

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 11 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03518

研究課題名(和文) 分子動力学-有限要素連成解析による照射誘起応力腐食割れ発生過程解明に関する研究

研究課題名(英文) Evaluation of initiations of Irradiation-Assisted Stress Corrosion Cracking by Molecular Dynamics &#8211; Finite Element Method concurrent coupling model

研究代表者

沖田 泰良 (Okita, Taira)

東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・准教授

研究者番号：50401146

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 8,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、分子動力学(MD)法と有限要素法(FEM)の計算領域境界に二重解像度要素(DRE)を配置することで、原子論的解析と弾性解析を連成させる手法を開発した。DREは、周囲のFEM要素に対しては要素として、MD領域の原子に対しては原子集団として振る舞うものである。DREを導入することで不必要な制約条件を排除しつつ両計算手法を適切に繋ぐことが可能となった。開発した手法を用いて複数転位と結晶粒界の相互作用に関する計算を行った。複数の転位が存在するすべり面近傍と結晶粒界近傍にMD領域、周辺部分にFEM領域、境界にDRE領域を配置し、外部応力印加下での隣接結晶粒への転位の伝播過程等を解析した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

開発した新手法は、MD法のみ従来の計算と比較して数千倍以上の高効率を有しつつ、且つ同等の精度を保持している計算手法である。本手法によって、これまでの手法では不可能であった空間スケールを対象として、原子論的取り扱いを用いた材料挙動予測が可能となった。今後の発展的適用として、照射下に於ける延性低下、破壊靱性劣化のモデル化が挙げられる。特に、軽水炉高経年化で最も大きな課題の1つである照射脆化を伴う圧力容器鋼、及び地震等の過大荷重負荷に於ける構造材料の健全性等の課題に対して、計算科学に基づいた評価手法を提供しうることも期待される。

研究成果の概要(英文)：We developed a method that concurrently couples atomistic and elastic analysis by allocating double resolution elements (DRE) at the boundaries between molecular dynamics (MD) regions and finite element method (FEM) regions. DREs act as elements towards surrounding FEM elements, whereas they act as atomic group towards atoms in MD regions. By introducing DREs, it became possible to properly connect both calculation methods while eliminating unnecessary constraint conditions.

Using this method, we calculated interactions between multiple dislocations and a grain boundary. We set a calculation cell in which MD, FEM and DRE regions are placed near the slip plane of the dislocations and grain boundary, at the peripheries, and at their boundaries, respectively. We analyzed propagation processes of the dislocations to the adjacent grain under an application of external stress to the calculation cell.

研究分野：原子力材料

キーワード：転位 結晶粒界 分子シミュレーション マルチスケールモデル

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

照射環境におかれる複雑な材料システムとしての原子力システムを利用していくためには、(1) 経年劣化予測手法開発や耐環境性材料開発、(2) 補修技術・劣化緩和・予防保全技術開発、(3) 材料劣化検査技術と環境定量化手法開発、の3つの項目をバランスよく総合化する保全工学研究の進展とこのための学術体系が必要であると考えられる。この中で、放射線照射場における経年劣化の予測手法を開発することは、我々が解決しなければならない最大の課題である。この方法の1つとして、材料劣化の物理メカニズムを明らかにして、これに基づいたシミュレーションから材料挙動の評価を行い、併せて模擬環境によって予測モデルの検証実験を行うことの重要性について、我々のグループは立証してきた[1]。また、材料特性変化を予測するモデル構築と検証実験を積極的に行ってきた実績を持つ[2-4]。

原子力材料に於いては、放射線との相互作用により、熱平衡条件下では存在しなかった高濃度の空孔と共に格子間原子が形成し、これらの拡散に伴うマイクロ組織変化を介し、構成する機器のマクロな機械特性変化が引き起こされる。これらの過程は、空間スケールで原子の大きさに相当する 10^{-10}m オーダから機器の大きさである $10^1 \sim 10^2\text{m}$ オーダに至る様々なスケールを包含し、且つ微小スケール過程によりそれ以降のスケール事象が決定づけられる典型的なマルチスケール・マルチフィジックス現象である。これらの過程を解明する1つの手法として、分子動力学 (MD) - 有限要素 (FEM) 弾性解析を連成させる解析手法が有望視されてきた。この手法は、転位やき裂中心部等結晶構造の乱れを原子論的に取り扱う必要のある領域のみを MD 法で解析し、周辺領域で結晶構造が保たれている領域を簡便な弾性体モデルで近似的に解析する手法である。しかし、MD-FEM 境界領域で原子位置と節点位置を一致させなければならない[5]、事前に別途数値解析を要する[6]、境界領域での熱伝導が適切に再現されない[7]等、実用化と適用性には課題が残されていた。

2. 研究の目的

本研究では、MD と FEM の新しい連成解析手法として、両計算領域の境界に二重解像度要素 (DRE) を配置する手法 (図1) を構築することを目的とする。DRE は、周囲の FEM 要素に対しては自身も1つの要素として振る舞い、MD 領域の原子に対しては原子集団として振る舞うものである。DRE を導入することにより、不必要な制約条件を排除しつつ両計算手法を適切に繋ぐことが可能となる。本手法により、マルチスケール・マルチフィジックス過程を高精度且つ高効率に再現する複合的モデルが実現し、多数の照射欠陥を含む体系に於いて、その原子挙動から機械的特性変化を予測することが可能となる。

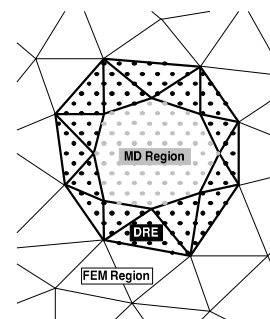


図1 MD-FEM 連成解析手法の概要

3. 研究の方法

(1) 連成解析フレームワーク構築

図2には、本研究で構築した計算プロセスを示す。本計算手法は、通常の MD や非常常 FEM と同様に、原子および節点にかかる力を求め、原子・節点の加速度を算出し、これを時間積分して原子・節点の速度・位置を逐次計算していくことが基本となる。シミュレーションの各時刻ステップにおいて、写像 κ によって DRE 内の原子加速度を節点加速度に換算し、それを FEM によって算出された節点加速度と力学的に均衡させ、調整後の節点加速度を写像 μ によって改めて原子加速度に換算する。この一連のプロセスにより、DRE 内の原子と節点の挙動から力学的矛盾を常に排除することが可能となった。

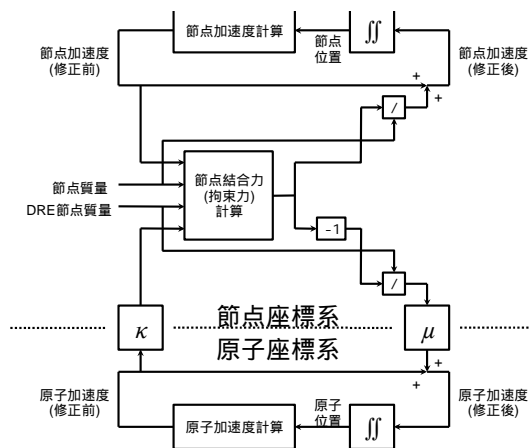


図2 MD-FEM 連成解析の計算プロセス

(2) MD-FEM 換算手法の構築

MD 法で記述される原子の変位を FEM の節点変位に換算する写像 κ 、その逆に相当する写像 μ を求めた (図3)。DRE 領域内では変位の線形性が保たれるため、FEM の節点変位から MD 法の原子変位に変換する写像 μ は FEM の内挿関数同様に簡略化した行列で表すことが可能である。一方、MD 法の原子変位から FEM の節点変位に変換する写像 κ については、直交性等の適切な条件により一意に定めることが可能となった。写像 κ 、 μ を図1に示す MD - FEM 連成解析コードに取り入れた。

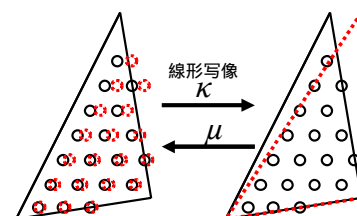


図3 DRE 導入のための写像概念図

(3) 熱伝導の適正化

FEM 領域と MD 領域では、短波長フォノンの取り扱い手法が異なるため、特に MD 領域で不自然な温度上昇が発生し、領域間での整合性が崩れる可能性があることがこれまでの研究により明らかとなっている[6]。本研究では、この課題を解決するため、統計力学的手法に基づいて、DRE 領域で格子振動を調整し、熱伝導を適正化する手法を構築した。これらの段階を経て、MD と FEM を適切に連成させる手法を確立した。

4. 研究成果

(1) MD-FEM 連成解析手法の検証

図 4 には、構築した連成解析手法と MD のみの計算結果の比較を示す。対象は Fe とし、を示していることがわかる。また、弾性振動が減衰していないことも併せて、DRE による計算結果の信頼度は高いことが明らかとなった。

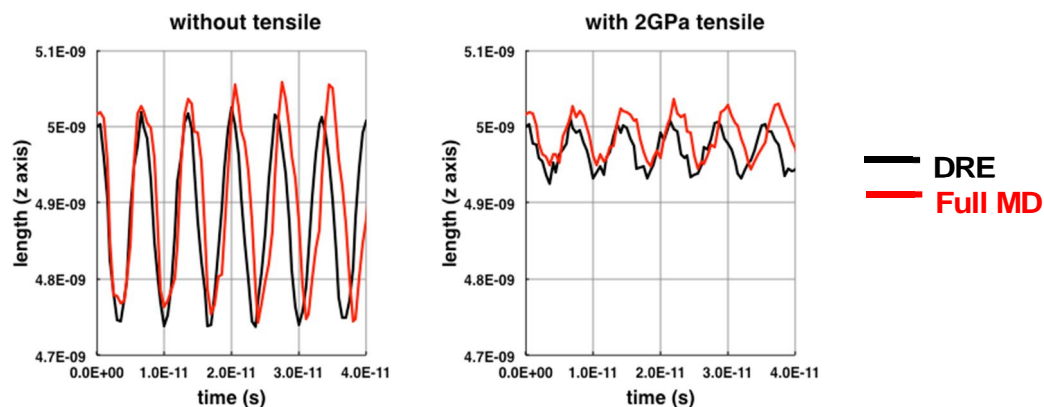


図 4 計算セル長さの変化に関する DRE

(2) 解析手法の実装

開発した連成解析手法を用いて、複数転位と結晶粒界の相互作用に関する計算を行った。図 5 に示すように、複数の転位が存在するすべり面近傍と結晶粒界近傍に MD 領域を、周辺部分に FEM 領域を、境界に DRE 領域を配置した計算セルを作成した。尚、MD 計算に必要な原子間ポテンシャルは、単元系面心立方金属 Ni を用いた。外部応力印加下での転位の結晶粒界への蓄積と隣接結晶粒への転位の伝播過程に関して解析し、特に応力集中の発生確率が高い粒界を解明した。

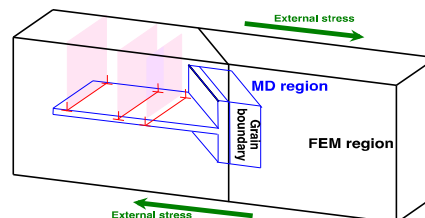


図 5 MD-FEM 連成解析における結晶粒界と転位の配置方法

参考文献

- [1] 沖田泰良, 日本シミュレーション学会誌「シミュレーション」, Vol. 30, No. 2, (2011) 70.
- [2] T. Okita, T. Sato, N. Sekimura, F.A. Garner, L.R. Greenwood, Journal of Nuclear Materials, 307-311 (2002) 322.
- [3] W.G. Wolfer, T. Okita, D.M. Barnett, Physical Review Letters, 92 No.8 (2004) 085507.
- [4] T. Okita, W.G. Wolfer, F.A. Garner, N. Sekimura, Philosophical Magazine, A 85 No.18 (2005) 2033.
- [5] H. Cheng, L. Wang, M. Du, C. Cao, Y. Wan, Y. He, K. Muralidharan, G. Greenlee, A. Kolchin, Journal of Computer-Aided Materials Design, 13 (2006) 161.
- [6] G.J. Wagner, W.K. Liu, Journal of Computational Physics, 190 (2003) 249.
- [7] B.Q. Luan, S. Hyun, J.F. Molinari, N. Bernstein, M.O. Robbins, Physical Review E, 74 (2006) 046710.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Okita Taira, Itakura Mitsuhiro	4. 巻 59
2. 論文標題 Computational modeling of the behavior of nuclear materials (2)	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Atomic Energy Society of Japan	6. 最初と最後の頁 712 ~ 716
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.3327/jaesjb.59.12_712	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Doihara K., Okita T., Itakura M., Aichi M., Suzuki K.	4. 巻 98
2. 論文標題 Atomic simulations to evaluate effects of stacking fault energy on interactions between edge dislocation and spherical void in face-centred cubic metals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Philosophical Magazine	6. 最初と最後の頁 2061 ~ 2076
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14786435.2018.1472401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki	4. 巻 98
2. 論文標題 Interactions between clusters of self-interstitial atoms via a conservative climb in BCC?Fe	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Philosophical Magazine	6. 最初と最後の頁 2311 ~ 2325
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1080/14786435.2018.1486047	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Nakanishi D., Kawabata T., Doihara K., Okita T., Itakura M., Suzuki K.	4. 巻 98
2. 論文標題 Effects of stacking fault energies on formation of irradiation-induced defects at various temperatures in face-centred cubic metals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Philosophical Magazine	6. 最初と最後の頁 3034 ~ 3047
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1080/14786435.2018.1515507	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ratanaphan Sutatch, Sarochawikasit Rajchawit, Kumanuvong Noppadol, Hayakawa Sho, Beladi Hossein, Rohrer Gregory S., Okita Taira	4. 巻 54
2. 論文標題 Atomistic simulations of grain boundary energies in austenitic steel	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 5570 ~ 5583
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1007/s10853-018-03297-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okita Taira, Kawabata Tomoya, Murayama Hideaki, Nishino Nariaki, Aichi Masaatsu	4. 巻 79
2. 論文標題 A new concept of digital twin of artifact systems: synthesizing monitoring/inspections, physical/numerical models, and social system models	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Procedia CIRP	6. 最初と最後の頁 667 ~ 672
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1016/j.procir.2019.02.048	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Kawabata Tomoya, Suzuki Katsuyuki	4. 巻 54
2. 論文標題 Atomistic simulations for the effects of stacking fault energy on defect formations by displacement cascades in FCC metals under Poisson's deformation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 11096 ~ 11110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1007/s10853-019-03688-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hayakawa Sho, Doihara Kohei, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki	4. 巻 54
2. 論文標題 Screw dislocation/spherical void interactions in fcc metals and their dependence on stacking fault energy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science	6. 最初と最後の頁 11509 ~ 11525
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1007/s10853-019-03716-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kosuge Hiroaki, Kawabata Tomoya, Okita Taira, Murayama Hideaki, Takagi Shunsuke	4. 巻 185
2. 論文標題 Establishment of damage estimation rules for brittle fracture after cyclic plastic prestrain in steel	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials & Design	6. 最初と最後の頁 108222 ~ 108222
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108222	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計37件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 安達悠希也、早川頌、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 面心立方金属を対象とした照射欠陥挙動のモデル化
3. 学会等名 日本原子力学会2017年秋の大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 早川頌、沖田泰良、板倉充洋、H. Xu, Y.N. Osetsky
2. 発表標題 BCC-Feにおける転位 結晶欠陥集合体間相互作用の原子論的解析
3. 学会等名 日本原子力学会2017年秋の大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中西大貴、川畑友弥、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 MD法による中性子照射下結晶欠陥形成過程に及ぼす材料物性の影響 (3)
3. 学会等名 日本原子力学会2017年秋の大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 土井原康平、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 MD法を用いた原子空孔集合体-転位相互作用に及ぼす積層欠陥エネルギーの影響解明 (2)
3. 学会等名 日本原子力学会2017年秋の大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Doihara, T. Okita, M. Itakura
2. 発表標題 MD simulation to investigate the effect of stacking fault energy on the interaction between a screw dislocation and vacancy cluster
3. 学会等名 18th International Conference on Fusion Reactor Materials (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 D. Nakanishi, Y. Yang, T. Kawabata, T. Okita, M. Itakura
2. 発表標題 Molecular dynamics simulations to elucidate the effects of stacking fault energies on the defect formation process under high energy of a primary knock-on atom
3. 学会等名 18th International Conference on Fusion Reactor Materials (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 沖田泰良
2. 発表標題 マルチスケールモデル・モニタリングのシンセシスによる人工物デジタルツインの構築
3. 学会等名 第2回サイバーNDE研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 沖田泰良
2. 発表標題 照射下微細組織発達検出のための非破壊検査技術の開発
3. 学会等名 第22回原子力計算科学セミナー
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 早川頌、沖田泰良、板倉充洋、H. Xu、Y.N. Osetsky
2. 発表標題 on-the-fly機構論的モンテカルロ法による原子炉構造材料の原子シミュレーション
3. 学会等名 第22回原子力計算科学セミナー
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Hu、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation to evaluate behaviors of vacancy-type defect clusters in Zirconium fuel claddings
3. 学会等名 第22回原子力計算科学セミナー
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Okita、M. Itakura、D. Nakanishi、T. Kawabata
2. 発表標題 Molecular dynamics simulations of effects of stacking fault energies on defect formation process in FCC metals
3. 学会等名 TMS 2018, 147th Annual Meeting and Exhibition (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土井原康平、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 分子動力学法を用いたFCC金属におけるボイド-転位相互作用の定量化
3. 学会等名 日本原子力学会2018年春の大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 早川頌、沖田泰良、板倉充洋、H. Xu、Y.N. Osetsky
2. 発表標題 BCC鉄における自己格子間原子集合体の三次元的運動に関する検討
3. 学会等名 日本原子力学会2018年春の大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 沖田泰良
2. 発表標題 中性子照射脆化検出のための非破壊検査技術開発に関する研究
3. 学会等名 ちゅうでんサイエンス・フォーラム2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Okita, T. Kawabata, H. Murayama, N. Nishino, M. Aichi
2. 発表標題 A new concept of digital twin of artifact systems: synthesizing monitoring/inspections, physical/numerical models, and social system models
3. 学会等名 12th CIRP International Conference on Intelligent Computation in Manufacturing Engineering (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 板倉充洋、沖田泰良、中村博樹
2. 発表標題 二酸化ウランおよびガンマ鉄のノンコリニア常磁性状態の第一原理計算
3. 学会等名 日本原子力学会2018年秋の大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 川満昭英、沖田泰良、早川頌、板倉充洋
2. 発表標題 MD法による中性子照射下結晶欠陥形成過程に及ぼす材料物性の影響(4)-ひずみ負荷の影響-
3. 学会等名 日本原子力学会2018年秋の大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土井原康平、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 MD法を用いた原子空孔集合体-転位相互作用に及ぼす積層欠陥エネルギーの影響解明(4)
3. 学会等名 日本原子力学会2018年秋の大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 早川頌、柴崎京介、沖田泰良、板倉充洋、H. Xu、Y.N. Osetsky
2. 発表標題 On-the-fly キネティック・モンテカルロ法を用いた面心立方金属中における照射誘起欠陥の挙動に関する検討
3. 学会等名 日本原子力学会2018年秋の大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 板倉充洋、沖田泰良
2. 発表標題 ボイドによる転位ピン止め過程の原子論的モデル化
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋の大会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Okita, A. Kawamitsu, S. Hayakawa, T. Kawabata, M. Itakura
2. 発表標題 The effects of stacking fault energies on defect formation by collision cascade in FCC metals
3. 学会等名 Nuclear Materials 2018（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Hayakawa, T. Okita, M. Itakura, H. Xu, Y.N. Osetsky
2. 発表標題 The evolution processes of self-interstitial atom clusters under displacement cascades in FCC metals
3. 学会等名 Nuclear Materials 2018（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 安達悠希也、強光友、早川頌、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 Zr中における空孔型転位ループ形成過程の解明
3. 学会等名 日本原子力学会2019年春の大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 二宮孝太、早川頌、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 面心立方金属における原子空孔集合体形成過程の照射劣化に及ぼす影響
3. 学会等名 日本原子力学会2019年春の大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 早川頌、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 Active volume を用いた温度並列Simulated annealing によるメゾ時間スケール原子シミュレーション
3. 学会等名 日本原子力学会2019年春の大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 二宮孝太、沖田泰良、川畑友弥
2. 発表標題 亀裂材弾塑性変形における小規模降伏項の高精度分離 -CTOD算定 式の高精度化に向けた取り組み-
3. 学会等名 日本船舶海洋工学会2019年春季講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 沖田泰良、川畑友弥、村山英晶、西野成昭、愛知正温
2. 発表標題 人工物デジタルツイン構築のためのマルチスケールモデル・モニタリングのシンセシス
3. 学会等名 日本保全学会第16回学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小菅寛輝、川畑友弥、沖田泰良、村山英晶
2. 発表標題 高精度な損傷蓄積則構築のためのメゾ空間スケールモデル構築
3. 学会等名 日本保全学会第16回学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 早川頌、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 構造材料を対象とした原子スケールの精度を有するマルチ時間スケールモデルの構築
3. 学会等名 日本保全学会第16回学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 寺山怜志、岩瀬祐樹、早川頌、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 MD法を用いた高エネルギー中性子照射下における欠陥形成過程の解明
3. 学会等名 日本原子力学会2019年秋の大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 G. Qiang、T. Okita、Y. Adachi、S. Hayakawa、M. Itakura
2. 発表標題 The microstructural evolution of c-type dislocation loop in zirconium and the effects of iron atoms on the formation process
3. 学会等名 日本原子力学会2019年秋の大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Hayakawa, T. Okita, M. Itakura
2. 発表標題 Atomistic simulations for the absorption process of an SIA cluster via self-climb in BCC-Fe
3. 学会等名 14th International Symposium on Fusion Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Hayakawa, T. Okita, K. Shibasaki
2. 発表標題 Temperature Parallel Simulated Annealing with Self-generated Basins for Searching the Stable State of Microstructures in Materials
3. 学会等名 14th International Symposium on Fusion Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Hayakawa, T. Okita, M. Itakura, K. Suzuki, H. Xu, Y.N. Osetsky
2. 発表標題 Study of the stable configuration of cascade-induced defects in FCC metals using the temperature parallel simulated annealing with self-generated basins
3. 学会等名 19th International Conference on Fusion Reactor Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岩瀬祐樹、早川頌、沖田泰良、板倉充洋
2. 発表標題 面心立方金属における析出硬化のメカニズム解明に関する研究
3. 学会等名 日本原子力学会2020年春の大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺山怜志、岩瀬祐樹、早川頌、沖田泰良、板倉充
2. 発表標題 MD法を用いた高エネルギー中性子照射下における自己格子間原子集合体形成過程の解明
3. 学会等名 日本原子力学会2020年春の大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 馬場貴生、寺山怜志、沖田泰良、板倉充洋、奥村雅彦
2. 発表標題 機械学習分子動力学法を用いたZr中における空孔集合体挙動の解明
3. 学会等名 日本原子力学会2020年春の大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	鈴木 克幸 (Suzuki Katsuyuki) (10235939)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授 (12601)	
研究分担者	増田 昌敬 (Masuda Yoshihiro) (50190369)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授 (12601)	
研究分担者	L i a n g Y u n f e n g (Liang Yunfeng) (70565522)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・特任研究員 (12601)	