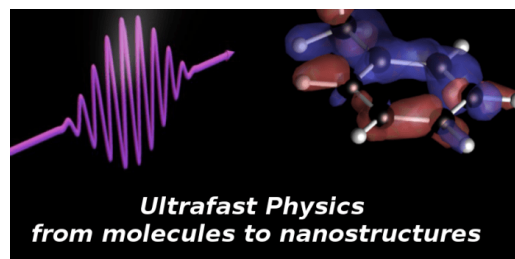




Ultrafast Physics from molecules to nanostructures



Urr. 07 - Urr. 10 2019

Kod. Z26-19

Mod.:

Aurrez aurrekoa

Edizioa

2019

Jarduera mota

Workshop

Data

Urr. 07 - Urr. 10 2019

Kokalekua

Miramar Jauregia

Hizkuntzak

Ingelesa

Balio akademikoa

40 ordu

Antolakuntza Batzordea



Azalpena

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

Argi eta garbi, prozesu ultrabizkorrak modelatzeko teorien eta metodoen arloan eginiko aurrerabideek ezinbestean behar dute esperimentazioan aritzen den komunitatearekiko truke bizi bat, sistemen eta neurketen konplexutasuna dela eta. Esan genezake azken hamarkada honetan iragarpen metodoak eta konputazionalak bideragarriak garatzeko ahaleginak eztanda egin duela. DFTn eta Greenen orekaz kanpoko funtzioan (NEGF) oinarrituriko ab initio ikuspegiak[4] 2D sistemetan eta nanoegituretan ebazitako esperimentuekin lotu dira berriki. Prozesu ultrabizkorrak modelatzeko uhin funtzioetan (adibidez, ADCn, CASPTn) edo kantitate txikietan (adibidez, TDDFT, NEGF) oinarrituriko beste ab initio metodo batzuek molekuletako subfemtosegundoen dinamika elektronikorako eta nuklearrerako sarbidea ematen dute. Horretaz gain, korrelazio handia duten eredu sistementzako (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 ongarrizte gurutzatua egin eta ab initio metodoen artearen egoeran aurrera egiteko aukera sortuko da. Berez, teknika esperimentalen garapen azkarrak ez du berekin ekarri ab initio komunitate konputazionalarekiko aldibereko integrazio bat. Emaizta 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 aztertzeke kimikaren aplikazio eremua hedatzea.

Horretarako, ezinbestekoa da zientzialari esperimental, teoriko eta konputazionalak biltzea eta oinarritzko 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 ultrabizkorraren arloan, aurrerabiderako funtsezkoak eta aztertugabeak diren jarraibideak ezarrita. Emaizta esperimentalen hainbat formulazio teoriko erkatuko ditugu, eta haien aplikagarritasun tarteari buruz eta muga fisiko eta zenbakizkoei buruz eztabaidatuko dugu. Horretaz gain, falta den fisika nola txertatu eta, ikuspegi desberdinen kasuan, txertaketa hori numerikoki egingarria den aztertuko dugu.

Ikastaroaren laguntzaile espezifikoak



MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

Zuzendaritza



Angel Rubio

UPV/EHU

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

Universita 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

Matrikula prezioak

ERREGISTROA

2019-10-06 ARTE

ERREGISTROA

0 EUR

Kokalekua

Miramar Jauregia

Mirakontxa pasealekua 48, 20007 Donostia

Gipuzkoa