

第1回極限物質科学研究会

日時：2016年1月18日〔月〕 14:30～18:30

場所：東京工業大学 地球生命研究所(ELSI) ELSI-1棟3階セミナー室
(〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1)

参加費：無料

主催：東工大 ELSI 共催：理研 iTHES

主題：「分子動力学計算における輸送係数のサイズ依存性」

内容：初期地球の研究でマグマオーシャンの粘性が問題になり、第一原理分子動力学による計算が行われている[1]。しかし、古典分子動力学の計算によりマグマの粘性の計算結果はシミュレーションセルの大きさに大きく依存することが知られている[2-4]。そこで、どの程度の原子数を計算すれば十分な精度の輸送係数が得られるのか、小さな原子数の計算から原子数無限大へ外挿が可能か、ポスト「京」を使った第一原理分子動力学で必要なだけ大きい系を扱えるか。収束にはどの程度のシミュレーション時間が必要か。その物理的根拠は何か。などについて議論する。

[1] B. B. Karki et al., Science 328, 740 (2010).

[2] Y. Zhang et al., J. Phys. Condens. Matter 16, 9127 (2004).

[3] J. Horbach et al., PRE 54, R5897 (2006).

[4] I. C. Yeh et al., J. Phys. Chem. B 108, 15873 (2004).

～プログラム～

- 14:00 「開会の挨拶、ELSI 紹介」
梅本 幸一郎（東工大 ELSI）
- 14:10 「マグマの輸送係数におけるセルサイズ依存性の古典 MD による研究」
則竹 史哉（東大地殻化学）
- 15:10 「外核の輸送係数の第一原理分子動力学法による計算」
梅本 幸一郎（東工大 ELSI）
- 16:10 休憩
- 16:30 「『京』を用いた $O(N)$ 第一原理分子動力学法による大規模計算」
宮崎 剛（物材研）
- 17:30 「論点整理」
飯高 敏晃（理研）
- 18:00 「全体討論」

【敬称略，講演時間に質疑応答を含む】

連絡先：東京工業大学 地球生命研究所 梅本幸一郎
Tel: 022-228-2162, E-mail: yuma.takida@riken.jp