

21世紀COE講演会報告書

化学研究所 中原勝

講演者：Michael L. Klein 教授（米国・ペンシルバニア大学）

演題：Nothing amuses more harmlessly than computation ...

場所：京都大学化学研究所本館4階セミナー室（C469号室）

日時：2006年6月16日（金）14:00~16:00

参加者：大学院学生，学生，博士研究員，教員

参加者総数：20名

講演内容：

計算機シミュレーションは、より大規模・複雑な系を適用対象として、長足の進歩を遂げている。今回の講演では、疎視化モデルを用いた、ナノからメゾスケールに関する自己組織化系の構造形成とダイナミクスに関する最新の知見が紹介された。ポテンシャルモデルの構築法に始まり、時間スケールの設定や物理的描像の抽出に至る過程について丁寧な解説がなされた。疎視化に伴って見えてくる長時間・長波長のダイナミクスの実験との対応について、示唆に富んだ検討がなされ、NMRや中性子を用いた結果との比較がなされた。講演中および講演後も、活発な質疑応答が行なわれた。丁寧な英語で講演・質疑がなされ、用いた大学院生の英語力向上に寄与した。