

The Condensed Matter Theory / Computational Materials Science Seminar

CMT/CMS seminar

Date & Time: June 4th 3:00pm
Place: 8F large seminar rm, Sengen main bldg
Speaker: Dr. Tsuyoshi Miyazaki
Computational Materials Science Unit, NIMS
宮崎 剛氏
理論計算科学ユニット

Title:

複雑生体系、ナノ構造物質に対する全原子第一原理計算

Abstract:

昨年秋から京コンピュータが本格稼働し、物質・材料計算科学の世界では現在大きな変革が起こっている。本講演では、我々が開発してきたオーダーN法第一原理計算プログラムCONQUESTを用いることにより、数十万原子から百万原子を含む超巨大系に対しても量子論にもとづいた第一原理計算が可能となってきたことを報告する。さらに、複雑生体系に対する全原子第一原理計算の例、半導体ナノ構造物質に対する研究例を紹介する。今までの第一原理計算が局所構造を取り出したモデル系を扱っていたのに対して、次世代デバイスや実材料界面などにおいて現実サイズの系をまるごと第一原理計算で扱うことが可能となってきたことを示したい。

Contact: TANAKA.Akihiro@nims.go.jp – Computational Materials Science Unit