

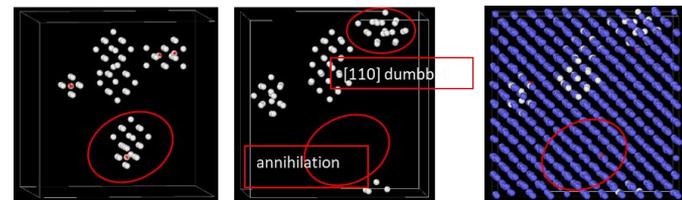
鉄中欠陥および水素挙動の 大規模原子シミュレーション

大阪大学 基礎工学研究科 Fanshun Meng, 尾方成信

目的 金属bcc鉄中の格子欠陥の挙動および、その鉄中水素依存性を原子レベルで明らかにする。

内容 大規模分子動力学シミュレーションによりbcc鉄に点欠陥（vacancyおよびinterstitial）を導入した原子モデルを作成し、作成した原子モデルに対して水素原子を導入した場合と導入しない場合とでこれらの点欠陥の拡散挙動がどのように変化するかを解析した。

結果 水素の有無にかかわらずinterstitialの拡散はvacancyに比べて速いことが確かめられた。また、水素の有無によるこれらの拡散速度の変化については、温度や水素濃度によって水素の影響が変化することがわかったが、その変化のばらつきが大きく、系統的な結果を得るためには今後さらに慎重な解析が必要であることがわかった。



利用した計算機 OCTOPUS

図：分子動力学シミュレーションにおけるvacancy拡散とinterstitialの拡散(水素導入時)。