

Vortrag am Freitag, 25. Januar 2002, 11.00 Uhr, Raum C0.003
in der Fakultät für Chemie und Pharmazie:

Computational Chemistry am Leibniz-Rechenzentrum
Hardware, Software, Nutzung, Benutzerwünsche

Vortragender: **Dr. Ludger Palm, Diplom-Chemiker**
Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Leibniz-Rechenzentrum, München
Abteilung Benutzerbetreuung, Gruppe Hochleistungsrechnen

Zusammenfassung:

Der Vortragende wird die Hardware und Software vorstellen, die den Wissenschaftlern der LMU am Leibniz-Rechenzentrum zur Verfügung steht, oder in naher Zukunft zur Verfügung stehen wird. Der Schwerpunkt des Vortrages wird auf einer Einführung in die Nutzung quantenchemischer Programme, vor allem Gaussian 98, auf dem Linux-Cluster liegen. Darüber hinaus wird die Verwendung von Gaussian 98, MOLPRO, GAMESS und NWChem auf dem Linux-Cluster, der IBM 270, der Fujitsu VPP sowie der Hitachi SR8000 erläutert.

Im Anschluss an den Vortrag wird Zeit für Diskussion und die Äußerung von Benutzerwünschen zur Verfügung stehen.

Auf Wunsch können danach konkrete Probleme, die bei der Benutzung der Hardware oder Software des Leibniz-Rechenzentrums auftreten, in einer "Hands On Session" angegangen werden.