

炉内構造物の経年変化に関する研究集会  
2012年7月24－25日 於:九州大学応用力学研究所

# 衝突カスケードのMD計算における 電子的エネルギー損失の影響

東京大学名誉教授  
石野 栞

# 講演概要

カスケード損傷計算の意義

損傷量 (dpa), 集合体形成、空間分布

欠陥相互作用、溶質原子との相互作用

材料特性変化への影響

物質内原子過程への影響

カスケード損傷計算手法

BCA, MD, MC:

原子間ポテンシャル、断熱近似

電子系は基底状態を仮定

# エネルギー付与 (一つの運動粒子にだけ注目した場合)

阻止能 Stopping power

$$-\frac{dE}{dx} = N \int T d\sigma$$

$$\int T d\sigma \quad \text{阻止断面積: } S$$

$$S = S_{\text{nuclear}} + S_{\text{electronic}} + S_{\text{radiation}}$$

$S_{\text{nuclear}}$ : 核的阻止能

$S_{\text{electronic}}$ : 電子的阻止能

Contact interaction: collisional

Distant interaction: Long range

Coulombic

# 基本的問題

- MD計算では核的エネルギー付与のみを考えてきた。
- 計算科学：原子間ポテンシャル：古典的ニュートン運動方程式
- 電子励起に関連して：
  - Frank-Condon 原理
  - Born-Oppenheimer 近似
- 励起過程、励起種の寿命、脱励起、その後の諸過程の時間構造 励起状態の持続時間  
(非金属のみならず金属でも大丈夫か?)

# NRTモデルとMD計算

## □ LSS理論

: 輸送理論的平均的取り扱い

: 見通しをよくするためのThomas-Fermi原子モデル

: 電子系に移ったエネルギーは原子系に戻らない  
(後で見直し) Cascade cooling phase で重要

## □ 弾性的エネルギー付与 : NRT-dpaとMD損傷の比較

: ポテンシャルの重要性

磁性 (Dudarev)

MD+KMC計算 : 欠陥蓄積に対するポテンシャルの影響

(C. Bjorkas, Nordlund, Caturia: Phys. Rev. B85(2012))

# MD計算への電子的エネルギー付与の取込み

□従来行われてきたこと:

- i) 電子的エネルギー付与は小さいとして無視
- ii) 予め全電子的付与をさしひいて計算

Phythian, Bacon, Stoller, Suzudo

両者ともエネルギーが大きくなれば正当性を失う。

□具体的改良の方向:

Calo-Victoria: 電子的エネルギー付与をLSS的な摩擦  
損失として扱う

電子-原子、電子 - フォノンのエネルギー移行も扱う

表1. ターゲット物質に付与される弾性的および電子的エネルギーの内訳(図による)

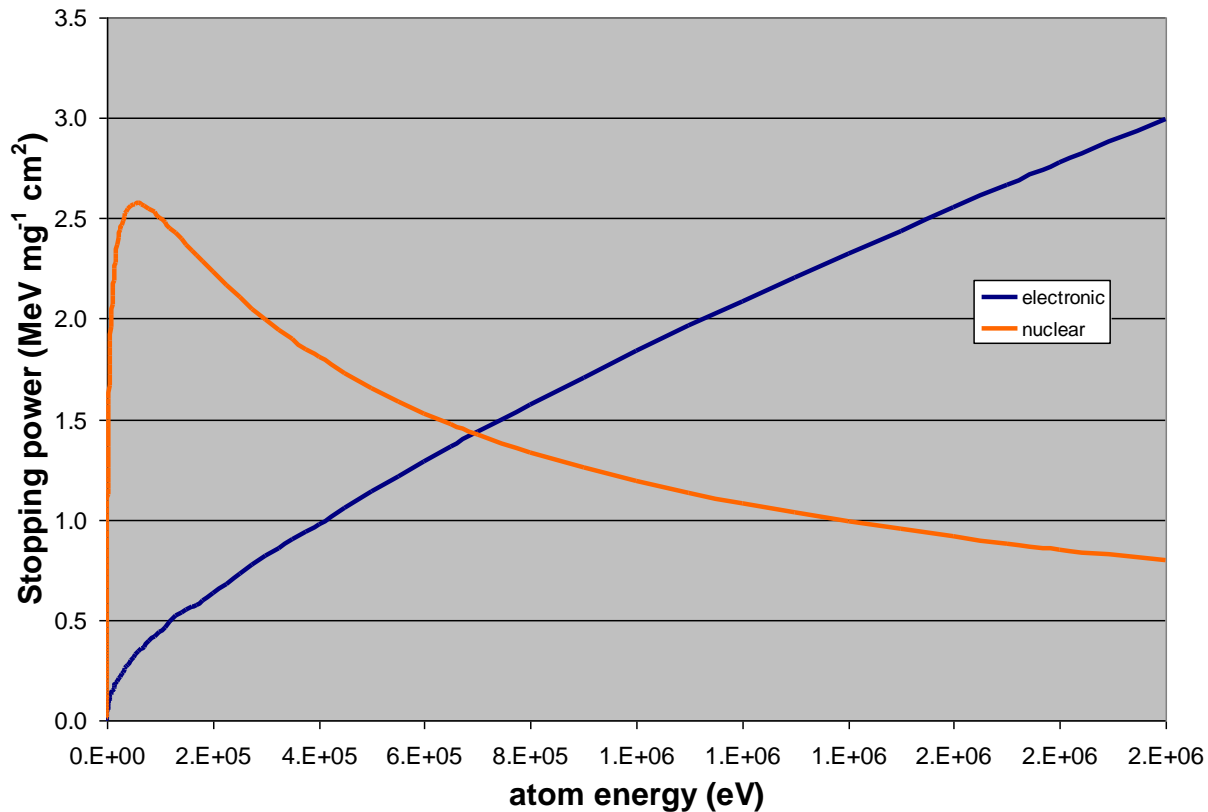
PKA エネルギー, keV	損傷エネルギー, keV	電子的損失エネルギー, keV
0.1158	0.1	0.0158
0.2357	0.2	0.0357
0.6046	0.5	0.1046
1.237	1.0	0.237
2.538	2.0	0.538
6.605	5.0	1.605
13.71	10	3.71
28.76	20	8.76
44.67	30	14.67
61.32	40	21.32
78.69	50	28.69
175.8	100	75.8
425.5	200	225.5

# Stopping Power for Fe

Calculated using TRIM (BCA code)

Maximum recoil energy from 14 MeV neutron collision ~1 MeV

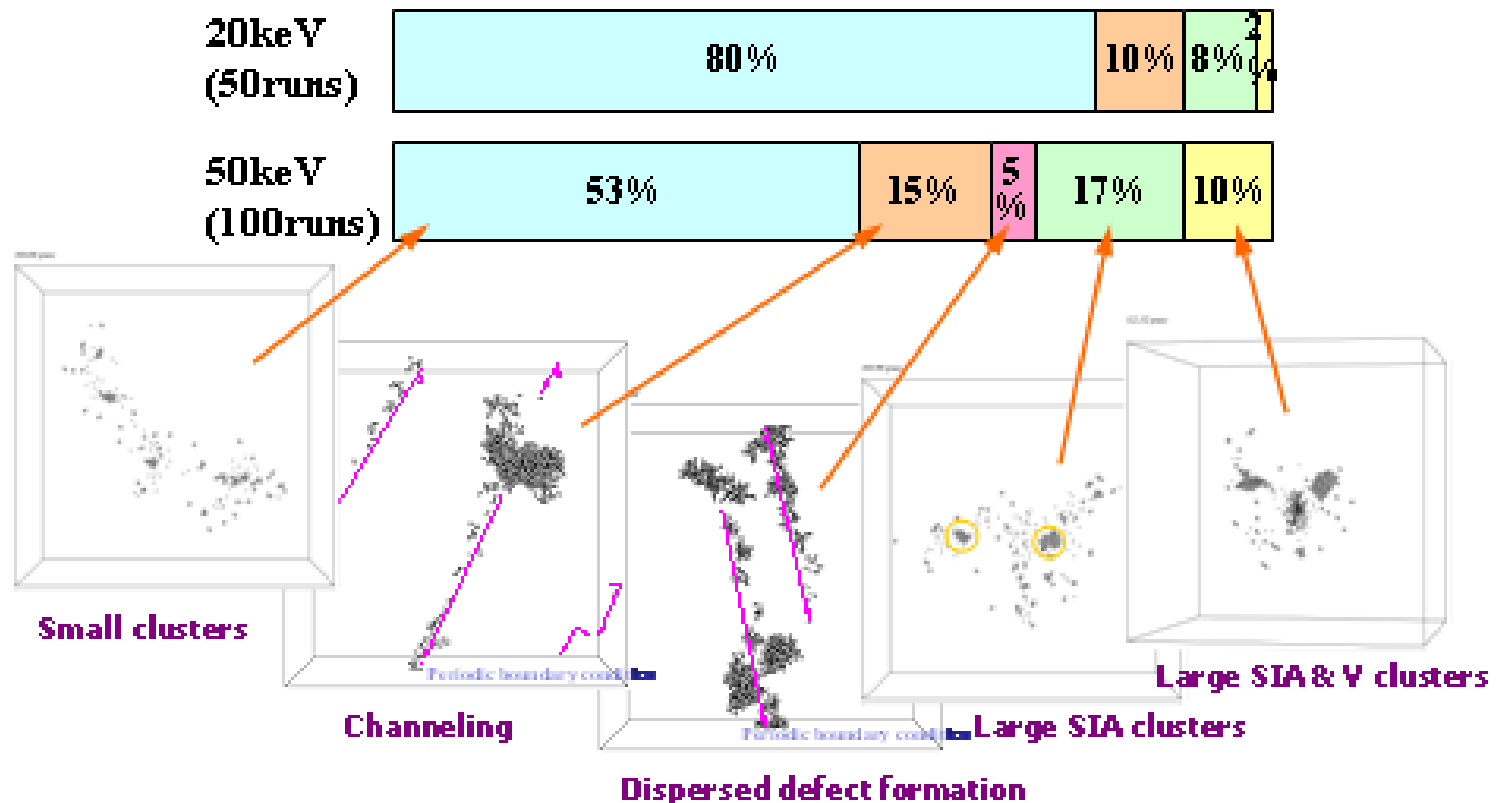
**Nuclear and electronic stopping**





# Displacement Cascade Database

PKA energies: 100eV, 200eV, 500eV, 1keV, 2keV, 5keV, 10keV, 20keV, 50keV



N. Soneda, T. Diaz de la Rubia, S. Ishino, Phil. Mag. Letters, #1 (2001) 649.

# Duffy-Rutherfordの扱い

- Caro and Victoria model

- High velocity regime (electronic stopping)

$$m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} = \underline{F}_i - \gamma_i v_i$$

- Low velocity regime (electron-phonon coupling)

$$m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} = \underline{F}_i - \gamma_i v_i + \underline{F}_i^2$$

# Duffy-Rutherfordの扱い(続)

- **ポテンシャル**: S. L. Dudarev and P.M.Derlet: J. Phys. Condensed Matter, 17(2005)
- **摩擦項**: O. B. Firsov: JETP、6(1958)534.
- **MDコード**: DL-POLY code: W. Smith and T. Forester, J.Mol.Graph, 14(1996) 135.
- **電子温度を決めるため、メッシュの切り方に工夫**

# 今後の方向

- BCA +Friction model は?
- First principle MDへの期待
- 極端時間のエネルギー移行および緩和に関心
- エネルギー注入手段としてのレーザ、放射光などへの関心