

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced Molecular Simulations towards Nanotechnology-oriented Materials Research

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

No. 27

令和2年 **1月24日** (金)
14:30~16:00

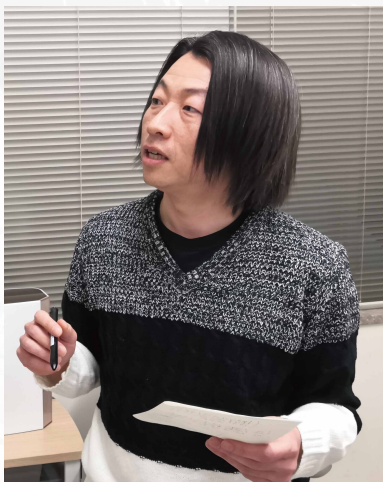
日時

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。

「原子・電子シミュレーションを用いた
欠陥挙動に基づく力学特性」



日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター

研究主幹 **都留 智仁** 先生

材料のマクロな力学特性は、一般にナノスケールの個々の欠陥構造やメソスケールの欠陥の集団挙動によって決定される。大規模な原子・電子シミュレーションによりナノスケールにおける個々の欠陥挙動と力学応答の関係を捉えることが可能になってきた一方、マクロな力学特性を直接評価することはいまだ困難である。我々は、分子動力学法や第一原理計算を用いた欠陥構造の大規模解析と転位論などの力学理論を応用することで、マクロな力学特性の評価に繋げる研究を進めてきた。

本講演では、原子シミュレーションと転位芯構造を記述する力学モデルの連携の理論的な枠組み、および多結晶材料の力学特性、様々な結晶構造に対する強度に対する温度や合金元素の影響などの最近の研究結果を紹介する。

■ 主催



CCMS

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター
Center for Computational Materials Science

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