



Zespół FQS Poland Grupa FUJITSU, Europejskiego Centrum Naukowo-Badawczego, od 15 lat zajmuje się rozwojem oprogramowania naukowego, którym posługują się naukowcy na całym świecie.

Mamy przyjemność zaprosić Państwa na bezpłatne seminarium poświęcone wykorzystaniu komputerów w chemii i biochemii.

ZAPROSZENIE NA SEMINARIUM

Tytuł: Po co chemikowi komputer? Chemia obliczeniowa w praktyce.

Zagadnienia teoretyczne:

- Mechanika molekularna, dynamika molekularna, metody kwantowe (*ab initio*, semiempiryczna, DFT)
 - Co to jest i kiedy używać?
- Po co liczyć, skoro można zmierzyć – Kiedy warto stosować symulacje?
- Czy chemia obliczeniowa kłamie? – Interpretacja wyników symulacji.

Zagadnienia praktyczne:

- Analiza konformacyjna,
- Analiza reaktywności,
- Obliczenia parametrów termodynamicznych,
- Modelowanie reakcji i optymalizacja procesów,
- Spektroskopia - obliczenia widm IR, UV-VIS, NMR,
- Symulacje procesów w czasie (np. wzrost kryształów, procesy absorpcji i adsorpcji, symulowanie procesów mieszania i dochodzenia do stanów równowagowych itp.),
- Proces dokowania ligandów do białek/enzymów,
- Przykłady zastosowań symulacji w:
 - Syntezie organicznej
 - Chemii przemysłowej
 - Projektowaniu leków
 - Ochronie środowiska
 - Materiałoznawstwie
 - Nauczaniu chemii

Zajęcia poprowadzi: **Wojciech Płonka**

- Członek zespołu Chemii Obliczeniowej i Life Science firmy FQS Poland Grupy FUJITSU z ponad 20 letnim doświadczeniem w dziedzinie chemii obliczeniowej.
- Użytkownik i developer specjalistycznego oprogramowania naukowego.
- Prowadził seminaria i warsztaty m.in. na Uniwersytecie Warszawskim, Jagiellońskim, Oxford University oraz szkolenia i konsultacje dla koncernów farmaceutycznych i chemicznych.



SCIGRESS

