

分子動力学法による α -Fe のカスケード損傷過程シミュレーション 欠陥生成率の PKA エネルギー依存性

Molecular Dynamics Simulation of Displacement Cascades in α -Fe
Dependence of Defect Production on PKA Energy

*陳 昱婷¹, 阮 小勇¹, 中筋 俊樹¹, 森下 和功¹, 渡辺 淑之²
¹京大, ²量研

照射によって引き起こされるカスケード衝突は、構造材料に非平衡な欠陥を作り出す。こうした欠陥どうしが反応すると、やがて材料の機械的性質は大きく劣化する。本研究では、 α -Fe のカスケード損傷を分子動力学 (MD) 法によってシミュレートし、はじき出ししきいエネルギーの評価や欠陥生成率の PKA エネルギー依存性を調べた。特に、統計的性質に注目した。MD 法によって評価した欠陥生成数と Kinchin-Pease モデルの比率は、PKA エネルギーが数十 eV 程度の低エネルギーの領域ではほぼ定数であったが、PKA エネルギーを増加させると、その比率は減少していった。また、しきいエネルギーは PKA の方向に強く依存することも明らかになった。

キーワード: 照射損傷、非平衡欠陥生成数、しきいエネルギー、PKA エネルギー

1. 緒言

照射を受けた材料内ではカスケード損傷により多くの格子欠陥が生成し、材料内の格子欠陥数は平衡欠陥数より数桁高くなる^[1]。そのため、カスケード損傷による欠陥生成率等を正しく求める必要がある。本研究では、分子動力学 (MD) 計算を行い、鉄のしきいエネルギー分布 (結晶学的方位の依存性) やしきいエネルギーと欠陥生成数の関係を定量的に評価した。

2. 方法

Mendelevov ポテンシャルに基づく分子動力学計算を行い、カスケード損傷によるしきいエネルギーを評価した。しきいエネルギーの計算においては、PKA 方向を固定し、2 eV きざみで PKA エネルギーを変化させた。原子のはじき出されるか否かのしきいエネルギーを、はじき出しのしきいエネルギーとした。したがって、この評価のあいまいさは 2eV である。初期温度は 0K とした (実際は 10^{-1} K)。また、欠陥生成率の PKA エネルギー依存性を求めるために、PKA エネルギーを固定し、ランダムな方向に対して 1000 個のカスケードを作り、欠陥生成数を評価した。PKA エネルギーは 0.01~10KeV とした。

3. 結果

図 1 は各 PKA 方向に対するしきいエネルギーの分布を表す。[100] 周辺のしきいエネルギーは低く、[522][531] 周辺は高い。あらゆる結晶方向に平均化した場合のしきいエネルギーの平均値は、一般に Fe に対して言われている 40eV よりも高くなった。図 2 はカスケード損傷によって生成する欠陥数と Kinchin-Pease モデルとの比率のエネルギー依存性を示す。低いエネルギーにおける比率は 1 に越えるが、しきいエネルギーから 100eV までの領域では定数になり、さらに 100eV 超えるとエネルギーの増加に伴い比率は減少した。

参考文献

[1] Nordlund K, Zinkle S J, Sand A E, et al., Nature communications, 2018, 9(1): 1084.

*Yuting Chen¹, Xiaoyong Ruan¹, Toshiki Nakasuji¹, Kazunori Morishita¹, Yoshiyuki Watanabe²

¹Kyoto University, ²National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

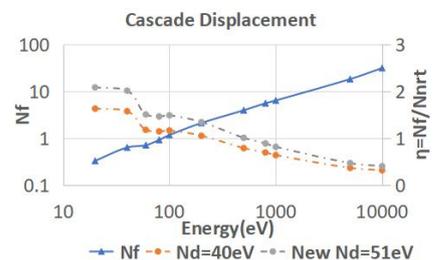
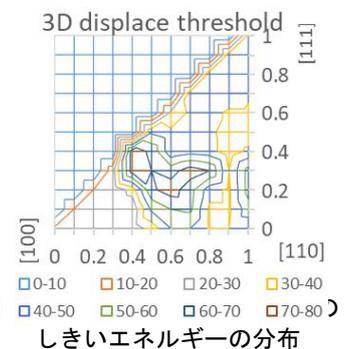


図 2 カスケード損傷による生成欠陥数と Kinchin-Pease モデルの比のエネルギー依存性