



H29年度

PCoMS東北大学 計算物質科学セミナー 1

領域を超えた物質科学研究のための 電子状態計算法の基礎と応用

講師：山崎 馨 [東北大学金属材料研究所 特任助教(研究)]

日時

2018年2月26日 (月) 13:30-17:00

参加費無料
部分参加OK!

会場

☆メイン会場☆

・東北大学理学研究科合同B棟721室 (大会議室) (青葉山) [15名]

☆ウェブ会議システムによる同時配信会場 (質疑応答可) ☆

・東北大学金属材料研究所 国際教育研究棟セミナー室 1 (片平) [16名]

・東京大学物性研究所第4セミナー室 (A614) (柏) [24名]

・物質・材料研究機構 千現地区 研究本館# 506 [15名]

☆その他☆

・ご自身のPCから参加 (質疑応答可) [20名程度]

概要

分子や固体の電子分布や諸物性をシュレディンガー方程式に基づいて計算する電子状態計算法は、分子科学・固体物性・材料科学等の領域を超えて広く使われる基盤的な手法の一つです。10年ほど前までは理論開発とプログラムの活用はそれぞれの領域の内部で閉じていましたが、最近は領域の壁を乗り越えて電子状態計算を活用しようとする試みが出ていきました。例えば、分子科学領域のプログラムでは困難な100原子をこえる系の物性や化学反応の計算のために固体物性領域で開発されてきたプログラムを分子科学領域の研究者が活用したり、伝統的な固体物性の手法では困難な精密な物性計算のために、分子科学領域由来の理論を物性物理の研究者が活用したりしています。そこで本講義では、分野の壁を超えて物質科学の諸問題を解決するための基盤になる電子状態計算法の基礎理論とその化学反応への応用例について簡潔に解説します。

申込

URL : <http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/cgi-bin/H29/ent-PCoMSTohoku-seminar-2018-Feb/>からお申込みください。同時配信受講会場は2月23日15時までに申し込みがない場合は開講しません。ご自身のPCでの参加は先着順です。詳細は、申し込みURLをご確認ください。

13:30~14:30

「分子軌道法の基礎」

・ハートリーフォック法
・電子相関の取扱

14:40~15:40

「密度汎関数法と
半経験的電子状態計算法」

・密度汎関数法
・半経験的分子軌道法

15:50~16:50

「光との相互作用によって
起きる化学反応への応用」

・日焼け止め分子の動作機構
・X線自由電子レーザーパルスによる
ナノ・バイオ分子の爆発的解離ダイナミクス

<DC、PD、若手研究者、MCの方へ>

「計算物質科学セミナー」では、物質科学分野の大学院生や若手研究者の方を主な対象として、異分野の方にもわかりやすく計算物質科学の入門レベルの内容から最新の研究内容の一端までを紹介いたします。今回は、「電子状態計算法」がテーマです。ぜひ、ご参加ください。

お問い合わせ

計算物質科学人材育成コンソーシアム事務局 pcoms@imr.tohoku.ac.jp

協賛

ポスト「京」重点課題5、ポスト「京」重点課題7、
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学のフロンティアー極限への挑戦」



計算物質科学
人材育成コンソーシアム

Professional development Consortium
for Computational Materials Scientists

H29年度

PCoMS東北大学 計算物質科学セミナー2

ガラスの分子シミュレーション

講師：芝 隼人 [東北大学金属材料研究所 特任助教(研究)]

日時

2018年2月28日 (水) 13:30-17:00

参加費無料
部分参加OK!

会場

☆メイン会場☆

・東北大学理学研究科合同B棟721室 (大会議室) (青葉山) [15名]

☆ウェブ会議システムによる同時配信会場 (質疑応答可) ☆

・東北大学金属材料研究所 国際教育研究棟セミナー室1 (片平) [16名]

・東京大学物性研究所第4セミナー室 (A614) (柏) [24名]

・物質・材料研究機構 千現地区 研究本館#506 [15名]

☆その他☆

・ご自身のPCでの参加 (質疑応答可) [20名程度]

概要

ガラスとは、液体のように空間的に乱れた原子・分子配置を持った状態が凍結されて、固化した状態を指す。ガラス状態への転移については、それが正真正銘の相転移であるか否かを含めてははっきりしたことは分かっておらず、物理学の重要問題となっている。

このガラス転移を記述する理論の開拓が長い時間をかけて進められている。近年でも、ガラスを液体と見るアプローチ、固体と見るアプローチ、双方の立場からの理論展開が行われて、hot な基礎物理学分野を形成している。また、ガラスの動力学的特性や流動・変形機構など、材料特性を解明する幅広い研究が行われている。

今回の講義は、物理・化学分野の修士レベル、または普段これらの話題に接することのない材料分野の博士後期課程学生のレベルを想定し、ガラスの動力学研究のhow to を現代的に解説し、少々最新の研究内容にも触れる。

申込

URL : <http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/cgi-bin/H29/ent-PCoMSTohoku-seminar-2018-Feb/> からお申込みください。同時配信受講会場は2月23日15時までに申し込みがない場合は開講しません。

ご自身のPCでの参加は先着順です。詳細は、申し込みURLをご確認ください。

13:30~14:30 「ガラス動力学を計算する」

- ・ガラスの理論と現象論 (なぜシミュレーションが必要か)
- ・分子動力学シミュレーションの基礎
- ・ガラスの分子動力学シミュレーションモデル

14:40~15:40 「ガラス動力学を解析する」

- ・ガラスの緩和解析
- ・ガラスの動的不均一解析
- ・ガラスの振動特性解析
- ・ガラスの固有構造解析

15:50~16:50 「ガラス動力学の新しい展開
—シミュレーションの視点から」

- ・ガラスの「平均場理論」
- ・低次元のガラス
- ・連続体スケールのガラス

<DC、PD、若手研究者、MCの方へ>

「計算物質科学セミナー」では、物質科学分野の大学院生や若手研究者の方を主な対象として、異分野の方にもわかりやすく計算物質科学の入門レベルの内容から最新の研究内容の一端までを紹介し、今回は、ガラスがテーマです。ぜひ、ご参加ください。

お問い合わせ

計算物質科学人材育成コンソーシアム事務局 pcoms@imr.tohoku.ac.jp

協賛

ポスト「京」重点課題5、ポスト「京」重点課題7、
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学のフロンティア—極限への挑戦」