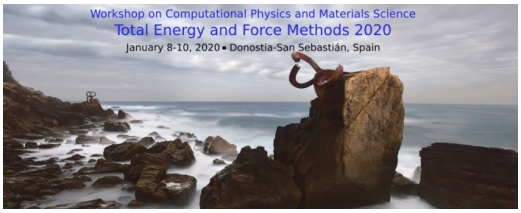
Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods (MiniTotalEnergy2020)



Urt. 08 - Urt. 10 2020

Kod. Z01-20

Mod.:
Aurrez aurrekoa

Edizioa
2020

Jarduera mota
Workshop

Data
Urt. 08 - Urt. 10 2020

Kokalekua
Carlos Santamaría Zentroa

Hizkuntzak
Ingelesa

Balio akademikoa
30 ordu

Antolakuntza Batzordea

Azalpena

Tailer hau CIFTn antolatutako «Energia eta Indar Totalak» hitzaldi sail baten barruan kokatzen da; urte bakoitietan, Triesten egiten dira, eta urte bikoitietan, berriz, beste lekuren batean. Mini «sail» horren aurreko tailerrak Bartzelonan (2012), Lausanan (2014), Luxenburgon (2016) eta Cambridgen (2018) antolatu ziren.

Tailerretako arlo nagusiak, tradizionalki, honako hauek izan dira:

Teoria eta metodoak: Dentsitatearen teoria funtzionala LDAz harago, denboraren mendeko DFT, material errealak manipulatzeko teknikak, Monte Carlo kuantikoa, ab-initio dinamika molekularra, elektroi-fotoi ahokatzea, eskala handiko eta eskala askoko simulazioak, prozesu aktibatuak, garraio elektronikoa, erantzuna kanpo eremuei, simulazioak ingurune errealistak.

Aplikazioak: nanozientzia, biokimika eta biomaterialak, magnetismoa eta espintronika, supereroankortasuna, geofisika, material funtzionalak, azalerak, espektroskopiak, katalisi eta elektrokimika, erreakzio kimikoak eta zinetika, materialen diseinua.

Antolakuntza batzordea

Ivo Souza (Euskal Herriko Unibertsitatea eta Ikerbasque fundazioa)

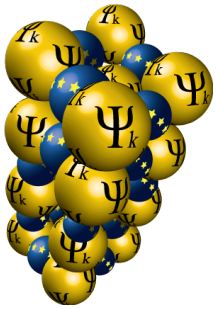
Ion Errea (Euskal Herriko Unibertsitatea)

Aran García-Lekue (Donostiako Nazioarteko Fisika Zentroa eta Ikerbasque Fundazioa)

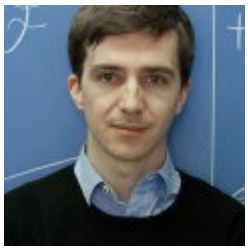
Helburuak

Ekimen honen helburu nagusia da estruktura elektronikoaren metodoen garapen eta gai berriak identifikatzea, lehen printzipioen, haien askotariko aplikazioen eta oinarri matematikoen ikuspegitik. Bere horretan, aukera handi bat eskaintzen du material konputazionalen zientziaren hainbat alderditan lanean diharduten zientzialari liderrak elkartzeko.

Ikastaroaren laguntzaile espezifikoak



Zuzendaritza



Ion Errea

UPV/EHU

After Ion Errea graduated, he started a PhD project supervised by Aitor Bergara and Vyacheslav Silkin at the University of the Basque Country (UPV/EHU) and the Donostia International Physics Center (DIPC). After defending his thesis he moved to the group of Francesco Mauri in the Institut de Minéralogie et de Physique des Millieux Condensés (IMPMC) at the Université Pierre et Marie Curie (UPMC) in Paris. His main task was to develop the Stochastic Self-Consistent Harmonic Approximation (SSCHA). In January 2014, he moved to the DIPC as a postdoctoral researcher to continue developing the SSCHA and applying it to systems of interests. Since April 2015 he is an Assistant Professor at the Department of Applied Physics 1 in the University of the Basque Country (UPV/EHU) and continues as an associate researcher of the DIPC.

Aran Garcia-Lekue

DIPC

Matrikula prezioak

REGISTRATION	2020-01-08 ARTE
Regular attendant	100,00 EUR
Invited speaker / organizers	0 EUR

Kokalekua

Carlos Santamaría Zentroa

Elhuyar plaza 2, 20018 - Donostia

Gipuzkoa