α 鉄における $\{112\} \langle 111 \rangle$ 刃状転位芯近傍の水素占有位置に関する原子モデルを用いた研究[†]

武 富 紳 也* 松 本 龍 介* 宮 崎 則 幸*

Atomistic Study of Hydrogen Occupation Sites around $\{112\} \langle 111 \rangle$ Edge Dislocation in Alpha Iron

by

Shinya TAKETOMI*, Ryosuke MATSUMOTO* and Noriyuki MIYAZAKI*

Despite the extensive investigations and the recent remarkable progress in experimental equipments, the effects of hydrogen on materials properties have not been sufficiently clarified yet. The difficulties to reveal the essential effects of hydrogen are mainly attributed to the characteristics of hydrogen such as ppm order extremely low concentration and high diffusivity in metals. In this study, we performed molecular statics (MS) analyses of hydrogen occupation sites around a $\{112\} \langle 111 \rangle$ edge dislocation in alpha iron. The stable hydrogen occupation region, where the hydrogen trap energy is strong, is not consistent with the result obtained by continuum theory of elasticity that hydrogen concentrate at the high hydrostatic stress region. According to the MS calculations, hydrogen trap energy has the different characteristics depending on the occupation sites under shear stress as well as hydrostatic stress. Furthermore, this results suggest that the hydrogen concentration on the slip plane around a $\{112\} \langle 111 \rangle$ dislocation can be extremely high.

Key words : Hydrogen embrittlement, Hydrogen diffusion, Molecular dynamics, Edge dislocation, Alpha iron

1 緒 言

近年、地球環境の保護や石油代替エネルギーの確保に多くの関心が集まり、次世代エネルギーの研究開発が盛んに行われている。そのような中、次世代クリーンエネルギーの候補の一つとして水素が注目され、水素エネルギー社会構想が支持を集めている。¹⁾水素エネルギー社会の安全な維持には水素を安全に製造し輸送、保存する技術の確立が急務となる。しかしながら水素が鉄鋼材料などの力学特性を劣化させる、いわゆる水素ぜい化現象は広く知られているにも関わらず、その機構は未だ明らかにされていない。マクロな材料強度に現れる水素の影響として、例えば延性が著しく低下することが知られている。²⁾これまで、金属の塑性変形に着目した水素ぜい化機構として、転位の運動が水素によって助長され塑性変形の局在化を生じる HELP (Hydrogen Enhanced Localized Plasticity) 機構³⁾などが提案されており、数多くの議論や研究が行われている。^{4)~6)}しかしながら転位芯近傍の水素存在状態や水素の分布について詳細な解析は十分には行われておらず、連続体力学から予測される静水圧分布に従った分布や様々な仮定に基づく水素分布がこれまでの研究では用いられている。^{7), 8)}実験による金属中の水素の測定には、SIMS (2次イオン質量分析法)、HMPT (銀マイクロプリント法)、昇温脱離分析などの技術が用いられており、特異応力場における水素分布の計測も試みられている。⁹⁾しかしながら、水素の速い拡散速度や、極めて低い濃度などに起因して、実験的手法によって存

在位置を特定することに多くの困難を強いられている。⁹⁾特に、転位などの格子欠陥やき裂先端近傍などの特異応力場における局所水素濃度の測定、および水素存在位置の特定は未だなされていない。転位やき裂近傍の水素の分布や、濃度を把握することは、水素が材料強度に及ぼす影響の素過程の解明、ひいては水素ぜい化現象の定量的予測のために非常に重要となる。しかしながら前述した理由から、現状では水素の存在状態は計算によって解析する方法が唯一の有効な手段である。よって本論文では刃状転位近傍の水素の存在状態について原子モデルに基づいて検討する。解析対象として α 鉄を用いる。これは炭素鋼等の安価な材料を用いて水素関連構造体の健全性を維持することが課題の一つとされていることと、純鉄における水素ぜい化の報告¹⁰⁾がなされているためである。

2 解析方法

2・1 解析モデル

金属中の水素によって転位の刃状成分が安定化し、らせん成分が減少するという報告がなされている。¹¹⁾さらに、連続体を仮定した弾性論によれば、転位の芯構造を無視すると、刃状成分のみが静水圧応力を有するために固溶原子（ここでは水素）と力学的相互作用をもつ。一方、転位芯構造まで考慮に入れると、らせん転位も水素と力学的相互作用をもち得るが、刃状転位との相互作用に比べて小さいと考えられる。^{12), 13)}したがって本論文では刃状転位を対象とした解析を行う。一般に bcc 構造の主すべり系には $\{110\} \langle 111 \rangle$ と $\{112\} \langle 111 \rangle$ とが存在する。こ

[†] 原稿受理 平成 19 年 12 月 10 日 Received Dec. 10, 2007 ©2008 The Society of Materials Science, Japan

* 正 会 員 京都大学大学院工学研究科 〒606-8501 京都市左京区吉田本町, Dept. of Mech. Eng. and Sci., Kyoto Univ., Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501

ここで水素は純鉄の格子間において、後述するようにひずみが小さい時には四面体位置 (T site) を占有する。¹⁴⁾ また、幾何学的に $\{112\}$ すべり面では単一面上に高密度に T site が存在するため、転位の運動と相互作用を持ちやすいと考えられる。¹⁵⁾ さらに Bastien らは水素環境下では $\{112\}$ 面にひずみが生じることを実験的に示し、 $\{112\}$ 面が活動すべり面にならない結晶是水素ぜい化に鈍感であることを示している。^{15), 16)} 従って、本解析では $\{112\}$ 面上に存在する刃状転位を解析対象とする。

本解析に用いる解析モデルを Fig. 1 に示す。すべり面が xz 平面に、すべり方向が x 軸方向となるように配置した原子モデルから図に示すように原子列を一系列抜き取り、共役こう配法を用いて構造緩和を行い、刃状転位を導入する。この際、原子面を抜き取った面の隙間をふさぐために、まず、原子の y 軸方向の運動を固定し、 x 軸方向に圧縮を加えて構造緩和を行った。その後、系に作用する x 軸方向の応力が零になるよう計算セルと原子位置の緩和を行った。解析モデルのサイズは、 x, y, z 軸方向寸法がそれぞれ 11.05nm, 4.91nm, 1.01nm であり、鉄原子数が 8054 個である。ここでは、 x, z 軸方向に周期境界条件を適用する。

2・2 原子間ポテンシャル

原子モデルを用いた解析の結果は原子間ポテンシャルに強く依存しており、その選定は非常に重要である。鉄-水素系を記述する原子間ポテンシャルとして、我々が調査した範囲では Ruda らによる EAM ポテンシャル¹⁷⁾ Hu らによる Morse 型ポテンシャル¹⁸⁾そして Wen らによる EAM ポテンシャル¹⁹⁾が現在までに提案されている。本解析では Wen らによって提案された EAM ポテンシャルを採用する。本ポテンシャルでは Fe-Fe 間においては Johnson と Oh による EAM ポテンシャル²⁰⁾を、Fe-H 間では Morse 型の関数を、H-H 間では Baskes らによって開発された EAM ポテンシャル²¹⁾が用いられている。本ポテンシャルは、水素拡散の活性化エネルギーや溶解熱、弾性定数などの物性値の再現性が高く、計算負荷が低いことから、現状ではここでの問題に対して最も有効なポテンシャルであると言える。²²⁾

Fig. 1 Simulation model.

2・3 初期水素の導入位置

bcc 格子中の水素の占有位置として Fig. 2 に示すように四面体位置 (T site) と八面体位置 (O site) の 2 種類が存在する。純鉄 (α 鉄) 完全結晶においては T site が水素の最安定占有位置であるとされている。¹⁴⁾ しかしながら、bcc 金属に一軸引張りを負荷した場合、T site と O site のエネルギーが逆転し、O site が安定占有位置となることが示されている。²³⁾ 本解析では転位近傍の結晶構造が大きく乱れた領域の解析を行うため、T site および O site に配位した水素を考慮する必要がある。ここで Fig. 2 に示すように、bcc 完全格子中の T site は Voroni 多面体の頂点に対応し、多面体の四角形の面中央に O site が位置する。これらを利用して格子がひずんだ場所での T site および O site に相当する場所を特定する。なお、結晶が大きくひずんだ場合には、これらは厳密には T site や O site ではなく、以下では便宜的に T site および O site と呼ぶことにする。

3 解析結果

3・1 緩和計算後の原子構造

Fig. 3 に緩和計算によって得られた原子構造の転位まわりの拡大図を示す。ここでは、CNA (Common Neighbor Analysis)²⁴⁾を用いて個々の原子まわりの結晶構造を判定し、bcc 構造を有すると判定された原子を白色で表し、それ以外を黒色で表している。FS ポテンシャル²⁵⁾による α 鉄を対象とした分子動力学解析によると、 $\{112\} \langle 111 \rangle$ 刃状転位の芯構造は約 $4b$ (b はパーガースベクトルの大きさ) 程度の広がりを持つことが示されている。²⁶⁾ ここで導入した刃状転位においても、一原子面抜き取った初期転位芯存在位置から x 軸の負の方向に約 $4b$ にわたって結晶構造が乱れた領域が存在するのが認められる。以下、この結晶構造が乱れた範囲を転位芯と呼ぶ。

3・2 転位芯近傍の水素トラップエネルギーの分布

得られた刃状転位芯の近傍で、Voronoi 分割によって導出された T site および O site に 1 個ずつ順番に水素を

Fig. 2 Hydrogen occupation sites in bcc lattice and Voronoi polyhedron of bcc lattice.

Fig. 3 Atomic structure around an edge dislocation ; white atoms : bcc structure, black atoms : non bcc structures.

導入し、共役こう配法を用いて鉄原子と水素原子の位置をエネルギーが最安定になるよう構造緩和した。この時のトラップエネルギー ΔE_d の分布を Fig. 4 に示す。図示している領域は Fig. 3 と同じである。ここで、水素占有位置 $\mathbf{r}$ におけるトラップエネルギー $\Delta E_d(\mathbf{r})$ の計算式は次の通りである。

$$\Delta E_d(\mathbf{r}) = -\left[\Phi_H(\mathbf{r}) - \left\{\Phi + \frac{1}{2}\Phi_{H_2} + H^T\right\}\right] \quad (1)$$

ここで $\Phi_H(\mathbf{r})$ は、位置 $\mathbf{r}$ のトラップサイトに水素を含む系の全ポテンシャルエネルギー、 Φ は水素を含まない系の全ポテンシャルエネルギー、 Φ_{H_2} は水素分子のポテンシャルエネルギー、 H^T は T site への溶解熱であり、 0.045aJ ($= 0.45 \times 10^{-19}\text{J}$) である。 $\Delta E_d(\mathbf{r})$ は水素が転位芯から離れるにしたがって零に漸近する。図中には初期転位芯位置 (L) と Fig. 3 から見積もった転位芯の範囲 (黒太点線) を合わせて示している。図より、最もトラップエネルギーが強い領域は転位芯に沿うように分布することがわかる。転位芯でのトラップエネルギーは 0.07aJ 程度であり、実験値 (0.032aJ)²⁷⁾ とほぼ一致する。また、刃状転位の引張側 (Fig. 4 の領域 A) においてもトラップエネルギーは強くなる。一方、すべり面上にもトラップエネルギーが強くなるサイトが存在する (Fig. 4 の領域 B)。以後簡便のためこの領域を転位芯の左側と呼ぶ。よりわかりやすく示すために、Fig. 5 に転位が存在するすべり面の上下 0.5nm の領域 (Fig. 4 の領域 C) 内でのトラップエネルギーの分布を示す。約 0.02aJ 程度の強いトラップエネルギーを持つサイトが、転位芯の左側に約 2nm の範囲にわたって分布していることがわかる。

このように、高静水圧応力領域 (Fig. 4 の領域 A) で現れるトラップエネルギーと同程度のトラップエネルギーが転位芯左側で見られることは、水素による格子膨張と転位によって発生する静水圧応力が相互作用を生じるとする弾性論からの導出は困難であり、さらには、転位の存在するすべり面上に大量の水素が分布する可能性を示唆している。また、転位のトラップエネルギーの分布にしま模様が生じている様子が確認できる (Fig. 4 の矢印)。これらのしま模様間におけるエネルギー差は、無ひずみ状態での T site と O site 間のエネルギー差 (0.0058aJ) よりも遙かに大きい。また、Fig. 4 において転位芯の左右で緩和後の水素の占有位置に違いが見られることから、初めに水素を導入した位置から異なるサイトに水素が移

Fig. 4 Distribution of trap-energy increment at each site of hydrogen.

Fig. 5 Trap-energy distribution of C region in Fig. 4.

動していると考えられる。転位芯近傍における T site, O site に対応するサイトのトラップエネルギーを調べるために、初期水素導入位置に水素原子を固定し、共役こう配法を用いて鉄原子のみを構造緩和した結果を Fig. 6 に示す。Fig. 6 (a), (b) はそれぞれ、T site, O site における水素トラップエネルギー分布であり、式 (1) を用いて計算している。本解析結果から同じ T site や O site であっても占有位置によってトラップエネルギーに差が生じることがわかる。このようなトラップエネルギーの分布も均質な連続体を仮定した弾性論からは導かれない。また、T site, O site 共に転位芯で強いトラップエネルギーを持つのは同じであるが、転位芯以外の場所では T site は領域 A でより強いトラップエネルギーを生じ、O site は領域 B でより強いトラップエネルギーを生じていることがわかる。

Fig. 6 Distribution of trap-energy for each site; (a) hydrogen atoms at T sites, (b) hydrogen atoms at O sites.

3・3 転位近傍における応力分布

次に、水素のトラップエネルギーと{112}<111>刃状転位近傍の応力との関係について調べる。水素原子は結晶格子の膨張を生じるため、静水圧応力の高い領域にトラップされる。分子静力学法によって求めた刃状転位近傍における各Fe原子に作用する静水圧応力分布をFig. 7に示す。刃状転位の引張応力側において弾性論から導出されるのと同様の静水圧応力が働いており、Fig. 4の領域Aは高静水圧応力の領域に対応していることがわかる。しかし、刃状転位左側（Fig. 4の領域B）においては当然のことながらトラップエネルギーを生じる強い静水圧応力は作用していない。この領域に特徴的に作用する応力はせん断応力 τ_{xy} であり、トラップエネルギーとせん断応力との関係が推測される。ここで、各Fe原子位置におけるせん断応力 τ_{xy} をFig. 8に示す。なお、応力分布にFig. 4、Fig. 6にみられたようなしま模様は確認されず連続的な分布になっている。

3・4 せん断応力下での水素占有位置

せん断応力が加わっているときのT siteおよびO siteの水素トラップエネルギーを調べる。鉄原子7038個をFig. 1に示す結晶方位をとるように配置する。そしてx軸とz軸方向に周期境界条件を適用し、上下約3層の原子面を変位拘束して左右<111>方向に移動させて解析モデルに単純せん断を負荷する。この際、ひずみを導入していくと初期水素導入サイトが不安定なサイトとなることもある。その場合、水素位置を緩和すると水素が別のサイトに移動するため、ひずみ導入下でT siteまたはO siteに水素が存在するときのエネルギーを正しく評価できない。そこで、水素位置を固定して鉄原子のみを構造緩和する。Fig. 9に得られた各サイトのトラップエネルギーのせん断応力依存性を示す。ここで、せん断応力負荷時のトラップエネルギーは以下の式によって定義している。

$$\Delta E_s(\tau, \mathbf{r}) = -\left[\Phi_H(\tau, \mathbf{r}) - \left\{ \Phi(\tau) + \frac{1}{2} \Phi_{H_2} + H^T \right\} \right] \quad (2)$$

上式はせん断応力による水素の溶解熱の変化量に対応するが、ここでは3・2節との関わりから便宜的にトラップエネルギーと呼ぶ。 $\Phi_H(\tau, \mathbf{r})$ および $\Phi(\tau)$ は、それぞれ水素を含む系と含まない系にせん断応力 τ を負荷した場合の系の全ポテンシャルエネルギーである。Fig. 9から明らかに、せん断応力が負荷されるとT siteおよびO siteでそれぞれ2種類のトラップエネルギーを示すことがわかる。これは水素占有サイトの形状（四面体または八面体）が異方性を持つためである。ここで簡便のため、正のせん断応力を負荷されてトラップエネルギーが強くなるサイトをtype A、負のせん断応力を負荷されてトラップエネルギーが強くなるサイトをtype Bと呼ぶ。T siteおよびO siteそれぞれのtype A, type Bの幾何学的位置関係をFig. 10に示す。Fig. 10上側にbcc格子の3次元描画と各サイトの分布を、Fig. 10下側にFig. 1と同様の2次元投影図を示す。参考のため、静水圧応力を同様に負荷した場合のトラップエネルギーについてFig. 11に示す。引張下でT siteもO siteもトラップエネルギーが強くなり水素の占有率が上がる。Fig. 9とFig. 11を比較

Fig. 9 Relationship between trap-energy and applied shear stress.

Fig. 7 Hydrostatic stress distribution around the edge dislocation.

Fig. 8 Shear stress distribution around the edge dislocation.

Fig. 10 Hydrogen trap sites in alpha iron lattice ; each symbol of the occupation sites correspond to trap-energy characteristics shown in Fig. 9, 12.

すると, トラップエネルギーのせん断応力依存性は, 静水圧応力依存性と同程度の強さを持つことがわかる.

転位芯を除く刃状転位近傍のせん断応力分布は, Fig. 8 から最大で 6GPa, 最小で-6GPa 程度である. この範囲のせん断応力による水素原子の安定占有箇所を Fig. 12 に示す. 転位芯の右側ではせん断応力が負の値 (0 ~ -6GPa) をとり, T site type B (Fig. 12 中の▽) が最安定箇所となる. 次いで O site type B もしくは T site type A (Fig. 12 の○および▼) が安定である (Fig. 12 (I), (II)). 同様に, 転位芯の左側部分のせん断応力が高い領域では O site type A (Fig. 12 の●) がその他のサイトに比べて圧倒的に強いトラップサイトを形成するため, Fig. 12 (IV) に示すように水素は特定の O site type A に強くトラップされてあまり拡散しないと考えられる. 一方, 転位芯から左方向遠方で, せん断応力が 2GPa 程度になると Fig. 9 より O site type A のトラップエネルギーが他のサイトと同程度になり強固なトラップが形成されなくなる. したがって, Fig. 12 (III) に示すように T site type A (▼), T site type B (▽), O site type A (●) に水素が分布することが予

想される. 以上の結果はせん断応力による水素のトラップエネルギーの変化のみに着目して得られた予測であるが, 特にすべり面上においてはせん断応力成分の寄与がその他の応力成分に比して十分に大きいと, すべり面上の水素の挙動を定性的に評価するのに十分であると考えられる. 実際に, Fig. 4 ですべり面近くでのトラップエネルギーの強い位置を詳細に調べると, 以上の予測とよく一致している.

4 結 言

純鉄 (α 鉄) における {112} 面上の刃状転位芯近傍の水素存在箇所について原子モデルに基づく解析を行った結果, 以下の知見を得た.

- (1) 水素は刃状転位芯および転位の存在するすべり面に強くトラップされ, すべり面上の水素濃度が上昇する.
- (2) 本解析条件において転位芯近傍の局所的水素分布は静水圧応力分布に必ずしも一致しない.
- (3) 転位芯近傍の高ひずみ領域では同じ T site または O site でも占有位置によってトラップエネルギーが異なる.

本研究では 2・1 節で述べたように, これまでの知見から刃状転位を選んだ. しかしながら本解析結果が示すとおり, せん断応力によっても水素がトラップされることから, らせん転位においても転位芯以外で水素と相互作用を持つと考えられる. 本研究で行ったような原子モデルを用いた解析では, 原子間ポテンシャルの影響を必ず受ける. しかしながら, 本文中で示したトラップエネルギーへのせん断応力の寄与や, T site や O site のエネルギーが分裂することの寄与がなくなることはない. 実材料を想定した定量的な解析を実施するためには, 第一原理計算によって, Fig. 9 や Fig. 11 に対応する関係を評価し, 転位まわりの応力の弾性解にマッピングすることで, 転位芯の部分以外でのトラップエネルギーの分布, つまり水素分布を知ることができると考えられる.

本研究の一部は, 産総研水素材料先端科学研究センターからの受託研究費によって行われたことを付記し, 謝意を表します.

Fig. 11 Relationship between trap-energy and applied hydrostatic stress.

Fig. 12 Hydrogen occupation sites under various shear stress conditions ;
(I) : -6 ~ -1GPa, (II) : -1 ~ 0GPa, (III) : 0 ~ 1GPa, (IV) : 1 ~ 6GPa

参 考 文 献

- 1) Y. Murakami, "The effect of hydrogen on fatigue properties of metals used for fuel cell system", *International Journal of Fracture*, Vol.138, pp.167-195 (2006).
- 2) Y. Wada, "Evaluation of material components of hydrogen station", *Proceedings of the 51th Japan National symposium on Strength, Fracture and Fatigue*, pp.47-63 (2007).
- 3) C. D. Beachem, "New model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen "embrittlement")", *Metallurgical Transactions*, Vol.3, No.2, pp.437-451 (1972).
- 4) H. K. Birnbaum, I. M. Robertson, P. Sofronis and D. Teter, "Mechanisms of hydrogen related fracture—a review", *Corrosion-Deformation Interactions*, Edited by T. Magnin, *Inst of Mat.*, pp.172-195 (1997).
- 5) S. P. Lynch, "Mechanisms of hydrogen assisted cracking—a review", *Hydrogen Effects on Materials Behavior and Corrosion Deformation Interactions*, Edited by N. R. Moody, A. W. Thompson, R. E. Ricker, G. W. Was and R. H. Hones, TMS (The Minerals, Metals & Materials Society), pp.449-466 (2003).
- 6) S. Taketomi, R. Matsumoto and N. Miyazaki, "Atomistic simulation of the effect of hydrogen on the mobility of edge dislocation in alpha iron", *Journal of Materials Science*, Vol.43, pp.1166-1169 (2008).
- 7) P. Sofronis and H. K. Birnbaum, "Mechanics of the hydrogen-dislocation-impurity interactions. 1. Increasing shear modulus", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.43, No.1, pp.49-90 (1995).
- 8) M. Wen, S. Fukuyama and K. Yokogawa, "Atomistic simulations of effect of hydrogen on kink-pair energetics of screw dislocations in bcc iron", *Acta Materialia*, Vol.51, No.6, pp.1767-1773 (2003).
- 9) K. Kawamoto, Y. Oda, H. Noguchi, H. Fujii, T. Izumi and G. Itoh, "Investigation of local hydrogen distribution around fatigue crack tip on a type 304 stainless steel with secondary ion mass spectrometry and the hydrogen micro-print technique", *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, A*, Vol.73, No.731, pp.36-43 (2007).
- 10) H. Matsui, H. Kimura and S. Moriya, "The effect of hydrogen on the mechanical properties of high purity iron I. softening and hardening of high purity iron by hydrogen charging during tensile deformation", *Materials Science and Engineering*, Vol.40, pp.207-216 (1979).
- 11) P. J. Ferreira, I. M. Robertson and H. K. Birnbaum, "Hydrogen effects on the character of dislocations in high-purity aluminum", *Acta materialia*, Vol.47, No.10, pp.2991-2998 (1999).
- 12) G. Lu, Q. Zhang, N. Kioussis and E. Kaxiras, "Hydrogen-enhanced local plasticity in aluminum: an ab initio study", *Physical Review Letters*, Vol.87, No.9, 095501 (2001).
- 13) A. Juan, B. Irigoyen and S. Gesari, "Electronic structure and bonding of hydrogen in a screw dislocated bcc Fe", *Applied Surface Science*, Vol.172, pp.8-17 (2001).
- 14) Y. Fukai, K. Tanaka and H. Uchida, "Hydrogen and metal", p.56 (1998) Uchida Rokakuho Publishing.
- 15) S. Matsuyama, "Delayed fracture", p.133 (1987) The Nikkann Kogyo Shinbun Ltd..
- 16) P. Bastien and P. Azou, "Influence de l'écrouissage sur le frottement interieur du fer et de l'acier, charges ou non en hydrogene", *Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L'Academie Des Sciences*, Vol.232, p.1845 (1951).
- 17) M. Ruda, D. Farkas and J. Abriata, "Embedded-atom interatomic potentials for hydrogen in metals and intermetallic alloys", *Physical Review B*, Vol.54, No.14, pp.9765-9774 (1996).
- 18) Z. Hu, S. Fukuyama, K. Yokogawa and S. Okamoto, "Hydrogen embrittlement of a single crystal of iron on a nanometer scale at a crack tip by molecular dynamics", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.7, No.4, pp.541-551 (1999).
- 19) M. Wen, X. J. Xu, S. Fukuyama and K. Yokokawa, "Embedded-atom-method functions for the body centered cubic iron and hydrogen", *Journal of Materials Research*, Vol.16, No.12, pp.3496-3502 (2001).
- 20) R. A. Johnson and D. J. Oh, "Analytic embedded atom method model for bcc metals", *Journal of Materials Research*, Vol.4, No.5, pp.1195-1201 (1989).
- 21) M. I. Baskes, X. W. Sha, J. E. Angelo and N. R. Moody, "Trapping of hydrogen to lattice defects in nickel", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.5, No.6, pp.651-652 (1997).
- 22) S. Matsumoto, R. Matsumoto, S. Taketomi and N. Miyazaki, "Molecular dynamics simulations of effects of hydrogen on mode I crack growth behavior in a-iron single crystals", *Proceeding of Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics APCOM'07*, CD-ROM (2007).
- 23) Y. Fukai, "Site preference of interstitial hydrogen in metals", *Journal of the Less-Common Metals*, Vol.101, pp.1-16 (1984).
- 24) J. D. Honeycutt and H. C. Andersen, "Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters", *Journal of Physical Chemistry*, Vol.91, No.19, pp.4950-4963 (1987).
- 25) M. W. Finnis and J. E. Sinclair, "A simple empirical N-body potential for transition metals", *Philosophical Magazine A*, Vol.50, No.1, pp.45-55 (1984).
- 26) A. Nakatani, H. Kitagawa and K. Nakatani, *Journal of the Society of Materials Science, Japan*, "Occurrence and motion of dislocation from mode II crack tip in bcc crystal", Vol.46, No.6, pp.625-630 (1997).
- 27) W. Y. Choo and J. Y. Lee, "Thermal analysis of trapped hydrogen in pure iron", *Metallurgical Transactions A, Physical Metallurgy and materials science*, Vol.13, No.1, pp.135-140 (1982).