

令和 5 年 5 月 22 日現在

機関番号：34303

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19H02025

研究課題名（和文）トランススケール解析による低合金鋼の水素 - 空孔 - 塑性ひずみ関連破壊現象の解明

研究課題名（英文）Elucidation of hydrogen, vacancy, and plastic-strain related fracture phenomena in low-alloy steels by trans-scale analyses

研究代表者

松本 龍介（Matsumoto, Ryosuke）

京都先端科学大学・工学部・准教授

研究者番号：80363414

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,300,000円

研究成果の概要（和文）：低合金鋼において、水素存在時には破壊の前駆段階で局所的に多量の空孔が生成していること、それらが脆化と強く関連していることが示されてきた。本研究では、統計熱力学と電子・原子レベルのシミュレーションおよびメゾ・マクロスケールの連続体力学的手法によって転位/空孔の運動挙動をモデル化し、スケールを跨いだトランススケール解析を実施した。特に、空孔の凝集・解離挙動やそれが発生する温度・空孔濃度条件を明らかにした。また、水素や空孔が転位運動に与える影響を調べた上で、マクロな脆化挙動との関係を広く解明した。さらに、空孔クラスター・プリズマティック転位間遷移による粒界部やき裂先端への空孔輸送機構を発見した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

水素によって金属材料の延性が低下する水素脆化の研究は、その重要性から継続に行われてきたが未解明な部分が多い。このことが、水素を積極的に利用していくための一つの障壁になっている。本研究では、種々のシミュレーション手法に加えて、実験的なアプローチを援用することで、ミクロな欠陥への水素の作用と、マクロな脆化との関係を幅広く解明した。本研究の成果は、水素脆化による材料強度予測の高精度化や耐水素鋼の開発に向けて重要なものである。また、従来は全く知られていなかった格子欠陥の輸送現象を予測し、次なる研究の方向性まで示した。

研究成果の概要（英文）：It has been shown that a lot of vacancy-type defects are locally nucleated at the prodromal stage of fracture of low-alloy steels under a hydrogen environment, and those defects have a strong correlation with embrittlement phenomena. In this study, we performed trans-scale analyses, which cross various scales, through the modeling of dislocation and vacancy by using electric- and atomistic-level simulations and Meso- and Macro-scale continuum methods. Especially, we revealed the aggregation and dissociation behavior of vacancies, and the influence of temperature and concentration on them. We also clarified the influence of hydrogen and vacancy on the dislocation motion, and then we discussed the relationship between the change in dislocation motion and the macroscopic embrittlement. Furthermore, we discovered a new vacancy transport mechanism toward grain boundaries and crack tips through the transition between vacancy clusters and prismatic-dislocation loops.

研究分野：材料力学

キーワード：水素脆化 格子欠陥 原子シミュレーション 力学特性 延性 鉄

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

水素によって金属材料の延性が低下する水素脆化の研究は、その重要性から継続に行われてきた。水素を二次エネルギーとして積極的に利用していくためには、水素脆化の高精度な予測や、耐水素脆性に優れた鋼の開発がますます重要になっている。研究代表者らは、格子欠陥と水素原子との相互作用に関する様々な解析を行ってきた。その中で、格子欠陥（空孔／転位／粒界）は条件に応じて様々な影響を受けるが、純鉄では特に空孔が受ける影響が最も顕著であることを示していた。また、低合金鋼において、水素存在時には破壊の前駆段階で局所的に多量の空孔が生成していること、それらが一度生成すると水素を放出させても延性が回復しないことが別の研究者によって示されていた。そこで、多量生成した空孔が最終破壊に至る過程でどのような役割を果たしているのかを明らかにする必要性が生じていた。

2. 研究の目的

空孔の分布を知るためには、水素と転位（塑性ひずみ）と空孔間の相互作用や、マクロ的なそれらの時間発展を考慮する必要がある。そこで、統計熱力学と電子・原子レベルのシミュレーションおよびメゾ・マクロスケールの連続体力学的手法によって転位／空孔の運動挙動をモデル化し、スケールを跨いだトランススケール解析を実施する。そして、空孔の濃度や分布、空孔の凝集によって生成する空孔クラスターの存在状態（寸法や形状）と、マクロな脆性との関係を明らかにすることを通して、水素環境での材料強度予測の高精度化と耐水素鋼の開発に資することを本研究の目的とした。

3. 研究の方法

本研究では、解析的なアプローチを主としつつ、実験的なアプローチによる研究も実施する。解析的なアプローチでは、ミクロからマクロにわたる種々のスケールの解析手法や、スケール間で物性値や物理モデルを受け渡しするトランススケール解析を用いて研究を実施する。最もミクロなスケールでは、量子力学に基づき材料物性を必要としない第一原理計算（密度汎関数法）を用いることで、水素や空孔の拡散挙動や、それらの凝集挙動を評価する。また、原子間の相互作用を表現する原子間ポテンシャルを用いた解析（分子動力学法、分子静力学法、Nudged elastic band 法）を駆使することで、第一原理計算では扱えないスケールでの格子欠陥と水素・空孔との相互作用を明らかにする。また、これらの結果を離散転位動力学法によるメゾスケール解析や、反応拡散方程式に基づくマクロ解析に導入する。実験では、ナノインデンテーションによるミクロスケールでの硬さの評価や、デジタル画像相関法によるマクロなひずみ分布の時間発展の評価を行うことで、解析的なアプローチを補完する。

4. 研究成果

(1)bcc 鉄における水素拡散挙動の非等方応力依存性の評価とモデル化

空孔の時間発展や転位の運動挙動は、水素の空間分布とその時間発展に強く依存する。研究代表者らはこれまでに、水素分布の時間発展に非等方応力の影響が強いことを発見していた。ここでは、分子動力学法を用いて鉄中の水素の拡散係数を異なる非等方応力下で評価した。その結果、 $\langle 100 \rangle$ 方向の単軸応力下では水素の拡散係数は、応力に平行な方向と垂直な方向とで異なる依存性を示すことがわかった。そして、得られた拡散係数の応力依存性は、水素の拡散経路上にある O サイトの異方性に起因することがわかった。また、負荷応力下での拡散係数の予測式を構築した。これらは、有限要素法などを用いて、応力特異場まわりの水素拡散の解析を高精度に行うために不可欠な知見である。

(2)マルテンサイト鋼における水素固溶濃度と拡散係数の計算力学的評価

応力集中部などへの水素の集積によって時間経過後に割れが生じることがある。ここでは、高い強度を持ち水素脆化を生じるマルテンサイト鋼を対象とした。ここで、水素の集積速度は、水素の固溶量と拡散係数の積に依存する。ここでは、マルテンサイト相中における水素の固溶量と各方向の平均拡散係数を個別に明らかにした。固溶量に関しては DFT 計算により求め、平均拡散係数に関しては、DFT 計算、分子動力学法、有限要素法を併用して評価し、それらの積として集積速度を見積もった。その結果、炭素濃度が低い時には水素の集積速度は小さくなり、濃度が高いときには概ね大きくなることがわかった。また、マルテンサイト相中では水素の拡散異方性が生じることがわかった。

(3)水素原子の量子拡散に及ぼす等方ひずみの影響の解析

水素の拡散は、その小さい質量から量子拡散の影響を受ける。分子動力学法を用いた古典力学に基づく解析によって、水素の拡散係数の等方ひずみ依存性は評価されているものの、量子拡散の等方ひずみ依存性は明らかになっていなかった。ここでは、量子拡散の影響が相対的に大きくなる低温での水素拡散の解析をより高精度に実施するために、密度汎関数法と small polaron 理

論を用いて、量子拡散も含めた鉄中の水素の拡散係数の等方ひずみ依存性を明らかにした。本解析を通して、特に圧縮下で拡散係数が増加することがわかった。古典力学に基づく予測では、圧縮下では水素の拡散経路が狭くなることから拡散係数は低下する。一方、量子拡散ではサイト間距離が短いほど拡散が促進されるために逆の結果になることが示された。この結果は、常温以下の環境での鉄中の水素分布の時間発展を高精度に予測する上で重要な知見である。

(4)空孔の相互作用エネルギーとそれに基づく凝集／解離挙動の基礎検討

高濃度空孔の時間発展を明らかにすることを目的に分子静力学法を用いて、水素の有無での凝集挙動の違いや、他の格子欠陥（粒界／刃状転位）への空孔の吸収エネルギーを評価し、昇温時の複空孔や空孔クラスターの解離挙動の解析を実施した。空孔が凝集していく際には、{110}を表面とする八面体構造が安定構造として現れることがわかった。そして、上記の八面体構造の発現に起因する周期性はあるものの、空孔クラスターが大きくなるほど、単空孔との結合エネルギーが大きくなることがわかった。単空孔が2個結合した複空孔（V2）の結合エネルギーは非常に小さく、常温でそれを形成するためには、0.01%程度の非常に高い空孔濃度が必要であることがわかった。つまり、単空孔を起点とする空孔のクラスター化には、水素による単空孔の安定化と生成促進が不可欠であると言える。

(5)昇温過程での空孔性欠陥からの水素放出と空孔性欠陥の解離挙動の解析

種々の条件での熱処理や水素添加と、水素昇温脱離分析を組み合わせることで、水素によって増加／減少する格子欠陥や、水素脆化に関与している格子欠陥の同定が行われている。しかしながら、試料の昇温過程では、格子欠陥や水素の存在状態が刻々と変化しており、実験的なアプローチだけでは現象解明に限界がある。ここでは、DFT計算と分子静力学計算によって、水素と空孔性欠陥（単空孔・複空孔・空孔クラスター）、空孔と空孔性欠陥の結合エネルギーを精密に評価し、それを反応拡散方程式に導入することで、昇温時の空孔水素複合体（水素をトラップした空孔性欠陥）の濃度変化を明らかにした。また、実験的に得られる水素昇温脱離曲線と、水素を放出している格子欠陥との対応を明らかにした。これらは、実験結果と計算結果をより良く対応させた解析を行うにあたり重要な知見である。

(6)塑性変形に伴って発生する空孔の時間発展の解析

転位運動に伴って生成した空孔は、水素原子や他の空孔と結合して空孔水素複合体を形成する。また、拡散して転位や粒界での消滅も生じると考えられる。変形速度、水素濃度、温度によって、空孔性欠陥の存在状態の時間発展は変化すると予想され、これが水素脆化の度合いと関連すると考えられるが、その詳細は明らかにされていない。ここでは、上記の研究(4)(5)でも用いた空孔性欠陥の生成エネルギーや水素との結合エネルギーを、空孔の拡散、消滅、凝集、解離、水素との反応を考慮に入れた反応拡散方程式に導入し、空孔が一定速度で生成する場合の時間発展を求めた。様々な条件下でV1が主要な存在状態であり、その中でも典型的な水素濃度においては水素数が2のものが主であることがわかった。V1の濃度が非常に高くなると、空孔の凝集が急速にはじまり、V10以上のものが多量に生成することがわかった。

(7)転位と水素の相互作用挙動の長時間分子動力学解析

水素が転位の運動挙動に与える影響の解明は、水素脆化の素過程を明らかにする上で非常に重要であるため、これまでも種々の解析が行われてきた。ここでは、非常に長時間の分子動力学シミュレーションによって、広い転位運動速度範囲での相互作用挙動を明らかにした。解析を行った全ての水素濃度と転位運動速度において、転位の運動は水素によって抑制されることがわかった。図1に示す通り、常温では転位運動速度が0.1 m/sよりも速い場合には、転位の運動開始時に水素によって運動が止められ運動開始後は水素が置き去りにされるピンニング挙動が生じ、遅い場合には、水素が転位に引きずられて運動するドラッグ挙動が現れることがわかった。常圧以下の水素ガス環境に対応するような低水素濃度条件でも、0.01 m/sの速さで転位が運動するためには、400 MPaものせん断応力が必要であることがわかった。また、異なる温度と転位運動速度での分子動力学法の結果を用いて、転位運動の活性化エネルギーを応力依存で求め、より低速での転位運動に必要なせん断応力を予測した。その結果、純鉄中で生じるようなせん断応力では、刃状転位の運動速度は、1 mm/s以下となることがわかった。また、転位運動速度がさらに小さくなると、水素の影響は無視できるくらい小さくなることがわかった。

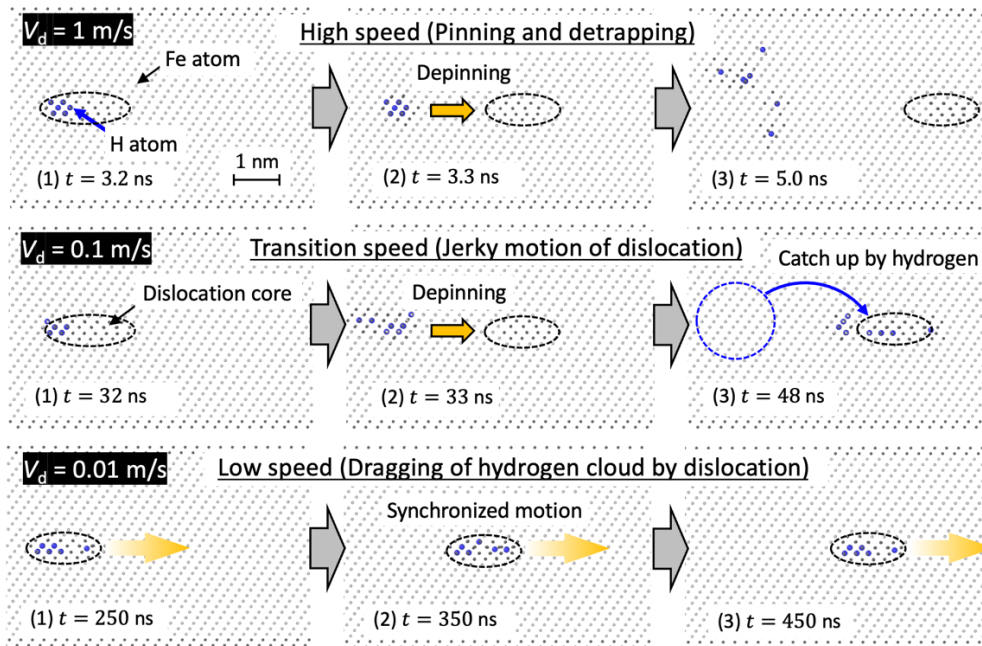


図1 刃状転位と水素の相互作用挙動の転位運動速度依存性：(上) 転位運動速度が速い場合に生じるピンニング挙動，(中央) 遷移速度で生じる Jerky 運動 (転位からの水素の脱離と再トラップが繰り返し生じる)，(下) 転位運動速度が遅い場合に生じるドラッグ挙動 (R. Matsumoto, S.T. Oyibo, M. Vignendran, S. Taketomi, *ISIJ Int.*, 62-11, (2022), pp. 2402-2409.)

(8) 転位と空孔，空孔水素複合体との相互作用の分子動力学解析

水素環境で生成する高濃度の空孔性欠陥が，刃状転位の運動挙動に与える影響を，分子動力学法を用いて明らかにした．解析を行った全て条件で，転位はすべり面状の空孔や複空孔を容易に吸収することがわかった．空孔を吸収した転位の運動に必要なせん断応力は，転位運動速度が速いほど，空孔を吸収していない転位に比べて高くなるが，水素の影響に比べて非常に小さいことがわかった．転位と水素をトラップした単空孔との相互作用では，転位運動速度が 0.1 m/s より速い場合では空孔のみが吸収されて水素は置き去りにされることがわかった．この場合は，相互作用時に一時的にピンニング効果を生じる．一方，転位運動速度が 0.1 m/s 以下になると，空孔と水素の両方が転位に吸収されて一緒に運動することがわかった．この場合は，転位はドラッグ力を受け，運動には高いせん断応力が継続的に必要となる．また，空孔水素複合体を吸収した転位の運動に必要なせん断応力は，トラップしている水素の濃度によってほぼ決定されることがわかった (図2)．

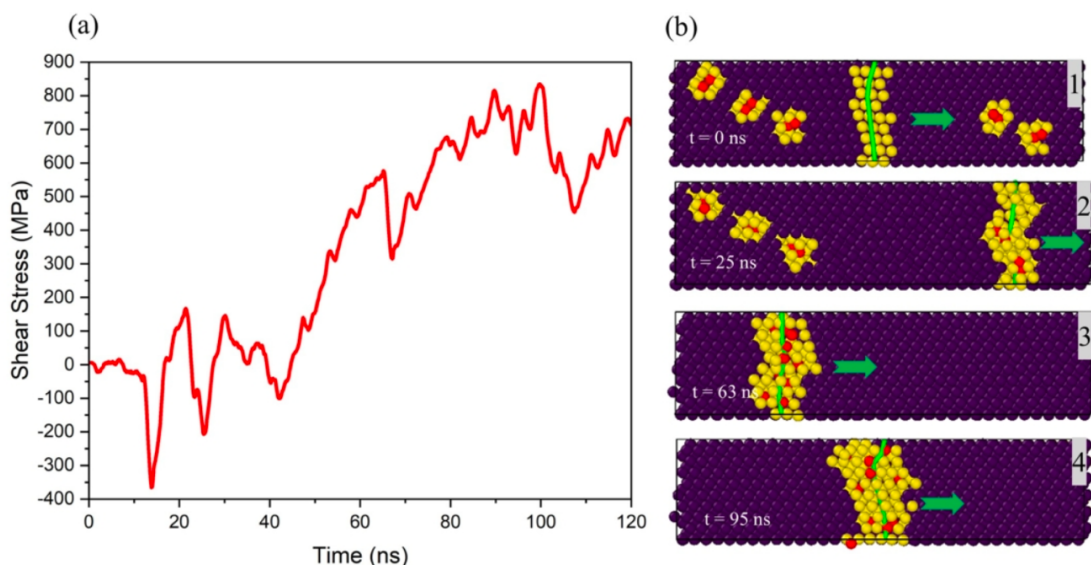


図2 刃状転位と空孔水素複合体との相互作用：(左) 転位運動に必要なせん断応力の時間変化，(右) 転位による空孔性欠陥の吸収挙動 (S.T. Oyibo, R. Matsumoto, *ISIJ Int.*, 64-3, (2024).)

(9) 表面吸着水素が生じる転位運動の解析

上述(7)の長時間の分子動力学法の結果にもあるように，刃状転位のモビリティは水素によって低下するか，影響が非常に小さくなる (低速運動時)．一方で実験的には，透過型電子顕微鏡

(TEM)での観察下で水素を導入すると、種々の材料、種々の転位で転位が運動することが報告されている。この結果に関しては、古くから多くの議論が行われてきているが、水素によって転位運動が促進されることの証拠となっている。ここで、表面で終端するらせん転位が運動すると、材料の表面に1バーガースペクトル分のステップが形成されるため、表面に吸着した水素の影響が現れると考えられた。ここでは、分子動力学法を用いて、水素が薄膜中のらせん転位の運動や配置に与える影響を調べた。その結果、表面ステップの影響は、膜厚が小さくなるほど顕著になること、水素の吸着と脱離によって薄膜表面のステップの見かけのエネルギーが変化するために、転位の安定配置が変化して転位運動が生じることがわかった。

(10)離散転位動力学法による水素存在時のき裂先端近傍での転位挙動の解析

分子動力学法では取り扱える空間スケールや時間スケールが厳しく制限される。ここでは、ミクロな解析に基づき転位運動則(せん断応力-運動速度関係)を決定し、それを用いて転位の運動を解く離散転位動力学法を用いて、き裂先端近傍での多数の転位の挙動を解析した。その結果、負荷応力拡大係数速度がある程度の値までは大きくなればなるほど、また、水素濃度が高いほど、き裂先端近傍で硬化が生じることがわかった。

(11)空孔クラスタとプリズマティック転位ループの間の遷移挙動の解析

水素環境での塑性変形で大量に生成した空孔は、ある濃度に到達すると凝集し始めることが上述(4)(6)の解析でもわかっている。一方、水素環境において、空孔型のプリズマティック転位ループ(PDL)の形成が確認されている。ほとんど拡散を生じない空孔水素複合体と比べ、PDLは後述の(12)の研究で示す通り非常に速く拡散する。ここでは、Nudged Elastic Band(NEB)法を用いて、2次元状の空孔クラスタとPDL間の遷移エネルギーを、負荷応力との関係で明らかにした。19個の空孔で形成される空孔クラスタ(V19)と、それ以上の大きさの空孔クラスタにおいて、PDLへの遷移が容易に生じることを明らかにした。これらのナノサイズの空孔クラスタのPDLへの遷移は転位ループ面に垂直な圧縮応力によって促進され、逆の遷移は引張応力によって促進されることがわかった。この結果は、空孔が凝集していく過程で、V19以上ではPDLへの遷移が生じ、高速な拡散が可能となることを示している。そして、それらのPDLは、引張応力下で空孔クラスタに戻る性質があることから、引張の応力特異場などに高濃度の空孔性欠陥が集積することになる。これによって、粒界三重点での高濃度空孔の蓄積による割れを説明できる可能性がある。上記の、空孔クラスタ-PDL(VC-PDL)遷移を通した空孔輸送は、これまでに全く知られていなかった新たなメカニズムであり、今後、実験的な検証も含めて研究を進展させていく必要性が明らかになった。

(12)プリズマティック転位ループの1次元拡散挙動のループサイズ依存性の解析

VC-PDL遷移によって、空孔クラスタが引張応力部に輸送される新たなメカニズムが明らかになった。ここでは、PDLの応力集中部への移動時間を見積もるために、PDLの1次元拡散の拡散係数、および、それに関連する活性化エネルギーを明らかにした。空孔型のPDLは、ループサイズが小さくなるほど、拡散係数が小さくなり、拡散の活性化エネルギーが大きくなることがわかった。また、この変化は非常に小さいループにおいて顕著になることがわかった。これは、転位ループ内の別の線素からのすべり方向の垂直応力(自己応力)と、非常に小さいサイズでの転位芯構造の変化に起因することがわかった。

(13)デジタル画像相関法を用いた水素存在時の変形挙動の可視化

水素チャージを行った機械構造用炭素鋼S25C、および、S55Cに対して引張試験を行い、その間の試料表面を一定間隔で撮影することで、デジタル画像相関法を適用し、ひずみ分布の時間発展を可視化した。水素が存在すると、変形領域がより小さくなること、また局所的には塑性ひずみ速度が大きくなること、より小さい塑性ひずみでき裂が生成することがわかった。

(14)ナノインデンテーションによる硬さと水素濃度の関係の評価

多結晶の機械構造用炭素鋼S25C中のフェライト相と、単結晶Fe-4wt.%Siに対して、ナノインデンテーション試験を行い、実験的に水素による硬化・軟化現象を調べた。この際、試験片に対して同条件で水素チャージを行った後に、時効時間を変化させて水素濃度を変化させて試験に用いた。両方の材料において、水素濃度が低下するに従い、硬化、軟化、影響なしと、水素の効果が変化することがわかった。上記(7)の通り、刃状転位に対する水素の影響は主に硬化であり、また転位運動速度が遅いほど、その影響は無視できるくらい小さくなる。したがって、軟化に関しては、らせん転位が固溶水素と相互作用した結果であると予想される。

以上の通り、本研究では、空孔の凝集・解離挙動やそれが発生する温度・空孔濃度条件を明らかにし、転位運動への影響を明らかにした。また、水素や空孔が転位運動に与える影響を調べた上で、マクロな脆化挙動との関係を広く議論した。さらに、VC-PDL遷移による粒界部やき裂先端への空孔輸送機構を発見した。本研究の成果は、水素脆化による材料強度予測の高精度化や耐水素鋼の開発に向けた、先駆的かつ重要な知見であり工学的価値は非常に高く、本分野の学術研究に大きな前進をもたらすだけでなく、次なる研究の方向性まで示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 VIJENDRAN Mugilgeethan, MATSUMOTO Ryosuke	4. 巻 225
2. 論文標題 Transition between a nano-sized prismatic dislocation loop and vacancy cluster in α -iron: An atomic scale study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 112195 ~ 112195
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2023.112195	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 該当する
1. 著者名 Oyinbo Sunday Temitope, Matsumoto Ryosuke	4. 巻 64
2. 論文標題 Influence of High Concentration Vacancy-Type Defects on the Mobility of Edge Dislocation in α -Iron: An Atomistic Investigation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 N.A.
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2022-356	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 Matsumoto Ryosuke, Oyinbo Sunday T., Vijendran Mugilgeethan, Taketomi Shinya	4. 巻 62
2. 論文標題 Hydrogen Effect on the Mobility of Edge Dislocation in α -Iron: A Long-Timescale Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 2402 ~ 2409
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2022-311	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 該当する
1. 著者名 Nagase Shuki, Matsumoto Ryosuke	4. 巻 61
2. 論文標題 Volumetric Strain Dependence of Quantum Diffusion of Hydrogen in bcc Iron	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 1294 ~ 1299
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2355/isijinternational.ISIJINT-2020-340	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 Fukuda Kazuhito, Tojo Akihiro, Matsumoto Ryosuke	4. 巻 61
2. 論文標題 Evaluating Solubility and Diffusion Coefficient of Hydrogen in Martensitic Steel Using Computational Mechanics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 1287 ~ 1293
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.Z-M2020824	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 Ebihara Ken-ichi, Sugiyama Yuri, Matsumoto Ryosuke, Takai Kenichi, Suzudo Tomoaki	4. 巻 52
2. 論文標題 Numerical Interpretation of Hydrogen Thermal Desorption Spectra for Iron with Hydrogen-Enhanced Strain-Induced Vacancies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Metallurgical and Materials Transactions A	6. 最初と最後の頁 257 ~ 269
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11661-020-06075-7	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 Liu Pengyu, Matsumoto Ryosuke	4. 巻 216
2. 論文標題 Temperature dependence of vacancy concentration and void growth mechanism in Al with constant hydrogen concentration: A first-principles study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Engineering Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 106508 ~ 106508
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engfracmech.2019.106508	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 Matsumoto Ryosuke, Taketomi Shinya	4. 巻 171
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation of Surface-Adsorbed-Hydrogen-Induced Dislocation Motion in a thin film	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109240 ~ 109240
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2019.109240	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 FUKUDA Kazuhito, TOJO Akihiro, MATSUMOTO Ryosuke	4. 巻 69
2. 論文標題 Evaluating Solubility and Diffusion Coefficient of Hydrogen in Martensitic Steel Using Computational Mechanics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Society of Materials Science, Japan	6. 最初と最後の頁 134 ~ 140
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2472/jsms.69.134	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 NAGASE Shuki, MATSUMOTO Ryosuke	4. 巻 69
2. 論文標題 Evaluation and Modeling of Anisotropic Stress Effect on Hydrogen Diffusion in Bcc Iron	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Society of Materials Science, Japan	6. 最初と最後の頁 119 ~ 125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2472/jsms.69.119	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 Nagase Shuki, Matsumoto Ryosuke	4. 巻 61
2. 論文標題 Evaluation and Modeling of Anisotropic Stress Effect on Hydrogen Diffusion in Bcc Iron	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 1265 ~ 1271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.Z-M2020823	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 -

〔学会発表〕 計22件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 松本龍介
2. 発表標題 純鉄における転位と水素, 空孔および空孔水素複合体の相互作用に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本材料学会「第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム (第7回マルチスケール材料力学シンポジウム)」 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Oyinbo Sunday, 松本龍介
2. 発表標題 Nanometer-scale Hydrogen Embrittlement of a Hydrogen-charged Single Crystal Alpha Iron
3. 学会等名 日本材料学会「第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム（第7回マルチスケール材料力学シンポジウム）」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松本龍介, Sunday OYINBO
2. 発表標題 純鉄中の刃状転位の水素および空孔性欠陥との相互作用挙動の長時間分子動力学解析
3. 学会等名 日本鉄鋼協会「第184回秋季講演大会」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松本龍介
2. 発表標題 純鉄中の空孔性欠陥の存在状態と刃状転位の易動度に関する原子モデル解析
3. 学会等名 日本鉄鋼協会「第184回秋季講演大会」（鉄鋼協会研究プロジェクト最終報告会「高強度鋼の水素脆化における潜伏期から破壊までの機構解明」）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S.T. Oyinbo and R. Matsumoto
2. 発表標題 Atomistic Investigation of Hydrogen Influence on the Mobility of Edge Dislocations in Alpha-Iron
3. 学会等名 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) and 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM-VIII) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Vigendran and R. Matsumoto
2. 発表標題 The degree of freedom associated with the one-dimensional thermal glide of a prismatic dislocation loop in alpha-iron: A molecular dynamics study
3. 学会等名 6th International Conference on Materials and Reliability (ICMR2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 武富紳也
2. 発表標題 純鉄の水素脆化における潜伏期と破壊の素過程解析
3. 学会等名 日本鉄鋼協会「第184回秋季講演大会」(鉄鋼協会研究プロジェクト最終報告会「高強度鋼の水素脆化における潜伏期から破壊までの機構解明」)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Matsumoto, C. Sano, S. Taketomi, and K. Ebihara
2. 発表標題 Hydrogen-Vacancy Complexes in bcc-Fe: Diffusion, Clusterization, Dissociation, and Influence on Dislocation
3. 学会等名 17th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松本龍介
2. 発表標題 純鉄中の水素 - 空孔性欠陥 - 転位間相互作用に関する原子モデル解析
3. 学会等名 日本鉄鋼協会「ISSS 2021ポストシンポジウム」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松本龍介
2. 発表標題 長時間 / 大規模MDによる鉄中の転位 水素 空孔の相互作用解析
3. 学会等名 第11回プラストンに基づく変形現象研究会 ~ 鉄鋼材料の水素脆性 ~ (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 武富紳也
2. 発表標題 水素脆化に関する計算科学を用いた研究
3. 学会等名 日本材料学会 第64期第4回 高温強度部門委員会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 海老原健一, 杉山優里, 高井健一, 松本龍介, 鈴木知明
2. 発表標題 ひずみ誘起空孔を含む純鉄の水素熱脱離スペクトルの数値的考察
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 (第180回秋季講演大会プログラム)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 R. Matsumoto and P. Liu
2. 発表標題 Atomistic Analyses of Thermal Evolution of Voids in Aluminum with Hydrogen
3. 学会等名 KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松本龍介, 武富紳也
2. 発表標題 鉄における水素環境での転位運動挙動の変化 - 水素の直接的寄与と空孔性欠陥の間接的寄与 -
3. 学会等名 日本鉄鋼協会 ISSS(International Symposium on Steel Science)勉強会(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ryosuke Matsumoto and Pengyu Liu
2. 発表標題 Void Growth Conditions in Aluminum with Hydrogen
3. 学会等名 The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM-2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shinya Taketomi, Toshiki Taniguchi, Hiroki Yamamoto, Ryosuke Matsumoto and Seiya Hagihara
2. 発表標題 Influence of Hydrogen on Edge Dislocation Motion in Alpha Iron and the Comparison with Nanoindentation Tests
3. 学会等名 The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM-2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松本龍介・白谷暢浩
2. 発表標題 大域的応経路探索法を用いた空孔性欠陥の拡散挙動解析
3. 学会等名 日本材料学会(第4回マルチスケール材料力学シンポジウム)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福田一仁・東條明裕・松本龍介
2. 発表標題 マルテンサイト鋼におけるモバイル水素効果の解明に向けた水素固溶量と拡散係数の評価
3. 学会等名 日本材料学会（第4回マルチスケール材料力学シンポジウム）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 長瀬周輝・松本龍介
2. 発表標題 bcc鉄における水素拡散挙動の応力依存性評価
3. 学会等名 日本材料学会（第4回マルチスケール材料力学シンポジウム）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐野千畝・松本龍介
2. 発表標題 水素がbcc鉄中の空孔の凝集・解離に及ぼす影響の第一原理的評価
3. 学会等名 日本材料学会（第4回マルチスケール材料力学シンポジウム）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松本龍介
2. 発表標題 薄膜表面に吸着した水素が誘起する転位運動の分子動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会（2019年度年次大会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松本龍介, Liu Pengyu, 武富紳也
2. 発表標題 空孔性欠陥の存在状態と脆化との関係(電子・原子レベルシミュレーションによる検討)
3. 学会等名 日本鉄鋼協会「高強度鋼の水素脆化における潜伏期から破壊までの機構解明」研究PJ・「水素脆化の基本要因と実用課題」フォーラム共催シンポジウム「水素脆化の破壊機構と実用課題」
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

researchmap https://researchmap.jp/read0115219 京都先端科学大学 教員紹介 https://www.kuas.ac.jp/edu-research/profile/ryosuke-matsumoto
--

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	武富 紳也 (Shinya Taketomi) (20608096)	佐賀大学・理工学部・准教授 (17201)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------