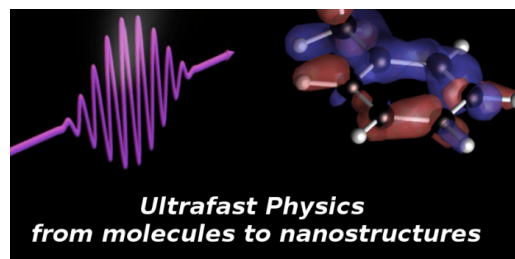




Ultrafast Physics from molecules to nanostructures



07.Oct - 10.Oct 2019

Cód. Z26-19

Mod.:
Presencial

Edición
2019

Tipo de actividad
Workshop

Fecha
07.Oct - 10.Oct 2019

Ubicación
Palacio Miramar

Idiomas
Inglés

Validez académica
40 horas

Web
https://www.cecarn.org/conferences_psik/

DIRECCIÓN

Angel Rubio, UPV/EHU

Comité Organizador

Fundación
BBVA



Descripción

El impresionante progreso de la tecnología láser ultrarrápida, que va desde la escala de tiempo del femtosegundo al attosegundo y desde la gama de frecuencia de THz a la de XUV, está haciendo posible probar la dinámica electrónica y nuclear en tiempo real en átomos, moléculas y sólidos[1]. Se puede obtener una visión fundamental de los procesos primarios fotoinducidos en sistemas con un nivel creciente de complejidad[2]. La capacidad de seguir y dirigir dinámicas ultrarrápidas tiene un impacto enorme en una amplia gama de aplicaciones, desde la ciencia de los materiales[3] hasta las ciencias de la vida.

Claramente, los avances realizados en el ámbito de las teorías y los métodos para modelar procesos ultrarrápidos requieren inevitablemente un intenso intercambio con la comunidad experimental debido a la complejidad de los sistemas y de las mediciones. En la última década, el esfuerzo por desarrollar métodos predictivos y computacionalmente viables prácticamente ha estallado. Los enfoques ab initio basados en DFT y la función de no equilibrio de Green (NEGF)[4] han entrado en contacto recientemente con experimentos resueltos en sistemas 2D y nanoestructuras. Otros métodos ab initio basados en funciones de onda (por ejemplo, ADCn, CASPTn) o en cantidades reducidas (por ejemplo, TDDFT, NEGF) para modelar procesos ultrarrápidos permiten acceder a la dinámica electrónica y nuclear de subfemtosegundos en moléculas. Además, se han propuesto métodos numéricos precisos en tiempo real para sistemas de modelos fuertemente correlacionados (por ejemplo, TD-DMFT y DMRG). Este taller reunirá a los mejores expertos mundiales en el ámbito de la teoría y los experimentos, lo que permitirá una fertilización cruzada que brindará la oportunidad de avanzar en el estado del arte de los métodos ab-initio. De hecho, el rápido desarrollo de las técnicas experimentales no ha ido seguido de una integración simultánea con la comunidad computacional ab-initio. El resultado es una escasa disponibilidad de herramientas numéricas para sistemas cruciales de interés tecnológico o fundamental, por ejemplo, biomoléculas, grandes nanoestructuras y materiales con aplicación tecnológica. Uno de los retos clave es, por tanto, ampliar el campo de aplicación de los códigos de la ciencia de los materiales y de la química para el estudio de las propiedades fuera de equilibrio.

Para ello, es fundamental que los científicos experimentales, teóricos y computacionales se reúnan y debatan sobre cuestiones cruciales como: ¿Cómo ampliar la precisión de los métodos ab-initio fuera del equilibrio? ¿Cómo beneficiarse de forma eficiente de los avances en las instalaciones de computación para simular la dinámica de no equilibrio de materiales complejos? ¿Cómo traducir las características del pulso láser a condiciones límite y aproximaciones adecuadas para las herramientas computacionales? ¿Podemos diseñar una serie de herramientas y procedimientos para proporcionar a la comunidad?

Objetivos

Este taller pretende ser un punto de inflexión en la ciencia computacional ultrarrápida, mediante el establecimiento de indicaciones cruciales y aún inexploradas para el progreso. Compararemos diferentes formulaciones teóricas de resultados experimentales, discutiremos su rango de aplicabilidad, así como sus limitaciones físicas y numéricas. También debatiremos sobre cómo incluir la física que falta y si esta inclusión es numéricamente factible en el caso de los diferentes enfoques.

Colaboradores específicos del curso



MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

Dirigido por:



Angel Rubio

UPV/EHU

Angel Rubio is the managing director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter and the director of its theory department. He is a distinguished Research Scientist at the Flatiron Institute's Center for Computational Quantum Physics distinguished as well as Professor of physics at the University of the Basque Country and the University of Hamburg. Rubio's research focuses on the modeling and theory of electronic and structural properties of condensed matter. He is working on developing novel theoretical tools, such as time-dependent functional theory for quantum electrodynamics and computational codes for the ab initio description and control of the dynamics of decoherence and dissipation in quantum many-body systems, and on characterizing new nonequilibrium states of matter.

Profesorado



Marco Bernardi

California Institute of Technology

Marco received his Ph.D. in Materials Science from MIT, where he worked with Prof. Jeff Grossman on novel materials and physical processes for solar energy conversion. He was a postdoc in the Physics Department at UC Berkeley, working with Prof. Steve Louie and Prof. Jeff Neaton on excited electrons in materials. His group at Caltech focuses on computing the dynamics of electrons in materials, with applications to electronics, optoelectronics, energy, quantum technologies and ultrafast science. Marco received the NSF CAREER Award in 2018, the AFOSR Young Investigator Award in 2017, the Psi-K Volker Heine Young Investigator Award for electronic structure calculations in 2015, and the Intel Ph.D. Fellowship from Intel in 2013, among other awards.



Jens Biegert

ICREA.ICFO.- The Institute of Photonics Sciences



Irene Burghardt

Goethe University



Andrea Cavalleri

Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter



Hannes Huebener

Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter



Aaron Kelly

Dalhousie University



Alfred Leitenstorfer

University of Konstanz



Fernando Martín García

Universidad Autónoma de Madrid, IMDEA Nanociencia & DIPC



Enrico Perfetto

Università di Roma Tor Vergata



Thomas Pfeifer

Max-Planck Institute for Nuclear Physics



Walter Pfeiffer

UB



Akshay Rao

University of Cambridge



Erling Thyrhaug

Technical University of Munich



Marc Vrakking

Max Born Institute



Davide Sangalli

CNR-ISM, Division of Ultrafast Processes in Materials (FLASHit)



Christian Schaefer

Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter



Martin Schultze

Technical University Graz.Institut of Experimental Physics



Sangeeta Sharma

Max Born Institute



Emma Springate



Gianluca Stefanucci

Università di Roma Tor Vergata

Precios matrícula

REGISTRO	HASTA 06-10-2019
REGISTRO	0 EUR

Lugar

Palacio Miramar

Pº de Miraconcha nº 48. Donostia / San Sebastián

Gipuzkoa