
2014年度冬学期 第8回 駒場物性セミナー

ナノ構造物質、巨大生体分子に対する 第一原理シミュレーション

講師 宮崎剛氏 (物質・材料研究機構)

日時 2015年2月13日(金) 午後4時30分

場所 16号館 827

密度汎関数法にもとづく第一原理計算は、物質の構造、電子状態を高い精度で計算する

ことができる強力な研究手法であり、物性物理、材料科学等の多くの分野で重要な役割を果たしています。しかし、通常用いられる計算手法では系の含む原子数 N が数百を越えると、計算量が N の3乗に比例して急激に増加するという問題があり、千原子以上を含む大規模系に対して第一原理計算を実現する事は長い間不可能でした。この問題を解決する為に「オーダー N 法」という計算時間が N に比例する手法の開発が世界の複数のグループで行われてきました。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 を紹介し、「京」などの大型計算機を用いる事により、百万原子を含むような巨大系に対しても第一原理計算が可能となってきたことを示します。今までは第一原理計算で扱うことが不可能であったナノ構造物質や生体系に対して構造最適化、さらに分子動力学が可能となってきたことを紹介します。

次回は夏学期で、4月頃に再開予定です。

物性セミナーのページ 「駒場物性セミナー」で検索！

駒場セミナーカレンダー (駒場内のみアクセス可)

<http://huku.c.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/webcal/webcal.cgi>

物性セミナー世話人： 加藤雄介 堺 和光 福島孝治 前田京剛 簀口友紀