CISS

梅野研究室

[ナノ・マイクロ材料強度と物性のモデリング＆シミュレーション]

生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター
Centre for Research on Innovative Simulation Software

ナノ・マイクロ機械物理学

機械工学専攻

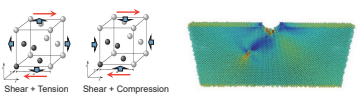
http://www.cmsm.iis.u-tokyo.ac.jp

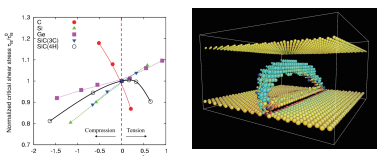
ナノ・マイクロ域の機械物理とマルチスケール解析

Challenges to Nano-Micro Mechanophysics and Multiscale Simulation

密度汎関数法による第一原理計算や分子動力学法による微小材料の強度・物性の解明，ならびにナノ～マイクロスケール現象の理解に基づいたマルチスケールモデルの構築とシミュレーションに取り組んでいます．

固体結晶の変形・破壊の原子レベル解析

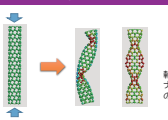




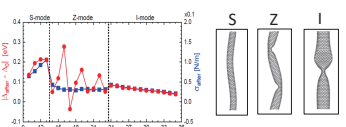
共有結合性結晶の圧縮・引張り応力下でのせん断理想強度

転位運動と結晶すべりの分子動力学シミュレーション

座屈を積極利用したナノデバイスの設計

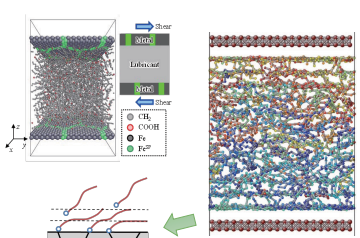


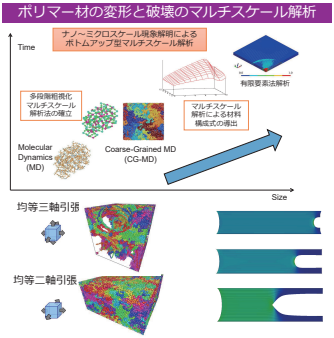
軸方向圧縮を受けるカーボンナノチューブの座屈変形挙動の原子モデル解析



ナノチューブ径 (n) によって変化する座屈モード，および座屈によるバンドギャップ変化と座屈後荷重の相関性

境界潤滑状態の分子シミュレーション



ナノ結晶粒構造を持つ金属表面に形成される潤滑油構造（ポリマーブラシ）の粗視化分子動力学シミュレーション

ポリマー材の変形と破壊のマルチスケール解析