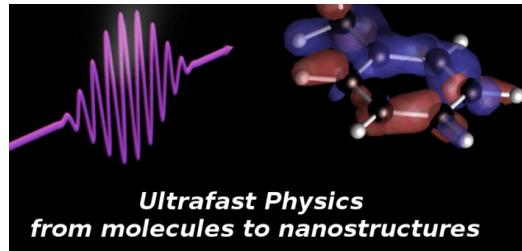


Ultrafast Physics from molecules to nanostructures



Urr. 07 - Urr. 10 2019

Kod. Z26-19

Mod.:

Aurrez aurrekoia

Edizioa

2019

Jarduera mota

Workshop

Data

Urr. 07 - Urr. 10 2019

Kokalekua

Miramar Jauregia

Hizkuntzak

Ingelesa

Balio akademikoa

40 ordu

Webgunea

https://www.ceciam.org/conferences_psik/

Antolakuntza Batzordea

Fundación
BBVA



Azalpena

Femtosegundoaren denbora eskalatik attosegundoaren eskalara, eta THz-ko maiztasun eskalatik XUVra doan laser teknologia ultrabizkorri esker posible da dinamika elektronikoa eta nuklearra denbora errealean probatzea atomoetan, molekuletan eta solidoenetan[1]. Prozesu primario fotoinduzituen funtsezko ikuspegi bat lor daiteke konplexutasun maila gero eta handiagoa duten sistemeten[2]. Dinamika ultrabizkorak jarraitu eta zuzentzeko gaitasunak izugarrizko eragina du aplikazio sorta oso zabal batean, materialen zientziatik[3] hasi eta bizitzaren zientziatarera.

Argi eta garbi, prozesu ultrabizkorak modelatzeko teorien eta metodoen arloan eginiko aurrerabideek ezinbestean behar dute esperimentazioan aritzen den komunitatearekiko truke bizi bat, sistemeta neurketen konplexutasuna dela eta. Esan genezake azken hamarkada honetan iragarpen metodoak eta konputazionalki bideragarriak garatzeko ahaleginak eztanda egin duela. DFTn eta Greenen orekaz kanpoko funtzioan (NEGF) oinarrituriko ab initio ikuspegiak[4] 2D sistemeten eta nanoegituretan ebazitako esperimentuekin lotu dira berriki. Prozesu ultrabizkorak modelatzeko uhin funtzioetan (adibidez, ADCn, CASPTn) edo kantitate txikietan (adibidez, TDDFT, NEGF) oinarrituriko beste ab initio metodo batzuek molekuletako subfemtosegundoen dinamika elektronikorako eta nuklearrako sarbidea ematen dute. Horretaz gain, korrelazio handia duten eredu sistemenzako (adibidez, TD-DMFT eta DMRG) denbora errealeko metodo numeriko zehatzak proposatu dira. Tailer honek teoriaren eta esperimentuen arloetako mundu osoko aditu nagusiak bilduko ditu, eta horri esker ongarritze gurutzatua egin eta ab initio metodoen artearen egoeran aurrera egiteko aukera sortuko da. Berez, teknika esperimentalen garapen azkarra ez du berekin ekarri ab initio komunitate konputazionalarekiko aldibereko integrazio bat. Emaitza da tresna numeriko gutxi dagoela eskuragarri interes teknologikoko edo funtsezko sistema erabakigarrientzat; adibidez, biomolekulak, nanoegitura handiak eta aplikazio teknologikoa duten materialak. Hortaz, erronka handienetako bat da materialen zientzien kodeen eta orekaz kanpoko propietateak aztertzeko kimikaren aplikazio eremua hedatzea.

Horretarako, ezinbestekoa da zientzialari esperimental, teoriko eta konputazionalak biltzea eta oinarrizko honako gai hauei buruz hitz egitea: Nola areagotu orekaz kanpoko ab initio metodoen zehaztasuna? Nola atera etekina, modu eraginkorrean, konputazio instalazioetako aurrerabideei material konplexuen orekaz kanpoko dinamika simulatzeko? Nola itzuli laser pultsuaren ezaugarriak tresna konputazionalen muga baldintzetara eta hurbilketa egokietara? Diseina al ditzakegu komunitateari eskaintzeko hainbat tresna eta prozedura?

Helburuak

Tailer honek inflexio puntu bat izan nahi du zientzia konputazional ultrabizkorren arloan, aurrerabiderako funtsezkoak eta aztertugabeak diren jarraibideak ezarrita. Emaitza esperimentalen hainbat formulazio teoriko erkatuko ditugu, eta haien aplikagarritasun tarteari buruz eta muga fisiko eta zebakizkoei buruz eztabaidatuko dugu. Horretaz gain, falta den fisika nola txertatu eta, ikuspegi desberdinenean kasuan, txertaketa hori numerikoki egingarria den aztertuko dugu.

Ikastaroaren laguntzaile espezifikoak



MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

Zuzendaritza



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.

Irakasleak



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.Institue of Experimental Physics

**Sangeeta Sharma**

Max Born Institute

**Emma Springate**



Gianluca Stefanucci

Universita di Roma Tor Vergata

Matrikula prezioak

ERREGISTROA

2019-10-06 ARTE

ERREGISTROA

0 EUR

Kokalekua

Miramar Jauregia

Mirakontxa pasealekua 48, 20007 Donostia

Gipuzkoa