衝突カスケードにおける点欠陥クラスターの生成メカニズム：大規模分子動力学シミュレーション

Formation mechanism of point defect clusters in collision cascades:
Large-scale molecular dynamics simulations

*陳 昱婷 [1]，森下和功 [1]
[1] 京都大学

照射下 Fe 内の衝突カスケードに関する大規模分子動力学シミュレーションを行い、主に統計学の視点からカスケードプロセスを分析した。カスケードクラスターの中には、比較的早期に形成するものと、冷却過程終了期に形成するものが観察された。カスケードプロセスを特徴づける様々な因子とカスケードクラスター生成率、サイズ分布、およびその生成メカニズムに関して検討した。

キーワード：照射カスケード，欠陥クラスター，生成メカニズム，統計分析

1. 緒言

照射材料内においては、衝突カスケードにおいて直接欠陥クラスターが生成されることがあり、材料のミクロ・マクロ特性に重要な影響を与えることから、このカスケードクラスターの生成率を精度よく評価することは重要である。クラスター生成率は、点欠陥生成率と同様、通常 PKA エネルギーの関数として整理されるが、同じ PKA エネルギーであってもクラスター生成率やサイズ分布にはばらつきがある。先行研究では、ひとつの PKA エネルギーに対し、クラスター生成率やサイズ分布について、その平均的ふるまいを記述するモデルは提案されているが[1,2]、ばらつきに関する考察は不明である。ばらつきを与えるメカニズムの考察もなされていない。本研究では、クラスター生成を体系的に説明するモデルを構築するために、大規模分子動力学法によりカスケードクラスター生成のプロセスを模擬し、クラスターサイズ分布に及ぼす様々な要因の影響を体系的に分析した。

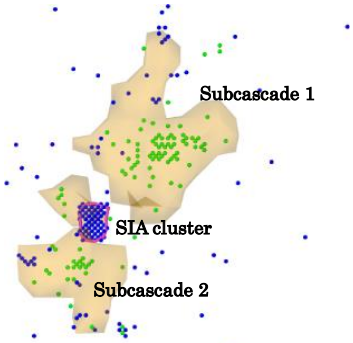

図 1　サブカスケードに生成されたクラスター

2. 方法

Mendelev ポテンシャルを使って、50keV までの PKA エネルギーの α-Fe 内のカスケードプロセスをシミュレートした。PKA 方向はランダムとし、各エネルギーに対し 1000 回の計算を行った。サブカスケード、溶融ゾーンなどの変化を追跡し、カスケードクラスターの生成メカニズムを分析した。

3. 結果

シミュレーションにより得られた溶融ゾーンの構造とサブカスケードの位置分布を調べ、いくつかのクラスター形成メカニズムを整理した。図は、異なるメカニズムによって生成されたクラスターを示す。図 1 はサブカスケード衝突によって形成されたクラスターであり、図 2 は溶融ゾーンの境界で形成されたクラスター1 と溶融ゾーンの内部で形成されたクラスター2 を示す。これらのクラスターは、クラスターとして成立する時刻がそれぞれで異なり、それぞれ形成メカニズムが異なる。詳細は当日報告する。

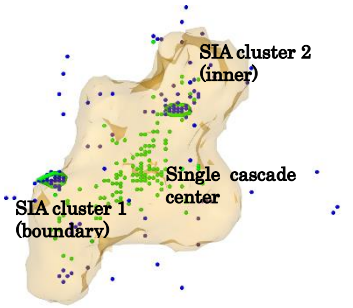

図 2　シングルカスケードに生成されたクラスター

参考文献

[1] Sand, A E, et al., EPL. 103 (4) (2013): 46003. [2] Sand, A E, et al., MRL. 5 (5) (2017): 357.

*Yuting Chen[1], Kazunori Morishita[1], [1]Kyoto University