

公開講演会 最新化学談話シリーズ

放射光科学と計算科学の融合による先端構造解析

西堀 英治 教授

(理化学研究所 播磨研究所 放射光科学総合研究センター、
理研 RSC-リガク連携センター・連携センター長)

主催 九州大学理学部化学教室談話会

日時:平成 24 年 12 月 10 日(月)午後 4 時より

場所:九州大学理学部化学科第 3 講義室

(理学部2号館2階 2273 号室)

内容:

SPring-8 で得られる高精度の X 線回折データと、マキシマムエントロピー法や遺伝的アルゴリズムなどの新しい解析アルゴリズム、専用計算機、並列計算機や GPGPU など計算科学を組み合わせることで、これまで観測することのできなかった高精度の電子状態、紛体からの分子性材料の構造、高分子化合物における Disorder 構造などを可視化することができる。講演では、アルゴリズム詳細と先端科学研究の現状、および物質科学における構造研究を含めて報告する。

(注)この講演は大学院集中講義の一部です。

連絡先:九州大学大学院理学研究院化学部門
(世話人)大場正昭 TEL(092)642-2570

(事務局)化学部門等事務室 TEL(092)642-2608