

令和 6 年 6 月 20 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19K05069

研究課題名（和文）計算科学手法を用いた空孔型欠陥の定量的評価に基づく水素脆化モデルの検証

研究課題名（英文）Validation of hydrogen embrittlement model based on quantitative evaluation of vacancy-type defects using computational methods

研究代表者

海老原 健一（Ebihara, Kenichi）

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹

研究者番号：40360416

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：水素脆化機構の1つである水素助長ひずみ誘起空孔モデルの検証を目指し、空孔や空孔クラスターと水素の相互作用を分子静力学で評価し、空孔や空孔クラスターの挙動を考慮した水素反応拡散方程式に組み入れ、水素ひずみ誘起空孔を含む純鉄の昇温脱離スペクトルを実験条件に基づいて再現した。この計算において $1.2e-6$ 程度の空孔生成を仮定する必要がある。また、機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションによって、表面エネルギーが最小とである $\{110\}$ 面より $\{100\}$ 面でき裂が起こりやすいとする観測結果の傾向を再現し、その機構を明らかとした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の結果は、今後さらに発展させることで、空孔型欠陥と脆性との相間に関する定量的な議論及び水素助長ひずみ誘起空孔モデルの定量的評価を可能とし、水素誘起損傷（主に空孔型欠陥）を回復させる最適な焼鈍条件の確立や水素貯蔵タンクなどの水素社会のインフラに必要な耐水素脆化材料の開発に貢献可能と考える。

研究成果の概要（英文）：To validate the hydrogen-enhanced strain-induced vacancy model as one of the mechanisms of hydrogen embrittlement, the interaction of hydrogen with vacancies and vacancy clusters was evaluated by molecular statics, incorporated into the hydrogen reaction-diffusion equation considering the behavior of vacancies and vacancy clusters, and the thermal desorption spectrum of hydrogen from pure iron containing hydrogen-enhanced strain-induced vacancies was simulated under the experimental conditions. In this calculation, assuming a vacancy formation of about $1.2e-6$ was necessary. Molecular dynamics simulations using a machine-learning potential reproduced the experimental trend that $\{100\}$ plane cracks are more likely to occur than $\{110\}$ plane cracks, which have the lowest surface energy, and clarified the mechanism.

研究分野：計算材料科学

キーワード：水素脆化 水素助長ひずみ誘起空孔モデル 昇温脱離スペクトル き裂進展挙動 反応拡散方程式 分子動力学 機械学習ポテンシャル 空孔型欠陥

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

鉄鋼材料は、近年、軽量化や経済性のため高強度化されているが、それにより使用中に突然割れる遅れ破壊が起こることがあり、これは水素脆化が原因と考えられている。よって、耐水素脆化鋼材の開発には脆化機構の理解が欠かせない。水素脆化機構として水素とひずみにより生成された空孔や空孔クラスターの空孔型欠陥が脆化の要因とする水素助長ひずみ誘起空孔 (HESIV) モデルが提案されている[1,2]。このモデルは、脆化の直接原因が、水素ではなく空孔型欠陥であるとしている(図1)。このことは、水素添加とともにひずみを加えた鋼材試料において、空孔型欠陥の生成が昇温脱離法や陽電子消滅法によって確認されていること、空孔型欠陥の生成に用いた水素を等温時効で抜き去った後の試料では延性が低下し(図2(a))、さらに空孔型欠陥も除去した場合(図2(b))は、空孔型欠陥が初めからない場(図2(c))と同程度まで延性が回復する実験結果に基づいている[3]。しかし、等温時効後に分布する空孔型欠陥が、どのように延性低下やき裂進展を引き起こすかは、空孔型欠陥の定量的評価がないため定量的な議論ができず、HESIV モデルは未だ定性的な推論を出ない。したがって、実条件での空孔型欠陥の定量的評価を行い、空孔生成から脆化割れにいたる全過程が実条件下で実現するかどうかを明確にすることが必要である。

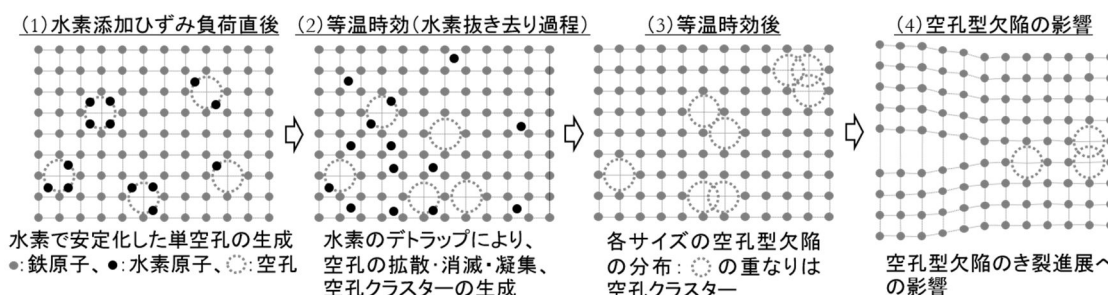


図1 HESIV モデルによる水素脆化の概念図

2. 研究の目的

本研究では、原子レベルの計算で各サイズの空孔クラスターの水素トラップ特性(水素をトラップするエネルギー及びトラップできる水素量)を詳細に評価し、その結果を取入れた数値シミュレーションにより実験条件での空孔型欠陥のサイズ分布を評価する。さらに、空孔型欠陥のき裂への影響を数値シミュレーションで評価し、脆化を生じる空孔型欠陥のサイズを解明する。これらの結果からHESIV モデルによるき裂進展の実現可能性を明らかにする。

3. 研究の方法

- (1)分子静力学を用い、空孔数2個から9個程度までの空孔クラスターの安定形状を同定し、各サイズの最安定空孔クラスターに対して、それぞれがトラップできる水素原子の個数(水素トラップサイト数)及び水素原子の個数に応じた水素トラップエネルギーを評価した。また、空孔のトラップできる水素の数及びトラップエネルギーを評価した。
- (2)空孔型欠陥の拡散、凝集、解離、消滅を考慮した水素の反応拡散方程式に基づく昇温脱離スペクトルのシミュレーションコードに(1)に結果を組み入れ、そのコードを用い水素助長ひずみ誘起空孔を含む純鉄試料のスペクトルの再現を行った。この時、ひずみ誘起空孔生成の助長に使用した水素を脱ガスした後、トレーサー水素を添加した試料のスペクトルを対象とした。
- (3)水素助長ひずみ誘起空孔の生成に用いた水素を脱ガスせずに直接昇温脱離測定して得た実験スペクトルに(2)のコードを適用し再現を試みた。
- (4)分子動力学シミュレーションによるき裂の発生、進展への空孔や水素の影響評価の可能性を検討した。

4. 研究成果

- (1)Wenら[4]が提案したEAMポテンシャルを用いた分子静力学計算によって、空孔(V_1)及び空孔数9個までの空孔クラスター($V_2 \sim V_9$)の水素トラップサイト数と、水素のトラップエネルギーを表1のように評価した[5]。

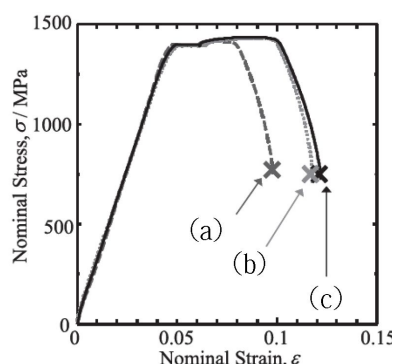


図2 水素助長ひずみ誘起空孔による延性低下とその回復[3]

表 1 空孔及び空孔クラスターの水素トラップエネルギー (kJ/mol) [5]

水素数	V ₁	V ₂	V ₃	V ₄	V ₅	V ₆	V ₇	V ₈	V ₉
1	53.3	56.9	54.9	55.3	55.4	55.4	55.9	55.9	56.8
2	50.0	53.0	54.5	55.4	55.4	55.4	55.7	55.9	55.9
3	32.5	52.7	54.3	55.1	55.1	55.4	55.7	55.9	55.9
4	27.5	36.5	50.9	55.1	55.1	55.4	55.4	55.9	55.9
5	17.6	37.8	50.1	50.8	54.8	54.9	55.1	55.4	55.5
6	10.6	38.6	44.9	50.9	51.1	54.9	55.1	55.4	55.4
7		28.1	34.8	50.3	51.2	52.4	54.9	55.2	55.5
8		28.4	34.4	50.4	50.6	52.5	51.5	55.2	55.2
9		19.1	33.4	30.9	50.0	50.1	51.2	51.5	55.1
10		18.2	26.0	31.1	37.0	50.1	47.0	51.6	52.4
11		10.1	24.3	30.5	38.0	37.1	47.4	50.4	51.6
12			17.9	27.6	35.5	37.1	51.1	50.7	51.4
13			13.1	23.9	29.8	40.0	42.5	45.9	51.1
14				18.2	24.5	34.6	36.8	45.7	51.1
15				17.6	26.6	30.0	34.5	36.6	50.2
16				13.8	21.5	29.4	32.9	36.0	37.4
17					20.6	26.4	32.9	35.5	38.8
18					14.8	26.3	30.9	34.1	35.8
19					10.6	16.5	28.3	33.6	33.1
20						14.8	25.5	29	33.3
21						12.7	21.3	26.7	30.9
22							17.7	26.4	31.4
23							15.9	24.3	29.4
24							13.1	22.4	25.8
25								16.9	22.6
26								12.6	22.2
27									20.1
28									16.0
29									13.4

(2) まず、水素助長ひずみ誘起空孔を含む場合と含まない場合の実験昇温脱離スペクトルを得るために、純鉄に水素を添加した試験片と添加していない試験片に対して、同様の引張試験でひずみを与えた。この時、水素を添加した試験片には、引張試験中も水素を添加し続け、引張試験後には、303Kで1時間脱水素処理をした。水素を添加しない試験片に対しては、同温度で同時間焼鈍処理をした。その後、両方の試験片から厚さ0.3mmの昇温脱離測定用の試験片を作成し、それぞれにトレーサー水素を添加し、低温昇温脱離装置で昇温脱離スペクトルを得た(図4(a))。この時、水素を添加した試験片をH+strain試験片とし、水素を添加していない試験片をStrain試験片とした。図では、どちらの場合も転位に起因する281K付近の大きな脱離ピークの高温側裾に、肩形状の脱離ピークが現れているが、H+strainの方が、Strainより高い。このことから、この肩形状の脱離ピークが空孔や空孔クラスターに起因する脱離ピークと考えられる。

上記実験手順において、引張試験中に空孔が生成し、脱水素過程や昇温脱離測定用試験片の生成過程において、空孔が拡散凝集していると考えられる。よって、数値シミュレーションでは、まず、引張試験直後からの過程における水素有無での空孔の挙動を計算し、その結果に対してトレーサー水素添加シミュレーションを実施し、昇温脱離過程前の空孔及び空孔クラスター分布、

トラップ水素量分布を得た。その後、それらを初期状態とし、昇温脱離シミュレーションを実施した。図 5 に、昇温脱離シミュレーション前の空孔及び空孔クラスターのサイズ分布と欠陥にトラップされている水素量を示す。また、図 4(b)に数値シミュレーションで得た昇温脱離スペクトルを示す。図 4(b)では、空孔や空孔クラスターに帰属する肩形状の脱離ピークにスパイクが見られるが、計算スペクトルが実験スペクトルをほぼ再現していることが分かる。このスパイクについては、 V_2 、 V_3 の速い拡散による急激な消滅に起因していた。また、H+Strainの実験スペクトルを再現するために設定した初期空孔量は 1.2×10^6 であった[5]。

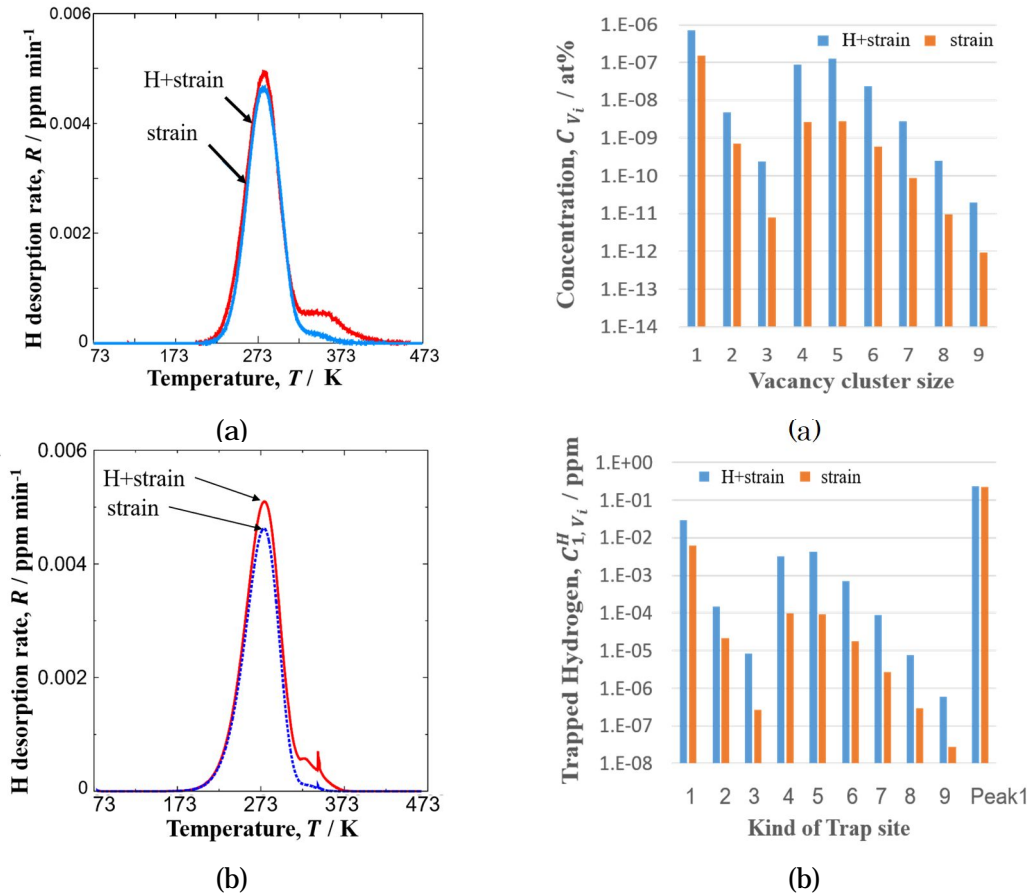


図 4 Strain 試験片と H+Strain 試験片の昇温脱離スペクトル[5]：(a)実験結果、(b)計算結果

図 5 昇温脱離シミュレーション前の(a)空孔及び空孔クラスターのサイズ分布、及び(b)トラップされた水素量[5]：水素量には、転位にトラップされた水素を含む

(3) 水素助長ひずみ誘起空孔を生成するために添加した水素を昇温脱離測定したスペクトルについて、(2)と同様の計算モデルやパラメータを用いてシミュレーションを試みたところ、適切な再現ができなかった。これについては、今ところ原因を同定できず、計算モデルや設定条件、計算パラメータ、実験データに対する推定などについて根本的な見直しが必要と考えられる。

(4) き裂発生や進展への水素や空孔のミクロレベルでの影響を調べるため、LAMMPS コード[6]を用いた分子動力学シミュレーションによる α 鉄におけるき裂進展挙動の妥当性を評価した。まず、Ackland 等[7]の EAM ポテンシャルを用いて {100} 上及び {110} 上のコイン状き裂の進展を計算したところ、{100} 面上のき裂では、転位の生成が少なく進展が起こりやすく、{110}

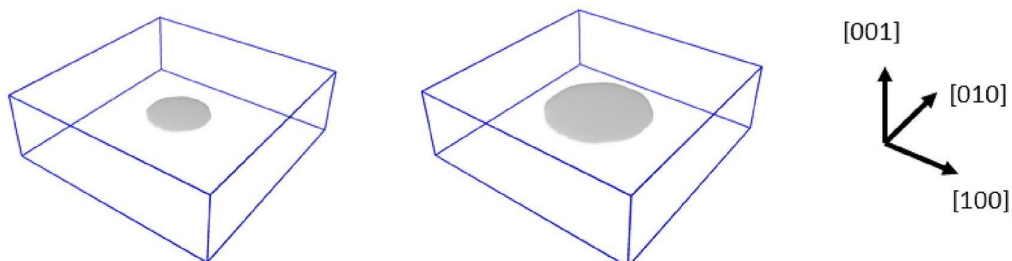


図 6 {100}上のコイン状き裂の挙動[10]：転位が発生せず脆的に進展

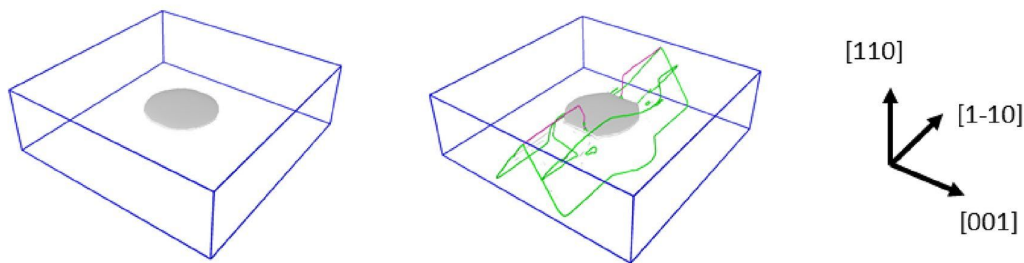


図 7 {110}上のコイン状き裂の挙動[10]：転位発生によりき裂は進展せず

面上のき裂では、その先端より転位が発生して進展しない結果となった。これは、実験で観測されるき裂進展の傾向を再現している[8]。さらに、EAM ポテンシャルより転位の移動に関連する一般化積層欠陥エネルギーを精度よく再現できる機械学習ポテンシャル[9]を用いた計算でも同様の結果が得られた(図 6, 7)。この時の考察では、直線状のき裂は、{110}と{100}のどちらの面でも脆性的であることから、{110}面でのき裂進展と{110}面での転位発生の違いは、き裂形状がコイン状であることに起因することが明らかとなった[10]。また、転位の発生は、き裂先端の周上に現れる応力の段差によることも明らかとなった。次に、同様の計算をいくつかの種類の粒界上のき裂進展に適用したところ、有限温度において、き裂先端領域に活性化された原子集団が現れることが分かった(図 8)[11]。これは、き裂進展に伴う塑性の前駆現象の可能性と考えられる。以上の結果から、機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションから、き裂進展現象に対する原子レベルの機構を詳細に考察することが可能であることが明らかとなった。この知見をもとに、今後は、機械学習ポテンシャル分子動力学シミュレーションを用いて、き裂の進展や発生への空孔や水素の影響の詳細な考察を進めていきたいと考える。

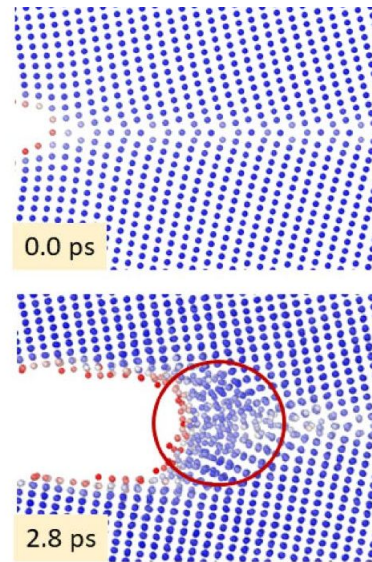


図 8 粒界き裂先端の原子集団の活性化 ($\Sigma 27(1-15)$, 300K)[11]

参考文献

- [1] M.Nagumo, et al., "Hydrogen Thermal Desorption Relevant to Delayed-Fracture Susceptibility of High-Strength Steels", *Metallurgical and Materials Transactions A* 32, 2001, 339-347.
- [2] M.Nagumo, "Hydrogen related failure of steels – a new aspect", *Materials Science and Technology* 20, 2004, 940-950.
- [3] T.Doshida, et al., "Enhanced Lattice Defect Formation Associated with Hydrogen and Hydrogen Embrittlement under Elastic Stress of a Tempered Martensitic Steel", *ISIJ International* 52, 2012, 198-207.
- [4] M.Wen, et al., "Embedded-atom-method functions for the body-centered-cubic iron and hydrogen", *Journal of Materials Research* 16, 2001, 3496-3502.
- [5] K. Ebihara, et al., "Numerical Interpretation of Hydrogen Thermal Desorption Spectra for Iron with Hydrogen-Enhanced Strain-Induced Vacancies", *Metallurgical and Materials Transactions A*, 52A, 2021, 257-269.
- [6] S. Plimpton et al., "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics", *Journal of Computational Physics* 117, 1995, 1-19.
- [7] G. J. Ackland, et al., "Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron", *Journal of Physics: Condensed Matter* 16, 2004, S2629-S2642.
- [8] T. Suzudo, et al. "Brittle-fracture simulations of curved cleavage cracks in α -iron: A molecular dynamics study", *AIP Advances* 10, 2020, 115209-1-8.
- [9] H.Mori and T. Ozaki, "Neural network atomic potential to investigate the dislocation dynamics in bcc iron", *Physical Review Materials* 4, 2020, 040601-1-5
- [10] T. Suzudo, et al., "Cleavages along {110} in bcc iron emit dislocations from the curved crack fronts", *scientific reports* 12, 2022, 19701-1-10.
- [11] T. Suzudo, et al. "Emergence of crack tip plasticity in semi-brittle α -Fe", *Journal of Applied Physics* 135, 2024, 075102-1-7.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Suzudo Tomoaki, Ebihara Ken-ichi, Tsuru Tomohito, Mori Hideki	4. 巻 12
2. 論文標題 Cleavages along {110} in bcc iron emit dislocations from the curved crack fronts	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 19701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-24357-5	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 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 EBIHARA Ken-ichi	4. 巻 71
2. 論文標題 Evaluation and Analysis Method of Hydrogen Embrittlement	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Society of Materials Science, Japan	6. 最初と最後の頁 481 ~ 487
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2472/jsms.71.481	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 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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Suzudo T., Ebihara K., Tsuru T.	4. 巻 10
2. 論文標題 Brittle-fracture simulations of curved cleavage cracks in α -iron: A molecular dynamics study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 115209 ~ 115209
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0026659	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 Sugiyama Yuri, Takai Kenichi	4. 巻 208
2. 論文標題 Quantities and distribution of strain-induced vacancies and dislocations enhanced by hydrogen in iron	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 116663 ~ 116663
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.116663	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 Ebihara Ken-ichi, Sekine Daiki, Sakiyama Yuji, Takahashi Jun, Takai Kenichi, Omura Tomohiko	4. 巻 48
2. 論文標題 Numerical interpretation of thermal desorption spectra of hydrogen from high-carbon ferrite-austenite dual-phase steel	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Hydrogen Energy	6. 最初と最後の頁 30949 ~ 30962
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijhydene.2023.04.205	査読の有無 無
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 Suzudo T., Ebihara K., Tsuru T., Mori H.	4. 巻 135
2. 論文標題 Emergence of crack tip plasticity in semi-brittle α -Fe	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 075102-1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0178940	査読の有無 無
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19件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 5件）

1. 発表者名 K. Ebihara, Y. Sugiyama, R. Matsumoto, K. Takai, T. Suzudo
2. 発表標題 Simulation of hydrogen thermal desorption spectra for iron with strain-Induced vacancy-type defects included
3. 学会等名 4th International Conference on Metals Hydrogen (Steely Hydrogen 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S.T. Oyinbo, 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 15 th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) and 8 th 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, R. Matsumoto
2. 発表標題 The degree of freedom associated with the one-dimensional thermal glide of a prismatic dislocation loop in α -iron: A molecular dynamics study
3. 学会等名 International Conference on Materials and Reliability (ICMR2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木 知明, 海老原 健一, 都留 智仁, 森 英喜
2. 発表標題 BCC鉄き裂先端における転位 射出のシミュレーション解析
3. 学会等名 日本金属学会2023年春季(第172回)講演大会
4. 発表年 2023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 佐藤礼、高井健一
2. 発表標題 純鉄の水素起因粒界破壊に及ぼす凍結空孔の影響
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第182回秋季講演大会
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 鈴木知明、海老原健一、都留智仁、森英喜
2. 発表標題 機械学習ポテンシャルを用いた BCC鉄における破壊の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季(第170回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 海老原健一、杉山優理、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
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉山優理、高井健一
2. 発表標題 水素有無でひずみ付与した純鉄における昇温脱離ピークと変形組織の比較
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第180回秋季講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木知明、海老原健一、都留智仁
2. 発表標題 Cleavage and dislocation emissions in BCC iron; A Molecular dynamics study
3. 学会等名 GIMRT Joint International Symposium on Radiation Effects in Materials and Actinide Science (GIMRT-REMAS 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020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 鈴木知明、海老原健一、都留智仁
2. 発表標題 BCC鉄におけるへき開面と転位の射出; 分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2021年春季(第168回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤礼、高井健一
2. 発表標題 低温昇温脱離法による純鉄中の水素と結晶粒界の相互作用解析
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第181回春季講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉山優理、高井健一
2. 発表標題 純鉄中の水素により形成助長された格子欠陥のひずみ依存性の検討
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第178回秋季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松本龍介・白谷暢浩
2. 発表標題 大域的反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 松本龍介、武富紳也、佐野千畝
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 材料の組織と特性部会 「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

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 鈴土知明、海老原健一、都留智仁
2. 発表標題 BCC鉄におけるき裂進展と転位の射出 - 分子動力学シミュレーション -
3. 学会等名 日本金属学会2020年春季第166回講演大会
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	鈴土 知明 (Suzudo Tomoaki) (60414538)	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・再雇用職員 (82110)	

6. 研究組織（つづき）

	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	松本 龍介 (Matsumoto Ryosuke) (80363414)	京都先端科学大学・工学部・准教授 (34303)	

	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 協 力 者	高井 健一 (Takai Kenichi)	上智大学 (32621)	

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