

澁田研究室 (マテリアルモデリング) 本郷キャンパス



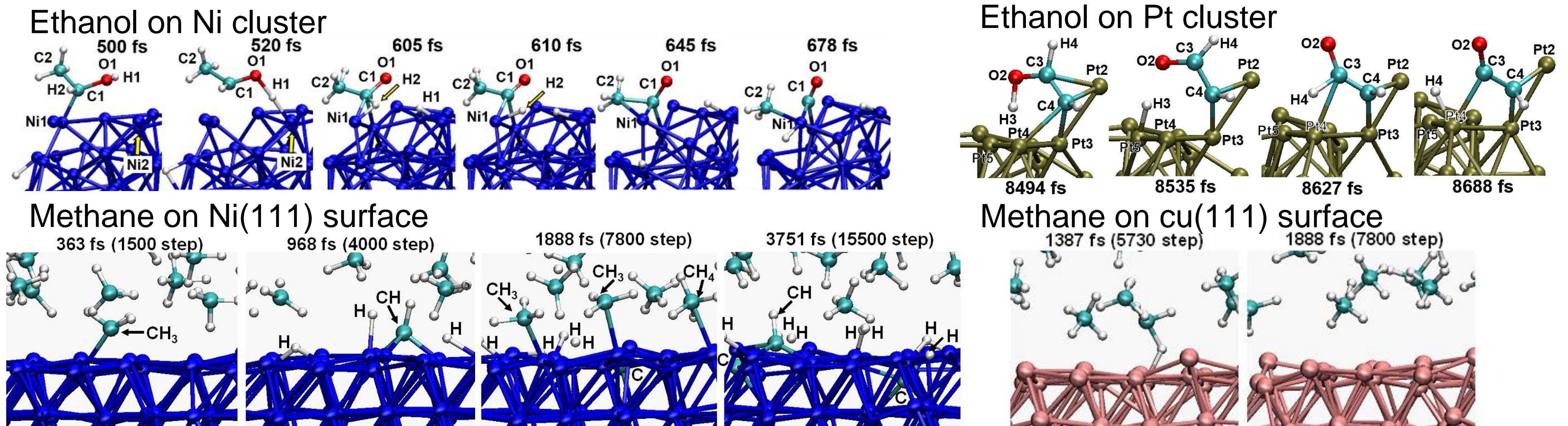
HPはコチラ！



近年の計算機性能の飛躍的向上により、数値解析手法で取り扱える時空間スケールが大幅に広がってきました。当研究室では、反応素過程の局所解析から多数の原子の協力現象としての相変化・変態に至るまで、マルチスケールの立場から材料最適設計への貢献を目指しています。最近では、100億原子以上の大規模分子動力学法計算による材料組織生成過程解析を実現する一方、機械学習による原子構造判定技術の開発やk-means法による反応座標分類など、データサイエンス手法と材料科学手法の融合に取り組み、計算機支援による材料設計・開発分野を牽引しています。

研究成果の一例

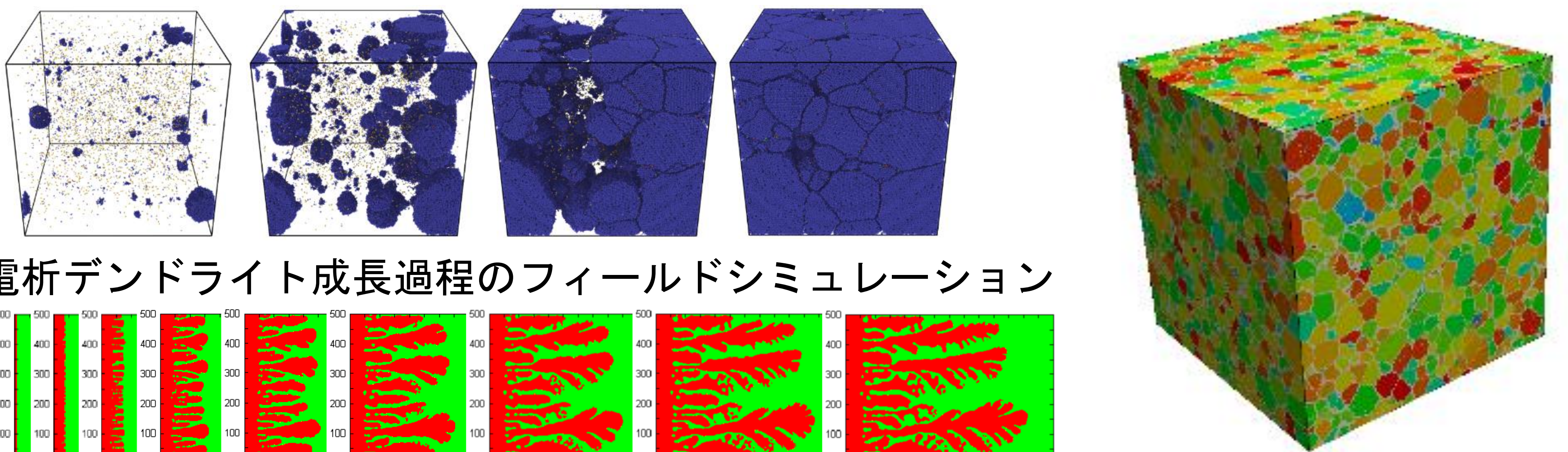
カーボンナノチューブ・グラフェン成長機構解明に向けた炭素源分子解離過程の第一原理分子動力学(AIMD)法シミュレーション



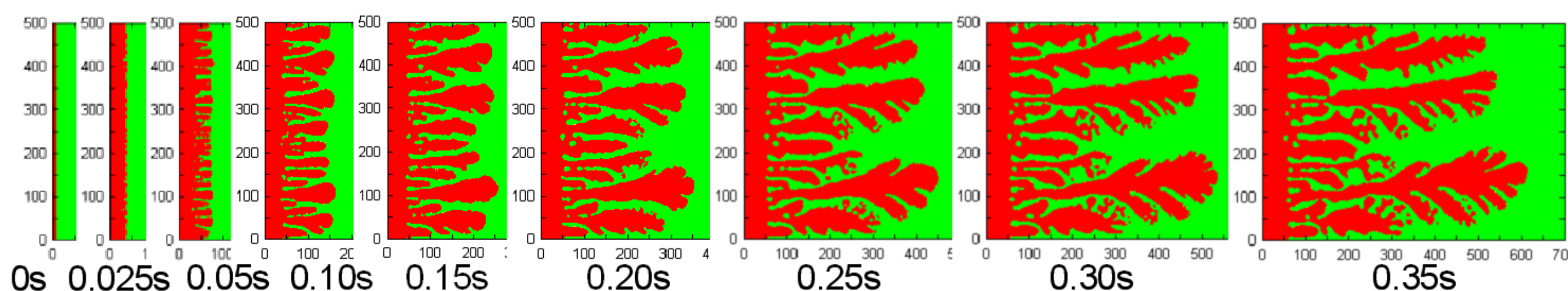
核生成・凝固・粒成長過程の大規模分子動力学(MD)法シミュレーション

1200万原子MDによる過冷融液からの核生成・凝固過程

10億原子MDで得られた結晶粒



電析 dendrait 成長過程のフィールドシミュレーション



その他の研究テーマ例

固液界面物性導出/固相変態キネティクス の解明/スパコン・GPGPUを用いた数値解析の大規模化
データ同化手法を用いた材料組織予測/グラフェン dendrait 成長予測/固体酸化物表面反応

主な共同研究先

- ナノチューブ・グラフェン生成：英国・ケンブリッジ大学/ベルギー・アントワープ大学
- 第一原理分子動力学法シミュレーション：熊本大学
- GPUスパコンを用いた大規模計算：京都工芸繊維大学/北海道大学/東北大学
- 他、東大内部多数