

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced Materials simulation towards Next-generation solution for Materials Research

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

No. 21

令和元年 **5月15日** (水)
14:00~15:30

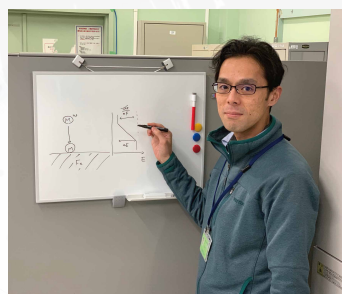
日時

場所

金属材料研究所
2号館 1階ラウンジ

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。


「金属腐食現象に対する
ミクロ・マクロ計算科学的アプローチ」





日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター
防食材料技術開発グループ 研究副主幹

五十嵐 誉廣 先生

溶液中金属の腐食は、材料と環境両方の因子が影響する電気化学反応である。溶液中では化学種の価数変化や拡散による化学種輸送(長時間、マクロスケール)、固液界面では金属の表面状態と界面近傍の化学種に対応した電気化学反応(短時間、ナノスケール)、材料側では化学反応の進行による表面形状の変化(長時間、マクロスケール)が進行している。これらすべての因子を考慮した計算シミュレーションをまともに行うためには、表面粗さを表現できるサイズのシステムに対して数年オーダーの量子計算を行う必要があり、昨今の高性能計算機をもってしても非常に困難である。我々は、着目する現象ごとに異なる計算アプローチを適用し、腐食現象の総合的な理解を試みている。本講演では、我々のグループで行っているミクロ~マクロスケールでの様々な計算シミュレーション例を紹介するとともに、金属材料腐食に対する計算科学の活用について議論させていただきます。

■ 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