

# スパコン プロフェッショナル

Series Supercomputer Professionals

No.09

日時：平成 29 年 **12** 月 **14** 日 (木)  
**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。

## 「密度汎関数理論に基づく大規模かつ 長時間シミュレーションの現状と物質科学」


東京大学 大学院工学系研究科


**押山 淳** 教授



密度汎関数理論に基づく物質計算は、過去 30-40 年にわたって大きな進展を見せ、物性の理解と予測に大きな貢献をなしてきた。近年の超並列マルチコアというコンピュータ・アーキテクチャの変遷は、従来からの計算科学的手法に加えて、コンピュータ科学・工学と融合したコンピューティクス・アプローチの重要性を示している (<http://computics-material.jp/>)。本講演では、パワー半導体表面界面、原子層物質に対する、大規模な構造最適化電子状態計算および Car-Parrinello Molecular Dynamics 計算の現状を紹介し、ナノメートル・スケールの構造、形状が電子物性に及ぼす影響を議論する。高精度非経験的計算に付随するセレンディピティの楽しみも強調したい。

■ 主催  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」

■ お問い合わせ 計算材料学センター TEL: 022-215-2411 E-mail: ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp