

# 計算機シミュレーションによる FCC 金属のはじき出しエネルギーの評価

頼 實 一 全\*・山 村 泰 道\*\*

\*岡山理科大学大学院理学研究科修士過程応用物理学専攻

\*\*岡山理科大学理学部応用物理学科

(1993年 9 月30日 受理)

## 要 旨

FCC 金属のはじき出しエネルギーを計算するために、時間発展的カスケードシミュレーション・コード DYACOCT を用いて、低エネルギーの1次のはじき出しに対する平均のはじき出し数を5種類の FCC 金属 (Al, Ni, Cu, Ag, Au) について計算した。また、シミュレーションに用いる原子間ポテンシャルがシミュレーション結果に与える影響を調べるために、各金属に対してそれぞれ3種類の原子間ポテンシャル (Molière ポテンシャル, Kr-C ポテンシャル, AMLJ ポテンシャル) を用いて同様の計算を行なった。そして、はじき出し損傷関数の表式として、2つの対照的なモデル (Kinchin-Pease モデルと連続確率モデルを考え、これらを用いてシミュレーション結果からはじき出しエネルギーを計算した。その結果、シミュレーション結果は連続確率モデルに一致することが分かった。また、計算機シミュレーションによって得られたのはじき出しエネルギーは、実験値と比較すると、原子番号が比較的小さい金属 (Al, Ni, Cu) に対しては Molière ポテンシャルと Kr-C ポテンシャルが比較的良好に合致し、原子番号が比較的大きい金属 (Ag, Au) に対しては AMLJ ポテンシャルが比較的良好に合うことが分かった。

## 1 序 論

結晶性固体に放射線を照射すると、固体中の原子は放射線との衝突によってエネルギーを受けて格子位置からはじき出される。このように、放射線によってはじき出された原子を1次のはじき出し原子と呼ぶ。また、この1次のはじき出し原子に付与されたエネルギーを1次のはじき出しエネルギーと呼ぶ。その後、1次のはじき出し原子は、周囲の原子に対する一連の衝突過程を経て、2次、3次、…と次々にはじき出し原子をつくり出す。このようなはじき出し衝突の連鎖過程を衝突カスケードと呼ぶ。放射線照射によるはじき出し損傷の問題は、1つの1次のはじき出し原子が引き起こす最終的なはじき出しの数である。本研究は、FCC 金属において1つのはじき出しが起こるために必要なエネルギー、すなわちはじき出しエネルギーを計算することを目的とする。

放射線照射によるはじき出し損傷の研究は、一般に、綿密な制御の下で照射された標本の検査か、又は様々な計算モデルを取り入れた衝突カスケードのシミュレーションによって行われる。本研究は、後者の方法を用いて低エネルギーの1次はじき出しに対する平均はじき出し数を計算し、得られた結果からはじき出し損傷関数を用いてはじき出しエネルギーを計算した。本論文は、2節で計算機シミュレーションとはじき出しエネルギーの計算方法について記述し、3節でシミュレーションによって得られた結果とそれぞれに対する考察について記述する。そして、4節で本研究に対する結論を述べる。

## 2 計算方法

### 2.1 計算機シミュレーション

本研究で用いた DYACOCT コードは、結晶系標的における原子衝突の動力的シミュレーションを行うために開発された時間発展的カスケードシミュレーション・コードである。DYACOCT コードの計算方法には、主として二体衝突近似法が用いられるが、二体衝突近似法の適用が困難となる低エネルギー事象においては、多体効果を考慮するために分子動力学法が用いられる。この計算方法は、完全分子動力学法よりも計算時間がはるかに短いため、完全分子動力学法では困難な統計的処理を容易に行なうことができる。

DYACOCT コードの計算方法は次の通りである。まず、指定された結晶格子を組み、与えられた結晶系の温度で決まる格子振動を各原子に与える。次に、1次はじき出し事象の位置と1次はじき出しエネルギーを与え、乱数によって1次はじき出しの方向を決めて、1次はじき出し事象を発生させる。1次はじき出し事象によって開始される衝突カスケードを個々の独立した二体衝突の連鎖過程であると見なし、各衝突を二体衝突近似法によって計算する。このとき、各衝突ごとに二体衝突近似法の適用性を調べ、二体衝突近似法の適用が困難な場合には分子動力学法を用いる。カットオフ・エネルギーを与えて、すべての原子がこのエネルギー以下に達したところで、空孔と格子間原子の再結合を評価して最終的に起こったはじき出し数を計算する。空孔と格子間原子の再結合の評価は次のように行われる。空孔の最近接原子を考え、その最近接原子によって囲まれるセル内に静止した格子間原子が存在すれば、空孔と格子間原子の再結合が起こるものとする。以上の計算を与えられた実行回数だけ繰り返して、1次はじき出しエネルギーに対する平均はじき出し数を計算する。

すべてのシミュレーションを次の条件の下で行なった。結晶格子を FCC とし、結晶系の温度を 300 K とした。1次はじき出し事象は、結晶の内部で起こるものとした。また、カットオフ・エネルギーを 2 eV とし、シミュレーションの実行回数を 1024 回とした。さらに1次はじき出しエネルギーをパラメータとして変化させて、平均はじき出し数が1以下の範囲でシミュレーションを行なった。

## 2.2 はじき出しエネルギー

シミュレーション結果からはじき出しエネルギーを評価するために、はじき出し損傷関数の表式として2つのモデルを考えた。1つは、最も簡単なモデルとして広く用いられている Kinchin-Pease モデル (図1) であり、もう1つは、連続確率モデル (図2) である。両者のモデルの大きな違いは、はじき出し確率の取り扱い方にある。前者のモデルでは、図1に示したように、はじき出し確率が付与されるエネルギーに対して階段関数的に与えられるのに対し、後者のモデルは、図2に示したように、はじき出し確率が付与されるエネルギーに比例して連続的に与えられる。また、両者のモデルには、はじき出し原子が格子位置にある原子をはじき出して自らはその格子位置に留まり、結果としてはじき出しが起こらないような衝突、すなわち置換衝突の効果が考慮されている。この2つのモデルにおけるはじき出し損傷関数はそれぞれ

$$N(E) \approx \frac{6 \ln 2}{\pi^2} \frac{\nu(E)}{E_{d \text{ th}}} \quad (\text{Kinchin-Pease モデル}) \quad (1)$$

$$N(E) \approx \frac{6}{\pi^2} \frac{\nu(E)}{E_D} \zeta(\alpha) \quad (\text{連続確率モデル}) \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 $\nu(E)$  は実際に原子に付与されるエネルギーであり、

$$\nu(E) = E - \eta(E)$$

で与えられる。 $\eta(E)$  は電子的阻止による原子の全エネルギー損失である。また、 $\zeta(\alpha)$  は

$$\alpha = \frac{E_d}{E_D}$$

$$\zeta(\alpha) = \frac{1}{1-\alpha} \left\{ 2 \cdot \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \ln \left( \frac{2}{1+\alpha} \right) + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{1-\alpha} \ln \alpha \cdot (4 - \ln \alpha) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\alpha)^n}{n^2} + \frac{\pi^2}{12} \right\}$$

で与えられる。

はじき出しエネルギーは、一般にはじき出しの方向によって異なる。従って、様々な方向に対する平均的なはじき出しは、Kinchin-Pease モデルのように不連続的に起こらず、連続確率モデルのように連続的に起こると考えられる。そこで、平均はじき出し数が1以下の範囲ではじき出しに対する確率であると見なして、シミュレーション結果から連続確率モデルにおける  $E_d$  と  $E_D$  を決定し、連続確率モデルから Kinchin-Pease モデルのはじき出しエネルギー  $E_{d \text{ th}}$  に相当する有効はじき出しエネルギー  $E_{d \text{ eff}}$  を計算した。有効はじき出しエネルギー  $E_{d \text{ eff}}$  は、(1), (2) 式より

$$E_{d \text{ eff}} = \frac{\ln 2}{\zeta(\alpha)} E_D \quad (3)$$

で与えられる。

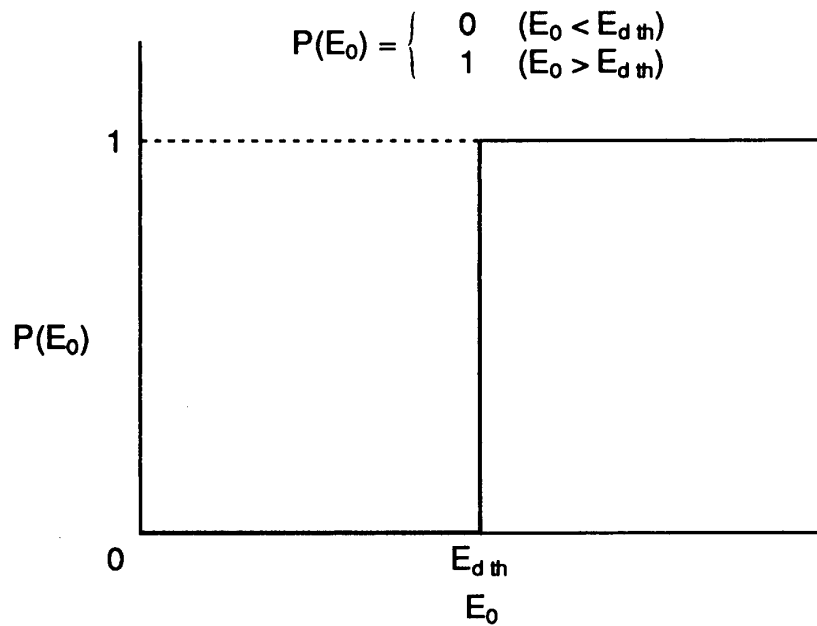


図1 Kinchin-Pease モデル

横軸は原子に付与されるエネルギーを示し、縦軸ははじき出し確率を示す。

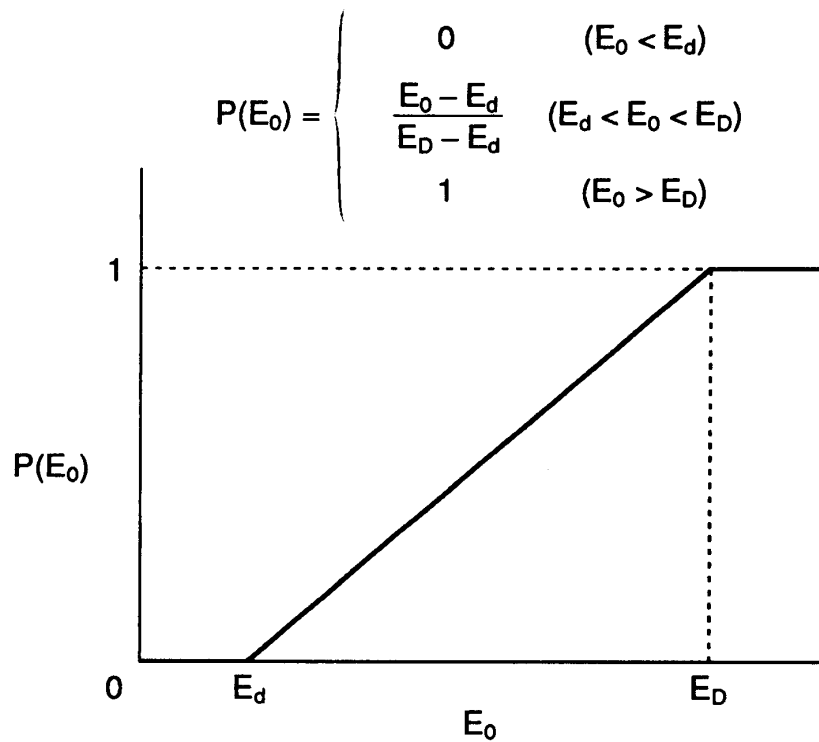


図2 連続確率モデル

横軸は原子に付与されるエネルギーを示し、縦軸ははじき出し確率を示す。

### 3 結果と考察

2.1 節で述べた計算方法により 5 種類の FCC 金属 (Al, Ni, Cu, Ag, Au) についてそれぞれ 3 種類の原子間ポテンシャル (Molière ポテンシャル, Kr-C ポテンシャル, AMLJ ポテンシャル) を用いてシミュレーションを行ない, 平均はじき出し数が 1 以下の範囲で 1 次はじき出しエネルギーと平均はじき出し数の関係を図 3 に示した。また, 3 種類の原子間ポテンシャルについて各金属における原子間ポテンシャルの違いを図 4 に示した。図 3 より, すべてのシミュレーション結果に対して, 平均はじき出し数は 1 次はじき出しエネルギーとほぼ比例関係にあることから, 平均はじき出し数が 1 以下の範囲ではじき出しに対する確率であると見なした場合, シミュレーション結果は連続確率モデルに一致することが分かった。また, シミュレーション結果はシミュレーションに用いる原子間ポテンシャルに大きく依存することが分かった。図 3, 4 より, 最近接原子間距離内でのポテンシャルエネルギーが大きく異なる金属 (Al, Ag, Au) ほどシミュレーション結果の違いが大きいことから, シミュレーション結果は最近接原子間距離内での相互作用に大きく影響されると考えられる。

2.2 節で述べた計算方法によりシミュレーション結果からはじき出しエネルギーを計算し, 5 種類の FCC 金属についてはじき出しエネルギーの計算値と実験値を図 5 に示した。図 5 より, 計算機シミュレーションによって得られたはじき出しエネルギーは, 実験値と比較すると, 原子番号が比較的小さい金属 (Al, Ni, Cu) に対しては Molière ポテンシャルと Kr-C ポテンシャルが比較的良好に合致し, 原子番号が比較的大きい金属 (Ag, Au) に対しては AMLJ ポテンシャルが比較的良好に合致することが分かった。

以上の結果から分かるように, この種の計算機シミュレーションでは適切な原子間ポテンシャルを用いることが重要である。本研究で用いた 3 種類の原子間ポテンシャルは, いずれも Thomas-Fermi 型の二体間ポテンシャルであるが, 計算機シミュレーションを用いた最近の研究では, 原子間ポテンシャルとして多体ポテンシャルが用いられるようになってきた。本研究の場合も, シミュレーションに用いる原子間ポテンシャルとして, 多体ポテンシャルを検討する必要があると考えられる。

### 4 結 論

本研究の結論は次の通りである。平均はじき出し数が 1 以下の範囲ではじき出しに対する確率であると見なした場合, シミュレーション結果は連続確率モデルに一致することが分かった。また, 計算機シミュレーションによって得られたはじき出しエネルギーは, 実験値と比較すると, 原子番号が比較的小さい金属 (Al, Ni, Cu) に対しては Molière ポテンシャルと Kr-C ポテンシャルが比較的良好に合致し, 原子番号が大い金属 (Ag, Au) に対しては AMLJ ポテンシャルが比較的良好に合致することが分かった。

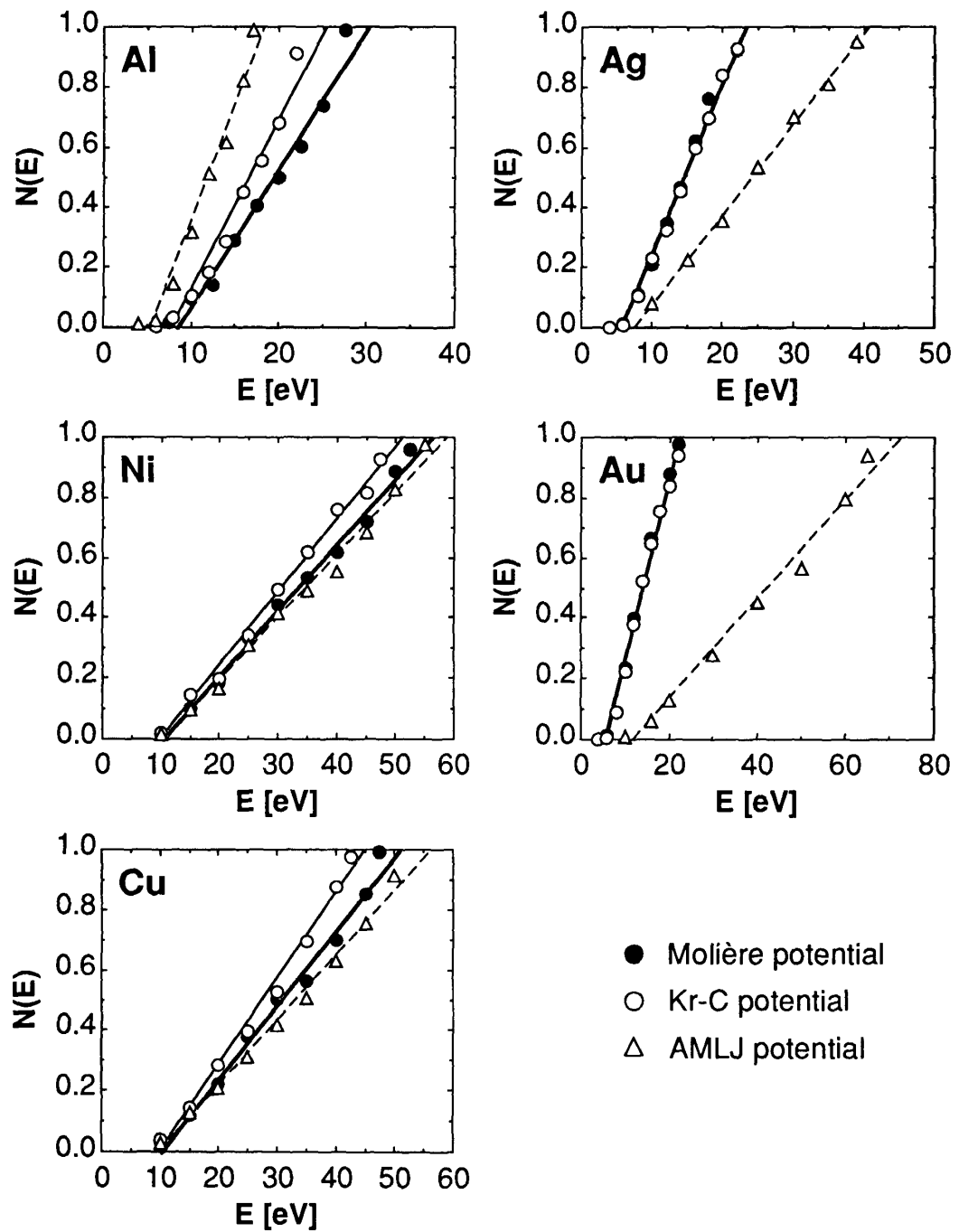


図3 各金属における1次はじき出しエネルギーと平均はじき出し数の関係  
DYACOCCTコードを用いて5種類のFCC金属と3種類の原子間ポテンシャルについてシミュレーションを行なった結果を示す。横軸は1次はじき出しエネルギーを示し、縦軸は平均はじき出し数を示す。

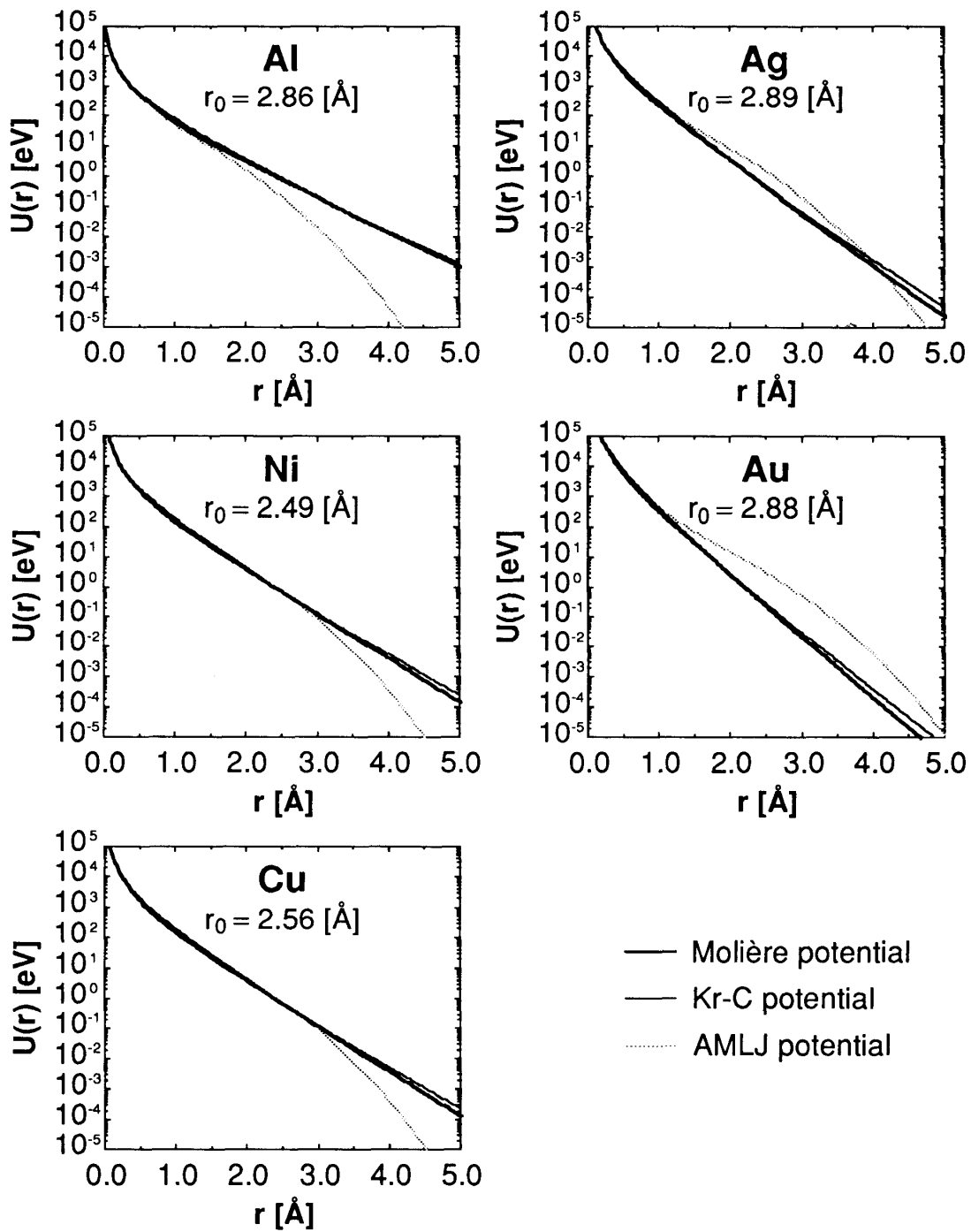


図4 各金属における原子間ポテンシャルの違い  
 横軸は原子間距離を示し、縦軸はポテンシャルエネルギーを示す。図中の  $r_0$  の値はその金属における最近接原子間距離を示す。

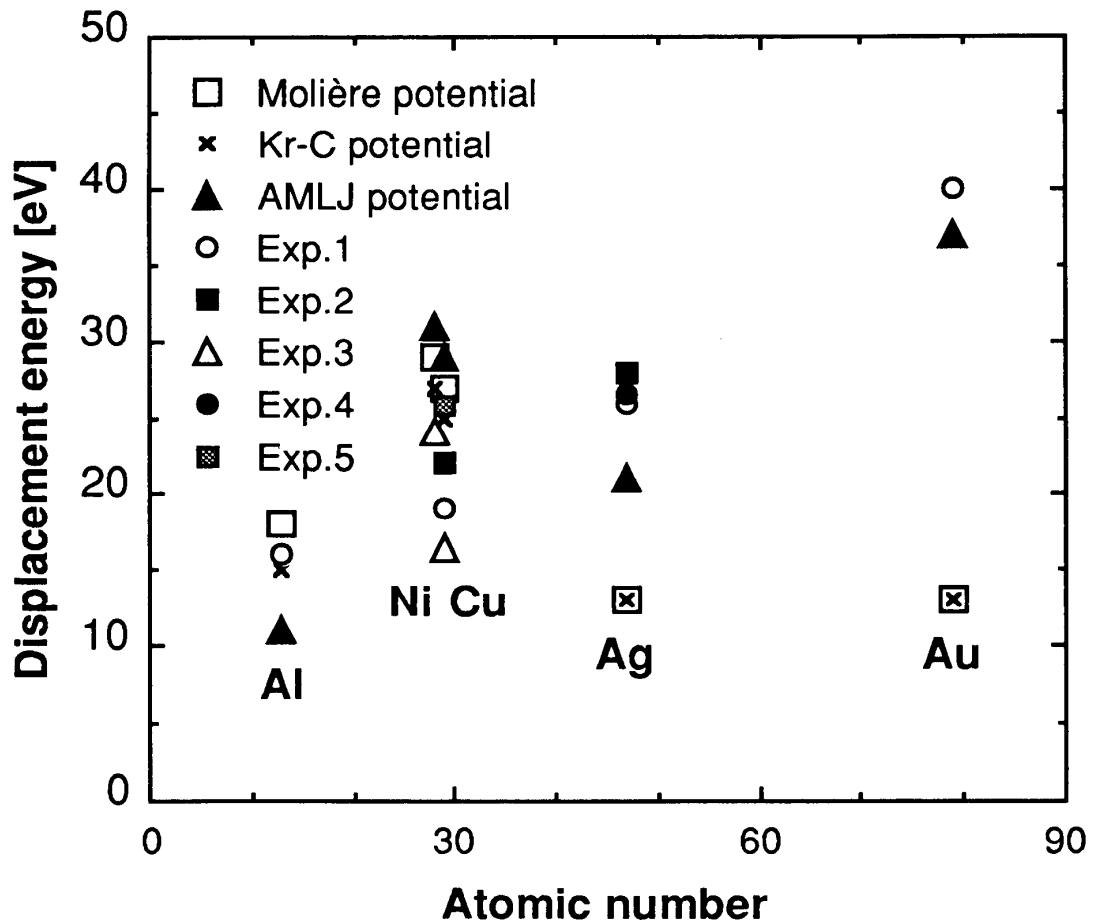


図5 FCC 金属のはじき出しエネルギーの計算値と実験値  
横軸は金属原子の原子番号を示し、縦軸ははじき出しエネルギーを示す。Exp. 1～5はそれぞれ参考文献(8)～(12)から集めた実験値を示す。

#### 参考文献

- 1) G. H. Kinchin and R. S. Pease, Rep. Prog. Phys., **18**, 1 (1955).
- 2) P. Sigmund, Rad. Eff., **1**, 15 (1969).
- 3) C. Lehmann, Nukleonik, **3**, 1 (1961).
- 4) P. Sigmund, Rev. Roum. Phys., **17**, 969 (1972).
- 5) J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff, Mat. Fys. Medd. Dan Vid, Selsk., **36**, No.10 (1968).
- 6) G. Molière, Z. Naturforsch. A, **2**, 133 (1947).
- 7) S. T. Nakagawa and Y. Yamamura, Rad. Eff., **105**, 239 (1988).
- 8) P. Vajda, Rev. Mod. Phys., **49**, 481 (1977).
- 9) P. G. Lucasson and R. M. Walker, Disc. Farad. Soc., **31**, 57 (1961).
- 10) K. Urban and N. Yoshida, Phil. Mag., **44**, 1193 (1981).
- 11) P. Vajda, M. Biget, A. Lucasson and P. Lucasson, J. Phys. F : Metal Phys., **7**, 123 (1977).
- 12) W. E. King, R. Benedek, K. I. Merkle and M. Meshi, Point Defects and Defect Interactions in Metals, edited by J. I. Takamura, M. Doyama and M. Kiritani (University of Tokyo Press), p. 789, (1982).



- 13) H. Gades and H. M. Urbassek, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **69**, 232 (1992).
- 14) A. J. E. Foreman, C. A. English and W. J. Phythian, Phil. Mag. A, **66**, 655 (1992).
- 15) S. M. Foiles, M. I. Baskes and M. S. Daw, Phys. Rev. B, **33**, 7983 (1986).
- 16) 石野 栞, 原子力工学シリーズ 照射損傷, 東京大学出版会 (1979).

## Computer Simulation on Displacement Energy of Face-Centered Cubic Metal

Kazumasa YORIZANE and Yasunori YAMAMURA

*Department of Applied Physics,*

*Faculty of Science*

*Ridai-cho 1-1, Okayama 700, Japan*

(Received September 30, 1993)

In order to investigate displacement energies of FCC (face-centered cubic) metals, the average number of displaced atoms due to low energy PKA (primary knock-on atom) for five FCC metals (Al, Ni, Cu, Ag, Au) have been calculated, using the time-evolution Monte Carlo simulation code DYACOCT. Two displacement models of the Kinchin-Pease model and the continuous displacement probability model have been considered as the displacement damage function, and the displacement energies have been estimated from the results of DYACOCT simulations.