

# 梅野研究室

## [原子・電子モデルによる固体材料の強度および物性評価]

生産技術研究所 基礎系部門

Department of Fundamental Engineering

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

計算材料力学物性

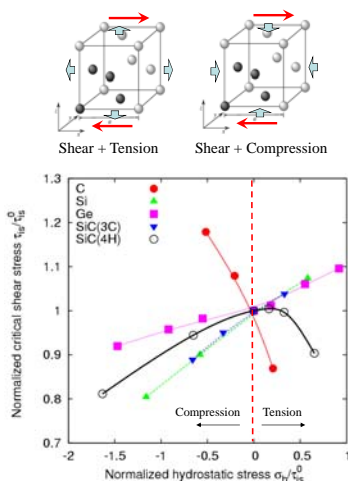
機械工学専攻

### ナノ材料物性・強度の理論的予測を目指して

Toward Theoretical Prediction of Strength and Physical Properties of Nanomaterials

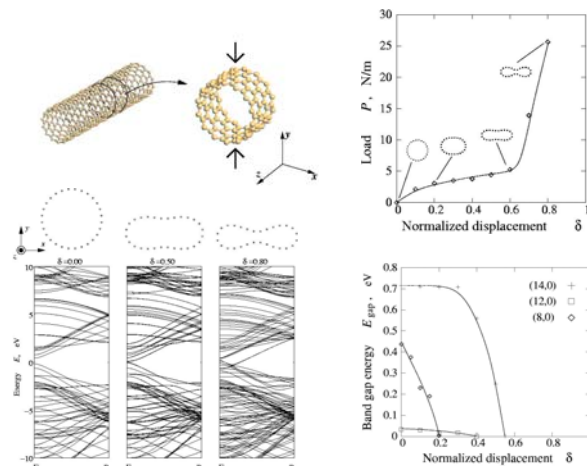
微小材料の強度や物性の基礎を明らかにすることを目的として、密度汎関数法による第一原理量子力学計算や、分子動力学法を用いた原子シミュレーションを行っています。

#### 多軸応力下の理想結晶の強度解析



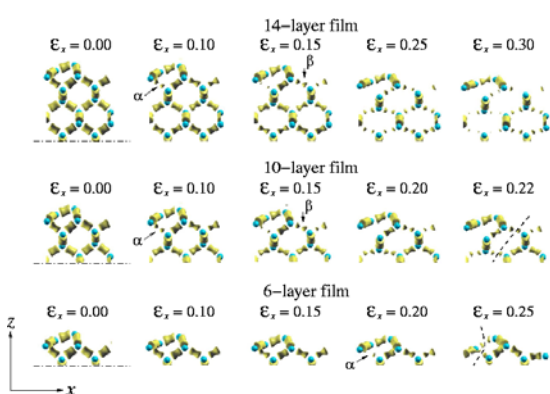
共有結合性結晶の圧縮・引張り応力下でのせん断理想強度。材料により異なる挙動を示す(金属と異なる)。

#### カーボンナノチューブの圧縮解析



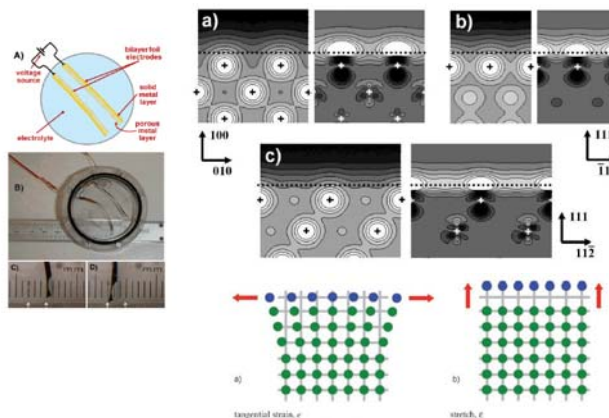
径方向に圧縮を受けるカーボンナノチューブの機械的・電気的特性の解析。

#### Siナノ薄膜の引張り変形解析



引張りを受けるSiナノ薄膜の破壊の様子。

#### 電解液中のナノポラス金属の変形解析



電界による表面応力変化を利用したナノポラス金属アクチュエータの変形メカニズムの解析。