

【研究シーズテーマ】

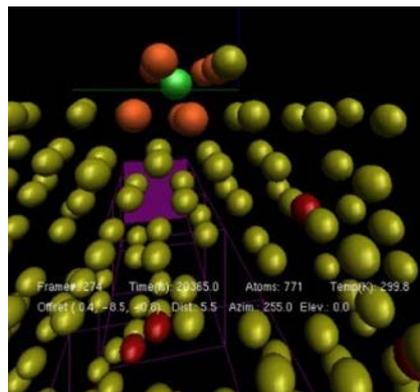
# 分子動力学法に基づく 結晶格子欠陥の計算機シミュレーション

 工学部 知能機械工学科 教授 **佐藤 裕樹**

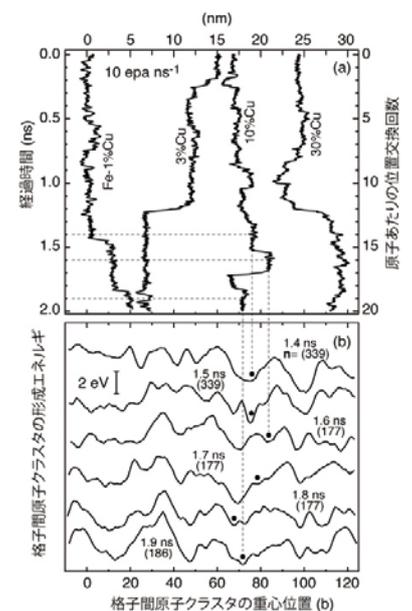
**Keyword**
**金属材料／格子欠陥／照射損傷／分子動力学シミュレーション**


## 【研究シーズの概要】

分子動力学法に基づく計算機シミュレーションを利用して、高エネルギー粒子の照射にさらされる材料の劣化(照射損傷)のメカニズムを研究しています。最新の透過電子顕微鏡でも材料を構成する原子一つひとつを直視することはできません。一方、計算機シミュレーションでは個々の原子の動きを追跡することが可能ですが、結果の信頼性は選択したモデルの妥当性に依存することに注意しなくてはなりません。



格子間原子クラスタの  
分子動力学計算の例



鉄-銅合金中の格子間原子クラスタの  
高速一次元拡散の分子動力学計算例

## 【新規性・独自性・従来研究(技術)と比べての優位性】

- 実験と計算機シミュレーションを相補的に組み合わせています。
- 高濃度合金中の格子間原子クラスタの高速一次元拡散のモデル化が可能になりました。

## 【産業界での展開・用途】

- 次世代の原子炉や、将来の核融合炉の材料開発のための基盤的知識となります。
- 現行の原子炉材料の組織変化や強度の低下を、より正確に予測できるようになります。

連絡・問合せ先

広島工業大学 研究支援機構 〒731-5193 広島市佐伯区三宅2-1-1  
 (事務窓口: 研究・地域連携支援部) TEL: 082-921-4222 FAX: 082-921-8963  
 URL <https://www.it-hiroshima.ac.jp/for-research/office/> E-mail [kyo-kiko@it-hiroshima.ac.jp](mailto:kyo-kiko@it-hiroshima.ac.jp)