

MASAMUNE-IMR

Advanced science supercomputing system for Advanced Materials research towards Next-Generation Institute for Materials Research

スパコンプロフェッショナル  
Supercomputer Professional

日時

平成30年 **11** 月 **13** 日 (火)  
**14:00~15:30**

場所

**金属材料研究所**  
**国際教育研究棟セミナー室1**

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

「Fragment Motion in Motor Molecules:  
Basic Concepts and Application to Intra-Molecular Rotations」



Department of Inorganic Chemistry,  
Fritz-Haber Institute of the Max-Planck-Society

**Prof. Klaus E. Hermann**

We propose a fragment motion analysis based on classical mechanics using Pulay forces to study complex motions of atoms inside large molecules. This provides a qualitative understanding of the motion of the different molecular components and can help to design simplified fragment motion paths. The formal aspects of the analysis are discussed and its application is illustrated by the rotational motion inside the BTP-BCO molecule and by rotational transitions between cis- and trans-stilbene isomers.

主催



CCMS

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター

Center for Computational Materials Science

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター

協賛



計算物質科学  
人材育成コンソーシアム



ポスト「京」萌芽的課題  
「基礎科学の挑戦」

No.17

■「MASAMUNE-IMR」は国立大学法人東北大学の登録商標です