

MASAMUNE-IMR

Advanced science Supercomputing system for Advanced Materials Simulation towards Next-Generation Materials Research

スパコンプロフェッショナル
Supercomputer Professional

No.17

平成30年 **11** 月 **13** 日 (火)
14:00~15:30

日時

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。

「Fragment Motion in Motor Molecules:
Basic Concepts and Application to Intra-Molecular Rotations」



Department of Inorganic Chemistry,
Fritz-Haber Institute of the Max-Planck-Society

Prof. Klaus E. Hermann

We propose a fragment motion analysis based on classical mechanics using Pulay forces to study complex motions of atoms inside large molecules. This provides a qualitative understanding of the motion of the different molecular components and can help to design simplified fragment motion paths. The formal aspects of the analysis are discussed and its application is illustrated by the rotational motion inside the BTP-BCO molecule and by rotational transitions between cis- and trans-stilbene isomers.

主催 CCMS 東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター 東北大学 金属材料研究所 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」

「MASAMUNE-IMR」は国立大学法人東北大学の登録商標です