

1月開催セミナーのご案内

【講師割引申込用紙】

※この申し込み用紙は切り離さず、そのままお送り下さい。

FAX : 03-5740-8766、または、→<http://www.johokiko.co.jp> にて

<主催> /// 情報機構

<http://www.johokiko.co.jp>
〒141-0032 品川区大崎3-6-4 トキワビル3階
TEL : 03-5740-8755 FAX : 03-5740-8766
mail req@johokiko.co.jp

実践で役立つGaussianの使い方！

講座協力：HPCシステムズ（株）

はじめてのGaussian 実践的Q&Aセミナー

【講義+実演】

～受講者のリクエストに基づき、解説しながら入力ファイルを作成実演！～

(株) クロスアビリティ 代表取締役社長 古賀 良太 先生

●受講料

『Gaussian』のみお申込みの場合

1名45,150円(税込、資料・昼食代含) *1社2名以上同時申込の場合、1名につき34,650円

『GAMESS(1/26)』と合わせてお申込みの場合

1名69,300円(税込、資料・昼食代含) *1社2名以上同時申込の場合、1名につき58,800円

●日 時 2011年1月25日火曜日 10:30-16:30

●会 場 [東京・浜松町]産業貿易センター

当講座は前半にGaussianの基本と使い方を講義した後、受講者の実際の質問・リクエストに答える形で、入力ファイル作成の実作業をします。解説を交えながら作成しますので実践的でポイントが分かりやすく、座学のみでは分かりづらい事も、作業を目の当たりにすることでGaussianの理解が深まります。

1 Gaussianによる量子化学計算

- 1.1 Gaussianとは
- 1.2 ハートリー・フォック法および密度汎関数計算法による電子状態計算
- 1.3 基底関数の種類、決め方、指定方法
- 1.4 初期構造の指定方法、Z-matrix、ダミー原子、凍結、対称性の考慮
- 1.5 構造最適化の手順、収束テクニック、リスタート
- 1.6 基準振動解析の手順、遷移状態探索、熱力学的諸量計算
- 1.7 分子軌道から分かること、HOMO/LUMO
- 1.8 静電ポテンシャル電荷、密度行列解析

1.9 Counterpoise補正を用いた

- 相互作用エネルギー計算
- 1.10 励起状態計算とは
- 1.11 ONIOMによるQM/MM計算
- 1.12 Gaussian03とGaussian09の違い
- 1.13 マルチコア活用、メモリ活用によるディスクI/O改善などHPC手法の重要性
- 1.14 ジョブスケジューラ、プリポストプロセッサ、GPGPU、TSDBの紹介

2 GaussianとWinmostarを使った計算の実例

- 2.1 シングルポイントエネルギー計算
- 2.2 構造最適化

2.3 振動数計算、赤外吸収スペクトル

- 2.4 紫外・可視吸収スペクトル、励起状態計(TDDFT)
- 2.5 NMRスペクトル
- 2.6 ONIOM
- 2.7 分子軌道表示、PIO解析

3 入力ファイル作成の実演解説

※受講者(希望者)の質問・リクエストに基づいて入力ファイル作成の実演をしますが、全てに回答することを約束するものではありませんのでご了承ください。可能な範囲で回答します。

<質疑応答>

<講師割引適用について>

- ・本申込用紙にてお申込された場合、講師紹介割引が適用されます。
- ・割引額はそれぞれ左記料金より、
1名ご参加の場合 ¥10,500円引き
2名以上参加の場合
通常の同時申込割引から更に1名につき¥2100円引きとなります。
- ・割引の適用条件としましては、本申込用紙にて、fax申し込みされた方に限らせていただきます。また場合によっては講師にご確認を取らせていただく場合がございますので、その点ご了承下さい。
- ・その他割引との併用はできません。

講師割引申込

本講座料金より ¥10,500 引き
2名以上参加 更に¥2,100 引き

<申込要領>

1. 申込を確認次第、弊社より受講券、請求書、会場地図等をお送り致します。
 2. 受講料のお支払いは、原則として開催日までにお願致します。後日になる場合は予定日をご明記ください。また、当日会場でのお支払いも可能です。
 3. 申込後、ご都合により講習会に出席できなくなった場合は、代理の方の出席をお願い致します。止むを得ず欠席される場合、弊社事務局迄ご連絡下さい(受付時間9:00-17:00)。
- 以下の規定に基づき料金を申し受けます。
- 開催日から逆算(土日・祝祭日を除く)して、
 - ・講座3日前～4日前での欠席のご連絡:受講料の70%
 - ・講座当日～2日前での欠席のご連絡:受講料の100%
4. 原則として銀行振込の場合、領収証の発行はいたしません。振込手数料はご負担下さい。
 5. 最小催行人数に満たない場合等、事情により中止になる場合がございますがご了承下さい。

★<http://www.johokiko.co.jp/>の申込みフォームからも承ります！

セミナー名	1月25日 はじめてのGaussian			<input type="checkbox"/> 1月26日『はじめてのGAMESS』を合わせて申込の場合には、チェックを入れてください	
会社名	住所		〒		
所属・役職	TEL	FAX			
受講者	e-mail	上司氏名	e-mail		
今後ご希望の案内方法にレ印を記入下さい(複数回答可) <input type="checkbox"/> e-mail <input type="checkbox"/> FAX <input type="checkbox"/> 郵送 <input type="checkbox"/> 不要					

ご連絡頂いた、個人情報は弊社商品の受付・運用・商品発送・アフターサービスのため利用致します。今後のご案内希望の方には、その目的でも使用致します。今後のサービス向上のため「個人情報の取扱いに関する契約」を締結した外部委託先へ、個人情報を委託する場合があります。個人情報に関するお問合せ先policy@johokiko.co.jp