

# インフォーマル計算科学セミナー

## ~100ナノ有機物質量子シミュレーションにむけて~

学術的・産業的に重要な有機分子凝集体の100ナノスケール量子シミュレーション実現を目的として、インフォーマル計算科学セミナーを開きます。化学・物理分野および数理・高速計算技術分野の融合として上記課題にとりくむための議論、および、関連した議論を行います。

場所：東京工業大学すずかけ台キャンパス S2棟7階 第6会議室

時間：2014年10月9日(木) 16:30-18:00

内容：

16:30-16:35 主旨説明

星健夫 (鳥取大)

16:35-16:55 「京」での100ナノ電子状態計算と有機物質系

星健夫 (鳥取大)

16:55-17:15  $\pi$ 電子近似によるポリマー鎖の量子波束散乱シミュレーション

多田朋史(東工大)

17:20-17:40 ナノカーボン材料の熱電変換シミュレーション

山本貴博(東京理科大)

17:40-18:00 電子状態計算を指向した行列計算アルゴリズム

山本有作(電通大)

18:00-20:30 自由討論 (懇親会)

注：講演終了後(18:00~)、軽食を食べながらの自由討論時間 (S2棟6階オープンスペース) があります。

注：事前申し込みは不要です。ただし配布資料数の把握などのため、下記連絡先のいずれかにご連絡いただくと幸いです。

注：本セミナーは、科研費新学術領域「 $\pi$ 造形科学:電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出」による「 $\pi$ 造形コロキウム」も兼ねています。

注：本セミナー案内のPDFファイル(最新版)は下記にあります：

[http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/info/semi\\_20141009\\_100nano.pdf](http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/info/semi_20141009_100nano.pdf)

世話人：多田朋史(東工大)・星健夫 (鳥取大)

連絡先：tada.t.ae@m.titech.ac.jp, hoshi@damp.tottori-u.ac.jp