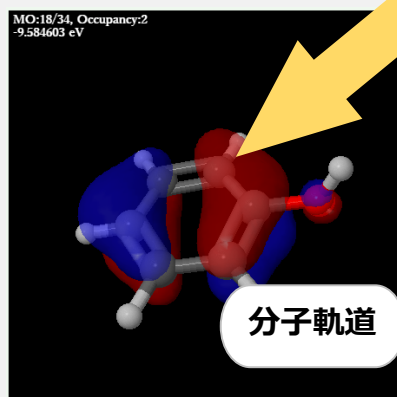
【日時】 2018/7/10 (火) 13:00~17:00  
【場所】 九州大学伊都キャンパス・ウエスト3号館209室  
【主催】 九州大学中央分析センター  
【共催】 九州大学ナノテクノロジープラットフォーム  
【協力】 HPCシステムズ株式会社



2D編集 : 量子化学計算クラウドサービス



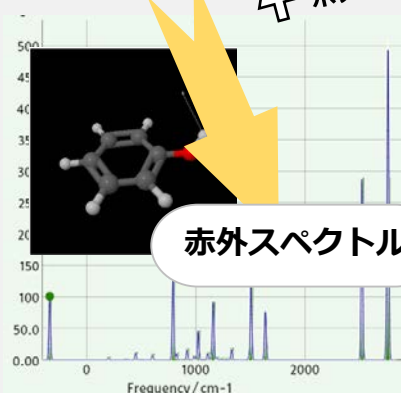
計算開始!



計算エンジン:  
*Gaussian Reaction plus*

計算を始める

ポチッ!

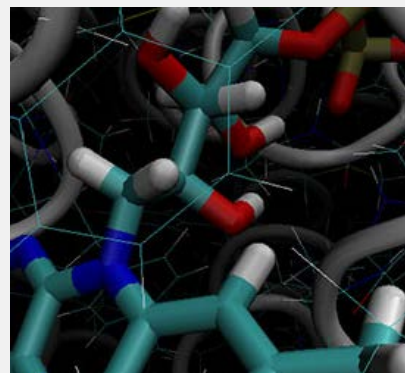


### Reaction plus Pro 2



遷移状態が簡単に求まる

### AutoMD



分子系を作る・計算実行が簡単に

### 【プログラム】

- |             |  |
|-------------|--|
| 13:00~13:30 | 量子化学計算の事例紹介・簡単な理論解説                            |
| 13:30~14:00 | 分子動力学計算の事例紹介・簡単な理論解説                           |
| 14:10~15:10 | Webを利用したGaussianによる分子軌道計算(ChemPark)の概要説明と実習    |
| 15:20~16:20 | Gaussianによる反応経路・遷移状態の計算(Reaction plus)の概要説明と実習 |
| 16:30~17:00 | 質疑応答   |

申込先 : 中央分析センター伊都分室・渡辺 watanabe.midori.452@m.kyushu-u.ac.jp