

逐次活性化探索を用いた kinetic Monte Carlo 法による Cu 中の自己格子間原子クラスター形態変化の解明

Analysis of transformation of SIA clusters in Cu by kinetic Monte Carlo with saddle point search algorithm

*山本 耀二郎¹, 早川 頌², 沖田 泰良¹

¹ 東京大学, ² テネシー大学

各時間ステップで発生しうるイベントとその活性化エネルギーを算出する on-the-fly kinetic Monte Carlo (kMC) 法に於いて, 定期的に活性化エネルギーの閾値を設定することで, 分子動力学 (MD) 法よりも数桁長い時間スケールで, 結晶欠陥の複数回の拡散を伴う微細組織の発達過程を再現する方法を構築した。

キーワード: 分子動力学法, 積層欠陥ループ, on-the-fly kinetic Monte Carlo, 結晶欠陥, カスケード損傷

1. 序論

各時間ステップの原子配置に応じて起こりうるイベントとその活性化エネルギーを算出する on-the-fly kMC 法では, 事前予測不可能かつ, 且つ発生までに要する時間が長い現象でも, 原子レベルの正確性を有したシミュレーションが可能である. 中でも SEAKMC 法[1]は, 鞍点探索で考慮する領域を限定し, 計算コストを大幅に削減させた手法である. 一方で, kMC 共通の課題として, 大小様々な活性化エネルギーが混在する系では, 注目するダイナミクスに直接寄与しない活性化エネルギーの小さいイベント(flicker event)のみが選択されることがある. 本研究では, この解決のため, 一定遷移回数ごとに活性化エネルギーの閾値を設定し, 該当ステップでのみ flicker event を無視して安定形態への変化を促進する手法を構築した. また, 同法を導入した SEAKMC により, 高エネルギー粒子入射によって Cu 中に形成した自己格子間原子 (SIA) 集合体が安定形態に変化するメゾ時間スケールの現象を再現した。

2. 計算手法

入力値の SIA 集合体形成過程として, MD の既往研究結果 (600K, 付与エネルギー50keV) である付与後約 100ps の原子配置を用いた[2]. この入力値に対して, SEAKMC を適用した. また, 鞍点の逐次活性化探索では dimer 法を用いた. 鞍点探索において 5step に一度 0.4eV を活性化エネルギーの閾値として設定し, 0.4 eV 以下のイベントの発生確率を 0 として求めた.

3. 結果

図 1 には, 一例として, 不安定な 3 次元 SIA 集合体が Frank loop に変換する過程での系のエネルギー推移を示す. 一時的なエネルギー上昇も伴いながら, 最終的には 3eV 程度も低いエネルギーの安定形態へ変化する過程を再現でき, 且つこの変換は MD よりも 100 倍長い 8.6 ns 程度を要することが分かった. 本手法により, SIA 集合体の安定形態への変化を従来より 40 倍程度高い確率で観測できた。

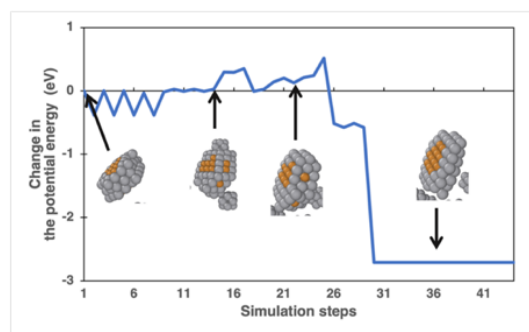


図 1 エネルギーの推移と原子配置

参考文献

- [1] H. Xu, Y. N. Osetsky, R. E. Stoller, J.Phys.: Condens. Matter., 84, 375402-1 – 375402-10(2012).
- [2] S. Hayakawa, T. Okita, M. Itakura, T. Kawabata, K. Suzuki, J. Mater. Sci. 54 (2019) 11096–11110.

*Yojiro Yamamoto¹, Sho Hayakawa² and Taira Okita¹

¹Univ of Tokyo. ²Univ of Tennessee.