

JAERI-M
8 1 7 8

放射線照射固体材質中のはじき出しカスケードの
計算機シミュレーション・コード

1979年3月

朝岡 卓見・田次 邑吉・筒井 恒夫
中川 正幸・西田 雄彦・中原 康明

この報告書は、日本原子力研究所が JAERI-M レポートとして、不定期に刊行している研究報告書です。入手、複製などのお問い合わせは、日本原子力研究所技術情報部（茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。

JAERI-M reports, issued irregularly, describe the results of research works carried out in JAERI. Inquiries about the availability of reports and their reproduction should be addressed to Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, Japan.

放射線照射固体材質中のはじき出しカスケードの
計算機シミュレーション・コード

日本原子力研究所・東海研究所・原子炉工学部

朝岡 卓見・田次 邑吉・筒井 恒夫

中川 正幸・西田 雄彦・中原 康明

(1979年2月22日受理)

固体材質が放射線照射を受けると、一般に1次たたき出し原子ができ、はじき出し原子のカスケードが起こる。このカスケード過程を扱う計算コードとしてCASCADE/CLUSTERがあるが、本報では、これをFACOM用に変換すると共に、結晶格子中に作られた欠陥の図形出力ルーチンを付加した。また、同様なMARLOWEコードも整備した。このカスケード過程に続き、原子の熱振動による欠陥の回復過程がある。これを取り扱うコードとして、体心立方結晶系に対してDAIQUIRIがあるが、本報では、これを改造し、面心立方晶系も扱えるようにした。

更に、この熱振動による回復も考慮して常温材質の重照射による損傷を取り扱えるように、CASCADE/CLUSTERとDAIQUIRIを結合して、CASC SRBシステムを作成した。また、カスケード過程をCASCADEコードの代りにMARLOWEで扱う重照射シミュレーション・コードシステムとして、CASC MARLも作成した。

Computer Codes for Simulating Atomic-Displacement
Cascades in Solids Subject to Irradiation

Takumi ASAOKA, Yukichi TAJI, Tsuneo TSUTSUI
Masayuki NAKAGAWA, Takahiko NISHIDA and Yasuaki NAKAHARA

Division of Reactor Engineering
Tokai Research Establishment, JAERI

(Received February 22, 1979)

In order to study atomic displacement cascades originating from primary knock-on atoms in solids subject to incident radiation, the simulation code CASCADE/CLUSTER is adapted for use on FACOM/230-75 computer system. In addition, the code is modified so as to plot the defect patterns in crystalline solids. As other simulation code of the cascade process, MARLOWE is also available for use on the FACOM system. To deal with the thermal annealing of point defects produced in the cascade process, the code DAIQUIRI developed originally for body-centered cubic crystals is modified to be applicable also for face-centered cubic lattices.

By combining CASCADE/CLUSTER and DAIQUIRI, we then prepared a computer code system CASC SRB to deal with heavy irradiation or saturation damage state of solids at normal temperature. Furthermore, a code system for the simulation of heavy irradiations CASC MARL is available, in which MARLOWE code is substituted for CASCADE in the CASC SRB system.

Keywords : Atomic-Displacement Cascade, Simulation Code, Crystalline Solid,
Point Defect, Thermal Annealing, Heavy Irradiation, Saturation Damage
State, Computer Code System

目 次

1. 序 論	1
2. CASCADE/CLUSTERコード	4
2.1 MAIN1(CASCADE)とMAIN2(EDIT)	4
2.2 MAIN3(CLUSTER)とMAIN4(SATURATION)	16
2.3 コードの使用法	27
2.3.1 入力データ	27
2.3.2 カード・セットアップと出力	31
3. MARLOWE コード	37
3.1 コードの機能	37
3.2 コードの使用法	50
3.2.1 入力データ	50
3.2.2 出力プリント	56
4. 重照射解析コード・システム	60
4.1 DAIQUIRI コード	60
4.2 CASCSEB システム	68
4.3 CASCSEB システム	78
5. 結 言	86
謝 辞	86
参考文献	88
付録 1 1 keVの銅のPKAによる銅結晶中の安定なフレンケル対を、PKAの3方向について求める際のCASCADE/CLUSTER用カード・セットアップ	90
付録 2 1 keVの銅のPKAによる安定なフレンケル対をもつ銅結晶中に、再び1 keVの銅のPKAが同じ位置から異なった方向に出た際の欠陥を求めるCASCADE/CLUSTER用カード・セットアップ	91
付録 3 付録2の問題に対するCASCADE/CLUSTERプリント出力の1部	92
付録 4 付録2の問題に対するCASCADE/CLUSTER図形出力の1部	97
付録 5 MARLOWE コードのための3つの例題に対するカード・セットアップ	99
付録 6 Cu 結晶表面に入射したH原子の透過問題に対するMARLOWE プリント出力の1部	100
付録 7 銅の結晶表面に垂直入射したアルゴン粒子によるsputtering 問題に対するMARLOWE プリント出力の1部	102
付録 8 1 keVの銅のPKAによる銅結晶中のカスケード解析に対するMARLOWE プリント出力の1部	105
付録 9 DAIQUIRI コードのための例題に対するカード・セットアップ	108

付録 10 付録 9 の問題に対する DAIQUIRI プリント出力の 1 部	109
付録 11 銅の重照射問題に対する CASC SRB 用カード・セットアップ	112
付録 12 付録 1 1 の問題に対する CASC SRB のプリント出力	113
付録 13 付録 1 1 と同一の問題に対する CASC MARL 用カード・セットアップ	119
付録 14 付録 1 3 の問題に対する CASC MARL のプリント出力の 1 部	121

CONTENTS

1. Introduction	1
2. CASCADE/CLUSTER Code	4
2.1 MAIN1(CASCADE) and MAIN2(EDIT)	4
2.2 MAIN3(CLUSTER) and MAIN4(SATURATION)	16
2.3 Usage of Code	27
2.3.1 Input Data	27
2.3.2 Card Setup and Output	31
3. MARLOWE Code	37
3.1 Function of Code	37
3.2 Usage of Code	50
3.2.1 Input Data	50
3.2.2 Output Print	56
4. Code Systems for Heavy Irradiation	60
4.1 DAIQUIRI Code	60
4.2 CASC SRB System	68
4.3 CASC MARL System	78
5. Concluding Remarks	86
Acknowledgments	86
References	88
Appendix 1 Card Setup for CASCADE/CLUSTER to Obtain Stable Frenkel Pairs in Cu Lattice due to 1 keV Cu PKA of 3 Different Directions	90
Appendix 2 Card Setup for CASCADE/CLUSTER to Obtain Stable Frenkel Pairs in Cu Lattice due to Successive Two 1 keV Cu PKA's with Different Directions at the Same Position	91
Appendix 3 A Part of Output Print of CASCADE/CLUSTER for the Problem of Appendix 2	92
Appendix 4 A Part of Output Figure of CASCADE/CLUSTER for the Problem of Appendix 2	97
Appendix 5 Card Setup for MARLOWE to Solve 3 Sample Problems	99

Appendix 6 A Part of Output Print of MARLOWE for the Transmission Problems of H Atoms Incident on Cu Crystal Surface	100
Appendix 7 A Part of Output Print of MARLOWE for the Sputtering Problem due to Ar Particles Incident Normally on Cu Crystal Surface	102
Appendix 8 A Part of Output Print of MARLOWE for the Analysis of Cascades in Cu Crystal due to 1 keV Cu PKA.....	105
Appendix 9 Card Setup for DAIQUIRI to Solve a Sample Problem	108
Appendix 10 A Part of Output Print of DAIQUIRI for the Sample Problem of Appendix 9	109
Appendix 11 Card Setup for CASCSRB to Solve a Heavy Irradiation Problem of Copper	112
Appendix 12 Output Print of CASCSRB for the Problem of Appendix 11	113
Appendix 13 Card Setup for CASCMARL to Solve the Same Problem as in Appendix 11	119
Appendix 14 A Part of Output Print of CASCMARL for the Problem of Appendix 13	121

1. 序 論

固体材質が放射線にさらされた時、それによる損傷の状態は、放射線の種類と材質の性質に依存する。1次損傷(primary damage)の機構は非常に複雑で、弾性的衝突によるエネルギー付与、非弾性的な電子励起とイオン化、あるいは核反応が関与している。そして一般に材質原子がその平衡位置からはじき出される(displacement)。この1次たたき出し原子(PKA=primary knock-on atom)は他の原子との相互作用により静止するが、その影響で他の原子がはじき出されるようになり、はじき出し原子のカスケードができる。このカスケードは 10^{-14} 秒程度の非常に短い時間で展開し、その影響も数千の原子体積内に限られる。この1次損傷は、熱振動に伴う回復(thermal annealing)による消滅などにより、分布が数ミリ秒の間に急激に変化する(short-term annealing)。このような複雑な現象の発展は多体問題でもあり、解析的方法で取り扱うのは特に結晶体について困難で、大型電子計算機による数値実験が必要となる。結晶片を構成するすべての原子の軌道を、古典力学の運動方程式に基づき、時間ステップで追跡するのが動力学的方法で、これによる計算機シミュレーションにより、結晶体の損傷の研究は格段の進歩を示した。この方法は煩雑であるが、照射損傷の多くの基本的事象を明らかにする。計算コードとしてはGRAPE¹⁾がよく知られており、我々もこのコードを改造して評価を進めているが、これについては後程報告がまとめられる予定である。しかし動力学的方法では、PKAエネルギーのkeVあたり、少なくとも1,500の連立運動方程式が必要とされるので²⁾、高いエネルギーの入射線による損傷を扱うためには、一般に、原子間衝突を2体間のみの過程として近似するカスケード法に頼らなければならない。

カスケード法による結晶格子欠陥の生成及び消滅に関する組織的な研究は、Beeler & Besco,³⁾及びRobinson & Oen⁴⁾らによりほぼ同時に始められた。Beeler & Bescoは、仮想的な2次元平方格子構造の酸化ベリウムを仕事の出発点とし、順次3次元構造を持つ現実の物質に移っていったが、⁵⁾⁶⁾⁷⁾⁸⁾Robinson & Oenらは、原子数密度は結晶と同じであるが、結晶構造は考えない無定形体系をまず考え、後で結晶格子構造の影響を調べるという方向で研究を進めてきている。⁴⁾⁹⁾

カスケード法では完全な結晶格子、または格子欠陥はあってもよいが安定な状態にある結晶格子を考える。原子は格子点、または格子間原子ならばその安定点で静止しているとし、有限温度効果、つまり原子の熱振動は今のところ無視する。この体系に外部から結晶と同種、または異種の原子を入射したり、あるいは結晶中のある1個の原子に初期運動量を人為的に与えることにより、カスケード過程をスタートさせる。そしてこの入射原子あるいはPKAが、他の格子点にある原子と衝突を繰り返していく過程、及びその結果はじき出された原子の衝突過程を以下の仮定のもとで追跡していくのである。

- 1) 衝突は2原子間のみで起り、同時に3個以上の原子が作用を及ぼし合うことはない。
- 2) 2原子間ポテンシャルとしてはBohr, Born-Mayer,¹⁰⁾¹¹⁾ Firsov¹²⁾及びMoliere¹³⁾などの反撥力のポテンシャルを用いる。

3) 散乱角及び衝突によるエネルギー授受の計算には剛体球散乱モデルを用いる。

4) 原子が格子点からはじき出されるかどうかは、結晶によって一定の値を持つ閾値エネルギー E_d によって決める。入射原子の衝突後のエネルギーを E'_1 、衝突された原子が受取ったエネルギーを E_2 とすると、次の4通りの事象が考えられる。³⁾

$E'_1 \leq E_d$ かつ $E_2 \leq E_d$; 標的原子ははじき出されず、入射原子は格子間原子になる。

$E'_1 > E_d$ かつ $E_2 \leq E_d$; 標的原子ははじき出されず、入射原子は散乱される。

$E'_1 \leq E_d$ かつ $E_2 > E_d$; 標的原子と入射原子が入れ代り、衝突された原子がはじき出される。

$E'_1 > E_d$ かつ $E_2 > E_d$; 標的原子及び入射原子共に自由原子として衝突点から移動していく。

5) 移動している原子のエネルギーがある一定値 E_c 以下になったら、その原子は静止させ、その原子についての計算を打ち切る。

1) の仮定については、移動している原子のエネルギーが大きい間は良い近似であるが、原子が減速されて、結晶の熱振動エネルギーに近くなると、多体相互作用が重要になり、2体衝突モデルは良くない。そこで一般には仮定5)と関連して、計算を打ち切る下限エネルギーを多体相互作用を無視できる位の高さのエネルギーに設定する。昇華エネルギーを E_s とすると、この下限エネルギーとして $2E_s$ (または $2E_d$) が一般に用いられている。しかし、格子欠陥の消滅過程はさらに低いエネルギーでも起るので、特に温度効果(熱振動)が重要な場合は、先述の運動方程式による方法を用いる必要がある。また、この2体衝突近似は、動いている原子が2つ以上の結晶格子原子の丁度中間を通る場合などは当然良くない。2体衝突近似では入射原子のエネルギー損失と速度方向変化を過大評価する。従ってこれらいくつかの標的原子との衝突を別々に計算して、その和をとるようにしなければならない。この方法でもエネルギー損失はいくらか過小評価される。¹³⁾

2) の仮定については、2体相互作用という仮定1)が成り立つとし、その範囲内でポテンシャルの型を工夫し、ポテンシャル関数に含まれるパラメータの値は他の物理条件(弾性定数、 E_d 等の値が正しくそのポテンシャルを用いて算出されること)によって決定される。最適のポテンシャルを決めるのはなかなか難しい問題で、種々のポテンシャルが提案されているが、ここでは立ち入った議論は行わない。

原子の軌道電子の励起を伴う非弾性散乱は、入射エネルギーが大きくなると重要になると考えられる。しかし現在のところ、非弾性散乱のカスケード過程への導入の仕方、その効果の評価は Robinson & Torrens¹⁴⁾ が行っているだけで、未だ議論すべき余地が多い。実験の方も未だ十分の精度で行われているとはいえず、3)の近似は、検討の余地はある。しかしながら十分良い近似として用いてよいであろう。

E_d の値は、厳密には、結晶に対する向きによって変わる。また結晶に格子欠陥が生ずることによる結晶構造のローカルな変化によっても変わるものである。しかしそのような効果を考慮して E_d の値を決めるのは困難なので、カスケード法では一般に E_d を一定としているが、現在の計算コードでは E_d の方向依存性も扱えるようになっている。

5) の仮定については、移動中の原子のエネルギーが $2E_d$ 以下になれば、確かに結晶原子を

はじき出すことはできなくなるが、移動中の原子自身がどこに落着くかを正しく見極めるには、もっと低いエネルギーまで追跡する必要がある。しかし、エネルギーが低くなると、熱振動の効果を無視できなくなるので、Robinson & Torrens は便法として、各結晶原子は各々独立にガウス分布を持つ rms (root mean square) 振幅で振動しているとして、熱振動効果の一応の評価を試みている。¹⁴⁾

以上の仮定を用いて照射損傷の初期パターンが得られる。計算を進める際には、先ず最大速度の原子の飛跡を追う。こうすると、速度の小さい原子は、それより速い原子が損傷を与えた結晶内を進むようになり、カスケード間の干渉が自動的に考慮されることになる。また速い原子によって作られた格子間原子に遅い原子が衝突することもあるので、カスケード干渉による欠陥消滅も考慮されることになる。カスケード過程の間で欠陥が消滅するのを radiation annealing と呼んでいるが、カスケード過程が終了した時点で得られた損傷パターンは、不安定な構造を含んでいる。はじき出しカスケード法に基づいて現在迄に開発されてきた計算プログラムの主なものである Besco & Baumgardt の CASCADE/CLUSTER¹⁵⁾コードや、Robinson の MARLOWEコード¹⁴⁾では、入力データで指定された距離内にあるフレンケル対は不安定であるとし、再結合させてその欠陥を消滅させている。

まず次章で、CASCADE/CLUSTERコードについて、計算の流れとコードの使用法を述べ、次いで第3章でMARLOWEコードについて、その機能と使用法を説明する。第4章で、これらカスケード法による計算コードで扱うカスケード過程に続く short-term annealing を取り扱う DAIQUIRI コードについてまず述べ、次いでCASCADE/CLUSTERと DAIQUIRI を結合して重照射過程を扱う CASC SRB コードシステム、及び CASCADE の代りに MARLOWE を用いた CASC MARL コードシステムについて説明する。

2. CASCADE/CLUSTERコード

CASCADE/CLUSTERコードのCASCADEプログラムは、初め2次元平方格子を扱うために開発された。¹⁶⁾ その後一般化され、まずwurtzite構造を扱うように改良され、¹⁷⁾更に面心立方構造(fcc)及び体心立方構造(bcc)金属が扱えるようになっている。¹⁸⁾この過程で、扱う物理モデルは漸次改良されている。その後CASCADEによる欠陥を処理するCLUSTERプログラムと結合され、fccとbcc結晶を扱うCASCADE/CLUSTERが作られた。¹⁵⁾

このコードはFORTRAN-IIとFAPで書かれ、chain job形式となっていたので、我々はこれをFACOM用に変換した。全体の計算の流れはFig. 1に示したように、CASCADEプログラムの中心部をMAIN 1とし、ここでFig. 2に示したようにカスケード過程を取り扱う。MAIN 2でその結果作られた欠陥をファイルに書き、次いでNORMEXルーチンを通してCLUSTERプログラムであるMAIN 3に入るようになっている。なお、Fig. 1に書かれているMAIN 4が、原典のSATURATIONプログラムで、すでに格子欠陥のある結晶を扱う場合に、まずここでファイルを編集してからMAIN 1に入るようになっている。

2.1 MAIN1(CASCADE)とMAIN2(EDIT)

MAIN 1の中心は、Fig. 2の下方に書かれている衝突過程の取り扱いである。この際結晶の基本単位(box)を考えている。すなわち格子間原子の位置は余りよく知られていないので、簡単な仮定として、格子原子と空間的に対称な位置にあるとする。¹⁸⁾この結果格子間原子と格子原子は簡単な立方格子を構成するので、基本単位として $4 \times 4 \times 4$ の立方格子をとる。格子定数 a の2倍の長さの一辺をもつこのbox内には、64の位置があり、その中fccでは32、bccでは16の位置が結晶原子の位置で、他が格子間原子の可能な位置である。各boxの一端の格子点を(111)として、そこを(x, y, z)座標の原点とし、そのboxの位置は整数(IJK)で、box内の格子点の位置は(ijk)で表示している。

衝突過程の取り扱いの流れは、Fig. 3に示したように以下のようにになっている。

- 1) エネルギー E_1 で、位置 (x_1, y_1, z_1) から方位角 (α, β, γ) の方向に飛んでいる質量 M_1 のPKA粒子、 P_1 、が次に衝突を起こす原子 P_2 を決定する。
- 2) 2原子間ポテンシャルに基づき、衝突点の座標を計算する。
- 3) 散乱角を決め、衝突後の2原子の運動方位角、及び P_1 が P_2 に与えたエネルギーを決める。
- 4) 衝突の結果生じた欠陥を記録し、この時点の諸条件を用いて、次に追跡する原子を決め、
 - 1) 以下を繰り返す。そしてPKA及びはじき出された原子のすべてのエネルギーが E_c 以下になるまで計算を続ける。

以下に、これらの各過程の取り扱い法をやゝ詳しく述べる。

- 1) まず P_1 が次に衝突する相手 P_2 を探す方法は、 P_1 が(IJK)box中の位置 $(x_1, y_1,$

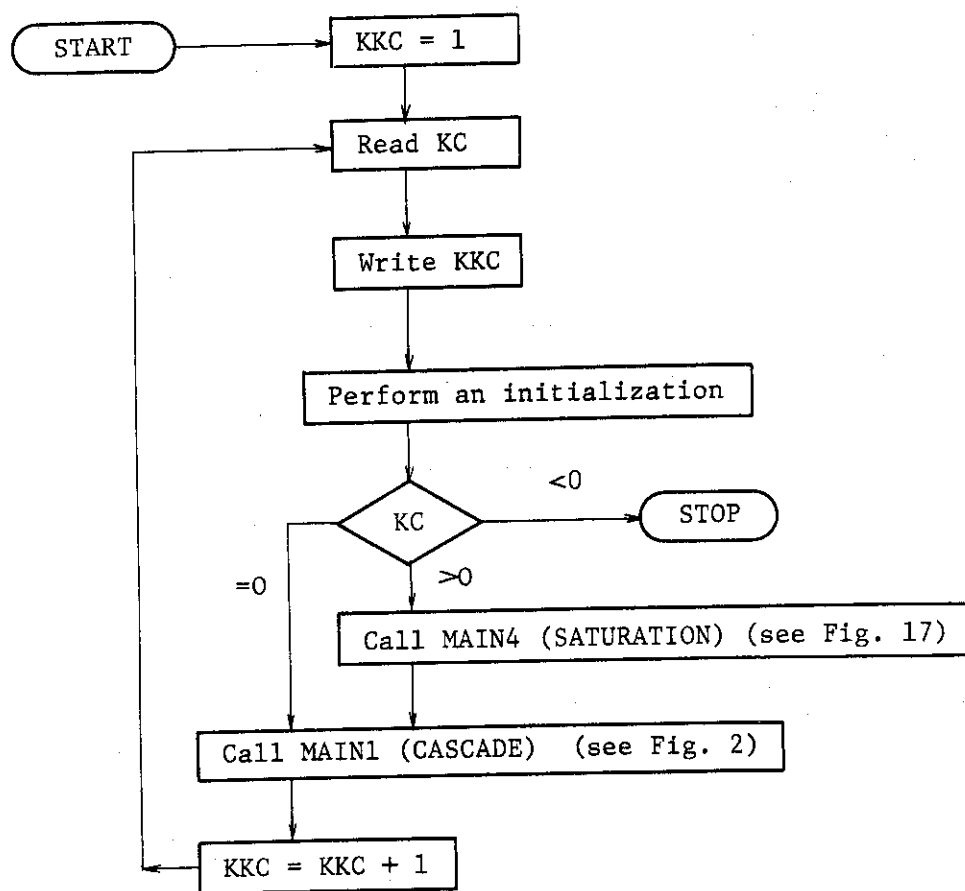


Fig. 1 Flow chart of CASCADE/CLUSTER code

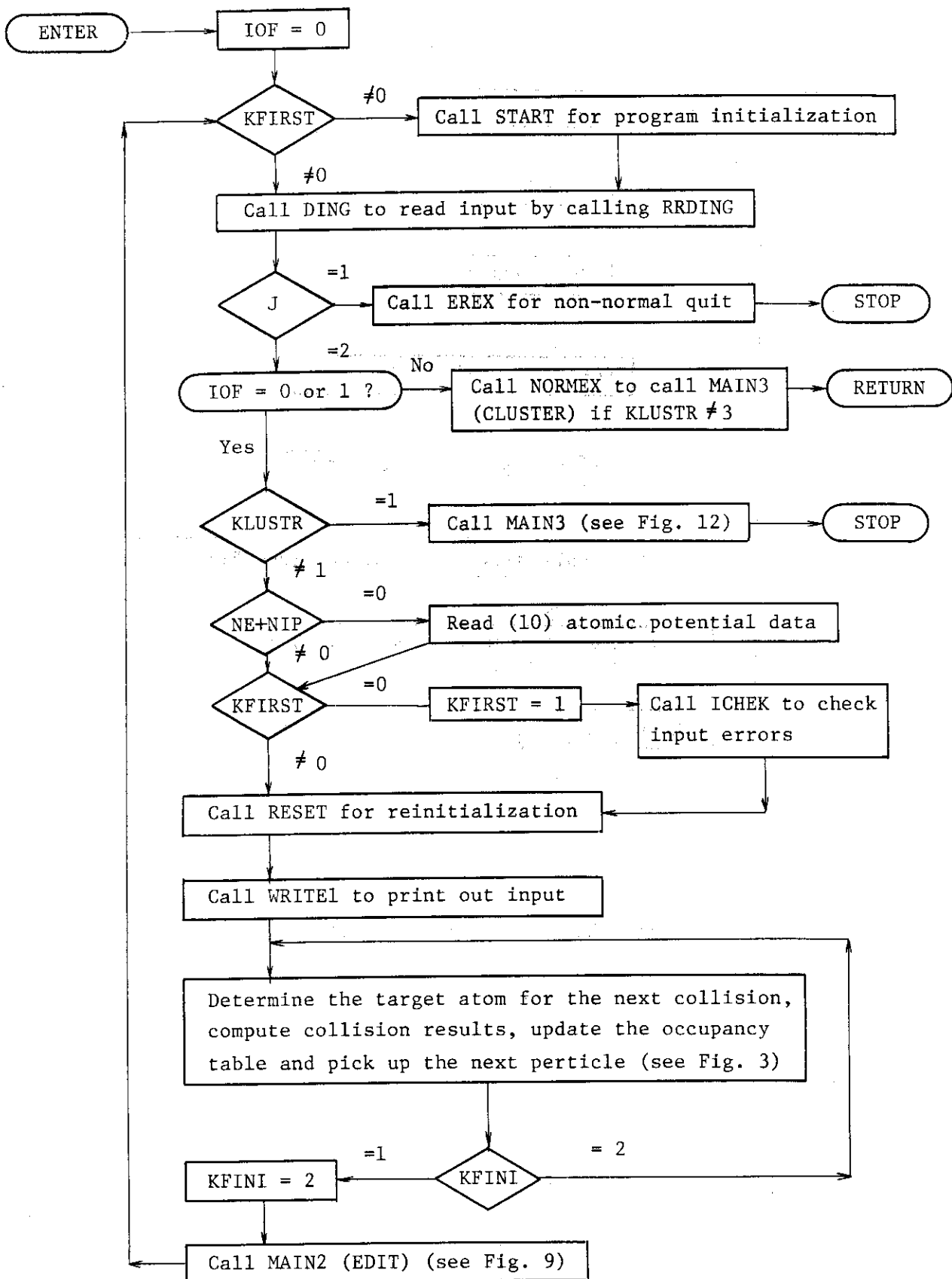


Fig. 2 Flow chart of MAIN1 (CASCADE) program of CASCADE/CLUSTER

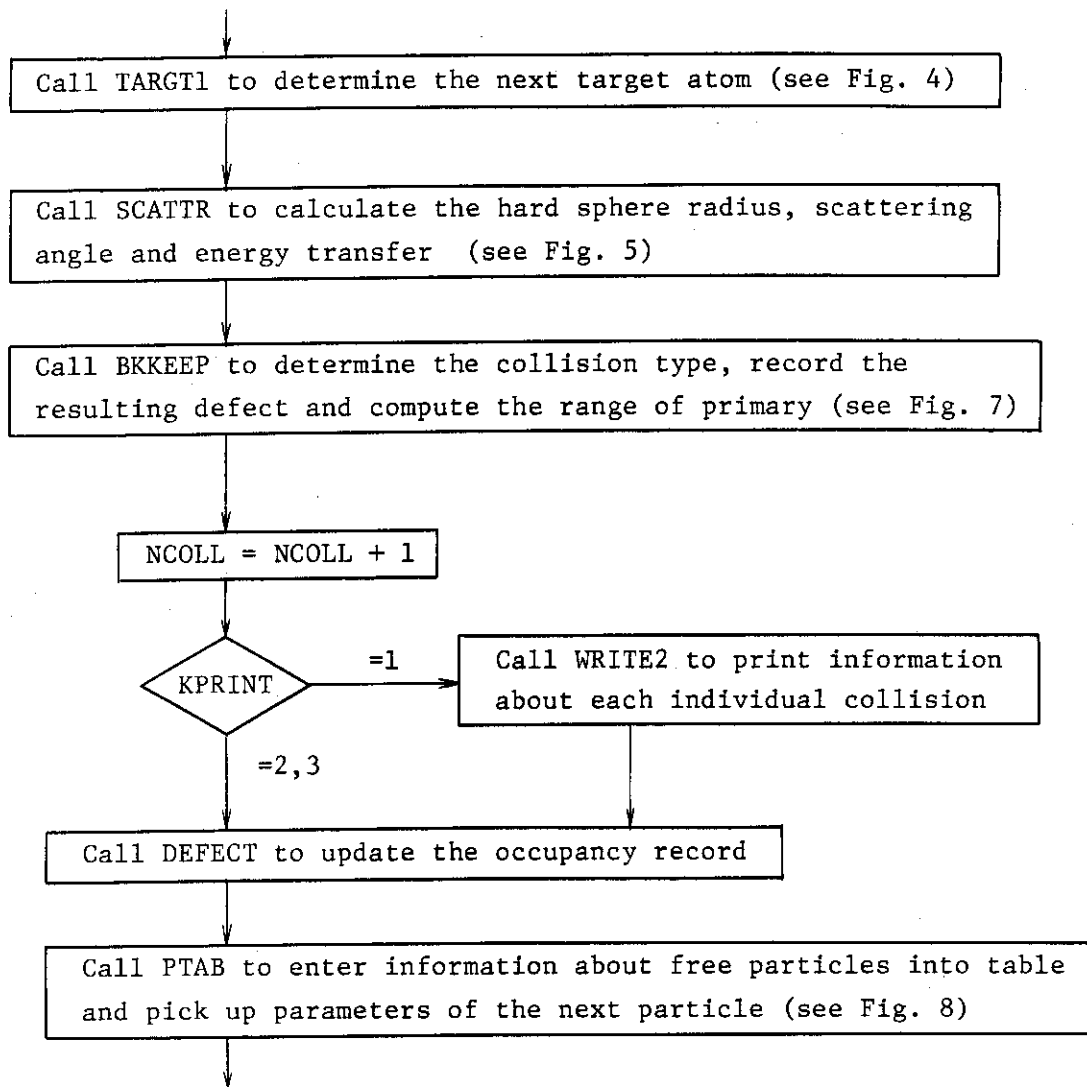


Fig. 3 Flow chart for determining the target atom and collision results, and for updating the occupancy table

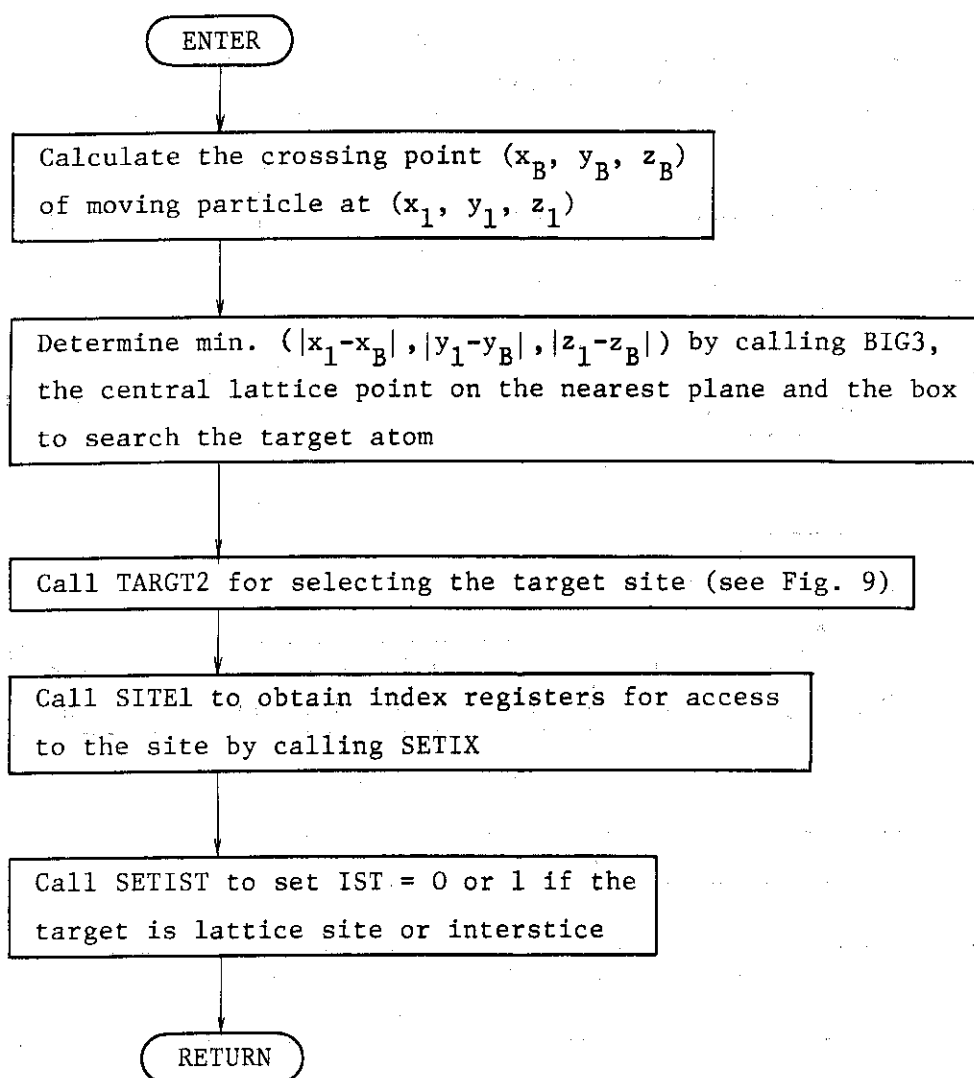


Fig. 4 Flow chart of TARGT1 program for determining the next target atom

z_1)にいとすると、まずこの box中の格子点を順次テストする。テストの順序は、Fig. 4に示したように P_1 の飛跡が横切る xy, yz, xz 面の中、最初に横切る面から順に、面を横切る位置に最も近い格子点を中心とする 3×3 の正方形の9つの格子点について行う。Fig. 9に示したように、初めに、 P_1 が同一原子間で繰り返し衝突するサイクルを避けるため、その格子点が、前2回 fcc では、その原子の grazing 衝突 (impact parameter $p > 1 \text{\AA}$) の数 (3以上のときは3とおく) の衝突原子と同じ原子なら標的原子とはしない。そうでなければ、その位置の占有状態を調べ、空孔ならば別の標的を探す。原子があれば、その位置 (x_i, y_i, z_i) と P_1 を結ぶ線の、 P_1 の飛行方向への射影 D_m を次式で計算する。

$$D_m = (x_i - x_1) \cos \alpha + (y_i - y_1) \cos \beta + (z_i - z_1) \cos \gamma \quad (1)$$

D_m がこの box中で最小であれば、 p を計算する。

$$p = [(x_i - x_1)^2 + (y_i - y_1)^2 + (z_i - z_1)^2 - D_m^2]^{1/2} \quad (2)$$

p が入力値 $p_{\max}$ より大きければ別の標的を探す。このようにして、正で最小の D_m を持つ原子 P_2 が標的原子として選ばれる。もし box中のすべての原子が対象から除かれる場合には、次の boxを探す。すなわち P_1 の飛行方向で最初に yz, xz, xy 面を切るそれぞれの x, y, z 座標を x_B, y_B, z_B としたとき、 $|x_1 - x_B|, |y_1 - y_B|, |z_1 - z_B|$ の小さい boxから順次テストをする。

- 2) 次に衝突点座標の計算は、2つの原子は、separation distance の点で衝突すると仮定してなされる。これはポテンシャル $V(r)$ のもとで2原子が最近接する中心間距離に等しく、以下で表わされる半径方向の速度成分がゼロとなる点である。¹⁷⁾

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{(2/M_0) [E_0 - V(r) - \ell^2 / (2M_0 r^2)]} \quad (3)$$

ここで r は中心間距離、 ℓ は角運動量 $p\sqrt{2M_0 E_1}$ 、 E_0 は重心系での全運動エネルギー $E_1 M_0 / M_1$ 、 M_0 は換算質量 $M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ である。(3)式で $dr/dt = 0$ とおくと、

$$V(R) = E_0 - \ell^2 / (2M_0 R^2) = (M_0 / M_1) E_1 (1 - p^2 / R^2) \quad (4)$$

従って a_{12} の screening の半径をもつ Bohr potential [Bohr 半径 = $a_0 = 0.529172 \text{\AA}$, 調整用パラメータ = λ]

$$V(r) = Z_1 Z_2 \exp(-r/a_{12}) / r, \quad a_{12} = \lambda a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} \quad (5)$$

に対しては

$$R = \frac{M_1 + M_2}{M_2} \frac{Z_1 Z_2}{E_1} \exp\left(-\frac{R}{a_{12}}\right) / \left(1 - \frac{p^2}{R^2}\right) \quad (6)$$

が得られ、これは $p \geq 1 \text{\AA}$ では、近似的に以下のようになる。

$$R = p(1 + \varepsilon), \quad \varepsilon = Z_1 Z_2 \left(\frac{M_1 + M_2}{M_2}\right) \exp\left(-\frac{R}{a_0}\right) / (2pE_1) \quad (7)$$

この剛体球半径 R の計算は、Fig. 3の SCATTR中、すなわち Fig. 5の最初の RADIUS ルーチンでなされる。そして衝突点の座標 (x_c, y_c, z_c) は原子 P_1 の中心座標を (x_1, y_1, z_1)、 P_2 のを (x_2, y_2, z_2) とすると、以下で与えられる (Fig. 6を参照)。

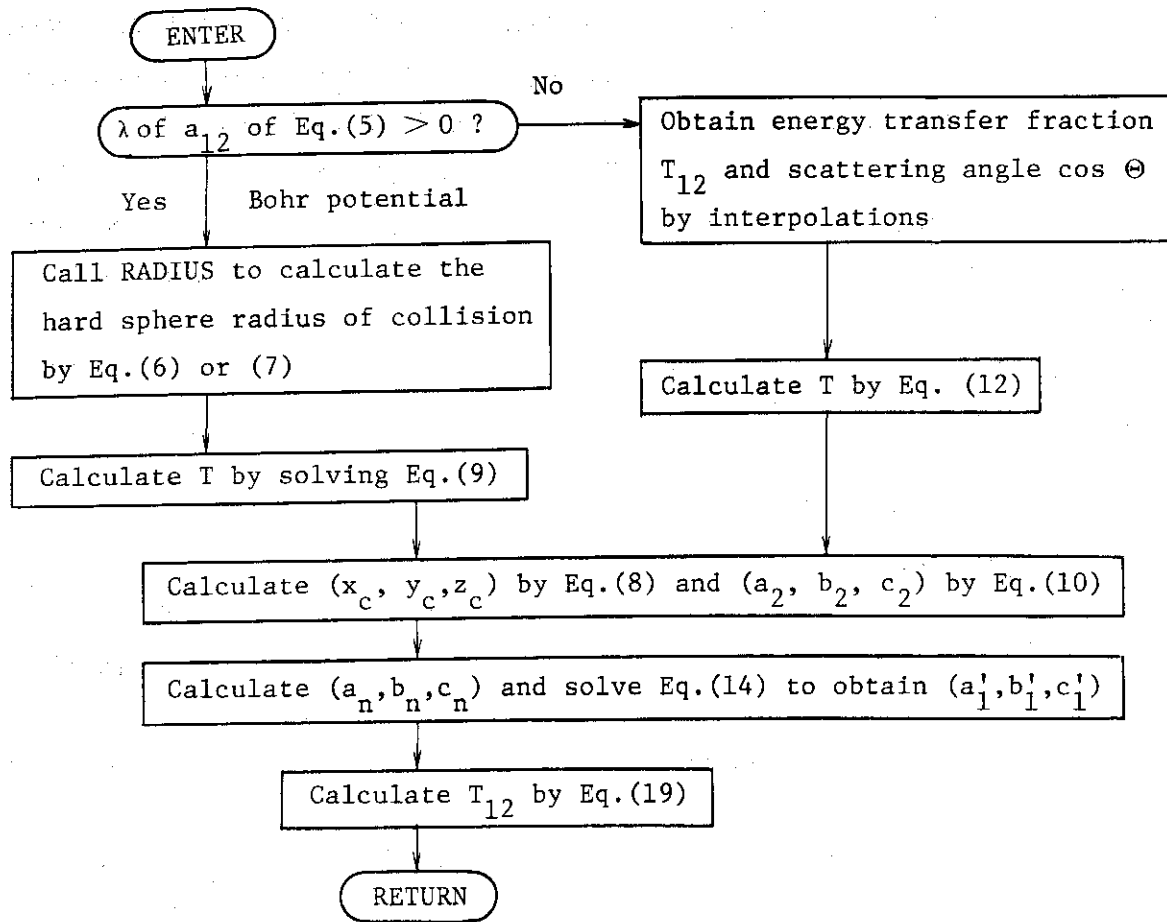


Fig. 5 Flow chart of SCATTR program for calculating the hard sphere radius, scattering angle and energy transfer by collision

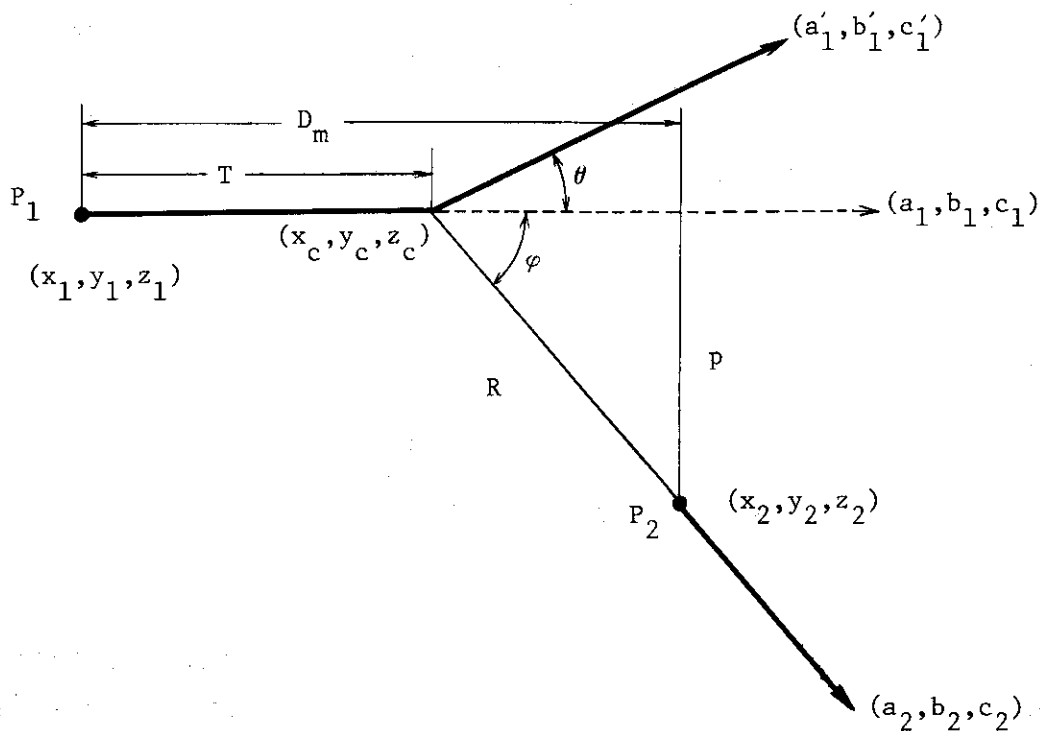


Fig. 6 Atomic collision in laboratory system

$$x_c = x_1 + a_1 T, \quad y_c = y_1 + b_1 T, \quad z_c = z_1 + c_1 T \quad (8)$$

ここで、 a_1, b_1, c_1 は P_1 の方向余弦、 $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma$ であり、 T は剛体球半径 R 、及び接触状態における x_c, x_1, x_2 等の関係式から決められるパラメータで、以下の解のうち小さい正の値として与えられる。

$$T^2 + 2BT + C = 0, \quad (9)$$

$$B = [a_1(x_1 - x_2) + b_1(y_1 - y_2) + c_1(z_1 - z_2)]$$

$$C = [(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 - R^2]$$

なお以下の関係がある。

$$R^2 = (x_c - x_2)^2 + (y_c - y_2)^2 + (z_c - z_2)^2 \quad (10)$$

現在のコードでは、Bohr screened Coulomb potential と共に、問題をもっと一般的に扱えるように、単一原子格子の場合には任意の入力されたポテンシャルから衝突のパラメータを計算できるようになっている。この際準備するテーブルは、エネルギー E_1 、impact parameter p の値に対するエネルギー伝達比 T_{12} と、重心系での散乱角の余弦 $\cos \Theta$ である。任意の (p, E_1) に対する T_{12} と $\cos \Theta$ は、SCATTR の最初で 2 重直線内挿式により求められる。この時、実験室系での標的核の散乱角 φ は Θ から次式によって決められる。

$$\varphi = (\pi - \Theta) / 2 \quad (11)$$

衝突点は、それと (x_2, y_2, z_2) とを結ぶ線が、 P_1 の飛跡と角度 φ をなす点とする。すなわち(8)式の T は以下により与えられる。

$$T = a_1(x_2 - x_1) + b_1(y_2 - y_1) + c_1(z_2 - z_1) - p(1/\sin^2 \varphi - 1)^{1/2} \quad (12)$$

なお、衝突の半径は(10)式により求められる。

3) 衝突後の P_2 の方向余弦 (a_2, b_2, c_2) は次式で与えられる。

$$a_2 = (x_2 - x_c)/R, \quad b_2 = (y_2 - y_c)/R, \quad c_2 = (z_2 - z_c)/R \quad (13)$$

一方 P_1 の衝突後の方向余弦 (a'_1, b'_1, c'_1) は以下の解として求められる (Fig. 6 を参照)。

$$\begin{aligned} a_n a'_1 + b_n b'_1 + c_n c'_1 &= 0, \\ a_2 a'_1 + b_2 b'_1 + c_2 c'_1 &= \cos(\theta + \varphi), \\ a_1 a'_1 + b_1 b'_1 + c_1 c'_1 &= \cos \theta \end{aligned} \quad (14)$$

ここで

$$a_n = b'_1 c_1 - b_1 c'_1, \quad b_n = c'_1 a_1 - c_1 a'_1, \quad c_n = a'_1 b_1 - a_1 b'_1 \quad (15)$$

は衝突面に対する垂線の方向余弦であり、 θ は P_1 の散乱角、 φ は P_2 の散乱前の P_1 に対する角で、剛体球モデルに対しては以下の関係が成立する。

$$\sin \varphi = p/R, \quad (16)$$

$$\cos \theta = \frac{M_1/M_2 + 2 \sin^2 \varphi - 1}{[(M_1/M_2)^2 + 2(M_1/M_2)(2 \sin^2 \varphi - 1) + 1]^{1/2}} \quad (17)$$

次いで P_1 が P_2 に与えるエネルギーは、運動量保存則から求められる。つまり、

$$M_1 V_1 = M_1 V'_1 \cos \theta + M_2 V_2 \cos \varphi, \quad (18)$$

$$0 = M_1 V'_1 \sin \theta - M_2 V_2 \sin \varphi \quad (18)$$

から計算すると以下のようになる。

$$T_{12} = E_2 / E_1 = 4M_0^2 \cos^2 \varphi / (M_1 M_2) \quad (19)$$

これらの量が Fig. 5 に示した SCATTR の後半で算出されている。

- 4) 原子のはじき出しのモデルは, Snyder-Neufeld に基づいている。¹⁹⁾ 従って E_d 以上のエネルギーを伝達された P_2 ははじき出されるが, Kinchin-Pease モデル²⁰⁾ と異なり, P_2 のエネルギーは $T_{12}E_1 - E_d$ と, ポテンシャルの井戸から出るために E_d だけ減少するとしている。また同様なモデルとして Seitz-Harrison モデルがあるが, これには置換衝突がない。現在の計算コードでは, はじき出し閾エネルギーの方向依存性も扱えるようになっており, はじき出された原子が最小原子間距離以上動かなければ, はじき出されたとはしていない。このモデルに関連した入力パラメータは, 次の3つである。¹⁸⁾

a) Ejection energy, E_e

標的原子が E_e 以上のエネルギーを得ると, はじき出される可能性を持つ。しかしこの原子が最終的に最小原子間距離以下しか動かなくて不安定なフレンケル対になった時は, 再結合を起すので, あたかもはじき出しは起らなかったように扱われる。一方これが安定なフレンケル対になった時, 初めてその空孔と孔子間原子が記録される。従って安定なフレンケル対を作る閾エネルギー E_d は一定でなく, 原子の放出される方向と周辺の格子状態に依存して来る。結果的には平均の E_d は $2E_e$ 以上となっている。一般に E_d は昇華エネルギー E_s の4倍にとられているので, $E_e = 2E_s$ と選んでいる。後に CLUSTER プログラムで欠陥の再結合を行うようになってからは, 安定なフレンケル対となるのはじき出しの距離は $(a/2)\sqrt{R}$ となり, R は特に指定しなければ5が採られている。¹⁵⁾

b) Subtraction energy, E_s

これは $E_2 \geq E_e$ のエネルギーを受けた標的原子が結晶の結合を破るのに使われるエネルギーである。従ってこの原子は, $E_2 - E_s$ のエネルギーで飛んでくることになる。コード中では $E_s = E_e$ となっているが, 別の値を入力することもできる。

c) Cut-off energy, E_c

ある原子が衝突を繰り返した結果, エネルギーが E_c より小さくなった時, それ以後の追跡は打ち切る。そして最近傍の格子間原子とする。特に指定しなければ, $E_c = E_e$ とおかれる。

以上の E_e, E_s, E_c を用いて, 以下の4つのうちのいずれの衝突が起きたかを, Fig. 7 に示した BKKEEP ルーチンで判定している。

a) 散 乱

P_1 は $E'_1 = E_1 (1 - T_{12})$ で飛び続け, P_2 は格子点に留まっている。

b) はじき出し

P_1 は $E'_1 = E_1 (1 - T_{12})$ で飛び続け, P_2 も $E_2 = E_1 T_{12} - E_s$ で格子点から出る。

c) 置 換

P_1 が P_2 の格子点に留まり, P_2 が $E_2 = E_1 T_{12} - E_s$ で格子点から出る。

d) 格子間原子生成

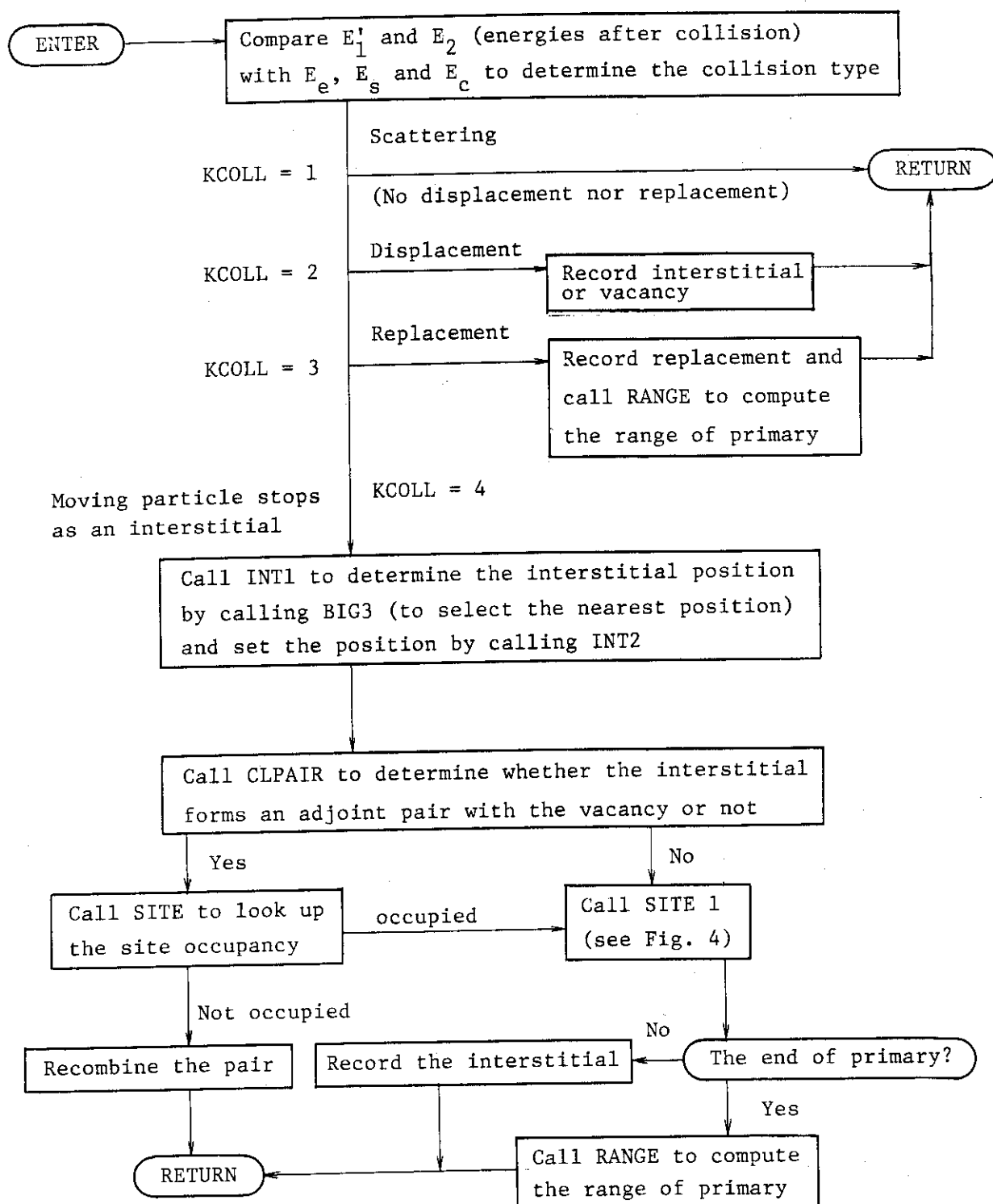


Fig. 7 Flow chart of BKKEEP program for determining the collision type and record the resulting defect on file (1)

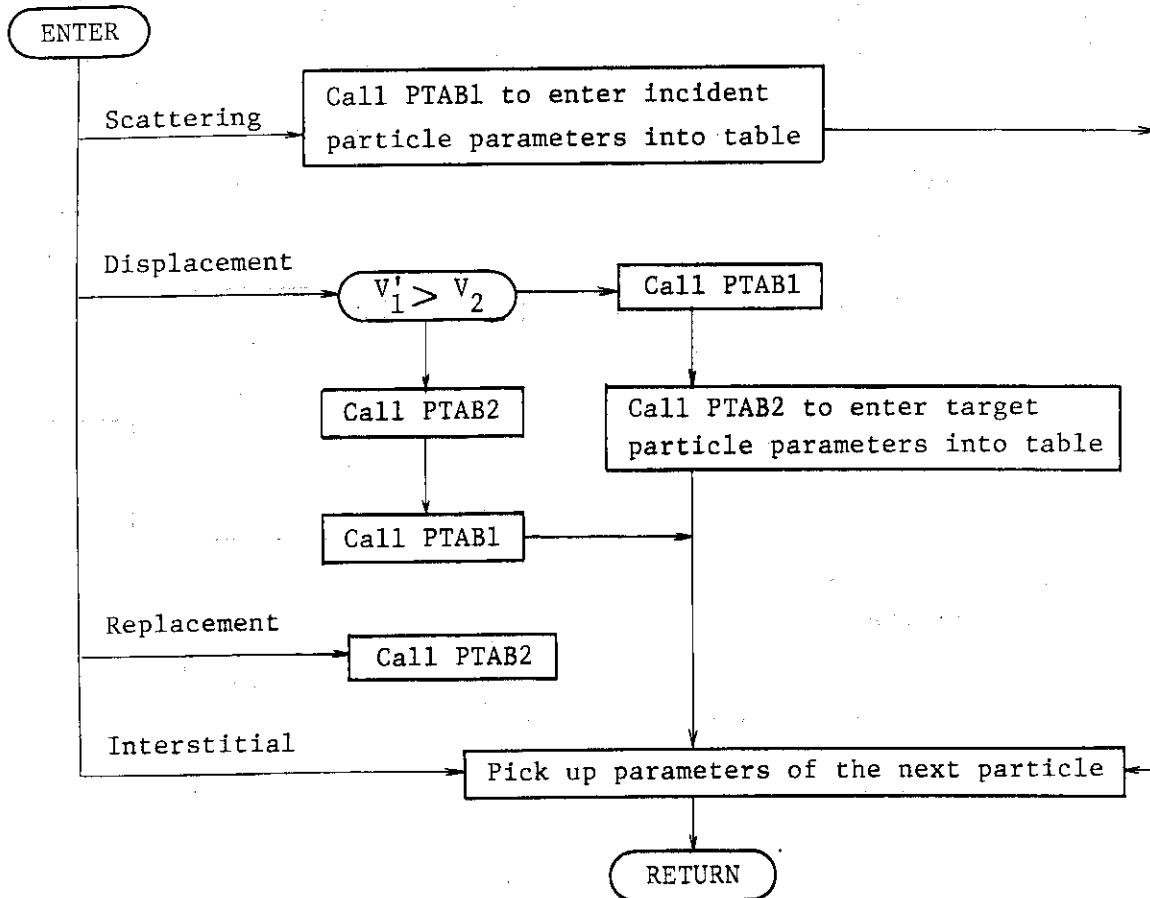


Fig. 8 Flow chart of PTAB program for dealing with parameters of the incident particle and the next particle

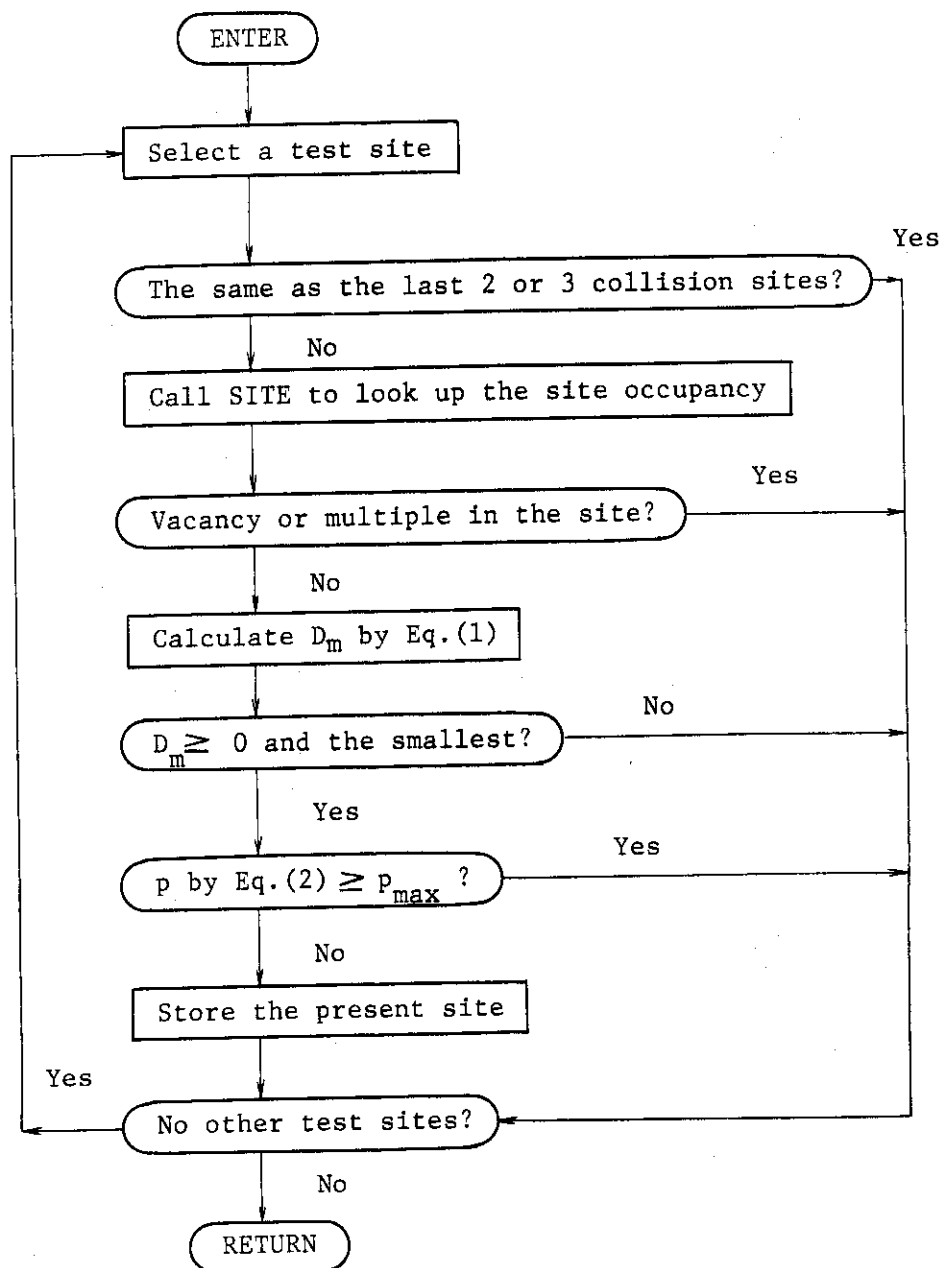


Fig. 9 Flow chart of TARGT2 program for selecting the target site

P_1 が P_2 近傍で止まり、 P_2 もそのまま格子点に留まっている。

最後の d) の場合には、格子間原子の位置を、標的原子と衝突点との位置関係により、最も近い 6 つの点の 1 つに決める。次いで、それが自分の出た空孔と不安定なフレンケル対になっているかを調べ、その際にはそれらを再結合する。この結果を記録した後、Fig. 3 の一番下を示したように、Fig. 8 の P T A B ルーチンで、自由原子のテーブルを更新し、次に追跡すべき原子をそのテーブルから拾いあげる。このテーブルには、全ての自由原子の種類、位置、運動の方向余弦、エネルギー、それのはじき出された位置の記録が含まれている。¹⁸⁾ 追跡は、ある時刻に格子中を動いている全原子について、最も速い原子から順番に、それぞれの次の衝突まで追跡する。そして、テーブル中の自由原子がなくなるまで計算を続ける。

なお Fig. 10 に示した MAIN2 (EDIT) では、まず Fig. 11 に示した BTEDIT ルーチンにより、Fig. 7 の BKKEEP で記録されたファイル(1)上の欠陥を [KSAT=2 のとき (後述) にはファイル(3)上の欠陥も含めて] 編集して、KPRINT=3 以外の際にプリント出力する。また次節で述べる MAIN3 (CLUSTER) へ結果を渡すため、ファイル(3)に欠陥のリストを書く。

2.2 MAIN3 (CLUSTER) と MAIN4 (SATURATION)

MAIN2 で作成されたファイル(3)上の欠陥を解析するのが MAIN3 (CLUSTER) で、その主な機能は以下のようである。¹⁵⁾

- 1) 不安定なフレンケル対をなす空孔と格子間原子を捜し、再結合させて欠陥のリストから消す。
- 2) Divacancy, di-interstitial, 及びそれ以上の数からなるクラスター状欠陥の位置を調べ、個々のクラスターのタイプを分類し、それをプリントする。
- 3) 種々なタイプの欠陥間の separation distance, 及びその最小値を計算する。そして欠陥の分布の xy, xz, yz 面への射影を図形表示する。

- 1) フレンケル対の安定性に関しては、前節の MAIN1 では、格子位置からはじき出された原子が、その位置から $(a/2)\sqrt{R}$ 以上離れた位置に留まった時は、安定なフレンケル対とし、これ以下だと再結合させた。MAIN3 (CLUSTER) では自分の出た空孔との距離でなく、すべての空孔と格子間原子との間隔が $(a/2)\sqrt{R}$ 以下の対を再結合する。

Closed-packed line 上の原子は $\sqrt{R}$ 以上でも不安定な場合があり、bcc では、相対格子座標で (000), (100), (111), (200), (222), (333) の位置が、fcc では、(000), (100), (110), (200), (220), (330) がそれぞれ、再結合の対象になる。

このように bcc と fcc では異なるので、MAIN3 は bcc 用の MAIN31 と fcc 用の MAIN32 に分れており、不安定なフレンケル対は、Fig. 12 の中央付近に示したように bcc については BUNSTB ルーチン、fcc については FUNSTB ルーチンで再結合されている。なおこの際、MAIN1 で決められた格子間原子の位置を、bcc の鉄と、fcc の

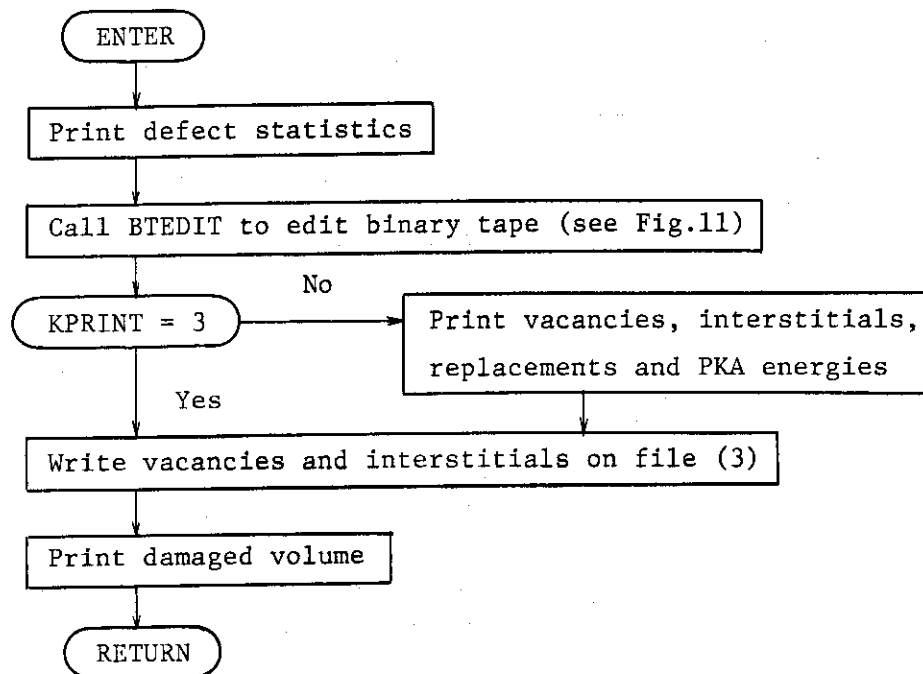


Fig.10 Flow chart of MAIN2 (EDIT) program of CASCADE/CLUSTER

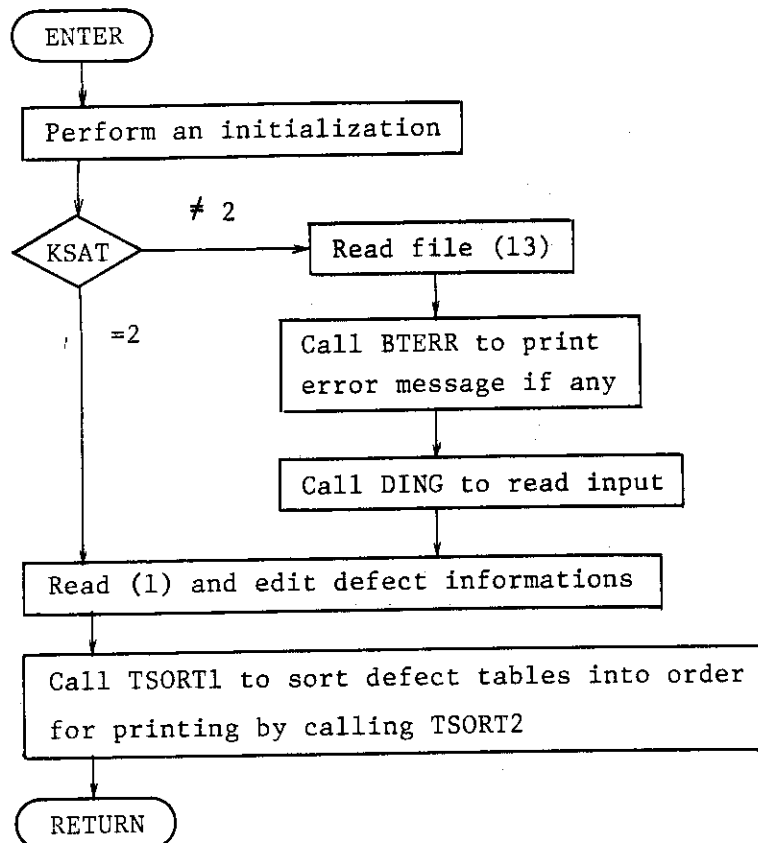


Fig. 11 Flow chart of BTEDIT program for editing binary file

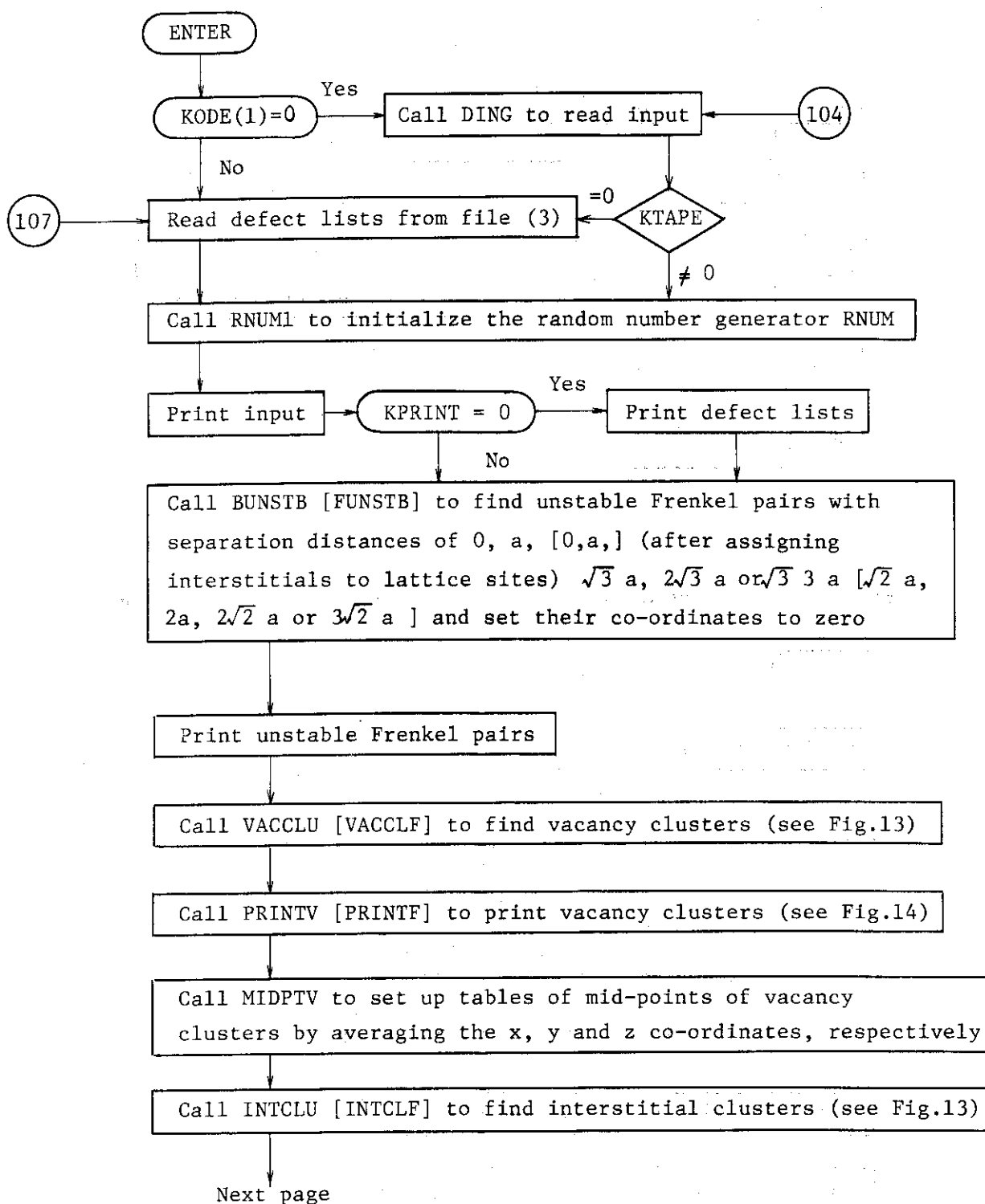


Fig. 12 Flow chart of MAIN31 [MAIN32] (CLUSTER) program for BCC [FCC] in CASCADE/CLUSTER

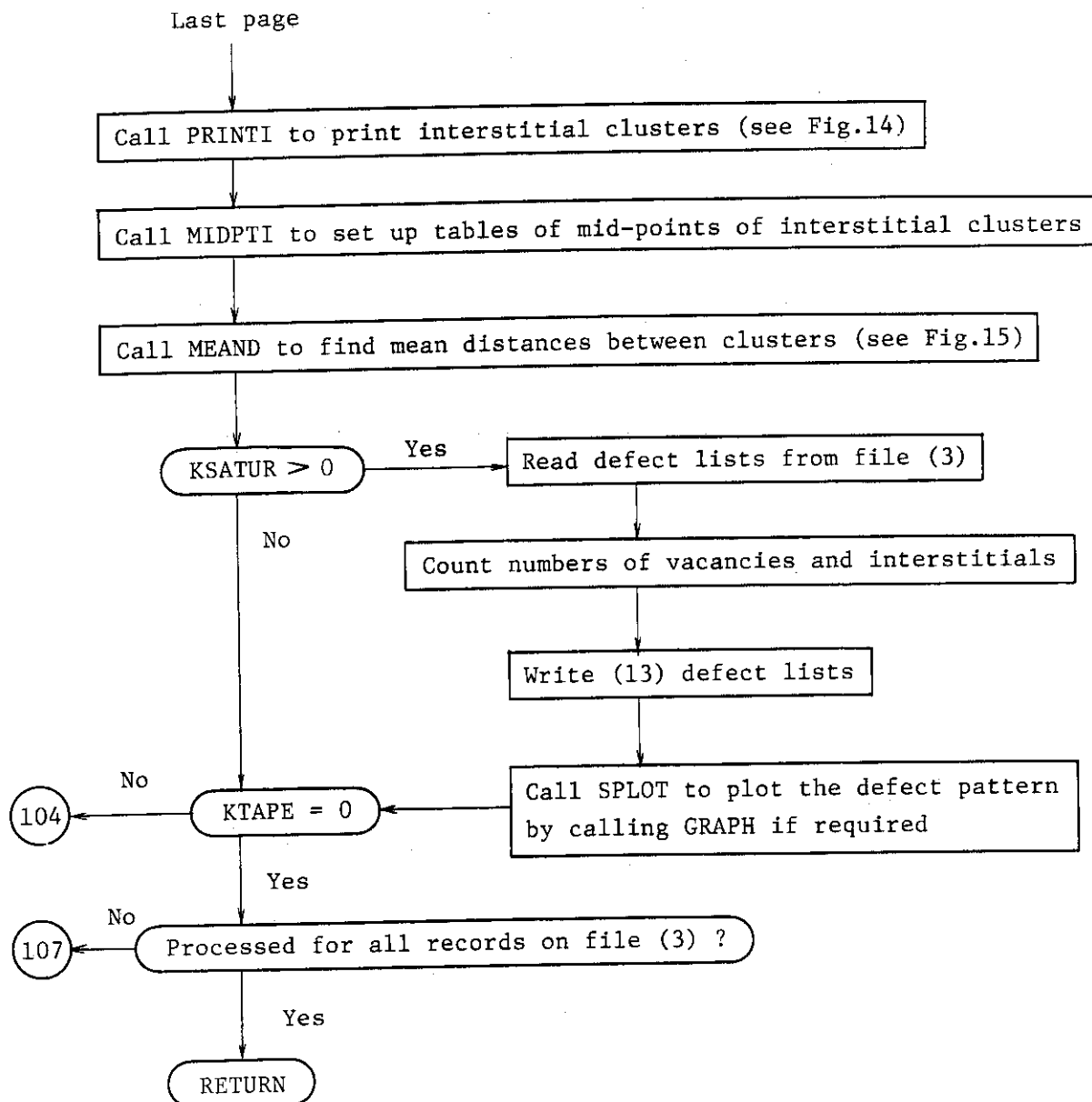


Fig. 12 (Continued)

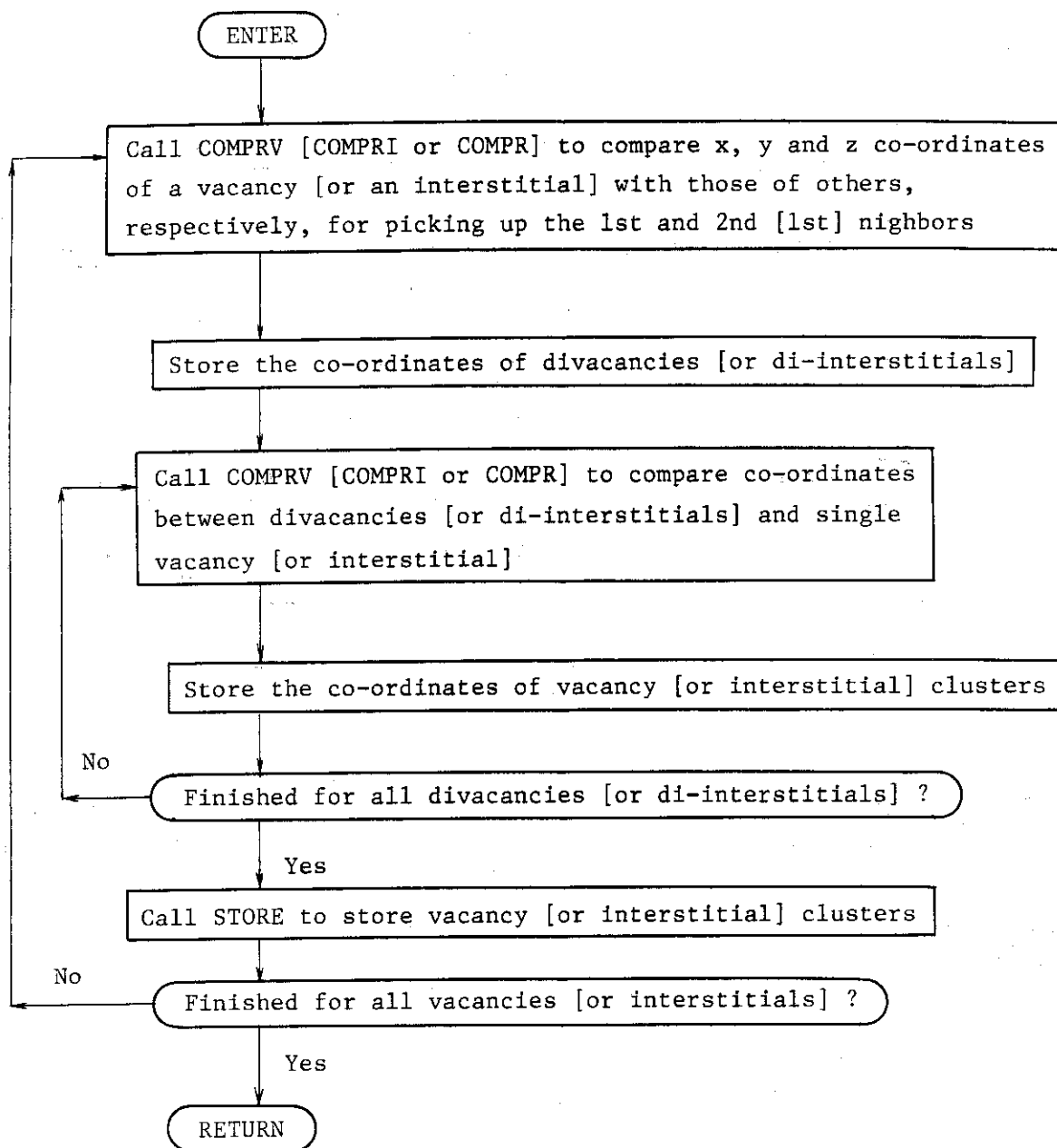


Fig. 13 Flow chart of VACCLU [INTCLU, VACCLF or INTCLF]
for finding vacancy [interstitial, vacancy or
interstitial] clusters in BCC [or FCC]

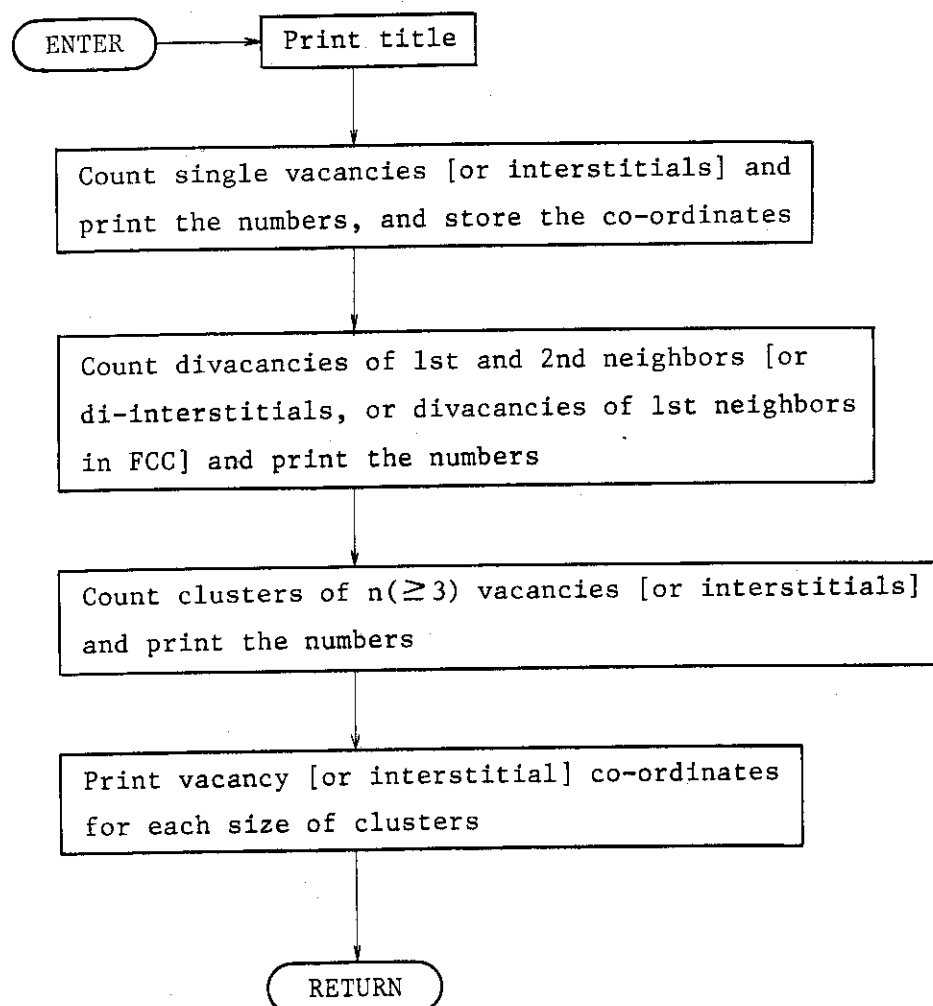


Fig. 14 Flow chart of PRINTV [PRINTI or PRINTF] for printing vacancy [interstitial, vacancy or interstitial] clusters in BCC [or FCC]

銅での状態に従って、格子点周りの split 状を模擬するように変更している。すなわち bcc の鉄では、最も安定な格子間原子は $[110]$ 方向の split 配列なので、MAIN1 で octahedral の位置に置かれたものを、その位置から等距離にある 2 つの最近接格子点の 1 つにランダムに置きかえる。Fcc についても $[100]$ の方向の split 配置が安定なので、body-centered の位置になっているのを、その位置から最近接にある 6 つの格子点の 1 つにランダムに置きかえている。これ以下で行うクラスター状欠陥への分類、その間隔の計算の正確を期するためである。

- 2) クラスター状欠陥として指定されるのは、bcc では最隣接と第 2 隣接にある空孔、あるいは最隣接の格子間原子のセットで、fcc では最隣接のセットのみである。Fig. 13 に示したように、bcc の空孔については VACCLU ルーチンで、bcc の格子間原子については INTCLU で、また、fcc の空孔、格子間原子については、それぞれ VACCLF, INTCLF で判定している。この結果をプリントしているのが、Fig. 14 に示したように、bcc の空孔、格子間原子に対しては、それぞれ PRINTV, PRINTI ルーチン、fcc に対しては、それぞれ PRINTF, PRINTI ルーチンである。
- 3) 種々のタイプの欠陥間の距離の計算は、欠陥を single vacancy, divacancy, それ以上の immobile vacancy, 及び single interstitial, di-interstitial, それ以上の immobile interstitial の 6 つに分類して、それら間についてなされている。すなわち i タイプの N_i 個の欠陥と j タイプの N_j 個の欠陥間の $N_i N_j$ 個 ($i = j$ のときは $N_i (N_i - 1) / 2$ 個) の距離が計算され、その分布が求められる。クラスターの位置としては、Fig. 12 に示した MIDPTV, あるいは MIDPTI で、それを構成している個々の欠陥の重心をとっている。そして Fig. 15 に示した MEAND ルーチン中で、同じタイプの欠陥間の距離は DIST S ルーチンにより、異種の欠陥間の距離は DIST D ルーチンにより、順番に 21 の欠陥間の組み合わせに対して計算が実施されている。その際、Fig. 16 から分るように、 N_i 個と N_j 個の欠陥間の距離に加え、 N_i 個の各欠陥から j タイプの欠陥までの最短距離も計算し、この N_i 個の値の分布も求めている。

MAIN31 あるいは MAIN32 の最後では、Fig. 12 に示されているように、KSATUR > 0 で MAIN4 を通る際には、欠陥のリストをファイル(3)に書くと共に、必要に応じて欠陥の分布を xy, xz あるいは yz 面へ射影した図を、新しく作成した SPLOT ルーチンによりプロットするようになっている。

MAIN4 (SATURATION) では、Fig. 17 に示したように、ファイル(3)に書かれた欠陥のリストを読み、それに従って、格子点の占有状態のテーブルを作成する。重照射を扱う際には、Fig. 1 から分るように、この状態の結晶中に PKA が MAIN1 で飛ばされるようになる。

なお、Fig. 18 には CASCADE/CLUSTER コード全体の構成を示しておいた。

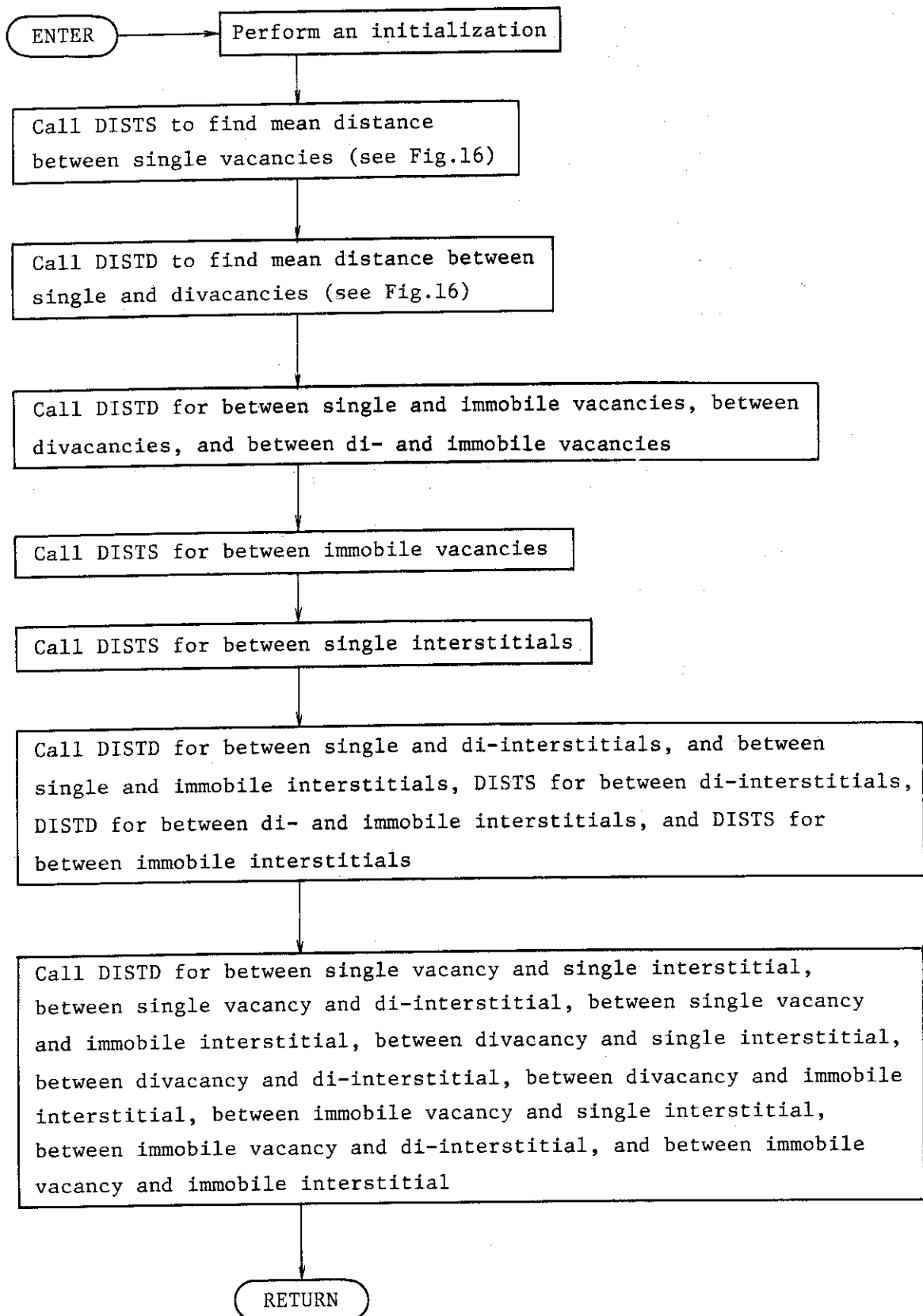


Fig. 15 Flow chart of MEAND for finding mean distances between defect clusters

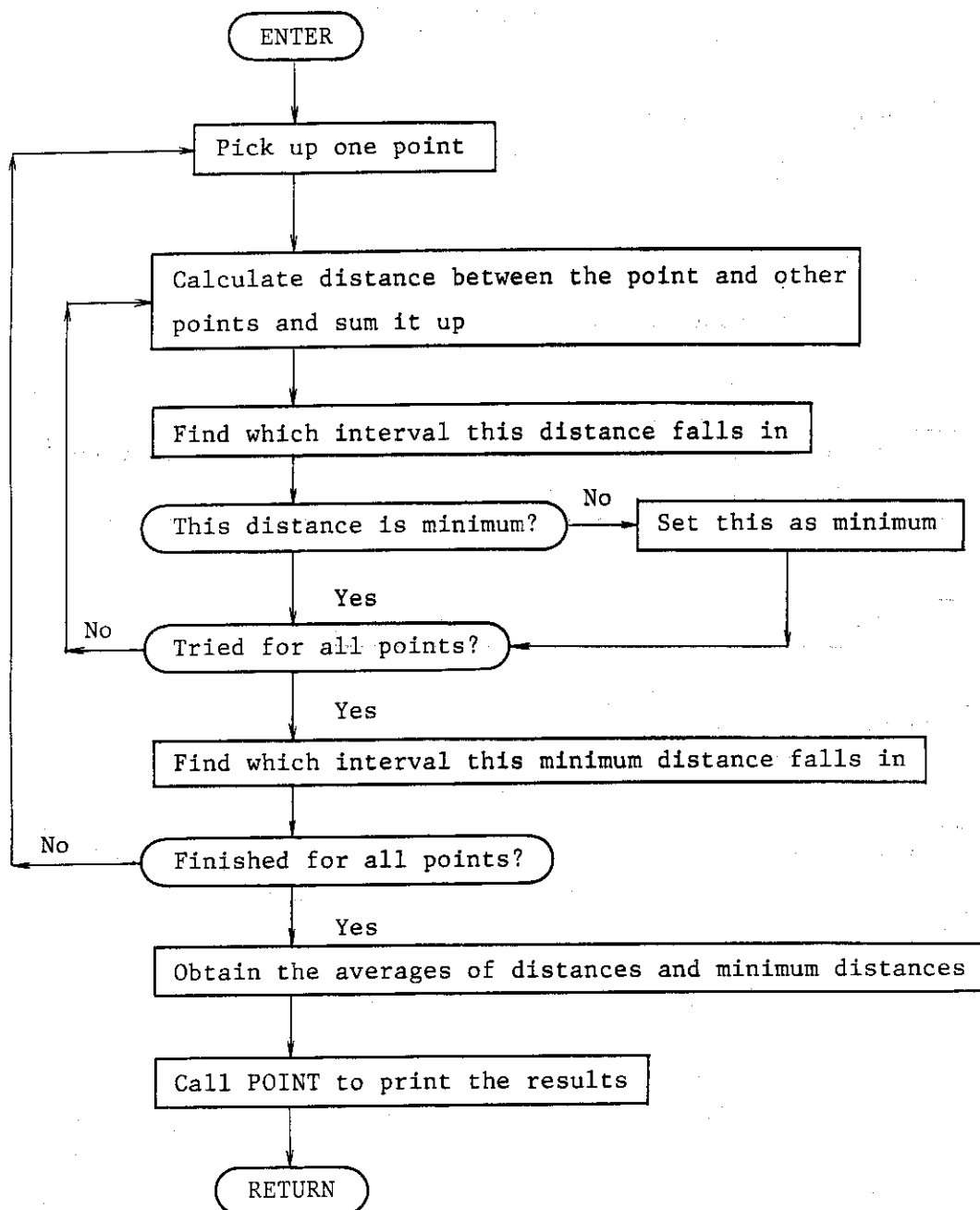


Fig. 16 Flow chart of DIST or DISTD for finding mean distance between two defects

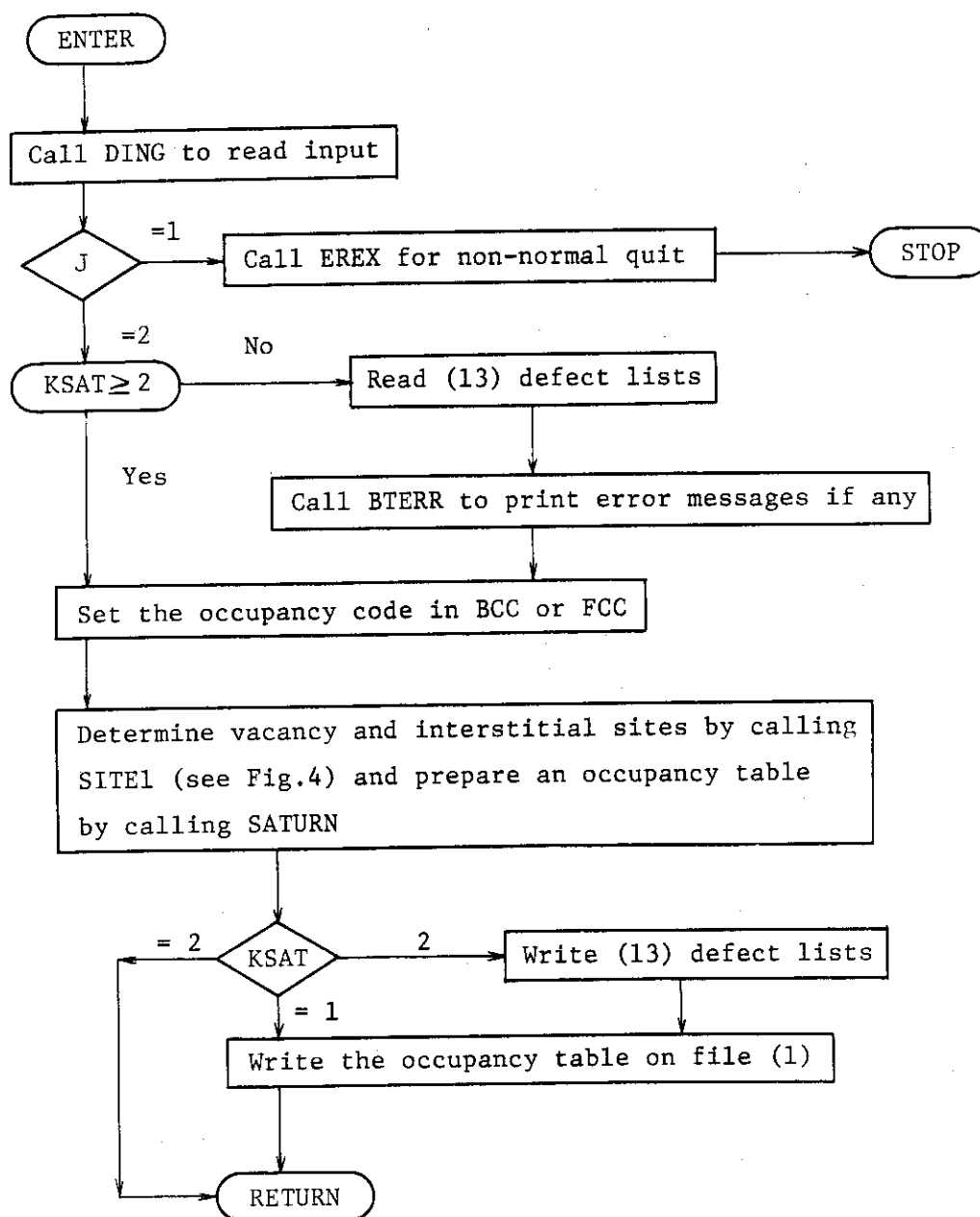


Fig. 17 Flow chart of MAIN4 (SATURATION) program of CASCADE/CLUSTER

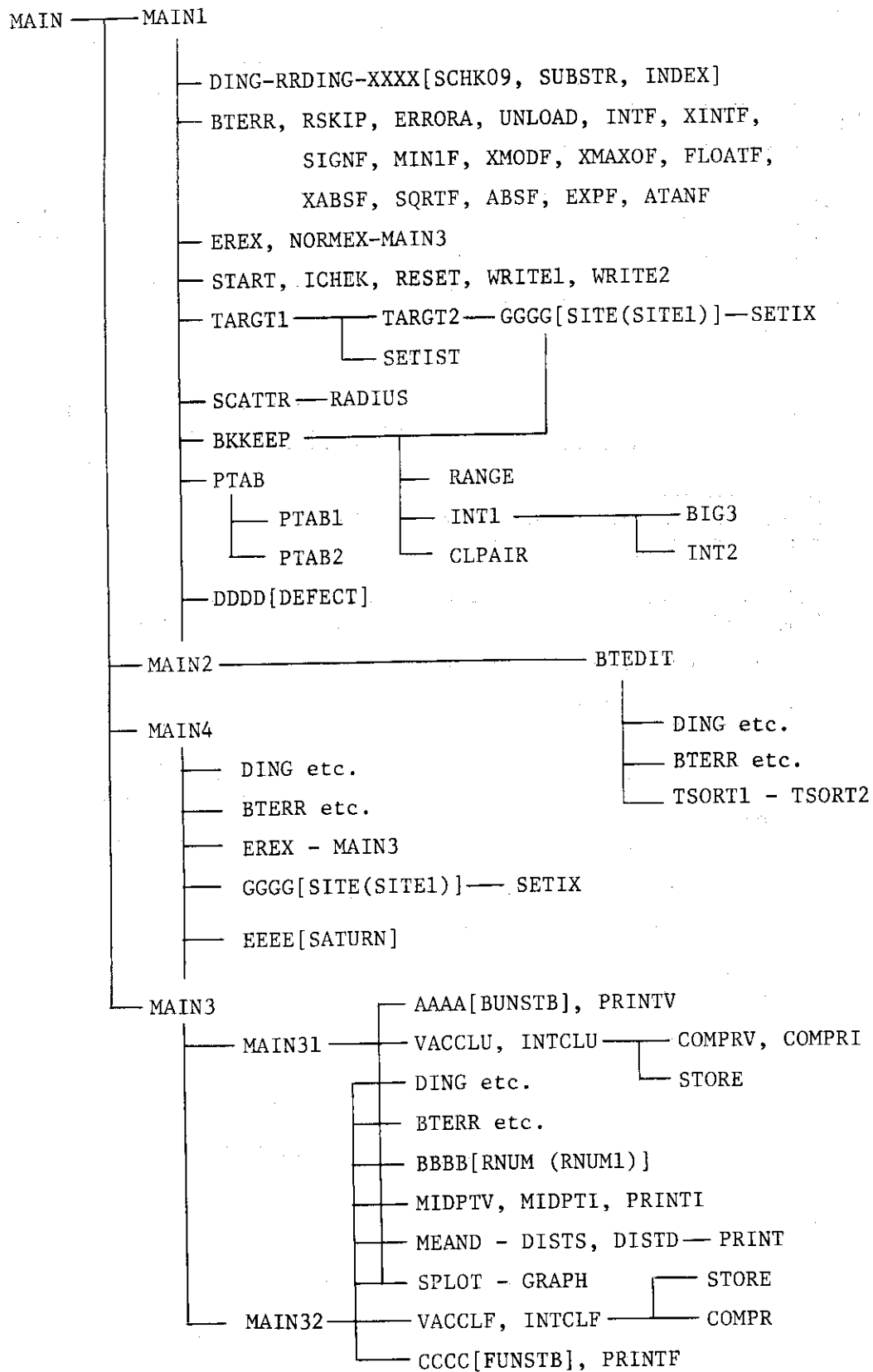


Fig. 18 Hierarchical structure of CASCADE/CLUSTER code

2.3 コードの使用法

2.3.1 入力データ

カードによる入力データは、Fig. 1のMAIN1で読まれるKCと、Fig. 12のMAIN31, MAIN32の最後のSPLOT用のデータ以外は、すべてDINGルーチンで読まれる。このDINGは、Fig. 18の最初の方に示されているように、RRDINGと要素名XXXXのFASPLルーチンも呼んでいるが、このための入力とは特殊な形式を要求する。すなわち、各カードの1行目には3, 4, 5, 8または=が必要で、3の場合にはその後に浮動小数点型データ、4の場合には整数型データ、5の場合には文字型データがくる。また=は、1連のデータの最後であることを意味し、1回のDINGの呼び出しでは=に遭遇するまで読み込まれる。8はMAIN1用のデータの最後を意味し、8に遭遇したときには、Fig. 2の上方でNORMEXを通してMAIN3に入るようになっている。1行目が3または4の際には、付録1、付録2の入力例からも分るように、その後に変数名がきて、その値が「・」ではさまれて入力される。5の際には、変数名の後に、その変数のDIMENSIONが「・」にはさまれて書かれてから内容が入力される。

以下にデータを(a)から(w)にグループに分けて説明する。DIMENSIONが1以上のものは、変数名のすぐ後にその大きさを括弧中に示し、データの型は、その下に浮動小数点型以外のものについて記した。

グループ	変 数 名	内 容		
(a)	KC (I 5)	= 0, MAIN 4を通さずにMAIN 1へ入る > 0, MAIN 4を通してからMAIN 1へ入る < 0, 計算を終了する (Fig. 1 参照)		
(b)	ID 1(4), ID 2(4) 各 (1 5 A 4)	表 題		
(c)	TYPE 1(3) TYPE 2(3) TYPE 3(3) 各 (3 A 4)	2原子系を扱っているので、完全結晶 box中の以下の格子座標 (i j k)にある原子の名前		
			b c c	f c c
		TYPE 1	すべての i, j, k が奇数	同左、及び i, j が偶数で k が奇数
		TYPE 2	すべての i, j, k が偶数	i が奇数で j, k が偶数、及び i, k が偶数で j が奇数
		TYPE 3は PKA の原子名		
(d)	CRYSTL (A 4)	結晶構造を、 'BCCb' か 'FCCb' と指定する		
(e)	PCHG(3) PMASS(3) ED(3)	それぞれTYPE1, TYPE2, TYPE3 の原子番号、質量数、ejection energy E_e (eV) (Fe, Cu, W に対しては ED=8, 7, 18 が使われている ¹⁵⁾)		

グループ	変 数 名	内 容
(f)	CLATT	結晶格子定数 $a(\text{\AA})$ (Fe, Cu, W に対しては, 2.8665, 3.6147, 3.1650 が使われている ¹⁵⁾)
	PMAXX	ポテンシャル切断距離, すなわち(2)式の p の $p_{\max}(\text{\AA})$ (Fe, Cu に対しては 2 が使われている)
	RELAX	2.1節4) の <i>ejection energy</i> の項で述べた安定なフレネル対となるはじき出しの距離の自乗 R (Fe, Cu に対しては 5 が使われている)
	XLMDX	Bohr screened Coulomb potential, (5)式, の $1 \leq \lambda \leq 2$ の値で, このポテンシャルを用いないときには 0 を入れる
(g)	X0, Y0, Z0	PKA の座標 ($\text{\AA}$) で, 格子座標 (ijk) とは $X0 = (a/2) \times (i - \frac{1}{2})$ 等の関係にある
(h)	E0	PKA のエネルギー (eV)
	COSA, COSB, COSG	PKA の方向余弦
(i)	KPRINT (整 数)	=1 Fig. 3 の中央に示されているように, 個々の衝突について, 自由原子, 標的原子のタイプ, 衝突のタイプ (Fig. 7 の KCOLL), 標的の格子座標, 自由原子の衝突前と後のエネルギー (eV), 伝達エネルギー (eV), (2)式の $p(\text{\AA})$, 及び(8)式の衝突点座標 (x_c, y_c, z_c) ($\text{\AA}$) がプリントされる =3 Fig. 10 に示されているように, 欠陥リストのプリントが省略される 欠陥リストは KPRINT=1, 2 のとき, すべての空孔, 格子間原子, 原子のタイプを変える置換衝突の格子座標が, z, y, x の増加する順序でプリントされる
	KLUSTR (整 数)	=1 Fig. 2 の中央に示されているように, MAIN1 の計算をせずに MAIN3 のみを実行する =3 MAIN1 の計算のみ実行し, MAIN3 には入らない
	KPRIM (整 数)	=1 PKA の衝突のみが追跡される (Channeling の計算などのため, この際には KLUSTR=3 とする)
	KREPL (整 数)	=1 標的原子と異なったタイプの原子との置換衝突のみ数える =2 すべての置換衝突を数える
	KSAT (整 数)	=1 MAIN1 を MAIN4 で作られた欠陥格子に対して実行する ($KC > 0$ が必要) (Fig. 11 参照)
(j)	ECO(3), ESUB(3)	それぞれ TYPE1, TYPE2, TYPE3 の cut-off energy E_c (eV), subtraction energy ES (eV) (入力しなければ ED がとられる)
	Bohr screened Coulomb 以外のポテンシャルを用いる場合 (XLMDX=0) [ファイル 00 から入力できる]	

グループ	変 数 名	内 容
(k)	NE, NIP (整 数)	エネルギー E_1 の入力数 ≤ 30 , 及び impact parameter p の入力数 ≤ 30 [但し XLMDA $\neq 0$ でも, 次の 2.3.2 節で述べるように, ファイル(0)を読まないように $(NE+NIP) > 0$ にしなければならない]
	E(30)	E_1 の値 (eV) [$E(1) = 0, E(NE) \geq E_0$]
	P(30)	p の値 (Å) [$P(1) = 0, P(NIP) \geq PMAXX$]
	COSINE(30,30)	$P(I), E(J)$ のときの重心系での散乱角の余弦 $\cos \Theta$ を COSINE(I, J) に与える
	ETRA(30,30)	$P(I), E(J)$ のときのエネルギー伝達比 T_{12} を ETRA(I, J) に与える
(l)	NDELX NDELY NDELZ (整 数)	Fig. 11 に示したように, KSAT $\neq 2$ のとき, ファイル(3)から読んだ欠陥を用いるが, その欠陥格子原点の格子座標 (ijk)。付録 2 の下半に示したように, KSAT $\neq 2$ のときのみ入力する (入力しなければ, すべて 0 だが, 入力することにより結晶をずらすことができる)。
(m)	NTVAL (整 数)	種々のタイプの欠陥間の距離のヒストグラムを作るための間隔の数 ≤ 100 (入力しなければ 64)
	TVALS(100)	格子座標単位での距離の各間隔の上限値 (入力しなければ 1, 2, 3, ..., 30, 35, 40, ..., 1000) (数枚のカードにわたって入力する際には付録 1 を参照)
	REGN (整 数)	8 進法での初期乱数
(n)	KTAPE=0 のときにはファイル(3)から読まれる	
	RID1(15), RID2(15) 各 (15A4)	表 題
	CONL	データ(f)の CLATT
	NVAC(2), NINT(2) (整 数)	TYPE1, TYPE2 原子のそれぞれ空孔, 格子間原子の数 ≤ 500
	KVACX, KVACY, KVACZ, KINTX, KINTY, KINTZ 各 (600, 2) (整 数)	TYPE1, TYPE2 原子の空孔, 格子間原子の x, y 及び z 格子座標
(o)	KTAPE (整 数)	=0 Fig. 12 の最初に示したように, ファイル(3)からデータ(p)を読む (入力しなければ 0) =1 データ(p)をカード入力する
	NRECRD (整 数)	ファイル(3)上の処理すべきレコード数 (Fig. 12 の最後を参照) ≤ 10 (入力せず 0 のときは全レコードを処理する)
	KRECRD(10) (整 数)	処理すべきレコードの番号 (NRECRD だけ入力する)

グループ	変 数 名	内 容
(o)	KPRINT (整 数)	=1 Fig. 12 の最初に示したように、入力した欠陥のリストはプリントしない(入力しなければ0でプリントする)
	KSATUR (整 数)	=1 Fig. 12 の最後の方に示したように、安定な欠陥のリストをファイル(3)に書き、これをMAIN1の初期条件に用いる(入力しなければ0)
(p)	IXY, IXZ, IXY IXMIN, IXMAX, IXW IYMIN, IYMAX, IYW IZMIN, IZMAX, IZW (1 2 1 6)	欠陥のパターンを図形出力するとき(KSATUR=1も必要)の射影面がxy面, xz面, yz面のとき、それぞれ1とする(0のときは出力しない) 図面のx軸の格子座標の下限と上限、及びその間隔のcm単位での図面上の長さ 図面のy軸に対して同上 図面のz軸に対して同上
(q)	IXP, IYP, IZP (3 1 6)	図面上でx軸のIXP格子座標, y軸のIYP格子座標, z軸のIZP格子座標に線を描く (PKAの出発位置を示すためなどに便利)
(r)	KSAT (整 数)	=1 Fig. 17 に示したように、初期条件としてファイル(3)に書かれている欠陥格子を用い、格子の占有状態をファイル(1)に書く(Fig. 11 参照) =3 欠陥リストはカード入力され、それがファイル(3)に書かれると共に、格子占有状態がファイル(1)に書かれる(Fig. 17 参照) (入力しなければ0)
	NDELX, NDELY, NDELZ (整 数)	KSAT=1のときファイル(3)に書かれている欠陥格子原点の格子座標を入力する〔データ(4)に同じ〕
(s)	CRYSTL	データ(d)と同じ
(t)	CHECK	≠0のとき、50までの欠陥boxの占有状態がプリント出力される
(u)	ID1(4), ID2(4) CLATT NVAC(2), NINT(2) KVACX, KVACY, KVACZ, KINTX, KINTY, KINTZ 各(600, 2)	データ(n)と同じ 〔KSAT=1のときはファイル(3)から読まれる〕

以上がカード入力データのすべてだが、データ(a)はMAINで、(b)~(k)はMAIN1で読まれる。MAINでは、これらの領域全部に0が入れられるが、MAIN1では、Fig. 2の上方のSTARTルーチンで、データ(i)のすべてに2が入力される。従って付録1, 付録2ではこれらを入力しているが、NE以外は省略してもよい。また両方の付録とも、データ(j), (k)はNE

以外は入力していない。これらの問題では Bohr screened Coulomb potential を用いるので、XLMDA $\neq$ 0 で、データ(k)は不必要である。しかし次の 2.3.2 節で述べるファイル(0)を読まないように、Fig. 2 の中央に示されているように (NE+NIP) $\neq$ 0 にするため、NE=1 を入力している。MAIN 1 の一連のデータの終りには = が入力されるが、種々の問題を続けて計算する場合には、付録 1 に示したように、その前の問題とは異なるデータのみを入力すればよい。計算結果の欠陥リストは、ファイル(3)に順番に書かれるので、MAIN 3 で一連のデータ、(m)~(o)を読んだ後、それに従って順番に処理される。従って MAIN 1 用 (MAIN 2 用の入力が必要なきときにはこれも含む) の入力が全部終了したときには、それを示すため、1 行目が 8 のカードが必要である。MAIN 3 用のデータの前のデータ(0)は MAIN 2 用で、付録 1 では MAIN 1 で KSAT=2 なので入力していないが、付録 2 では 2 番目の問題で KSAT=1 となっていて入力されている。

MAIN 3 用のデータは、先述のように (m)~(o) であるが、データ(o)は、MAIN 3 1 か MAIN 3 2 を呼ぶ MAIN 3 プログラム中ですべて 0 にセットされる。なおデータ(n)は、Fig. 12 の最初に示したように、KTAPE=0 のときにはファイル(3)から読まれるので、付録 1、付録 2 とも入力していない。この MAIN 3 用の一連のデータの最後には = が必要である。KSATUR $>$ 0 の際には、Fig. 12 の最後の方に示したように、次の MAIN 1 での計算の初期条件として計算結果の欠陥格子を用いるため、欠陥リストをファイル(0)に書いた後、欠陥パターンを SPLOT ルーチンにより図形出力するためのデータ(p),(q)が必要である。付録 2 にはこのデータも示されている。付録 1 の際にはこれで計算を終らせるので、最後にデータ(a)の KC とし て -1 を入力している。付録 2 の際には、KC=1 とし て MAIN 4 に入るようになっている。MAIN 4 用のデータは (r)~(u) で、このうち (r)~(t) は、プログラム中では KSAT が 0 にセットされている以外は定義されていないので、必ず入力する必要がある。最後のデータ(u)は、KSAT=1 のときには、Fig. 17 の最初の方に示したように、ファイル(0)から読まれるので入力する必要がない。この一連のデータの最後にも = がくるが、付録 2 では、その後更に MAIN 1 用のデータ、MAIN 2 用のデータ、MAIN 3 用、及び SPLOT 用データが入力された後、KC=-1 とし て終了している。

2.3.2 カード・セットアップと出力

CASCADE/CLUSTER コードの計算実行のためのカード・セットアップは、付録 1 及び 2 に示されている。その際のセグメント構造は Fig. 18 に示したものだが、必要なファイルとしては 1, 2, 3, 10, 13 の 5 本を使用している。

まず F01 は格子点の占有状態の記録ファイルで、Fig. 7 にも示したように、占有状態の変化の都度、4 語が記録される。すなわち、関係している原子が TYPE1, TYPE2, TYPE3 であるとき、K=1, 2, 3 とし、Fig. 7 の KCOLL=2, 3, 4 の際、N=10 (標的が格子間原子の際には 50), 30, 20, 更に Fig. 7 の左下で再結合したとき N=40 とし、(N+K) を第 1 語に書き、次いでその現象の起った格子座標を第 2~4 語に書く。これらは 100 語づつまとめてバイナリ形式で書かれ、Fig. 11 の BTEDIT プログラム中で読んで欠陥リストに編集している。

ファイル(2)は単なるスクラッチだが、F 0 3は、前節でも述べたように、MAIN 1で求められた欠陥リストをMAIN 3へ橋渡しするファイルである。内容としては、前節のデータ(n)のすべてが1つのレコードとして、以下のバイナリ形式で書かれる。

```
(RID1(I), I=1, 15), (RID2(I), I=1, 15), CONL, NVAC(1), NVAC(2), NINT
(1), NINT(2), (KVACX(I, 1), I=1, NVAC(1)),
(KVACY.....), (KVACZ.....), (KVACX(I, 2), I=1, NVAC(2)),
(KVACY.....), (KVACZ.....), (KINTX(I, 1), I=1, NINT(1)),
(KINTY.....), (KINTZ.....), (KINTX(I, 2), I=1, NINT(2)),
(KINTY.....), (KINTZ.....)
```

次のファイル(10)は、前節のデータ(n)を入力するため、カード入力で $(NE+NIP)=0$ としておくと、Fig. 2の中央に示されているように、F 1 0からこれらのデータが読まれる。ファイル中にはバイナリ形式で、最初のレコードとしてNEとNIPの2語、2番目のレコードとして $(E(J), J=1, NE)$, $(P(I), I=1, NIP)$, $((COSINE(I, J), I=1, NIP), J=1, NE)$, $((ETRA(I, J), I=1, NIP), J=1, NE)$ の $NE+NIP+2*NE*NIP$ 語が書かれる。

最後のF 1 3は、前節でも述べたように、KSATUR>0の際、MAIN 3で求められた安定な欠陥を、MAIN 1の初期条件として橋渡しするためのファイルで、前節のデータ(n)が書かれている。形式は上述のF 0 3に書かれているデータ(n)と同様だが、それから不安定なフレンケル対が除かれ、かつ格子間原子の位置が、2.2節で述べたように、MAIN 3ではsplit状態を模擬するように変更されたが、F 1 3に書くときは、もとの位置、すなわちbccに対してはoctahedral, fccに対してはbody centerの位置に戻されている。このファイルは、Fig. 17に示されているようにMAINで読まれ、これにより格子の占有状態のテーブルが作成されてF 0 1に書かれるのである。

プリント出力については、付録3に例を示した。これは付録2の例題の出力の1部である。この例題では、まず、銅の完全結晶中の $X0=Y0=Z0=362.3737\text{\AA}$ 、すなわち格子座標で $(200, 200, 200)$ から、 $\theta=0.954965^\circ$, $\varphi=44.04569^\circ$ の方向(Fig. 19参照)に1 keVのCuのPKAが飛ばされる。その入力データのリストが1ページ目にプリントされている。KPRINT=1の際には、2.3.1節で述べたように個々の衝突の記録が次にプリントされるが、例題では、これはない。第2ページには結晶中に作られたTYPE1, TYPE2原子(今の場合両方とも銅原子)の格子間原子、空孔、置換衝突の数がプリントされる。しかし、この数にはPKAは含まれないので、PKAが格子間原子になった際には、プリントされた格子間原子と空孔の全数は等しくなるが、PKAが置換衝突した際には、格子間原子の方が1つ多くなる。第2ページには、更に、PKAの $(X0, Y0, Z0)$ からの直線距離と、その止まった位置の格子座標が書かれている。次いで、これら空孔、格子間原子、置換衝突の位置の格子座標が、TYPE1, TYPE2それぞれに対してz, y, x座標の小さい順にプリントされるが、これは付録3には示さなかった。

次に出力される付録の1ページ目下を示したprimary knock-on energyは、PKAによりはじき出されたすべての原子(この例では、TYPE1のが2個のみ)のエネルギー(ESUB

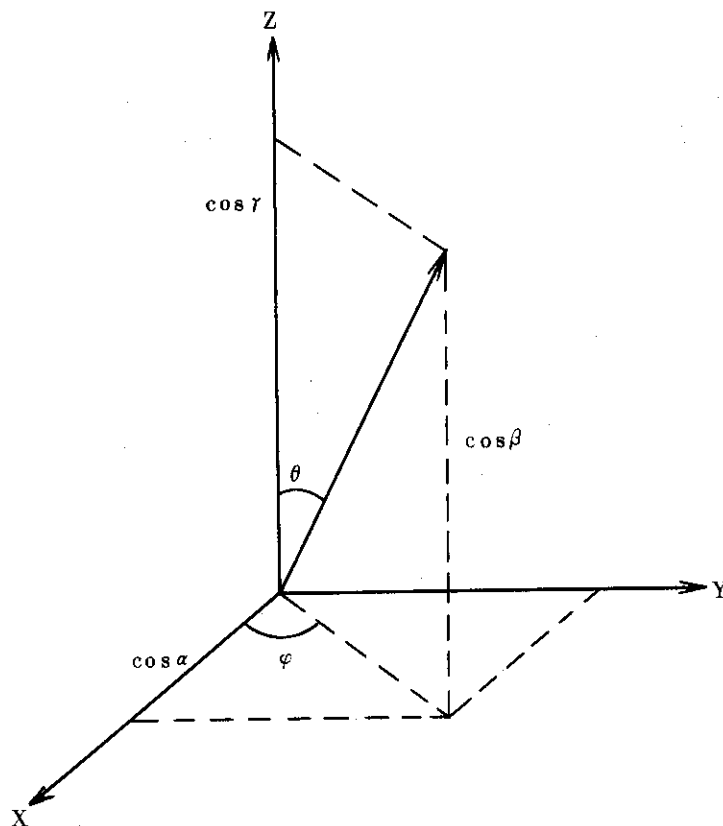


Fig. 19 Take-off direction of a PKA

は差し引いている)である。衝突全数は、最大値として20,000がセットされており、これ以上になると計算が打ち切られるようになっている。また、損傷領域の体積は、少なくとも1個の点欠陥をもつ box の体積の和であり、今の場合、box の体積は $(3.6147 \times 2)^3 = 377.84 \text{ \AA}^3$ なので、 $377.84 \times 43 = 1.625 \times 10^4$ となっている。計算コードの扱える最大損傷体積は 1.500 box なので、 $377.84 \times 1.500 = 5.668 \times 10^5 \text{ \AA}^3$ である。

付録3の2ページ目からはMAIN3の出力で、Fig. 12に示されているように、KPR-INT=0の際には、ファイル(3)に書かれている表題とか欠陥リストが、まずプリントされる。3ページ目中央にはMAIN3で見付けられた不安定なフレンケル対のリストとそのタイプが示されている。タイプとしては、2.2節の最初で述べた不安定なフレンケル対の相対座標の順に、0, 1, 2, 3, 4, 5と番号が付けられている。0と1のタイプ以外については、格子間原子は格子位置に戻されている。3ページ目下半には、安定な空孔が、それぞれのクラスターのタイプに分類されてプリントされており、その下には格子間原子クラスターがプリントされている。なおbccのdivacancyについては、最隣接のものと、それより安定な第2隣接のものが分けて出力される。

3ページ目以後は、種々のタイプの欠陥間の距離のリストで、付録3には最初の2ページのみ示しておいた。まず最初は、13個あるsingle vacancy間の $_{13}C_2 = 7.8$ の距離について、それらの平均が、3つの単位で最初に表示されている。次の平均最小距離は、各々のsingle vacancyから他のsingle vacancyまでの最短距離(これは13個ある)の

平均である。次いで入力データの TVALS に従って区分された区間に対して、I ~ V の欄は 78 個の距離、VII ~ X の欄は 13 の最小距離について、それぞれ分布が示されている。例えば 2 列目は、格子座標単位で 1.0 ~ 2.0 の距離のが 1 個あり、従って全体の $1/78 = 0.01282$ で、第 III 欄はその区間までのこの割合の和であり、第 IV 欄は単位格子体積あたりに規格化したヒストグラムで $1/[(4/3)\pi(2^3 - 1^3)] = 0.34105$ 、第 V 欄は単位立方 Å に規格化したヒストグラムで、今の場合 $(3.6147/2)^3$ で第 IV 欄のを割った値になっている。

次のは 13 の single vacancy と 1 つの divacancy (付録 3 の 2 ページ目中央を参照) 間の距離についての表である。これに続いて、single と immobile vacancy 間、divacancy と immobile vacancy 間、single interstitial 間、single の空孔と格子間原子間、divacancy と single interstitial 間、immobile vacancy と single interstitial 間の距離の表がプリントされる。

以上で MAIN 3 での計算が終り、付録 2 に示されている SPLOT 用の入力データに従い欠陥のパターンが図形出力される。付録 4 にその例を示したが、上方の図は xy 面への射影で、空孔は正方形、格子間原子は三角形で示されている。今の場合は、大体 z 軸の正方向に沿って (200, 200, 200) から PKA が飛ばされているので、(x, y) = (200, 200) を中心に等方的に欠陥が分布し、空孔を囲むように格子間原子ができています。下方の図は yz 面への射影である。

今扱っている付録 2 の問題では、この欠陥格子中に、次の PKA が飛ばされるので、Fig. 1 の流れに従い次には MAIN 4 に入る。ここでは、2.3.1 節で述べたように CHECK ≠ 0 のとき、50 個までの欠陥 box の占有状態がプリント出力される。今の場合はこのプリントはないが、少なくとも 1 つの空孔、格子間原子、あるいは置換衝突の起きた box を、欠陥のできた順番に、その座標 (IJK) がストアされている。そしてその box 中の全格子点の占有状態が、Table 1 に示した順番でプリントされる。すなわちプリントは 9 つの欄に分れており、第 1 欄にプリントされる 12 個の数字の最初の 8 個が、Table 1 の最初の行に書かれている 8 個の位置、すなわち (IJK) box 中の (111) ~ (411), (121) ~ (421) の位置の占有状態を示し、次の第 2 欄の 12 個のうちの最初の 8 個の数字が (131) ~ (431), (141) ~ (441) の位置の占有状態を示すようになっており、第 8 欄までで 1 つの box 中の $4^3 = 64$ 個の位置の占有状態が示されている。最後の第 9 欄の 12 個の数字は、4 個ずつに分れて 8 進法でそれぞれ I, J, K を示している。格子の占有状態を示す数字は、0, 1, 2, 3, 4 がそれぞれ、占有なし (空孔を含む)、TYPE 1 の原子、TYPE 2 の原子、PKA、2 重に占有された状態、を表わす。従って完全結晶では、第 1, 第 2, 第 5, 第 6 欄は、最初の 8 数字が、fcc では 1010, 0000, fcc では 1010, 0101, 残りの 3, 4, 7, 8 欄は、fcc では 0000, 0202, fcc では 0202, 2020 となる。なお余分の最後の 4 数字は、すべて 0 にセットされている。

付録 3 の 4 ページ目は、欠陥格子中に飛ばされる PKA についての入力データのプリントで、1 ページ目と同じだが、PKA の飛ぶ方向の ϕ のみ $2.8.6.4.8.0.2^\circ$ に変っている。その下は、この結果作られた結晶中の全欠陥のリストで、格子間原子は 2 ページ目に示されている 19 個から 49 個に増え、空孔も 18 個から 47 個に増加している。置換衝突については 1 ページ

Table 1 Lattice position (ijk) of a box represented by each position of each printed column by CASCADE/CLUSTER

Position Column	1	2	3	4	5	6	7	8
1	111	211	311	411	121	221	321	421
2	131	231	331	431	141	241	341	441
3	112	212	312	412	122	222	322	422
4	132	232	332	432	142	242	342	442
5	113	213	313	413	123	223	323	423
6	133	233	333	433	143	243	343	443
7	114	214	314	414	124	224	324	424
8	134	234	334	434	144	244	344	444

Table 2 Limitations imposed upon CASCADE/CLUSTER from available DIMENSION's

Item	Maximum number
Vacancies	500 for each type (partly 600)
Interstitials	500 " " (" ")
Replacements	300 for each type
Primary knock-on atoms by PKA	300 " "
Moving atoms	300 at any one type
Occupancy change events	3500
Damaged boxes	1500 (24,000 atoms in bcc or 48,000 atoms in fcc)
Collisions	20,000 (10,000 if KPRIM = 1)

目の24個は足されていない。4ページ目下～5ページ目は、前の2ページ目中央から下半に対応し、除かれるべき不安定な欠陥、残った安定な欠陥の種々のクラスター・タイプへの分類結果が示されている。空孔は大きなクラスターを形成していることが、5ページ目に示されている。これは付録4の4番目の図からもよく伺える。この第3, 第4の図は、付録3の5ページ目に示されている結果の xy 面, yz 面への射影である。

Error messageについては、入力データをDINGルーチンで読む際、データの型を示す数字が0となっていると、RRDINGルーチンでSIGN ERRORをプリントし、計算を打ち切る。また、入力データを読み込んだ後、最初の問題に際しては、Fig. 2に示されているように、ICHECKでデータに矛盾があるかどうかを調べ、矛盾があった場合にはメッセージを書き計算を打ち切る。一方バイナリ・ファイルの読み書きでerror となったときは、BTERRルーチンで、その由のメッセージを書く。MAIN1中でこのようなerror に遭遇した際、次にMAIN3の計算に移るように入力データで指定されているときには、MAIN1のその後の計算を打ち切ってMAIN3に移る。

最後に、CASCADE/CLUSTERコードのDIMENSION から受ける制限をTable 2にまとめておく。なお、MAIN1では2原子系が扱えるが、MAIN3, MAIN4では単原子系しか扱えない。

3. MARLOWE コード

3.1 コードの機能

MARLOWE コードも計算の大筋においては、CASCADE/CLUSTERと同じであるので、その相異を簡単に述べる。全体の計算の流れはFig. 20 に示した。原子間衝突は2体衝突近似だが、ポテンシャルは以下で表わされるThomas-FermiポテンシャルのMoliere 近似が組み込まれている。¹³⁾

$$V(r) = (Z_1 Z_2 / r) f(r), \quad (20)$$

$$f(r) = 0.35 \exp(-0.3 r / a_{12}) + 0.55 \exp(-1.2 r / a_{12}) \\ + 0.10 \exp(-6.0 r / a_{12})$$

Screening 半径 a_{12} は Firsov による次式を用いている。

$$a_{12} = 0.8853 a_0 / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3} \quad (21)$$

この値は Fig. 20 の上方に示されている入力データを読む INPUT 中、すなわち Fig. 21 の下方に記されている POTSET で求められている (入力データについては次節を参照)。結晶格子の最隣接点で(20)式の値が、 $A \exp[-\rho(r-r_c)/r_c]$ の形の Born-Mayer ポテンシャルと同じになるように a_{12} を決める方法もある。Table 3 に、このようにして決められた a_{12} の値を、3つの金属について(20)式による値と対比してある。¹³⁾

Table 3 Comparison of modified screening radius for the Thomas-Fermi interatomic potential (20) with the Firsov value for copper, iron and gold in units of Å.

	Cu	Fe	Au
Firsov value	0.0960	0.0996	0.0688
Modified value	0.0738	0.0781	0.0752

結晶格子は完全に静的であるとし、熱振動の効果は、原子がガウス分布に従ってランダムに格子位置からずれているとして考慮する。すなわち、各結晶原子は、その格子点において他の結晶原子とは全く独立に、Debyeモデルに基づくrms振幅で球対称振動を行い、振幅はガウス分布に従うとする。しかし計算上はこれを3角形分布で近似する。⁴⁾すなわち、

$$P(\rho) = (1/\sqrt{2\pi}) \exp(-\rho^2/2) \\ = \begin{cases} 1/\sqrt{6} - |\rho|/\sqrt{6}, & -\sqrt{6} \leq \rho \leq \sqrt{6}, \\ 0, & \sqrt{6} \leq \rho \end{cases} \quad (22)$$

ここで ρ はrms振幅単位での格子点からのずれの距離で、Fig. 21 の第2ページの最初に示したように、ARNORMとTVAMPにより計算され、計算の高速化のためテーブル化される。

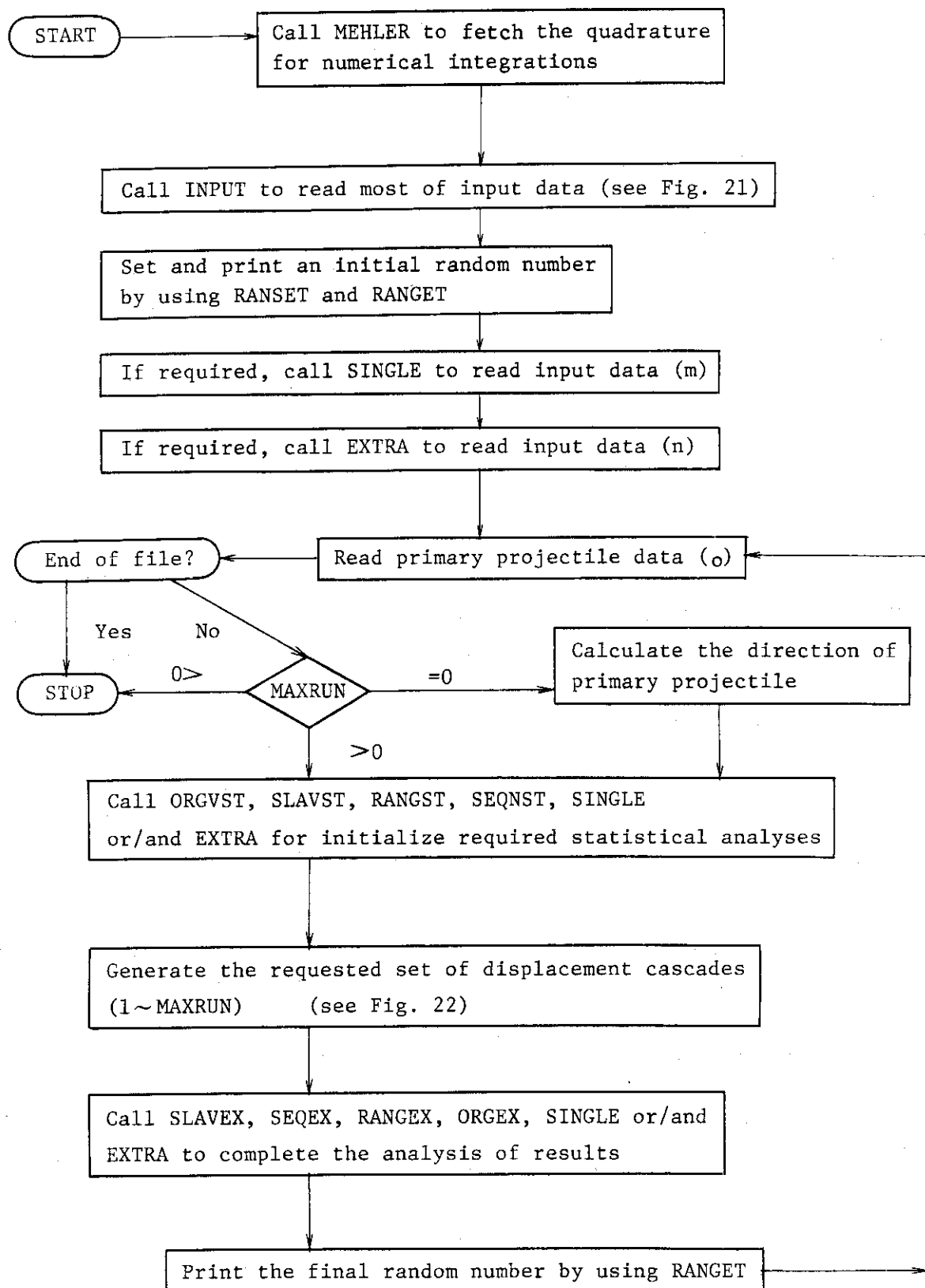


Fig. 20 Flow chart of MARLOWE code

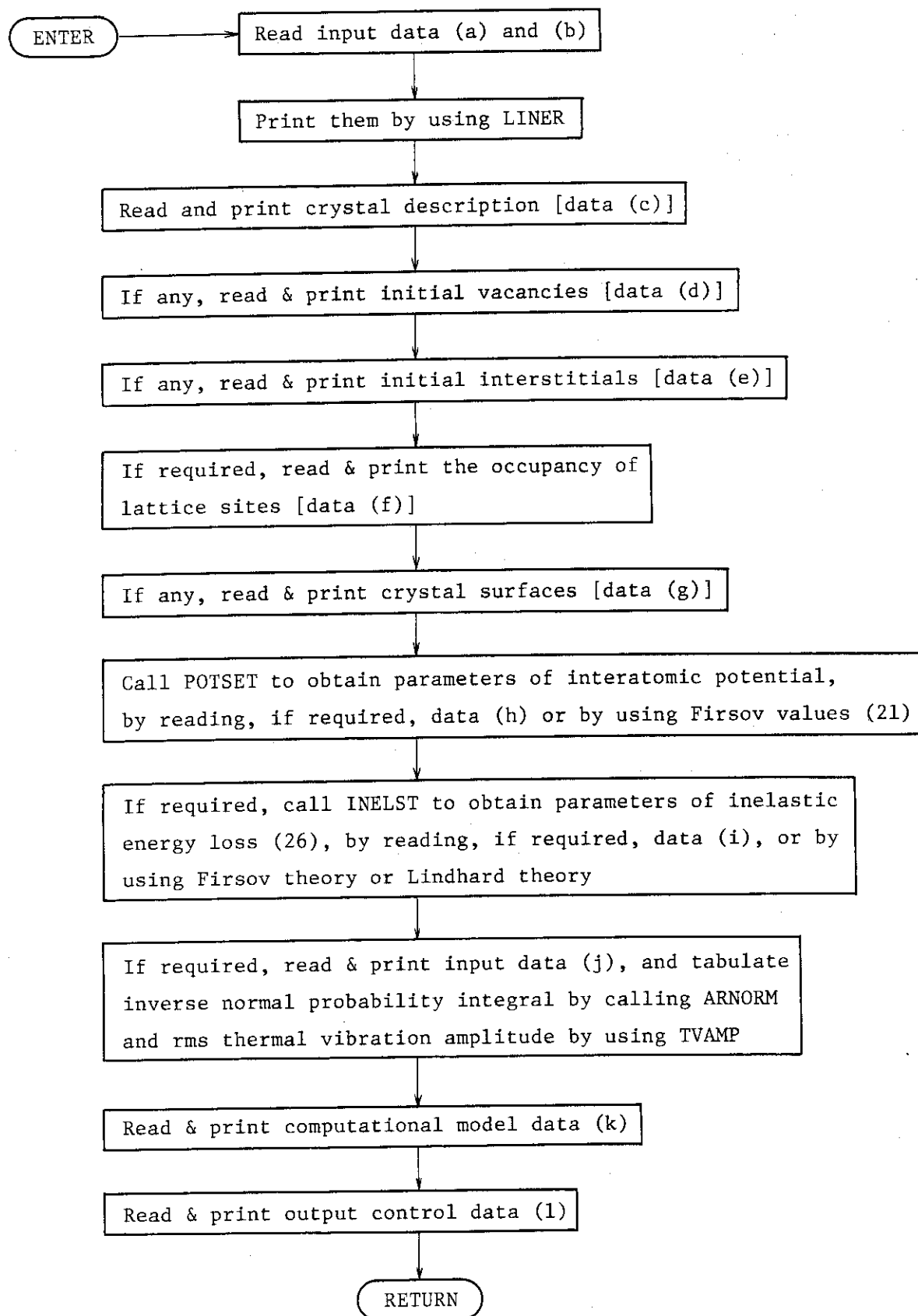


Fig. 21 Flow chart of INPUT program for reading most of input data

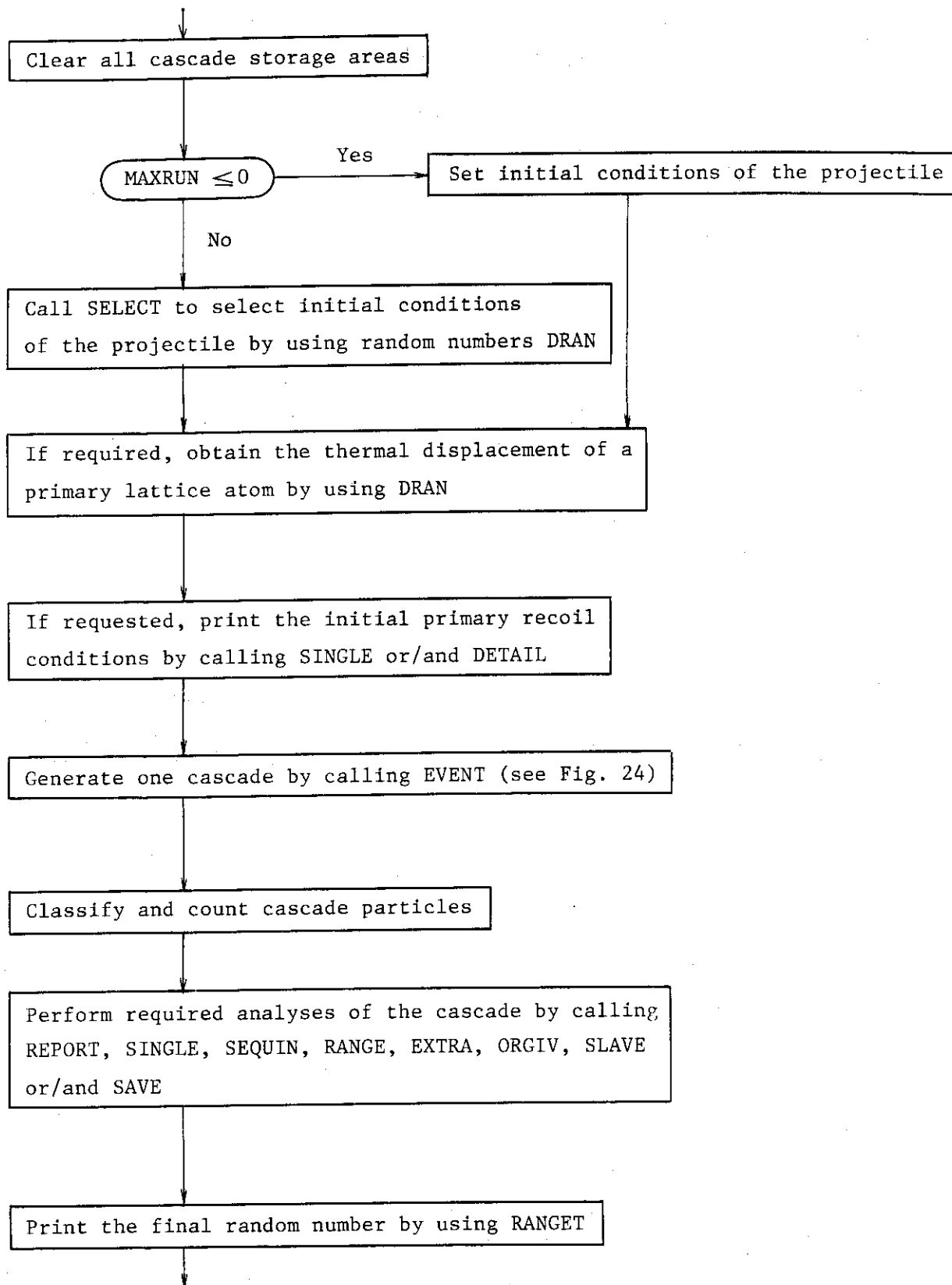


Fig. 22 Flow chart of the process to generate the requested set of displacement cascades in MARLOWE code

これに従って、Fig. 22 の中央に示したように、DRANによる乱数によりそれぞれの標的原子の熱的変位を求めるが、振幅が大きい時には標的原子を探すのが面倒になる。その場合の工夫についても詳しく議論がなされている。¹⁴⁾

またMARLOWE プログラムでは、結晶格子を全てリストしておかないで、最隣接、または第2隣接程度のみを入れておく。そして衝突の相手がこの中に見付からない場合に、更に対象格子を広げる。格子はCartesian座標で記述され、1つの結晶表面も考慮できるようになっている。2体間衝突の取扱いで、CASCADEコードと異なる点は、標的原子が一般には入射粒子の方向変化の前に動き出すことである。CASCADEでは、Fig. 6のように入射粒子の方向変化後、直接格子位置から動き出している。またMARLOWEでは2つ以上の標的原子との同時衝突を考慮することもできる。すなわち、Fig. 23(a)に示したように、R点の原子との衝突で運動しているP粒子の標的原子としては、Rの近傍の原子のリストから選ばれたTが、 $\zeta > \zeta_{\min} \geq 0$ 及び impact parameter $p \leq p_{\max}$ を満足するとき、そのTが採用される。しかしこのような条件を満足する2つ以上の標的原子 T_1 と T_i が選ばれた際には、 $\Delta\zeta_{1i} < \zeta_m$ 、 $d_{1i} < p_{\max}$ 、 $d_{i1} < p_{\max}$ を満足するとき〔Fig. 23(b)を参照〕、 T_i を T_1 と同時衝突の標的原子とし、それぞれ独立に衝突するとしたときの入射粒子の振れをベクトル的に加える。この同時衝突の判定は、Fig. 24に示したEVENTの最初の部分、すなわちFig. 25のSEARCHで標的原子を見付ける際になされる。

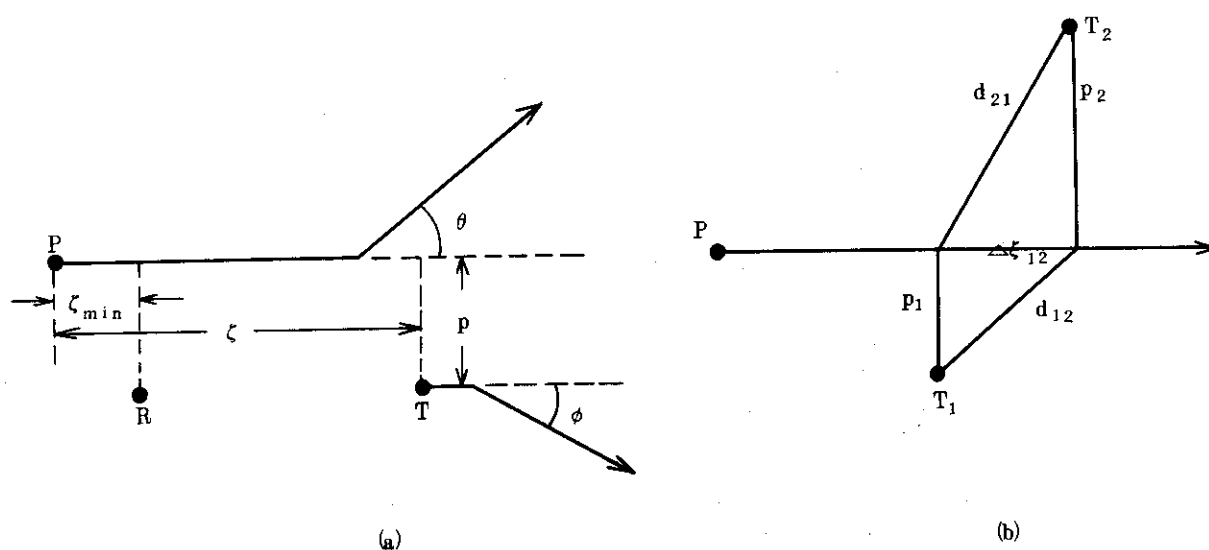


Fig. 23 (a) Basis of the searching procedure for target atoms and
(b) the criteria for simultaneous collisions

更に衝突に際し、非弾性的エネルギー損失をFirsovモデルに基づいて取り扱うこともできる。すなわち、原子の軌道電子のエネルギー単位の励起に用いられるエネルギーを Q とすると、エネルギー E_0 のPKAの衝突後のエネルギーは

$$E_1 = E_0 - E_2 - Q \quad (23)$$

となる。ここで E_2 は標的原子に与えられたエネルギーで、 Q は非弾性散乱によるエネルギー

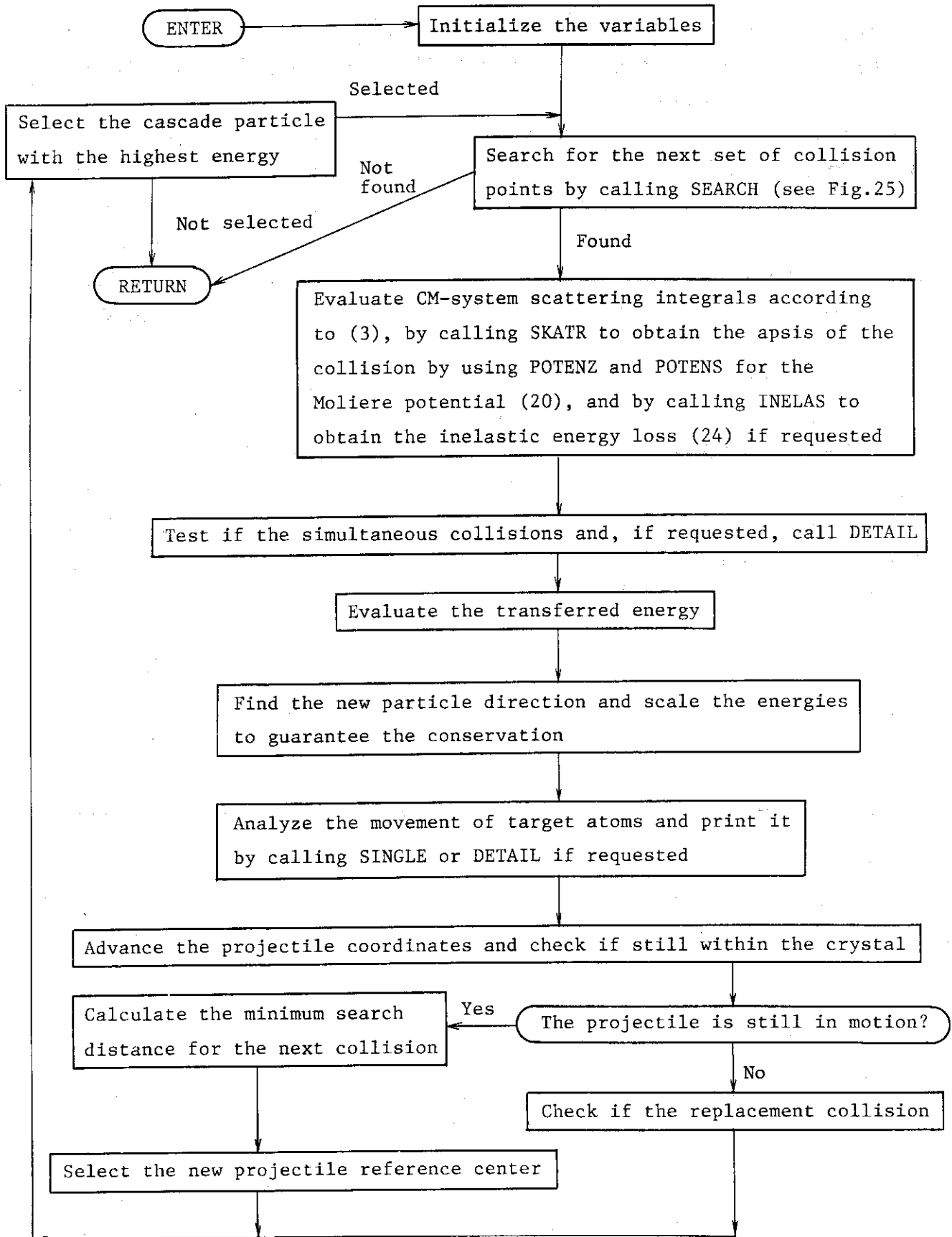


Fig. 24 Flow chart of EVENT program for generating one displacement cascade

損失と呼ばれている。Firsov²¹⁾は impact parameter p の 2 体散乱における電子の励起エネルギーを求めている。 E_0 を eV 単位とすると、

$$Q = \alpha / (1 + \beta p)^5, \quad (24)$$

$$\alpha = 0.05941 (Z_1 + Z_2)^{5/3} [E_0 / M_1]^{1/2} \text{ eV},$$

$$\beta = 0.3042 (Z_1 + Z_2)^{1/3} \text{ \AA}^{-1}$$

で表わされている。この際、 p の値としては最近接衝突距離を用いる。特にエネルギーの低いところでは、最近接衝突距離は衝突原子の電子殻の重なり合いの程度を示すので、妥当であることが指摘されている¹³⁾

Firsov モデルの他に、よく知られている以下の Lindhard らの理論²²⁾に基づいて非弾性的エネルギー損失を評価することもできる。

$$Q/E_0 = 1 - 1 / [1 + k g(\epsilon)], \quad (25)$$

$$g(\epsilon) = \epsilon + 0.40244 \epsilon^{3/4} + 3.4008 \epsilon^{1/6},$$

$$k = 0.0793 Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-3/4} (M_1 + M_2)^{3/2} / (M_1^{3/2} M_2^{1/2}),$$

$$\epsilon = 0.8853 M_2 E_0 / [27.2 Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} (M_1 + M_2)]$$

MARLOWE コードでは、(24)あるいは(25)式を最近接衝突距離 R を用いて

$$Q = \frac{(FK) \sqrt{E_0}}{\pi (FR)^2} \times \left\{ \frac{6}{[1 + R/(FR)]^5}, \right. \quad (26)$$

$$\left. 0.045 \exp[-0.3R/(FR)] \right\},$$

の形で近似しており、Fig. 21 の第 1 ページの下方に示したように、INELST で、 FK と FR をそれぞれのモデルに従って計算している。

非弾性散乱がある場合には、散乱角も当然剛体球の場合とは違ってくる。具体的に非弾性散乱の散乱角への影響を表現するのは難しい問題であるが、MARLOWE では次のようなモデルを用いている¹⁴⁾まず、非弾性散乱のない剛体散乱を考え、質量 M_1, M_2 の原子の実験室系における衝突前後の速度を、 $\vec{u}_1, \vec{u}_2 (=0)$ 、及び $\vec{v}_1, \vec{v}_2$ 、重心系における値を、 $\vec{U}_1, -\vec{u}_g$ 、及び $\vec{V}_1, \vec{V}_2$ とする。ここで

$$\vec{u}_g = \frac{M_1 \vec{u}_1}{M_1 + M_2}, \quad \vec{U}_1 = \vec{V}_1, \quad \vec{V}_1 = \frac{M_2 \vec{u}_1}{M_1 + M_2}, \quad \vec{V}_2 = \vec{u}_g \quad (27)$$

更に、重心系における散乱角を Θ とすると、

$$v_2^2 = u_g^2 + V_2^2 - 2 u_g V_2 \cos \Theta \quad (28)$$

が成り立つことは容易に分る。衝突後の重心系における全エネルギーは

$$(1/2) M_1 V_1^2 + (1/2) M_2 V_2^2 \quad (29)$$

であるが、非弾性散乱を導入するために、重心系における速度を $f V_1$ 及び $f V_2$ とし、

$$(1/2) M_1 f^2 V_1^2 + (1/2) M_2 f^2 V_2^2 = (1/2) M_1 V_1^2 + (1/2) M_2 V_2^2 - Q \quad (30)$$

と置く。この式から、

$$f^2 = 1 - Q / \left(\frac{1}{2} M_1 V_1^2 + \frac{1}{2} M_2 V_2^2 \right) = 1 - Q / E_r \quad (31)$$

が得られ、この f を通じて非弾性散乱の寄与を 2 体衝突過程に導入する。ここで E_r は

$$E_r = [A / (1 + A)] E_0, \quad E_0 = \left(\frac{1}{2} \right) M_1 u_1^2, \quad A = M_2 / M_1 \quad (32)$$

で与えられる相対エネルギーである。(31)式から明らかなように、 $Q = 0$ の場合は $f = 1$ である。非弾性散乱がない時には標的原子の衝突後のエネルギーは $M_2 V_2^2 / 2$ であるが、(28)式で V_2 の代りに $f V_2$ とし、非弾性散乱の効果を導入すると、標的原子に与えられるエネルギーとして

$$\begin{aligned} T &= \left(\frac{1}{2} \right) M_2 v_2^2 = \left(\frac{1}{2} \right) M_2 [u_g^2 + f^2 V_2^2 - 2 f u_g V_2 \cos \Theta] \\ &= \frac{M_1^2 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \frac{1}{2} u_1^2 (1 - 2 f \cos \Theta + f^2) \\ &= T_m [f \sin^2 (\Theta / 2) + (1 - f)^2 / 4] \quad (33) \\ T_m &= 4 E_r / (1 + A) \end{aligned}$$

が得られる。このような考え方で、重心系における散乱角 Θ と実験室系における散乱角 θ の関係は

$$\tan \theta = A f \sin \Theta / (1 + A f \cos \Theta) \quad (34)$$

となることが分る。同様に標的原子がはじき出される角度 ϕ は

$$\tan \phi = f \sin \Theta / (1 - f \cos \Theta) \quad (35)$$

で与えられる〔Fig. 23 (a)を参照〕。

MARLOWE プログラムでは、オブションとして 1) 非弾性散乱を完全に無視する ($Q = 0$, $f = 1$)。2) エネルギー損失は考慮するが、kinematics には入れない ($Q \neq 0$, $f = 1$)。3) kinematics から考慮するの 3 種の扱いが可能である。Fig. 24 の上方に示した SK-ATR で、Fig. 20 の流れの最初の MEHLER で計算した求積法に従って散乱積分を計算し、最近接衝突距離 R を求め、INELAS で、(26) 式などから Q を求めている。

原子のはじき出しは、MARLOWE でも閾エネルギー E_d 、及び結合エネルギー E_b を用いて判断する。Cut-off エネルギー E_c で原子の飛行を打ち切ることも CASCADE コードと同じである。ただこの MARLOWE では、現在進行中のカスケードに組み入れられた原子間の衝突は一般に考慮しない。つまり現在進行中のカスケードで作られた格子間原子を標的原子としては扱わない点が CASCADE と異なる。欠陥の再結合は、空孔の吸収距離 r_v を基準として、最も近いペアーからユニークに結合していく。また Fig. 20 の中央付近に示したように、MAXRUN > 0 のときには、ある決められた位置から出発する PKA の方向が等方になるように、統計的にランダムな方向を持たせてカスケード計算を繰り返し、その結果を統計的に処理して出力することもある。統計量としては 1) 空孔と格子間原子の全数、2) 置換衝突の全長と全数、3) 結晶格子の主要な方向での置換衝突列の長さの分布などがある。

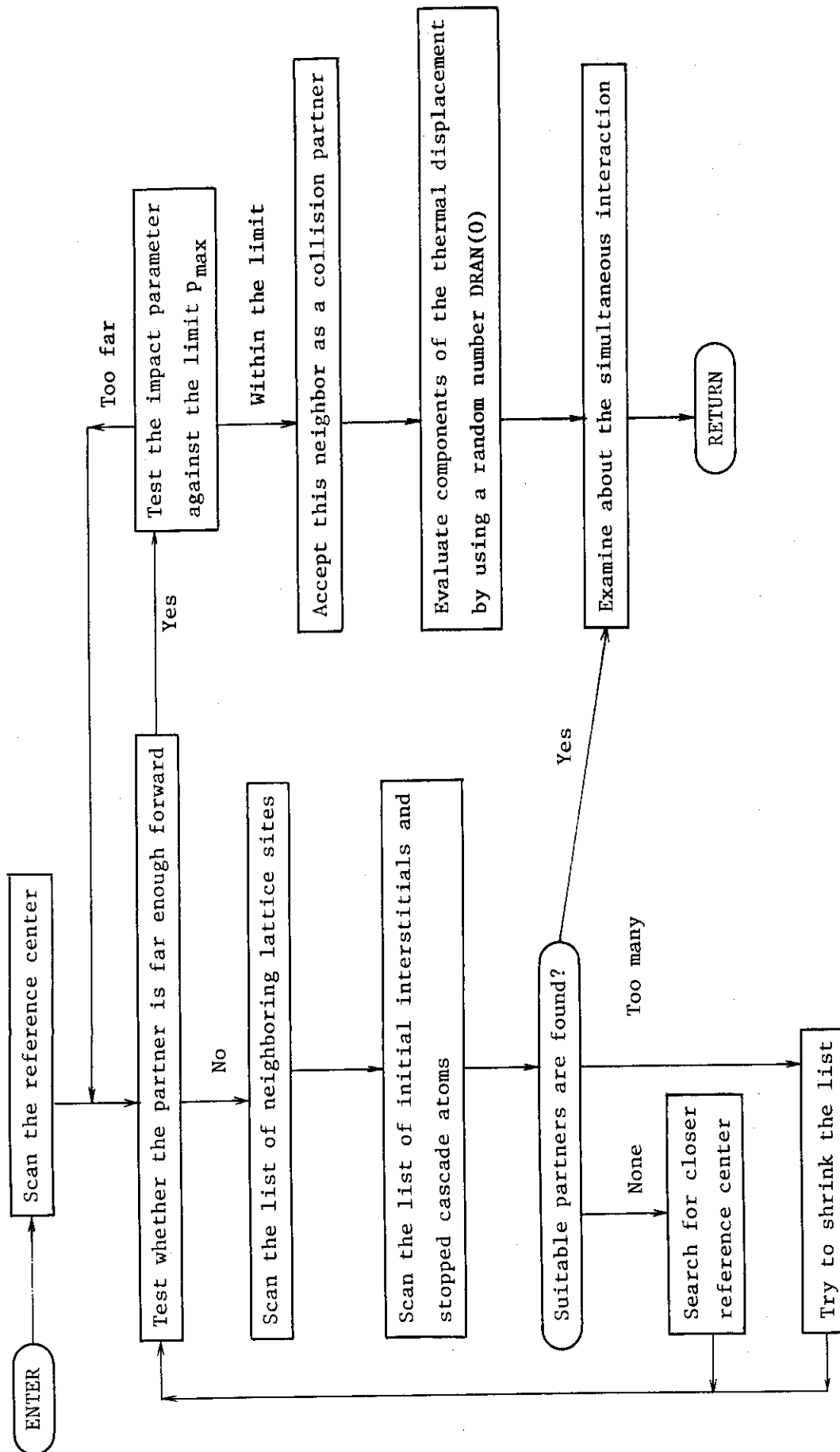


Fig. 25 Flow chart of SEARCH program for searching the next collision points

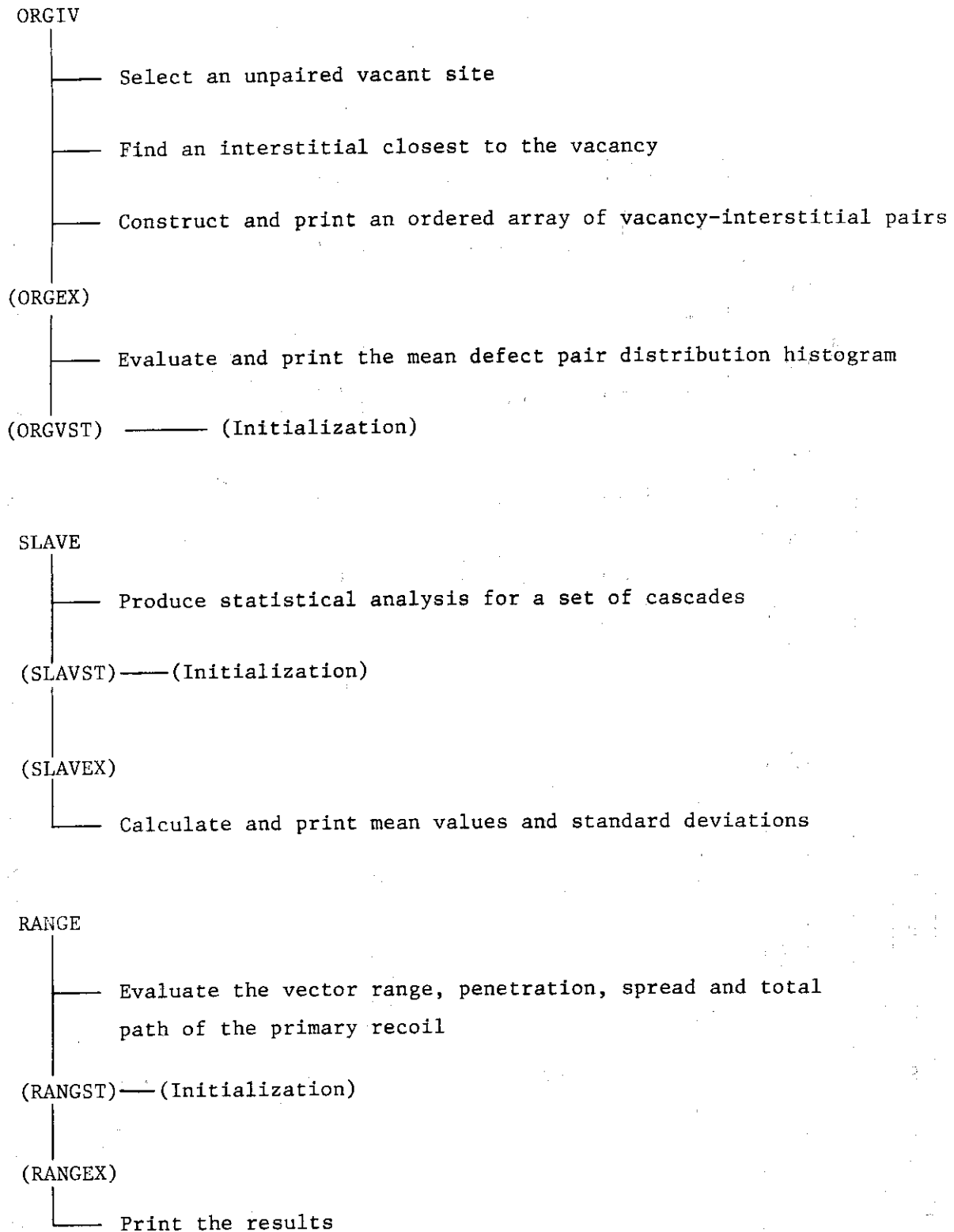


Fig. 26 Functions of programs for analyzing individual cascades and sets of cascades

SEQUIN

- Scan the list of vacancies for replacement sites
- Score the length and direction of replacement sequences
- Print the results for a single cascade if requested
- Perform the analysis for a set of cascades if required

(SEQEX)

- Complete the statistical analysis and print the results

(SEQNST)——(Initialization)

SINGLE (ID, NA)

- | | |
|------|--|
| ID=1 | Read input data (m) |
| ID=2 | (Initialization for a set of cascades) |
| ID=3 | (Initialization for a single cascade) |
| ID=4 | Introduce a new projectile |
| ID=5 | Analyze the result of a collision |
| ID=6 | Analyze the results of a single cascade |
| ID=7 | Analyze the results of a set of cascades |

Fig. 26 (Continued)

EXTRA (ID) (Version B-3)

ID=1	Read input data /XTRB/
ID=2	(Initialization)
ID=4	Score the separation of a primary from a vacancy
ID=5	Print the distribution of separations

EXTRA (ID) (Version C-3)

ID=1	Read input data /XTRC/
ID=2	(Initialization)
ID=3	Score directions and energies of ejected atoms in a single cascade
ID=5	Analyze and print the results for a set of cascades

EXTRA (ID) (Version D-3)

ID=2	(Initialization)
ID=3	Score reflected or transmitted primaries
ID=5	Analyze and print the results for a set of cascades

Fig. 26 (Continued)

DETAIL (ID, NA)

ID=1	
—	Print initial conditions of the primary recoil
ID=2	
—	Print conditions of the projectile before collision
ID=3	
—	Print details of single collision
ID=4	
—	Print conditions of each new cascade atom
ID=5	
—	Print conditions of the projectile after collision

REPORT

—	Print summary data of a single cascade
—	Print details of the displacement cascade if requested
—	Print a list of vacant lattice sites if requested
—	Print a list of interstitial atoms if requested
—	Print a list of escaping atoms, stenons and focusons
—	Print a list of improper replacements

Fig. 27 Functions of DETAIL and REPORT for output print

なお Fig. 21 の流れの最初の方に示されている LINER は、出力プリントのページ送りとか表題を書くための FUNCTION である。乱数発生のための DRAN は原研版・科学用サブルーチン・ライブラリ (JSSL)²³⁾ の RANDU を使用しており、DRAN 中の ENTRY として RANSET と RANGET が定義されている。計算結果のはじき出しカスケードを解析しプリント出力するプログラムとして、ORGIV, SLAVE, RANGE, SEQUIN, SINGLE, EXTRA, DETAIL, REPORT, SAVE がある。ORGIV は Fig. 26 の上方に示したように、空孔と格子間原子を対にして整理するプログラムで、ENTRY として ORGEX と ORGVST がある。次の SLAVE は一連のカスケードについて統計的処理をしてプリント出力するプログラムで、SLAVST と SLAVEX の ENTRY がある。RANGE は PKA の飛程、拡がりなどの計算をし、必要ならば統計的処理もしてプリント出力する。Fig. 26 の 2 ページ目に示した SEQUIN は、置換衝突列について解析しプリント出力する。SINGLE は、衝突毎の解析を付加的に行うプログラムで、Fig. 26 に示したように、ID の値によって種々の機能を果すようになっているが現在のところは dummy である。次の EXTRA も付加的解析をするプログラムで、Fig. 26 の 3 ページ目に示したように 3 つの版があるが、いずれも ID=1, 2, 3, 4, 5 に従って、入力の読み込み、initialization、単一カスケードについての ORGIV 前の解析、同じく単一カスケードについての ORGIV 後の解析、一連のカスケードについての解析、と機能が分れている。現在のコードには C-3 版が組み込まれている。

DETAIL, REPORT, SAVE は出力のためのプログラムで、DETAIL は Fig. 27 に示したように、衝突毎の詳細な情報をプリント出力するプログラムで、ID に従って出力内容が異っている。REPORT は単一カスケードの結果をプリント出力するプログラムである。SAVE は、パンチ出力とかファイルへの出力のためのプログラムであるが、現在のところは dummy になっている。

3.2 コードの使用法

3.2.1 入力データ

まずカードによる入力データをグループに分けて以下に示す。MARLOWE コードは、すべて倍精度演算をしているので、浮動小数点型の全データは倍精度で入力する。また大部分のデータは、NAMELIST 文で宣言された変数に対するものである。

グループ及び NAMELIST 名	変 数 名	内 容
(a)	TITLE (20A4)	表 題
(b) /XTAL/	NTYPE	結晶中の原子のタイプの数 (≤ 4)
	TYPE(4)	NTYPE の原子名 (付録 5 を参照)
	NEIGH(4)	NTYPE の各原子の隣接格子点数 (入力しなければすべて 0) (≤ 32)
	Z (4)	NTYPE の各原子の原子番号

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(b) /XTAL/	W(4)	NTYPEの各原子の amuでの質量
	ALAT(3)	斜方晶系の3つの格子定数(Å)
	UNIT	長さの単位にとるALATの番号(入力しなければ1)
	NVAC1	既存の空孔の数(≤ 2500)(入力しなければ0)
	NINT1	既存の格子間原子の数(≤ 100)(入力しなければ0)
	MIXT	化学的に無秩序結晶のときTRUE(入力しなければFALSE)
	SURFCE(2)	結晶が照射される表面をもつときSURCE(1)=TRUE, 後面をもつときSURCE(2)=TRUE(入力しなければ両方ともFALSE)
	VPR	以下のデータ(b)を読むときTRUE(入力しなければFALSEで組み込みのポテンシャルを用いる)
	INEL	非弾性的エネルギー損失を考慮するときTRUE(入力しなければTRUE)
	QPR	以下のデータ(i)を読むときTRUE(入力しなければFALSEで, 組み込みの非弾性的エネルギー損失のパラメータを用いる)
	THERM	格子原子の熱振動を考慮するときTRUE(入力しなければFALSE)
(c)	LN(NY, N), (RN(NY, N, I), I=1, 3), N=1, NEIGH) により, NTYPEの各原子からの隣接格子の相対座標とその位置にある原子のタイプを, NY=1~NTYPEについて(NEIGH=0のものについては省略)(I3, 3G11.0, I3, 3G11.0, 8X)で入力する	
	LN(4, 32)	隣接原子のタイプ番号
	RN(4, 32, 3)	UNITで指定した長さを単位とした相対座標
(d)	NVAC1>0のとき, 既存の空孔の位置とその位置のタイプを, データ(c)と同様に入力する	
(e)	NINT1>0のとき, 既存の格子間原子の位置とその原子のタイプを, データ(c)と同様に入力する	
(f) /ORDR/	MIXT=TRUEのとき, 各NTYPEの格子が種々の原子で占有されている割合を入力する	
	ORDER(4, 4)	ORDER(I, J)がJの型の格子がIの型の原子に占有されている割合(入力しなければ, 無秩序になっていない状態を示す単位行列となる。またIについての和が1以下のときは, 残りの格子点は空孔として扱われる。)
(g) /SURF	SURFCE(1)=TRUEのとき, 結晶の表面を記述する	
	RSORT(3)	結晶面の内側法線方向のMiller指数
	AXISA(3) AXISB(3)	結晶面内の2つの方位角のMiller指数

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(g) /SURF/	RSRF(3)	AXISAとAXISBで決められる平行四辺形の1つの頂点の位置をUNITの単位で入力する〔入力しなければ(0D0, 0D0, 0D0)〕
	SIDEA SIDE B	表面の平行四辺形の2辺の長さをUNITの単位で入力する
	DEPTH	2つの表面があるとき, UNIT単位での標的の深さ
(h) /VPAR/	VPR=TRUE のとき, 原子間ポテンシャルのデータを入力する	
	BPAR(4, 4)	BPAR(I, J)がIの原子とJ($\geq I$)原子間の screening 半径($\text{\AA}$)〔入力しないか0のとき, あるいはVPR=FALSEのとき②式のFirsovによる値が入力される〕
(i) /QPAR/	INEL=TRUE, かつQPR=TRUE のとき, Iの入射粒子のJの標的原子による非弾性的エネルギー損失に関するデータを入力する(入力しないか0のとき, あるいはQPR=FALSE のとき組み込みの値を用いる)	
	FK(4, 4)	Electronic stopping 断面積を入射粒子エネルギーの平方根 $\sqrt{E_0}$ で割った値($\sqrt{eV} \text{\AA}^2$) 〔②式を参照〕
	FR(4, 4)	②式の length parameter ($\text{\AA}$)
	FIRS(3)	FIRS(1)=TRUE のときはFirsovによるFKを用い, それ以外はLindhardによる。 FIRS(2)=TRUE のときはFirsovによるFRを用い, それ以外はBPARの値による。 FIRS(3)=TRUE のときは, 最近接衝突距離に対する依存性をFirsovにより考慮し, それ以外のときは指数関数を用いる。 (入力しなければ, すべてFALSEになる。)
(j) /TVIB/	THERM=TRUE のとき, 格子原子の熱振動を指定する	
	T TDEBYE(4)	結晶の絶対温度 NTYPE の各格子原子のデバイ温度 Θ_D (K)
(k) /MODL/	計算モデルの詳細で, 長さはUNITによる単位, エネルギーはeV 単位で入力する	
	RB(2)	最大の impact parameter $p_{\max}$ の値で, RB(1) は最初の置換衝突まで用い, その後はRB(2) の値を用いる
	DSIM(2)	同時衝突点間の最大距離 ζ_m で, DSIM(1)は散乱前に同時衝突の相手を挿すのに用いられ, DSIM(2)は散乱の補正の際〔TIM(9)=FALSE〕に用いられる〔入力しなければ $0.5 \text{\AA}$ と $0.25 \text{\AA}$ となる〕
	XILIM	最小の前方探索距離(入力しなければ $0.1 \text{\AA}$)

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(k) /MODL/	EDISP(4)	NTYPE各原子のはじき出し閾エネルギー E_d
	EBND(4)	NTYPE各原子の格子への結合エネルギー E_b (入力しなければ0D0)
	EQUIT(4)	NTYPE各原子の最大の最終エネルギー E_c
	DECHAN	チャンネルリング衝突で伝達する最大エネルギー (入力しなければ1D0)
	ICHAN	連続するチャンネルリング衝突の打ち切り回数 (入力しなければ100)
	DERPL	Focusされた置換衝突での入射粒子の保持する最大 エネルギー(入力しなければ1D-1)
	IRPL	Focusされた置換衝突の打ち切り回数 (入力しなければ10)
	POLY	TRUEのとき、標的結晶は無秩序にされる
	DVAC	無秩序構造での空孔のテスト距離(入力しなければ 0.5 Å)
(l) /OUTP/	TIM(12)	TIM(1)=FALSEのとき、散乱の時間は0と仮定するが、入力せずTRUEのときは時間積分を用いる。 TIM(2)=TRUEのとき、入射粒子の運動は無制限だが、入力せずFALSEのときは前方のみへ進む。 TIM(3)=TRUEのとき、前方探索を原子位置ですが、入力せずFALSEのときは格子位置で行う。 TIM(4)=TRUEのとき、横方向探索を原子位置ですが、入力せずFALSEのときは格子位置で行う。 TIM(5)=FALSEのとき、標的原子は方向変化の際動くが、入力せずTRUEのときは方向変化前に動く〔Fig. 23(a)を参照〕 TIM(6)=TRUEのとき、非弾性散乱を実験室系で考慮するが、入力せずFALSEのときは、重心系で考慮する。 TIM(7)=FALSEのとき、カスケード原子も標的として扱うが、入力せずTRUEのときは標的としない。 TIM(8)=FALSEのときは、入射粒子が結晶外に出てもよいが、入力せずTRUEのときはerrorになる。 TIM(9)=TRUEのときは散乱前に同時衝突を考慮するが、入力せずFALSEのときは散乱時に補正する。
	カスケードの解析と出力のオプション	
	DRNG	PKAの飛程分布のヒストグラムのチャンネル幅 (入力しなければ1D0)
	DIST	フレンケル対分布関数のヒストグラムのチャンネル幅 (入力しなければ1D0)

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(l) /OUTP/	LORG(4)	LORG(1)=FALSEのときは、フレンケル対はNTY-PEそれぞれ別個に解析する。 LORG(2)=FALSEのときは、improperな置換衝突は、フレンケル対の対象とする。 LORG(3)=FALSEのときは、properな置換衝突も、フレンケル対の対象とする。 LORG(4)=FALSEのときは、各置換衝突列は生成されたまま保持する。 (入力しなければすべてTRUE)
	INFORM(16)	INFORM(1)=TRUEのとき、フレンケル対分布関数を出力する。 INFORM(2)=TRUEのとき、一連のカスケードの統計処理をする。 INFORM(3)=TRUEのとき、PKAの飛程の計算をする。 INFORM(4)=TRUEのとき、置換衝突列の解析をする。 INFORM(5)=TRUEのとき、SINGLEによる解析をする。 INFORM(6)=TRUEのとき、EXTRAによる解析をする。 INFORM(7)=TRUEのとき、衝突毎の詳細を出力する。 INFORM(8)=TRUEのとき、カスケードの詳細をすべて出力する。 INFORM(9)=TRUEのとき、カスケードの出力は簡単になる。 INFORM(10)=TRUEのとき、カスケードの出力は非常に簡単になる。 (入力しなければ、すべてFALSEになる)
(m)	SINGLEで解析するための入力データ〔INFORM(5)=TRUEが必要〕	
(n) /XTRB/	EXTRAで解析するための入力データ〔INFORM(6)=TRUEが必要〕	
	SIZE	UNITを単位としたヒストグラムチャンネル幅
	ION	1次イオンの特別な位置の数(≤10)
	RION(3,10)	UNITを単位とした特別な位置の座標をX(1), Y(1), Z(1), X(2), Y(2), ... と入力する
あるいは (n) /XTRC/	PHIA PHIB	最小及び最大方位角(度)
	EBOX	Sputterされた粒子のエネルギー分布のためのチャンネル幅

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(a) /PROJ/		P K Aの初期条件を与えるが、Fig. 20 から分るように繰り返して入力できる
	MAXRUN	統計的に選ぶP K Aの全数（入力せず0のときは決められた条件の1個のみ扱う）
	PRIM(2)	PRIM(1)=TRUEのときは、P K Aの衝突のみが追跡され、PRIM(2)=TRUEのときは、更に標的原子のはじき出しもないとする。 （入力しなければ両方ともFALSE）
	LOG	P K Aの統計的選択法を指定する。結晶内のP K Aのときは、LOG=0, 1, 2, 3で、それぞれ、全角度空間から、 $z > 0$ 方向の半空間から、第1象限から、 $1/48$ 空間から等方を選ぶ。結晶外のprimaryの際は、LOG=20, 21で、それぞれ、平行四辺形の全結晶表面から、AXISAに近い半分の表面から一様に位置を選ぶ。（入力しなければ0になっている。）
	KARMIP	P K Aが格子間原子のときKARMIP=1とする （入力しなければ0）
	EKIP	Primaryの最初のエネルギー（eV）
	RAIP(3)	Primaryの最初の位置（入力しなければ、0D0, 0D0, 0D0）
	LAIP	Primaryのタイプ番号（入力しなければ1になっている）
	REFIP(3)	Primaryの出発する位置の（あるいはそれに近い）結晶格子位置（入力しなければ0D0, 0D0, 0D0）
	LRIP	REFIPの原子のタイプ番号（入力しなければ1になっている）
	THA	Primaryの極角で、結晶外のときはRSORT, それ以外のときはz軸, ALAT(3), から測られる（入力しなければ0度）
	PHI	Primaryの方位角で、結晶外のときはAXISA, それ以外のときはx軸, ALAT(1), から測られる（入力しなければ0度）
	DVRG	入射粒子ビームの拡がり（入力しなければ0度）

以上の入力のうち、グループ(a)から(l)までが、Fig. 21 に示したようにINPUTで読み込まれており、(m)から(o)まではFig. 20 に示したようにMAINで読み込まれる。データ(n)については、/XTRB/, /XTRC/ は、Fig. 26 の最後のページに示したように、それぞれB-3, C-3版のEXTRA用である。なおカード入力しなかった場合には、DATA文及びBLOCK DATAによって設定されている値が採られる。

3.2.2 出力プリント

出力プリントについては、付録5に示した例題に対する計算結果の出力の1部を付録6に示した。最初の例題は、Cuの結晶表面にH原子が垂直に一樣に入射した場合のH原子の透過を扱っている。仮想的な問題なので、第1ページから分るように格子定数を $1\text{\AA}$ としており、結晶表面は 2×2 （この際には $1\text{\AA}$ が単位になっている）の大きさとなっている。原子間ポテンシャルは、組み込みのFirssovによる値を用いており、非弾性的エネルギー損失も、第1ページ中央に示されているように、すべて組み込みのデータを使って考慮している。計算モデルは/ MODL/の入力に従いRB=2、次の同時衝突のDSIM、更にXILIM, DECHAN, ICHAN, DERPL, IRPLは、いずれも組み込みの値がプリントされている。その次のEDISPは、入力により 10^5 eV が入っており、従ってはじき出しは実際上起らないようになっている。EQUITは、入力により 1 eV となっており、それに続いて、TIM(1)からTIM(9)までの内容がプリントされている。入力はTIM(8)=Fのみだが、それに関連して書かれているKARMAは、カスケードに関係したすべての粒子の状態を示す整数(IJKL)で、I, J, K, LそれぞれがTable 4に示したような意味をもっている。/OUTP/については、INFORM(2)=Tのみが入力され、SLAVEサブルーチンにより一連のカスケードの統計的处理をするようになっている。1ページ目の下方の「個々のカスケードの出力不要」のプリントは、INFORM(8)~(10)がすべてFALSEのためである。なお初期乱数は、内部的にすべて131075にセットされている。

2ページ目は、付録5の入力で与えているPKAの2つの初期条件/PROJ/の最初による結果を与えているが、まず入力のMAXRUN, LOGがプリントされ、続いてTHA, PHI, DVRGがプリントされる。PRIM(1)=T, PRIM(2)=Fなので、PKAの衝突のみを追跡するが、標的原子のはじき出しはあってもよい（実際にはEDISP= 10^5 eV なので不可能）。続いてLAIPとEKIPがプリントされている。その後が続いているのがSLAVEによる解析結果で、まず1つのカスケードに関連した数の平均と標準偏差が表になっている。この問題では、入射した 1 keV のH原子が、Cu結晶中で平均0.799回衝突し、0.1%は表面から飛び出し、残りの0.999が結晶中で標的原子が見付からなくなって終わっている。この表に続いて、エネルギーについての統計表がプリントされており、 1 keV のうち 1.93 eV が非弾性的損失に使われ、 0.39 eV が E_d 以下での損失に使われ、 0.92 eV が0.1%の表面から飛び出したH原子により持ち去られ、残りの 996.76 eV が結晶中に留まった99.9%のH原子に残っている。出力プリント4ページ目には、この計算後の乱数の値と、カスケードに関係した全原子の数（今の場合は1）がプリントされるが、付録6では省略した。付録の2ページ目後半は、/PROJ/の2番目の入力に従い、前とはエネルギーのみが 100 eV に変わったH原子に対する解析結果が、同様に示されている。この後に、また最後の乱数値と、カスケードに関係した原子の数がプリントされて終りとなる。

付録7は、付録5の例題2に対する出力プリントの1部を示したものである。この例題は、厚さ $8.35 \times 2.5562\text{\AA}$ の銅の結晶表面に 1 keV のAr粒子が垂直に入射した際のsputteringを扱っている。VPR=Tとしてscreening半径をカード入力しており、第1ページ後半から分るように、銅に対してはTable 3の $0.0738\text{\AA}$ を用いている。 E_d, E_c とも 5 eV を入力して

Table 4 Contents of KARMA (IJKL) for describing the status of each cascade particle in MARLOWE

I	0	Atom is not paired with a lattice site
	1	Atom has been paired with a lattice site
J	0	Atom is not currently in motion
	1	Atom is currently in motion ($E_0 > E_c$)
	> 1	Atom is a possible stenon (KARMA increases by L=4 for each channeling collision in sequence)
K	0	If J=0, atom is not yet in motion. Otherwise, K is read as a part of L
	1	Atom made a proper replacement
	2	Atom made an improper replacement
	3	Atom escaped from the front target surface
	4	Atom escaped from the back target surface
	5	Atom is a truncated stenon (channeled atom)
	6	Atom terminates a truncated replacement sequence
	7	(Not currently in use)
	8	Atom is a lost projectile (no target atoms were bound)
	9	Atom has stopped interstitially ($E_0 \leq E_c$)
L	0	Atom is originated from a lattice site
	1	Atom was initially an interstitial
	2	Atom is a redisplaced lattice atom
	3	Atom is a redisplaced initial interstitial

おり、これが第2ページにプリントされている。結晶表面に一樣に、10個のArを打ち込んだ場合の統計処理をしているが、INFORM(2),(3),(4),(6)がTRUEとなっていて、それぞれ、SLAVE,RANGE,SEQUIN,EXTRA(C-3版)で解析し、プリント出力するようになっている。2ページ目中央が、付録6の2ページ目同様、SLAVEによる出力プリントである。その下に、SEQUINによる出力がプリントされており、まず3個までの置換衝突列の統計、続いて、4個以上の置換衝突列を、その方向に分類してプリント出力している。それに続いて、どの型の原子がどの型のサイトに入ったかの統計がプリントされている。今の場合、3のタイプの原子、すなわちArが、1または2のサイトに入った場合がimproper置換なので、その和0.4が、その上の表にも書かれている。

3ページ目はRANGEによる出力である。入射した10個のAr粒子のうち、上方にプリントされているように、結晶前面へ2個が出ているので、残りの8個の飛程の統計量がまず示されている。次いで入力データで与えたチャンネル幅、DRNG=0.35355を用いて透過距離の分布が示されており、今の場合、 5×0.35355 以下が4個、それから3.5355までが2個、それ以上 15×0.35355 までが2個という分布になっている。続いて先述のように10個のAr粒子の最終状態がプリントされている。その下方はEXTRAによる解析結果で、まず結晶後面からはじき出された結晶原子数、前面からの原子数がプリントされている。これには入射粒子は含まれないので、2ページ目中央の表から入射粒子の寄与を差し引いた数になっている。次いで0から18個、またはそれ以上の個数が、後面あるいは前面からはじき出された回数(今の場合は、回数の合計は10)がプリントされ、その後、それらの原子のエネルギースペクトルが50 eVを幅にしてプリントされている。この例題では、後面から全部で50個、前面からは40個はじき出されているので、それらの分布が示されている。

3ページ目下方には、プリントから分るように、これらはじき出された50個、40個の原子を、それぞれ、その方位角(縦)と極角の余弦(横)で分類して表にしている。その下は、最後の乱数値と、この10個のカスケード中で関係した原子の最大数(平均は2ページ目中央の表のように117.7)をプリントして終わっている。

最後に付録8に、付録5の例題3に対する計算結果の出力プリントの1部を示した。これは付録3に示したCASCADE/CLUSTERによる計算と同様、銅の結晶中の1個のPKAによるカスケードを扱っている。原子間ポテンシャルのscreening半径は、付録8の第1ページ中央に示されているように、入力データにより付録7の際と同様、Table 3の値を用いている。その下方には、RB,DSIM,XILIM,DECHAN,ICHAN,DERPL,IRPLが順にプリントされ、EDISP,EQUIT,EBNDには入力データにより、すべてに7 eVが入られている。付録5の入力データから分るように、INFORM(1)~(4)がTRUEなので、ORGIV,SLAVE,RANGE,SEQUINにより解析され、更にINFORM(8)がTRUEなので、DETAIL(1),REPORTによりカスケードの詳細がプリントされる。

MAXRUN=0なので、第2ページの上方にDETAIL(1)により書かれているように、格子位置(KARMA=100)の1原子が、1 keVのエネルギーで極角 13.49° 、方位角 13.37° の方向に飛ばされ、それにより作られた欠陥がREPORTにより、2ページ目中央以後にプリントされている。付録の第2ページ中央のリストは、カスケードに関係した66個の原子について書か

れているが、1 ページ分のプリントは付録には載せていない。これに続いて、66 個の原子の最終位置の座標と、最初の位置の座標のリスト、更にその後、それらの最終位置に近い格子位置 (reference site) の座標と、最終の進行方向の方向余弦のリストがプリントされるが、これらも付録 8 では省略した。これに続き、作られた空孔の位置座標のリストが、付録 8 の 2 ページ目後半に 1 部示されているようにプリントされる。ここで NSUBST は、作られた空孔に入った、すなわち置換した原子の file 番号で、0 の際には、空孔のまゝであることを示している。2 ページ目の下には SEQUIN による置換衝突列の解析結果、RANGE による PKA の飛程の解析結果がプリントされ、3 ページ目には、ORGIV により解析された空孔と格子間原子の対がリストされている。今の場合には、/OUTP/ の LOG はすべて TRUE なので、置換衝突は、この対のリストから除かれている。

4. 重照射解析コード・システム

4.1 DAIQUIRI コード

一般に1次損傷状態(primary damage state)の後に続く short-term annealing のシミュレーションにはモンテカルロ法が用いられる。この annealing の間の各欠陥の動きは、その近傍のすべての他の欠陥の相対的位置と方向により決まる。従って最初にどの欠陥を動かすかは、この annealing 後の欠陥の分布に大きく影響するので、これを統計的に処理するために、モンテカルロ法を用いるのである。すなわち、各時間ステップ毎に現存する個々の欠陥をランダムに拾いあげ、それが動くかどうかみる。そして物理的に動くことが可能な時、ジャンプの方向が、結晶学的に可能な方向からランダムに選ばれる。次にその方向の運動に対する migration エネルギーと乱数との比較により、実際にその欠陥が動くかどうか決められる。

Besco & Beelerは、単一原子の bcc, 及び fcc 晶系に対する annealing の計算コードとして DAIQUIRI (Defect Annealing in Quenched or Irradiated Specimens) を作成し、その Fortran プログラムのリストを示している。²⁴⁾その後 Doranはこのコードを改良し、ANNEALと名付けた。²⁵⁾これらの計算コードでは、各時間ステップにすべての欠陥を1回だけランダムな順序でえらび、ランダムな方向へある確率でジャンプさし、その欠陥がクラスター化するか、分解(dissociation)するか、または消滅(annihilation)するかをみている。

DAIQUIRI コードの計算の流れは Fig. 28 に示したが、ここの乱数発生ルーチン RNUM も JSSL²³⁾の RANDU を使用しており、RNUM 中の ENTRY として RSTART が定義されている。OCTIN は第2章の CASCADE/CLUSTER コードで述べた bcc の octahedral, fcc の body center の格子間原子も扱うため、それらを最隣接の格子位置に動かすプログラムである。また UPDATE は、そのような欠陥の配置の変化に伴うクラスター化を、Table 5 の最初に示した論理関数 CONECT を用いて判定し、欠陥リストを改訂するプログラムである。CLOSE は同じく Table 5 に示されている論理関数 FRENKL を用いて、フレンケル対の消滅を判定し、そのような対を欠陥リストから除去している。

Fig. 28 の第2ページ上方で、個々の欠陥をランダムに取り出して、動かしてみたり、その部分の詳細が Fig. 29 に示されている。DAIQUIRI コードは、元来、具体的な annealing モデルとしては、Johnson の計算結果に基づく bcc α -鉄に対するもののみが組み込まれている。すなわち single vacancy, divacancy, single interstitial, di-interstitial, それぞれの migration エネルギーとして、0.68, 0.66, 0.33, 0.18 eV を用い、300°K では、Table 5 に示したように、single interstitial と di-interstitial のみ動くとしている。これらの動きを時間ステップで追っていくが、計算の効率と精度から、数の多い普通の格子間原子のジャンプの平均時間間隔の $1/10$ を時間ステップの単位

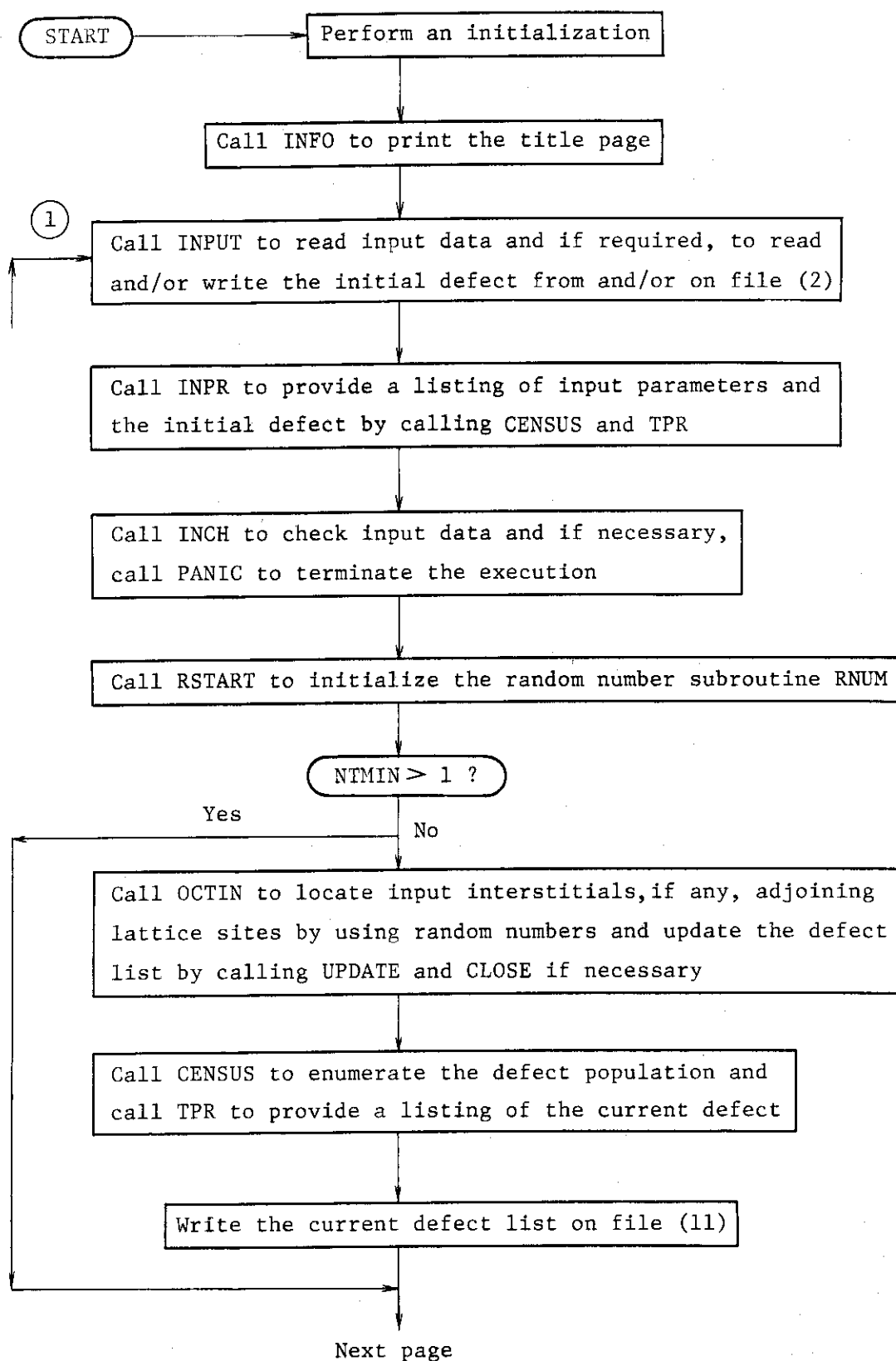


Fig. 28 Flow chart of DAIQUIRI code

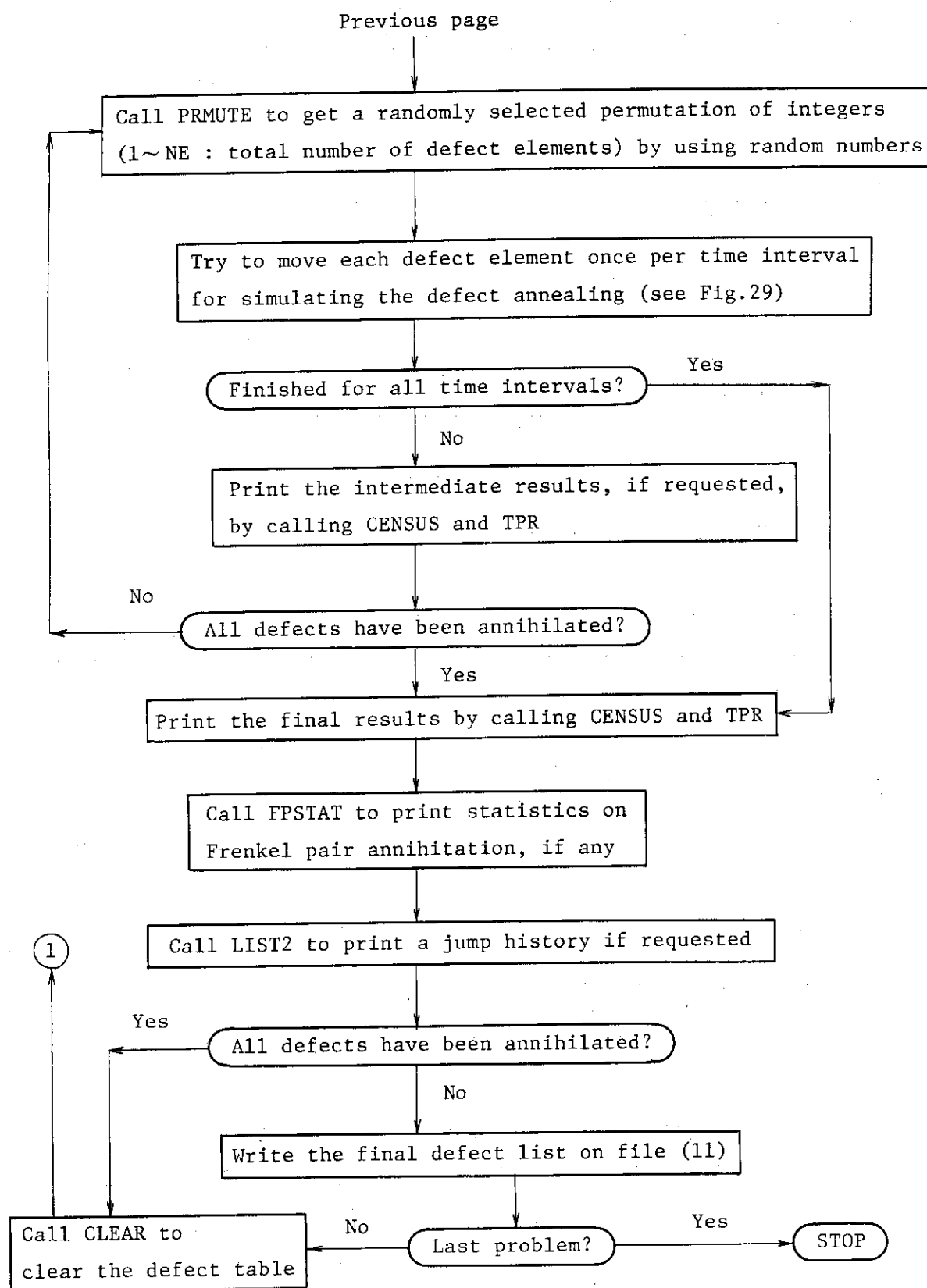


Fig. 28 (Continued)

Table 5 Defect annealing simulation models for BCC and FCC at 300°K in DAIQUIRI

		BCC α -iron ²⁴⁾	FCC γ -iron ²⁷⁾
Clustering criteria for (CONNECT = TRUE)	vacancies	1st and 2nd neighbors	1st neighbors
	interstitials	1st neighbors	
Annihilation criteria (FRENKL = TRUE)		1st, 2nd, 5th and (3, 3, 3) 10th neighbors	1st, 2nd, 4th and [110] 9th neighbors
Correlation criteria (CORL = TRUE) for two single interstitials		1st~5th, 7th and (3, 3, 3) 10th neighbors	1st~4th neighbors
Jump probabilities	for single interstitials without correlation with correlation for all jumps to reduce distance between the two otherwise	0.1	0.14
		1.0	1.0
		0.1	0
	for di-interstitials	30 jumps prohibiting those to increase its distance from a correlated single interstitial	0
for others		0	0

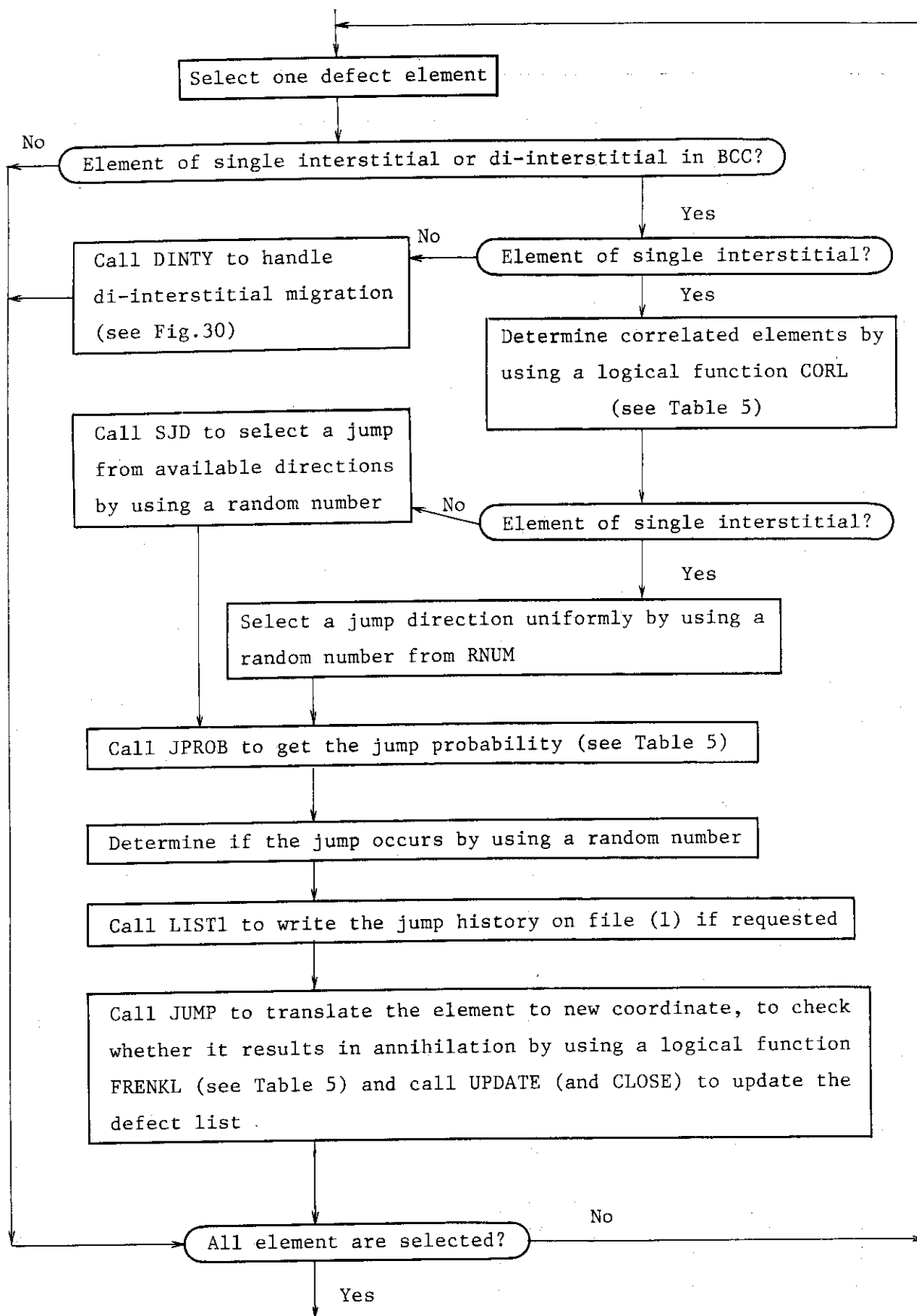


Fig. 29 Flow chart for simulating the defect annealing

に採っている。そして普通の格子間原子より300倍動きやすいが、数の少ないdi-interstitialは、その単位時間に30ジャンプするとしており、これをFig. 29の上方のDINTYプログラムで取り扱っている。この詳細はFig. 30に示されている。なお、Table 5に書かれているsingle interstitial間の相関については、2回以下のジャンプでdi-interstitialになる可能性のある配置にあるものについて、その間の距離を短くする方向へのジャンプ確率を1として、お互いに引き合い影響を考慮している。これもTable 5に示した論理関数CORLを用いて判定しており、Fig. 29の上方で調べ、中央のJPROBで、それに従ってジャンプ確率を選ぶようになっている。

Fcc晶系に対しては、CONNECTとFRENKLについては、Table 5に示したように最初から組み込まれていたが、CORLとジャンプ確率については、Doran & Burnett²⁷⁾による γ -鉄に対するモデルに基づいて新しく組み込んだ。Single, di-, tri-interstitialのmigrationエネルギーは0.15, 0.29, 0.45 eVを用いており、格子間原子については、その間隔が第4隣接距離以下の際に相関があるとし、相関を強める方向へのジャンプ確率を1にしている。

入力データは以下に示すように、4つのグループに分れている。

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(a)	ID1(2), ID2(2) 各(12A4)	表 題
(b) /ANNEAL/ (NPRIまでが 整数型で、 LAST以下が 論理型)	NPROB	問題番号
	NTMIN	最初のステップ番号(入力しなければ1だが、restartの際には1以上を入力する)
	NTMAX	最後の時間ステップ番号
	NPRI(3)	欠陥リストをNPRI(2)時間ステップまではNPRI(1)時間ステップ毎にプリントし、その後はNPRI(3)ステップ毎にプリントする。(入力しなければ10,500,10となる。)
	LAST	この計算後に続く問題がなければTRUE(入力しなければTRUE)
	BCC	300°K γ -鉄 のモデルを用いるときFALSE(入力せずTRUEの際には300°K α -鉄 のモデルを用いる)
	LIST	完全なジャンプ履歴をプリントするときTRUE(入力しなければTRUE)
	SAVE	入力欠陥リストをファイル(2)に書くときTRUE(入力しなければFALSE)
	FETCH	入力欠陥リストをファイル(2)から読むときTRUE(この際SAVE=FALSE)(入力しなければFALSE)

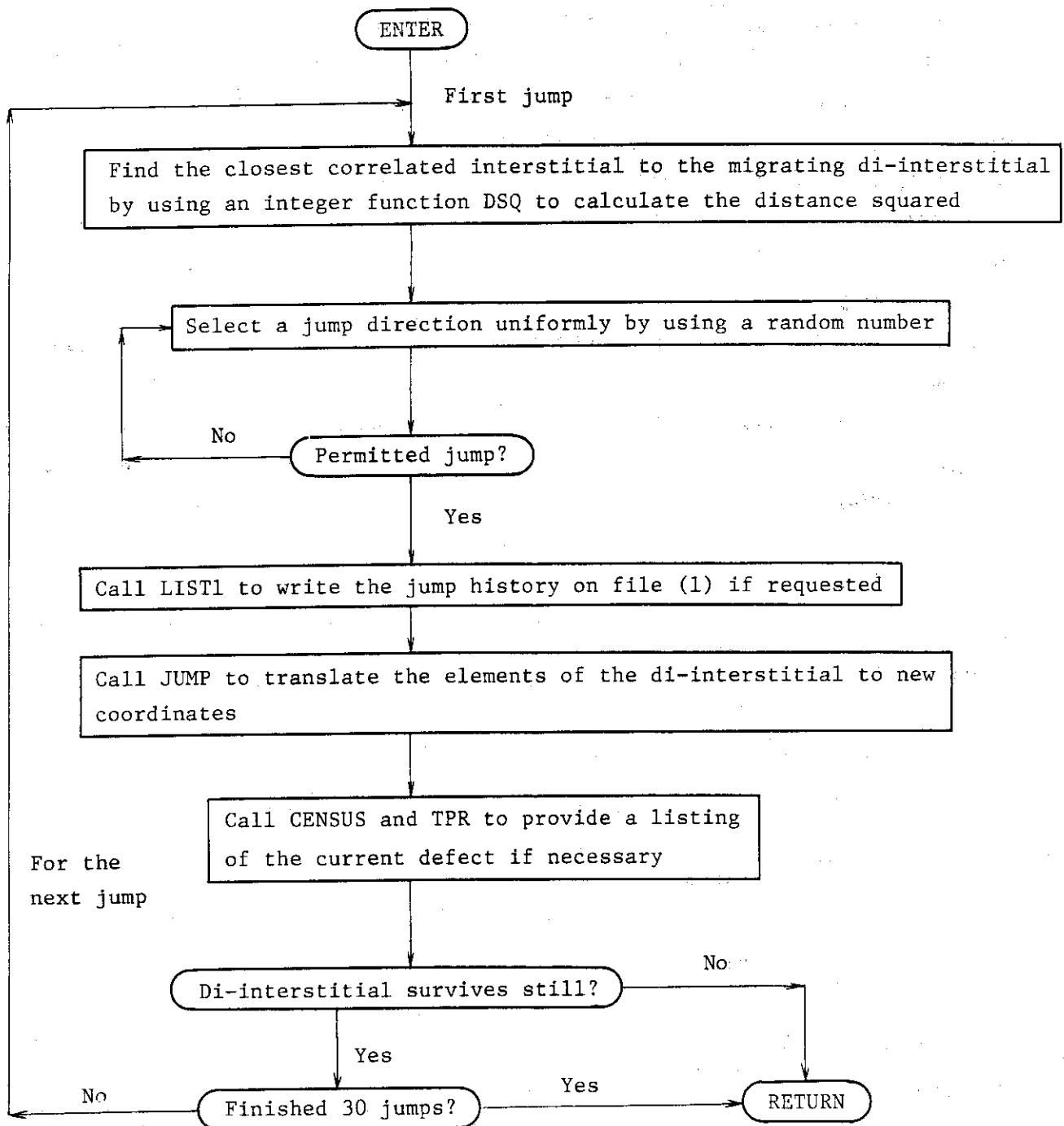


Fig. 30 Flow chart of DINTY program for handling
di-interstitial migration in α -iron at 300°K

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(e)	入力欠陥リスト (FETCH=TRUEの際には不要)	
	NE (5X, I 5)	欠陥の総数 (≤ 500)
	(R(I,1),R(I,2) R(I,3),TYPE(I), CLASS(I),NBR (I),I=1,NE) (5X, 6 I 5)	R (1~3) は位置の格子座標, TYPEは空孔, 格子間原子, 不純物原子それぞれに対して 1, 2, 3, CLASSはクラスター内の要素数 (≤ 50), NBRはクラスター内要素の番号 I をサイクリックに入力する。
	DUMMY (5X, I 5)	不使用
(d)	G (O 1 2)	初期乱数

グループ(b)については, Fig. 28 からも分るように, 続けて実行する問題については initialization をしないので, カード入力しなければ前の問題の値が残っている。グループ(e)の欠陥位置の格子座標は, CASCADE/CLUSTERコードと同様に採られるが, 結晶格子の格子位置の1つを便宜的に (0, 0, 0) としている。従って bcc の格子原子座標 (i j k) は, i, j, k すべてが奇数か, すべてが偶数になる。一方, fcc の格子原子座標は (i+j+k) が偶数になる。例題についてのカード・セットアップは付録9に示しておいた。

出力については, 付録9の例題の出力プリントの1部を, まず付録10に示した。第1ページは, Fig. 28 の上部に示した INFO によるプリント出力で, Table 5 で述べた annealing モデルなどが書かれている。ジャンプ・ベクトルは8個あるが, di-interstitial に対しては, その2つの格子間原子を結ぶ方向は除かれる。このジャンプ・ベクトルは, BLOCK DATA により MOVE (I, J, K) に入れられる。ここで K = 1 が bcc, K = 2 が fcc で, I がジャンプ・ベクトルの番号で, J がその成分である。Fcc に対しては12個の方向があるので, MOVE の DIMENSION は (12, 3, 2) となっている。付録10の第1ページ中央には, 出力の2ページ目に INPR により出力された入力パラメータのプリントが示されている。これに続き, 3ページ目には, 表題と入力した欠陥のリストが, 付録9と同じ形式でプリントされるが, 付録10では省略し, その続きの4ページ目のみを付録の第1ページ下方に示した。ここで I は順番だが, J は個々の点状欠陥の番号で, 最初は I と同一だが, その後は消滅した J はリストから除かれていく。このリストの下には, CENSUS により数えられた欠陥数がプリントされている。

次いで, この入力された欠陥について, Fig. 28 からも分るように, OCTIN で, 必要に応じて格子間原子を格子点に移し, 不安定なフレンケル対を除き, その結果の欠陥リストが同様にプリントされる。これもその2ページ目のみを, 付録の第2ページ上方に示した。最初63個あった欠陥が55個に減っている。次いで入力データ NPRI に従い, 10番目の時間ステップでの欠陥のリストがプリントされるが, これも2ページ目のみを, 付録の第2ページ中央に示した。まだ51個欠陥が残っている。次にプリントされる20ステップ目では, 付録の第2ページ下方に示したように39個になっており, 第3ページから分るように, 1個, 2個, 3個の空

孔クラスターがそれぞれ 9, 2, 2 個, 1 個と 2 個の格子間原子クラスターがそれぞれ 17 個と 1 個になっている。

次いで Fig. 28 の 2 ページ目中央付近に示されているように FPSTAT により, 最初に 63 個から 55 個になった際に消滅したフレンケル対の欠陥の番号がプリントされ, それに続き, その後の時間ステップ中に消滅した欠陥の番号がプリント出力される (付録の第 3 ページ中央を参照)。次いで付録の第 6 ページに示したように, 各時間ステップで消滅した欠陥数とそれの累積がプリントされ, 最後に LIST=TRUE の入力データに従い, LIST2 プログラムにより, 付録 3 ページ目下方に示したように, 欠陥のジャンプ履歴がプリントされる。すなわち, 今の場合には, 最初の時間ステップでは, 43 番の欠陥が, 付録の第 1 ページに示されている第 7 番のベクトル方向にジャンプし, 59 番の欠陥が 1 番の方向にジャンプし, というようにリストされている。

使用ファイルについては, F02 は, Fig. 28 の上方に示したように, 初期の欠陥リストの読み書きのために,

```
NE, ((R(I, J), J=1, 3), TYPE(I), CLASS(I), NBR(I), I=1, NE)
```

でバイナリ型式で読み書きされている。F11 は, Fig. 28 の 1 ページ目下端に示されているように, annealing 前の欠陥のリストと, Fig. 28 の最後に示されているように, annealing 後の欠陥リストが書かれるファイルである。これには, 入力データの際に述べたグループ(c)のデータと同様に, それぞれ (7I5, 35X, 5HSTART, I5), (7I5, 35X, 6HF-INISH, I4) の FORMAT で,

```
NPROB, NE
```

```
(I, (R(I, J), J=1, 3), TYPE(I), CLASS(I), NBR(I), NPROB, I=1, NE)
```

```
NPROB, NE
```

の 3 つのレコードが書かれる。なお F01 には, Fig. 29 の中央に示されているように, ジャンプ履歴が書かれている。

4.2 CASCSRB システム

第 2 章, 第 3 章では, PKA の発生から結晶中の大部分の原子のエネルギーが E_d 以下になるまでをカスケード法で扱う計算コード, CASCADE/CLUSTER, MARLOWE について述べ, 前節 4.1 では, カスケード過程に続く short-term annealing を扱う DAIQUIRI コードについて説明した。実際に材質が放射線照射を受ける場合, 材質結晶中に PKA が次々に発生し, 前の PKA により作られた欠陥結晶中に欠陥を加えていくわけで, この重照射の過程は CASCADE/CLUSTER コードでは, 2.2 節で述べた MAIN4 (SATURATION) を通ることにより扱える。しかし, このコードでは short-term annealing を全然考慮していないので, 前の PKA により作られた欠陥がそのまま凍結されており, そこに次の PKA が飛ばされている。すなわち 0°K の材質に対する重照射を扱っていると考えられる。常温材質では short-term annealing があるので, これを考慮して重照射を扱えるように, CASCADE/CLUSTER と DAIQUIRI を結合して CASCSRB システムを作成した。なおカスケード

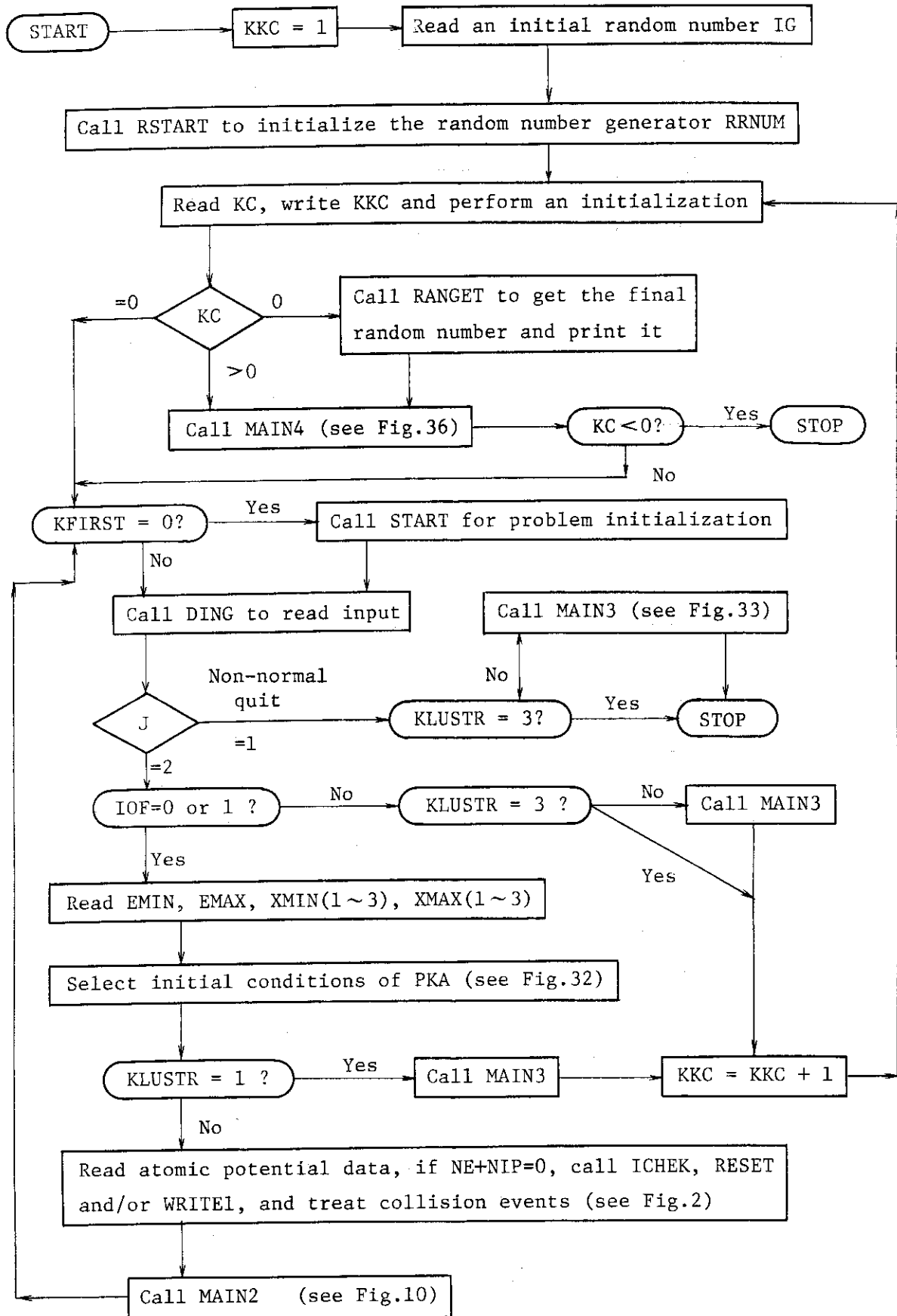


Fig. 31 Flow chart of CASC SRB code system

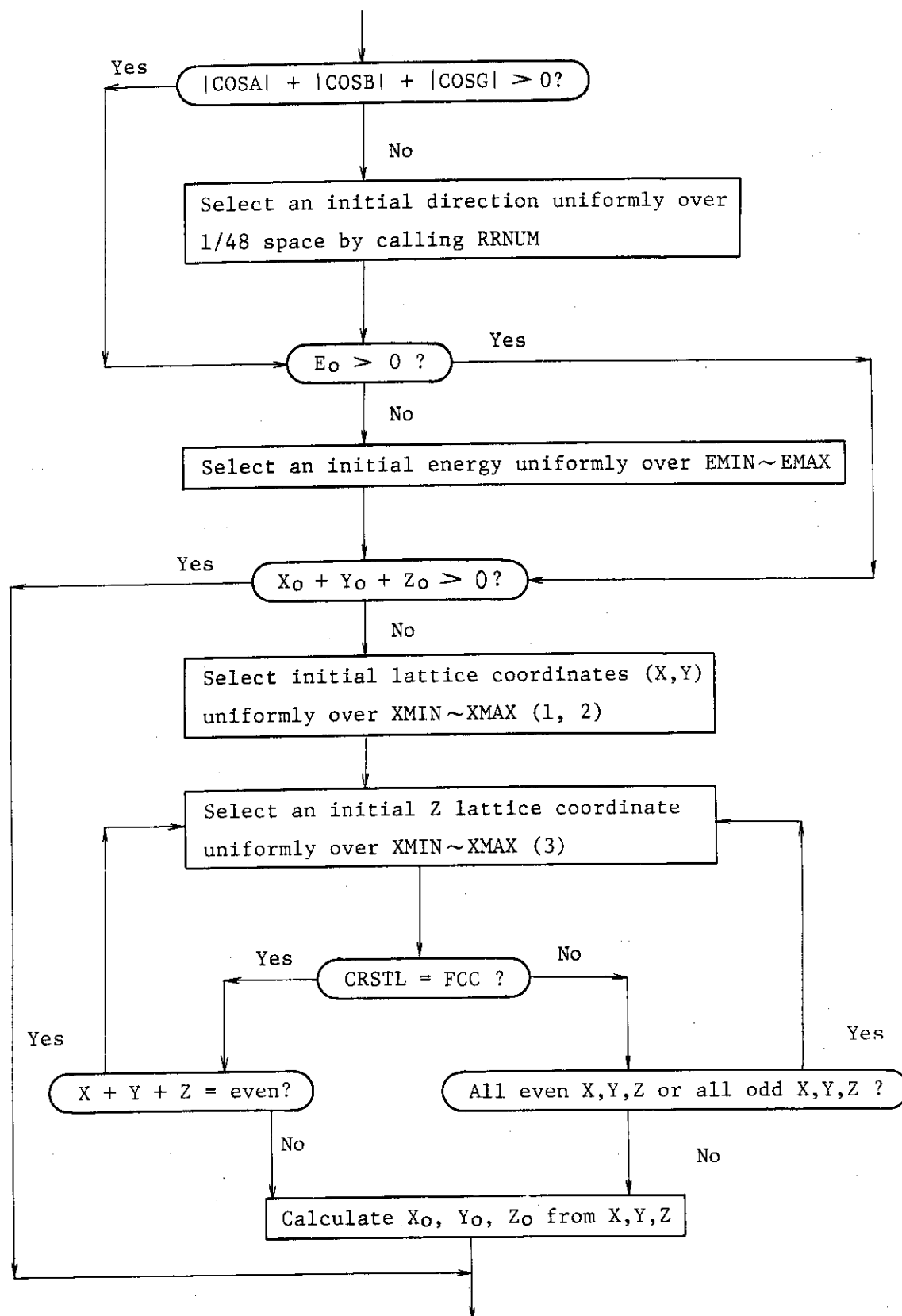


Fig. 32 Flow chart for selecting initial conditions of PKA in CASCSRB

過程はMARLOWEコードでも扱えるわけで、これを用いた重照射解析コードシステムCAS-CMARLについては次節で述べる。

CASCSRB システム中の計算の流れをFig. 31 に示した。これはFig. 1 に示した CASCADE/CURSTER コードに、 $KC < 0$ の流れ(後述)を付加すると共に、Fig. 2 との比較から分るように、PKAの初期条件をMARLOWEのように乱数で選べるようにしている。すなわちPKAの初期条件については、Fig. 32 に示したように、CASCADEのデータ(h)のCOSA, COSB, COSGの3つともが0のとき、MARLOWEのデータ(o)のLOG=3の際と同様、 $1/48$ の角度空間から等方にPKAの飛行方向を選ぶ。次いで $E0 > 0$ でなければ、入力のEMINとEMAXの間に一様乱数により初期エネルギーを選び、更にCASCADEのデータ(g)が $X0+Y0+Z0 > 0$ でなければ、入力で与えられた格子座標XMINとXMAXの間にそれぞれ一様乱数によりPKAの座標を選ぶ。この際、座標がDAIQUIRIの格子結晶原子の位置になるように、fccに対しては和が奇数になるように、bccに対してはすべてが奇数か偶数の場合を除くようにしている。なお乱数ルーチンはRRNUM中で、RANDUを呼んでおり、Fig. 31 に示したように、初期値設定のためにはそのENTRY RSTARTを、ある時点の乱数を取り出すためにはRANGETを呼ぶようになっている。

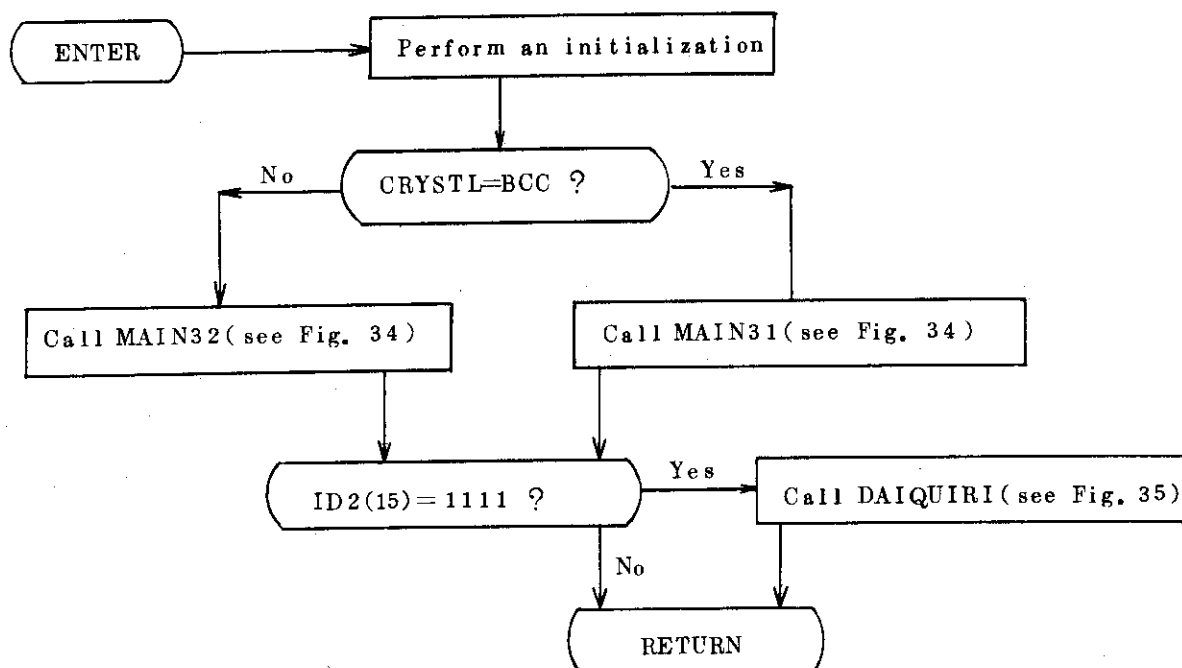


Fig. 33 Flow chart of MAIN3 of CASCSRB

Short-term annealing のためには、Fig. 33 に示したように、CASCADE/CLUSTERのMAIN3(CLUSTER)で処理してから、CASCADEのデータ(h)のID2(15)が1111の場合にDAIQUIRIを呼ぶ。まずMAIN3には、Fig. 34 に示したように、 $KPRINT < 0$ の流れを付加した。この際には、不安定なフレンケル対を除いた後に残った空孔

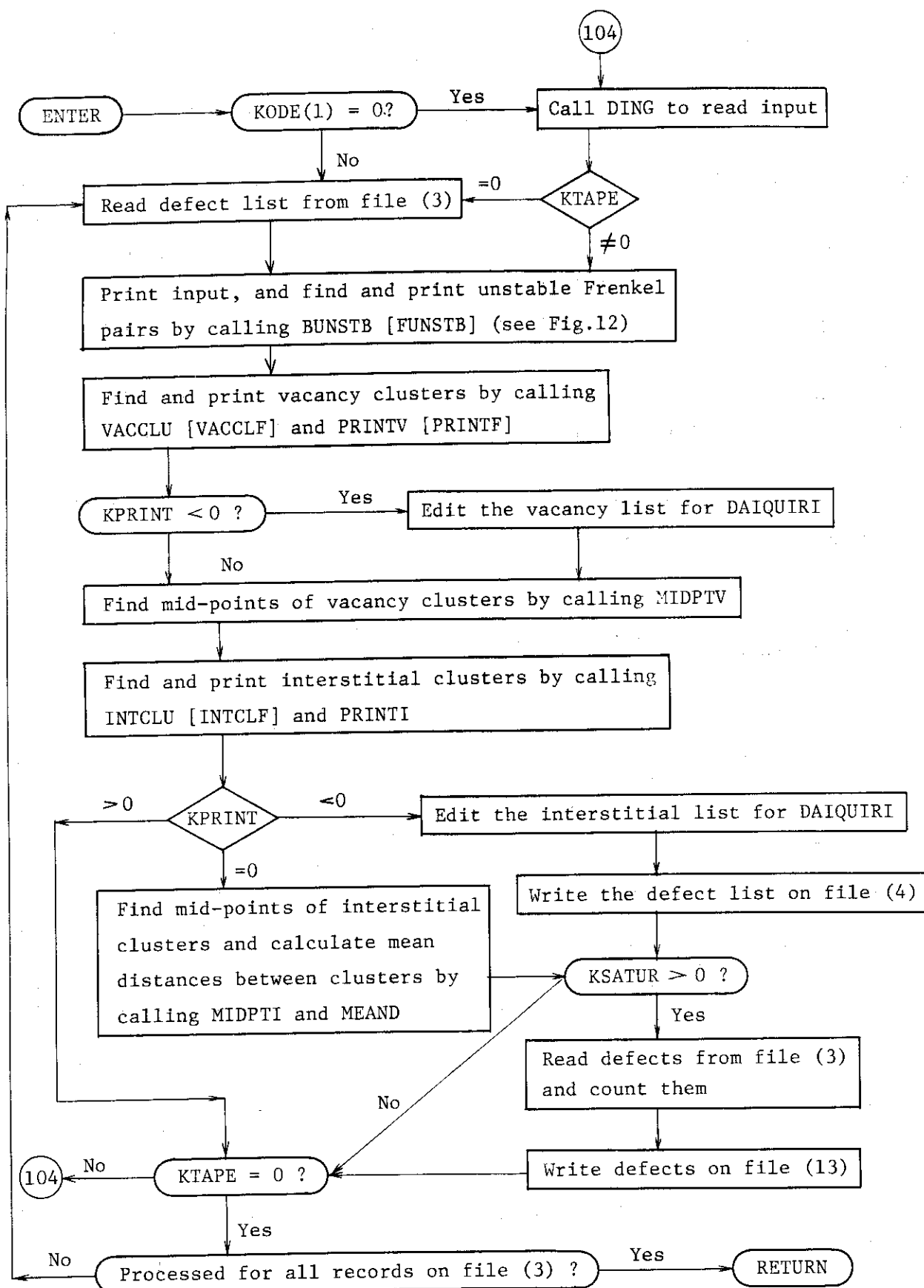


Fig. 34 Flow chart of MAIN31 [MAIN32] of CASCSRB

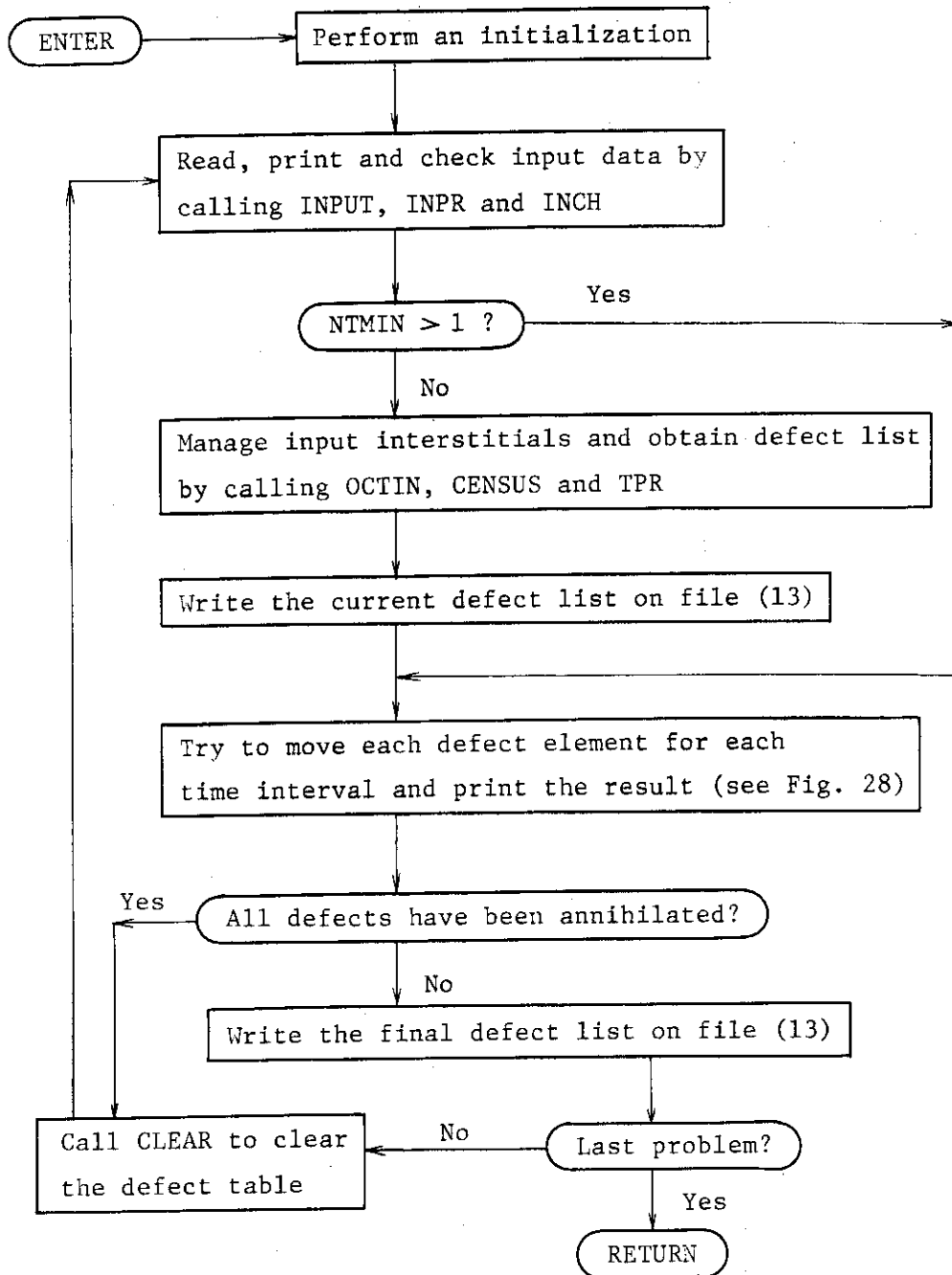


Fig. 35 Flow chart of DAIQUI (DAIQUIRI) of CASCSRB

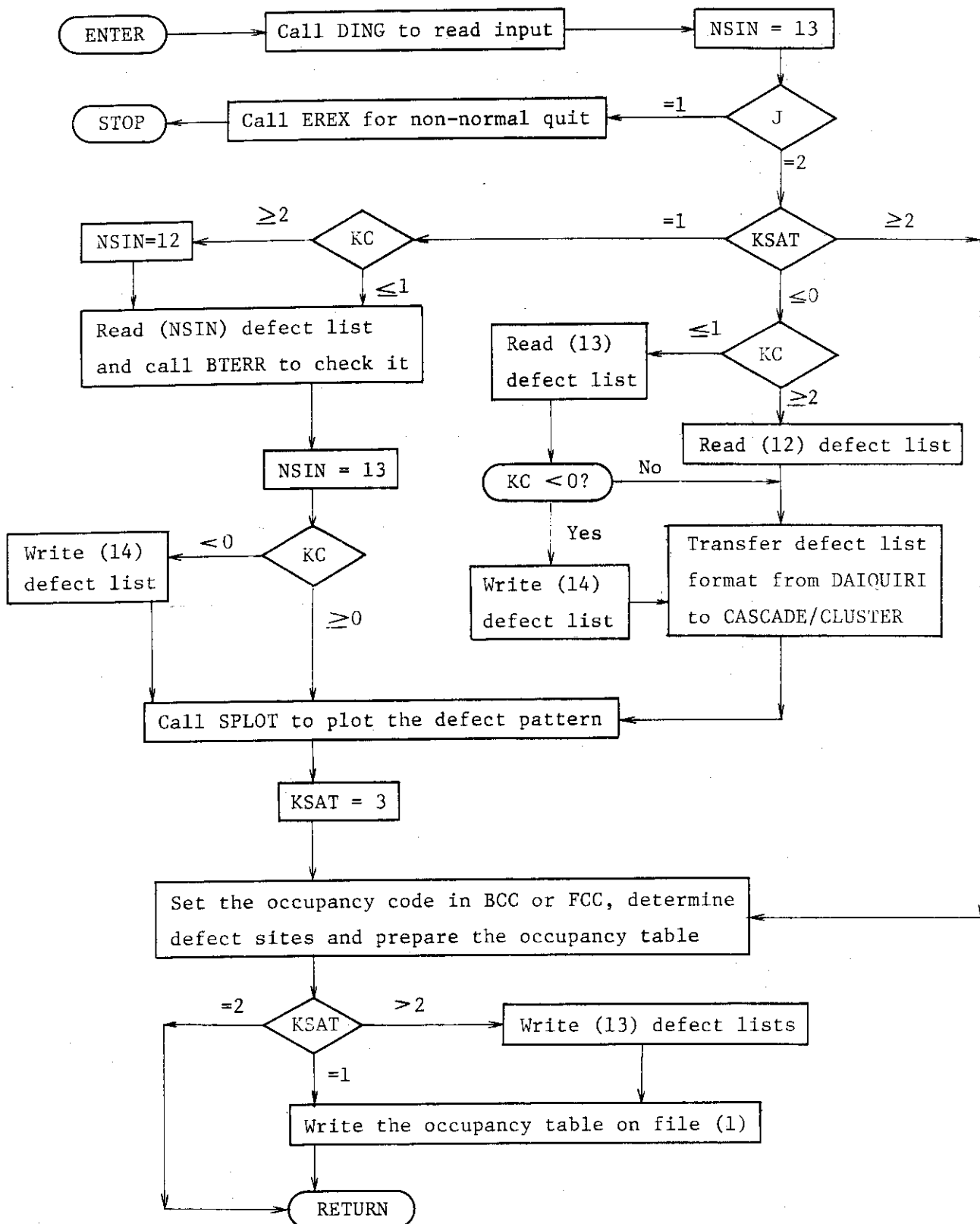


Fig. 36 Flow chart of MAIN4 of CASC SRB

と格子間原子を, DAIQUIRI の入力形式に編集し, ファイル(4)に書く。そして種々のタイプの欠陥間の距離の計算とその結果のプリントは省略する。一方, DAIQUIRI は, そのメイン・プログラムをDAIQUIという名のサブルーチンとし, Fig. 35とFig. 28を比較すると分るように, Fig. 28のINFOは省略し, RSTARTも, CASCADE/CLUSTER部から引き継いだ乱数を用いるので除いた。また, 欠陥リストは, 次のMAIN4で読まれるように, ファイル(3)にバイナリ型式で書かれる。なおINPUTでは, DAIQUIRI のデータ(c)をFETCH=TRUEとして必ずファイル(4)から読むようにした。

次に $KC \neq 0$ のときに通るMAIN4であるが, Fig. 36をFig. 17と比較すれば分るように, $KSAT=1$ と0以下に分け, DAIQUIRI を通らない $KSAT=1$ の際には, 欠陥リストを, $KC \leq 1$ ではFig. 17と同様にファイル(3)から読むが, restartのときである $KC \geq 2$ ではファイル(2)から読む。また, 一連の計算の最後である $KC < 0$ では, 次のrestartのためファイル(4)に書く。一方, DAIQUIRI を通る $KSAT \leq 0$ の際には, 欠陥リストを, $KC \leq 1$ ではファイル(3)からバイナリ型式で, restartの場合である $KC \geq 2$ ではファイル(2)からBCD型式で読む。一連の計算の最後である $KC < 0$ では, ファイル(4)にBCD型式で書く。その後, これらDAIQUIRI により求められた欠陥リストをCASCADE/CLUSTERの形に変換する。そして, SPLOTで必要に応じて欠陥のパターンを図形出力してからKSATを3にセットし, その後はFig. 17の $KSAT \geq 2$ の場合と同様である。以上により, Fig. 31のKCの値による計算の流れも理解されるであろう。

次に, このCASCASRB システムのための入力データを以下にまとめる。

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(a)	IG (012)	初期乱数 (restart の時には前の計算の最後にプリントされた数値を入力する)
(b)	KC (15)	= 0, 最初の計算の場合 (restart の最初は2以上) = 1, 2番目以後で, 一連の計算の最後でない場合 < 0, 一連の計算の最後の場合 (Fig. 31 参照)
(c)	ID1(4) ID2(4) (15A4)	CASCADE/CLUSTERのデータ(b)だが, DAIQUIRIでannealするときは, ID2(15)に1111を入力する (Fig. 33 参照)
(d)	CASCADE/CLUSTER のデータ(e)~(f)	
(e)	X0, Y0, Z0	CASCADE/CLUSTER の(g)だが, 3つの値の和が正でなければ, 以下のデータ(g)のXMIN(1~3)~XMAX(1~3)の間に一様乱数により格子座標i, j, kを選び, それから計算される (入力しなければすべて0)
	E0	CASCADE/CLUSTERの(h)だが, 正でなければ, 以下のデータ(g)で与えるEMIN~EMAXの間に一様乱数で選ばれる (入力しなければ0)

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(e)	COSA COSB COSG	E0と同様、3つの値とも0のときには、1/48の立体角中に一様乱散により方向が選ばれる（入力しなければすべて0）
(f)	CASCADE/CLUSTERのデータ(i)~(k)	
(g)	EMIN, EMAX, (XMIN(I), XMAX(I), I=1,3) (8F10.2)	PKAのエネルギー範囲がEMIN~EMAX(eV)で、位置の格子座標(ijk)のiがXMIN(1)~XMAX(1), jがXMIN(2)~XMAX(2), kがXMIN(3)~XMAX(3)の範囲に一様分布しているとする（使用しない際にもblank・カードが必要）
(h)	CASCADE/CLUSTERのデータ(l)	
(i)	CASCADE/CLUSTERのデータ(m)~(n)	
(j)	KTAPE NRECRD KRECRD KPRINT KSATUR	CASCADE/CLUSTERのデータ(o)だが、KPRINT<0を付加し、この際には、欠陥リストをDAIQUIRIによるannealingのために編集し、それをファイル(4)に書く。なおこのとき、種々のタイプの欠陥間の距離のヒストグラムは作成しない（Fig. 34参照）
(k)	DAIQUIRIのデータ(a)〔ID205=1111のときのみ必要〕	
(l) /ANNEAL/	DAIQUIRIのデータ(b)だが、FETCHは常にTRUEとして扱っている〔ID205=1111のときのみ必要〕	
(m)	KSAT (整数)	=0, DAIQUIRIでannealする際で、初期条件としての欠陥を、 $KC \geq 2$ ではファイル(02)から、 $KC \leq 1$ ではファイル(03)から読み、 $KC < 0$ のときにはそれをファイル(04)に書く。またCASCADE用に変換した欠陥リストをファイル(03)に、格子占有状態をファイル(1)に書く（Fig. 36参照） =1, DAIQUIRIを使用しない場合で、KCによるファイルの使用などは0の際と同じ =2, 初期欠陥はカード入力される >2, 初期欠陥はカード入力され、ファイル(03)に書かれ、格子占有状態がファイル(1)に書かれる (入力しなければ0)
	NDELX NDELY NDELZ (整数)	読み込まれた初期欠陥の格子原点の格子座標を入力する（結晶の位置をずらすために用いる）
(n)	CASCADE/CLUSTERのデータ(s)~(u)〔KSAT=0のとき、(u)のID1, ID2, CLATT以外はファイルから読む〕	
(o)	CASCADE/CLUSTERのデータ(p), (q)	

付録 1 1 には例として、銅の重照射を扱う問題の最初の 2 つの PKA による損傷計算のためのカード・セットアップを示してある。入力データは、グループ(a), (b)に続き、restartではないので(c), (d)が入力される。(e)はすべて入力していないので、いずれも 0 となり、プログラム中で乱数により選ばれる。(f)のグループについてはCASCADE/CLUSTERのデータ(i)が入力されているが、これらは Fig. 31 の中央に示されている START ですべて 2 にセットされているので、KPRINT=3 以外は省略してもよい。なお、NE=1 は CASCADE/CLUSTERのグループ(k)のデータである。CASCSRB のデータ(c)~(f)は Fig. 31 の中央に書かれている DING で読まれるので、最後に=が入力されてから、グループ(g)のデータに移る。例題ではKSAT=2なので、MAIN2用のデータ(i)は不必要である (Fig. 10 と 11 を参照)。

次いでMAIN3に入るように 8 が入力されてから、MAIN3用のデータ(i), (j)がくる。(i)のうち、CASCADE/CLUSTERの(m)は、不安定なフレンケル対を除去するために使われる初期乱数RGENのみが入力されているが、(n)はCASCSRB のデータ(j)のKTapeが 0 なので不要である。データ(j)ではKPRINT<0 としてあり、ここまでが Fig. 34 の上方に示されている DING で読まれるので、その後には=がきている。次いで ID2(4)=1111 に従い DAIQUIRI に入るので、(k), (l)が入力される。その後は、Fig. 31 の右側の線を通して RSTART の後に帰り MAIN4 に入り、次の PKA に対する計算にかかるので、まず MAIN4 に入るように KC=1 を入力している。次いでグループ(m)と(n)のうち、ファイルから読めないデータが入力され、これらは Fig. 36 の最初に示した DING で読まれるので、後に=がおかれている。次いで SPLOT 用のデータがくるが、例題ではプロットしないので、2 枚のブランク・カードが入っている。

その後は、これまでのが繰り返えられるが、グループ(f)のKSATは 1 になっている。このためデータ(h)が必要だが、すべて 0 でよいので、単にその最後を示す=がおかれている。更に DAIQUIRI 用のデータの後にくる KC は -1 と一連の計算の最後であることを示しており、次の restart のため最後の乱数がプリント出力されると共に、それまでの結果が MAIN4 でファイル(4)に書き出される。なお restart の際には、まず MAIN4 に入ってファイル(2)から以前の結果を読んでから次の PKA に対する計算を行うので、KC>2 の後に、付録 1 1 の KC=1 以後のデータを入力するようになる。

DIMENSION から受ける制限については、CASCADE/CLUSTER 部分では、各タイプの空孔と格子間原子それぞれの最大数を 600 に上げた以外は Table 2 と同じである。DAIQUIRI については、取り扱える欠陥の総数、すなわち DAIQUIRI の入力データ(c)の NE を 2000 に拡大している。

次にプリント出力については、付録 1 1 の問題に対する計算結果を付録 1 2 に示した。付録 1 2 の第 1 ページは、付録 3 の第 1 ページと同様だが、PKA のエネルギーは 0.5~3 MeV の間に一様乱数で選ばれており、X, Y, Z はそれぞれ格子座標 175~225 の間で選んでいるので (198, 184, 219) の位置になっている。また方向も乱数で 1/48 の角度空間内に選ばれている。付録 1 2 の第 1 ページ下半は、付録 3 の 1~2 ページ目に対応しており、付録 1 2 の第 2 ページが付録 3 の 2 ページ目後半に対応している。次の第 3 ページ上半は、付録 1 0 の 1 ページ目下半から 2 ページ目の上半までに対応しており、付録 1 2 の第 3 ページ下半が付録 1 0 の 2 ページ

目下半から3ページ目の下方までに対応しているが、それぞれの時間ステップでの欠陥リストは、TPRルーチンを変更してプリントしないようにしてある。付録12の第4ページからは次のPKAに対する結果が示されており、最後の第6ページの終りには最後の乱数が出力されている。

なお使用ファイルについては、F01, F02, F03, F10, F13はCASCADE/CLUSTERのと同様で、DAIQUIRIのF01, F02, F11がそれぞれF01, F04, F13になっている。F12, F14はすでに述べたように、restartのための読み書きのファイルである。

4.3 CASCARL システム

前節のCASCSRBシステムのCASCADEコードの代りに、カスケード過程をMARLOWEコードで扱う重照射コードシステムを、CASCARLとして作成した。このシステム中の計算の流れをFig. 37に示した。CASCSRBシステムでは、Fig. 31の下方に示したように、入力データの読み込み後に、Fig. 2に示したMAIN1を通り、MAIN2, MAIN3と流れる。これに対し、Fig. 37ではMARLOW(MARLOWEのメイン・プログラムをサブルーチンとしたもの)を通してからMAIN3に入るようになっている。ただし、PKAの初期条件は、CASCSRBの際と同様に、入力データの読み込み時に与えられるので、MARLOWでは、その部分がFig. 20に示されているMARLOWEと異なる。すなわち、Fig. 38に示したように、MARLOWでは、MARLOWE用の入力データ読み込み後、Fig. 37中で与えられたPKAの初期条件をMARLOWE用にセットし、MAXRUN=0により、Fig. 22に示されているカスケード過程の計算に入るようになっている。なおMARLOWEのINPUTプログラムは、DAIQUIRIにも同名のプログラムがあるのでINPUTMと名前を変更した。Fig. 21に示されているINPUTでは初期条件としての空孔と格子間原子をカードから読み込むようになっているが、CASCARLではそのデータはCOMMONに入っているもので、その必要はない。更に、Fig. 22中の乱数発生関数ルーチンDRANも、RRNUMを呼ぶようにしてあり、RANGEプログラムはRANGEMと名前を変更している。

DAIQUIRIコードによるshort-term annealingのためには、DAIQUIRIのグループ(c)の入力データとして、欠陥を種々のクラスターへ分類する必要がある。このため、MARLOWの後でMAIN3(CLUSTER)を通すわけだが、この橋渡しをREPORTプログラムでするようにした。すなわち、MARLOWEのREPORTは、Fig. 27に示したように、単に出力プリントのためのプログラムであるが、これをFig. 40のように、まず格子間原子を結晶格子位置におくようにbccはBCCQQ, fccはFCCQQという新しいプログラムにより処理し、次いで空孔の格子座標をCHANGEというプログラムで求め、これらの結果をファイル(3)に書くようにした。これにより、CASCSRBのMAIN3(Fig. 33と34を参照)がそのまま用いられるようになっている。すなわち、Fig. 34から分るように、ファイル(3)から欠陥リストを読んで、処理し、DAIQUIRIを通す際にはその結果をファイル(4)に書くが、DAIQUIRIを通さない際にはCASCADE/CLUSTERコードのようにファイル(3)に書く。DAIQUIRI(サブルーチン名はDAIQUI)もCASCSRBコードのFig. 35に示したも

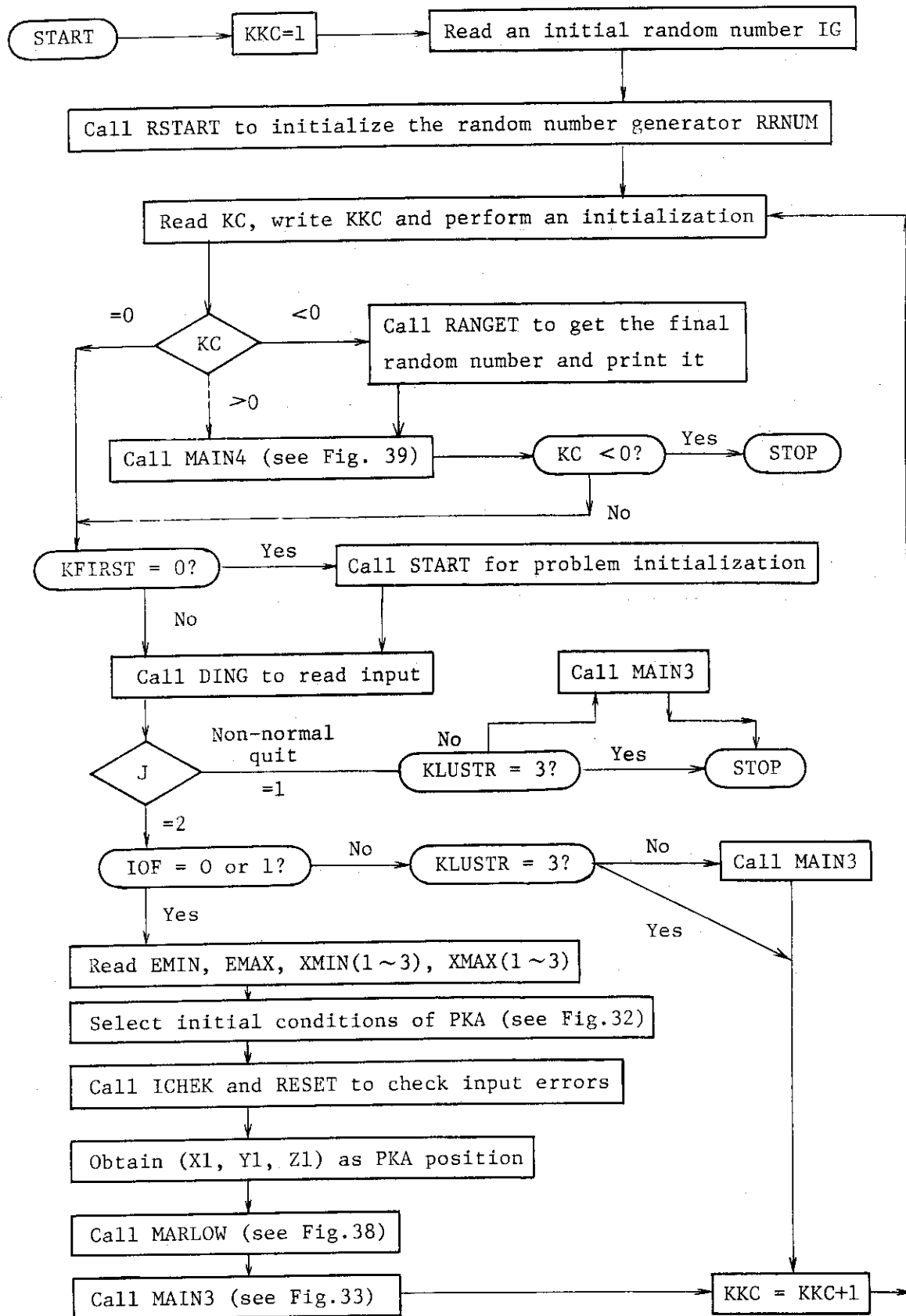


Fig. 37 Flow chart of CASCARL code system

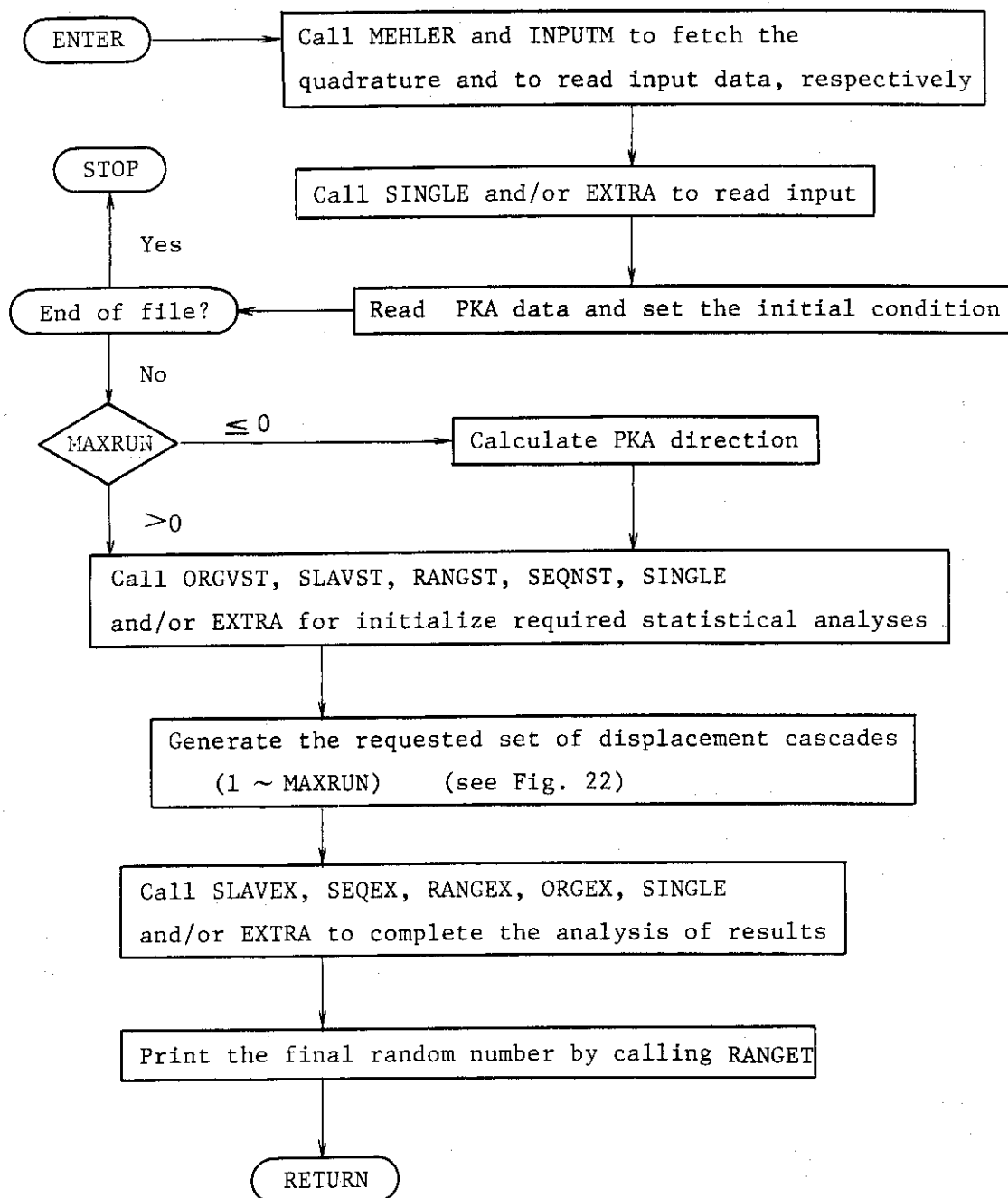


Fig. 38 Flow chart of MARLOW (MARLOWE) in CASCMARL

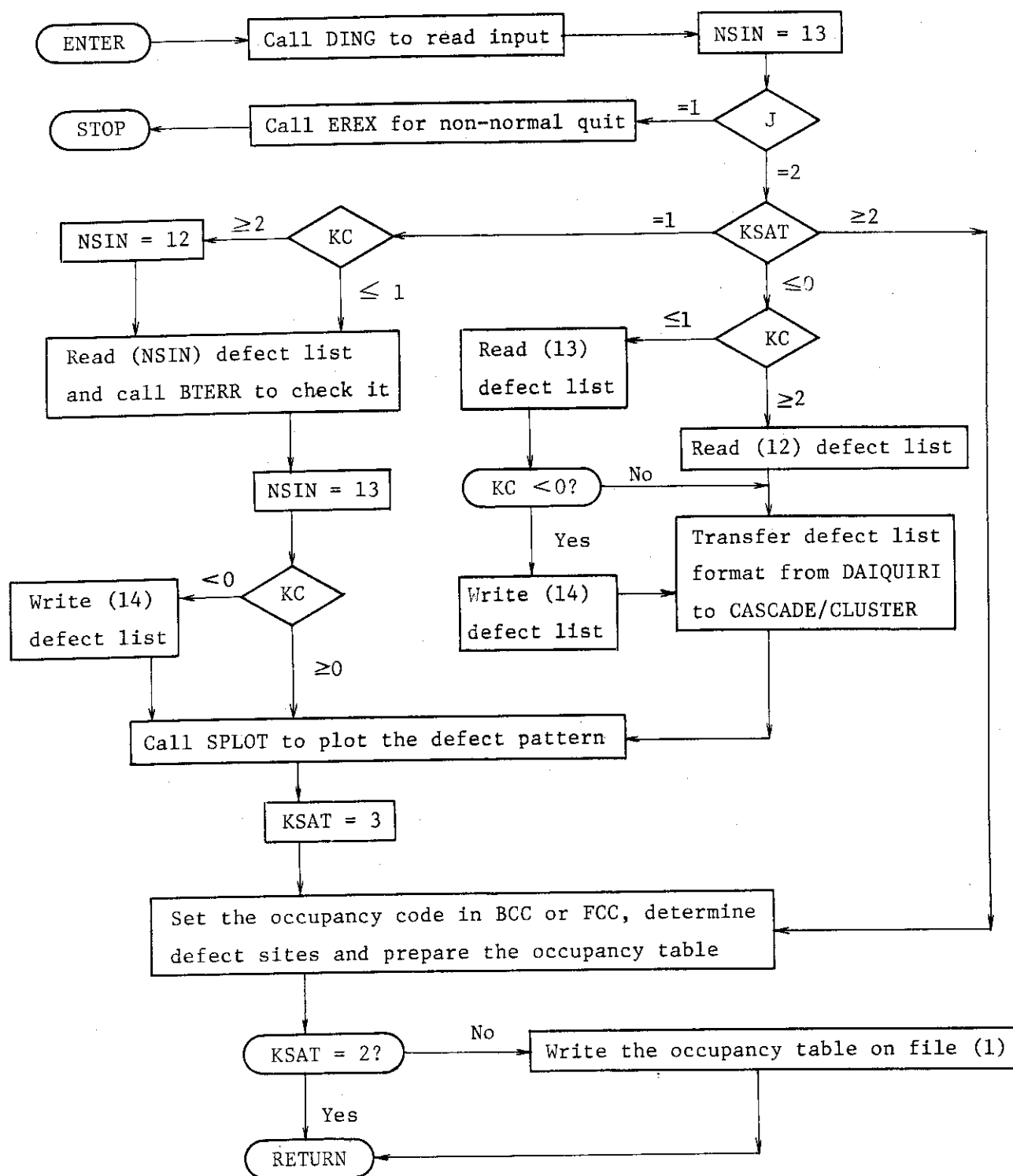


Fig. 39 Flow chart of MAIN4 in CASCARL

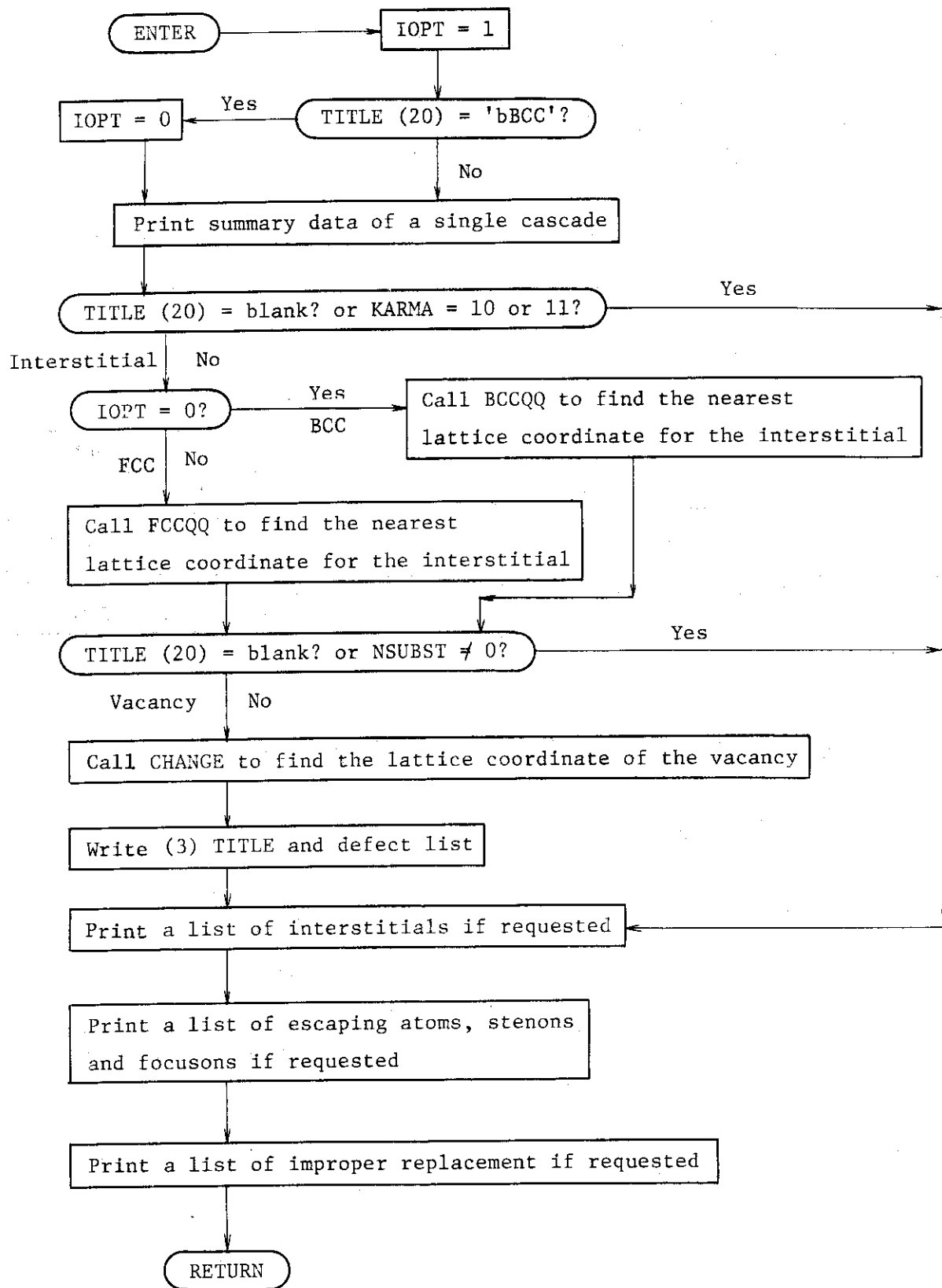


Fig. 40 Flow chart of REPORT program in CASCARL

のと同じで、annealした結果をファイル03に書く。

次いで、この欠陥格子中にまた次のPKAを飛ばすため、Fig. 37に示されているようにMAIN4に入るが、これもCASCSRBコードのと殆んど同じである。すなわち、Fig. 39に示したように、restartの場合($KC \geq 2$)にはファイル02だが、それ以外ではファイル03から欠陥リストを読む。そして一連の計算の最後のときには、次のrestartのため、それをファイル04に書く。次いで、その欠陥のパターンを必要に応じて図形出力してから、次の計算の準備をする。ただしその際、Fig. 36とは異なり、欠陥リストは、先述のようにCOMMONによりMARLOWEのINPUTMへ渡されるので、ファイル03には書かない。

このCASCMARL システムのための入力データは以下のようにになっている。

グループ及び NAMELIST名	変 数 名	内 容
(a)	IG (012)	CASCSRB のデータ(a)
(b)	KC (15)	CASCSRB のデータ(b)
(c)	ID105 ID205 (15A4)	CASCSRB のデータ(c)
(d)	CASCADE/CLUSTERのデータ(e)~(f)だが、実際に使用されるのはCRYSTLとCLATTのみ(ただしICHECKによりチェックされるので付録13に示した程度に入力すること)	
(e)	CASCSRB のデータ(a)	
(f)	CASCADE/CLUSTERのデータ(i)~(k)だが、実際にはKSATのみがRESETで使われる	
(g)	CASCSRB のデータ(g)	
(h)	TITLE (20A4)	MARLOWE のデータ(a)だが、TITLE(20)に結晶構造を'bBCC'か'bFCC'を入力
(i) /XTAL/	MARLOWE のデータ(b)だが、TYPEは次で入力し、NVAC1,NINT-1は不要	
(j)	TYPE (20A4)	(TYPE(I), I=1, NTYPE)で入力
(k)	MARLOWE のデータ(c)	
(l)	MARLOWE のデータ(f)~(o)	
(m)	CASCSRB のデータ(i)~(l)	
(n)	CASCSRB のデータ(m)だが、KSAT $\neq$ 0のときでも欠陥リストをファイル03に書かないことのみが異なる	
(o)	CASCSRB のデータ(n), (o)〔ただし(n)でKSAT=0のときには、ID1, ID2, CLATTも不要〕	

付録13に、付録11と同一の問題に対するカード・セットアップを示した。すなわち、付録13では、付録11の問題に際して乱数により選ばれて付録12に示されているPKAの初期

条件を入力しているの、差異は、カスケード過程を CASCADE コードの代りに MARLOWE コードで扱っていることである。入力データのグループ(a)~(c)は、付録 1 1 と同一だが、グループ(d)のうちの CASCADE/CLUSTER のデータ(c)は、ICHECK でもチェックされないの、省略してある。次いで PKA の初期条件であるデータ(e)が入力され、(f)に移るが、KSAT=2 が常に START でセットされているので入力していない。これで Fig. 3.7 の中央に書かれている DING による読み込みが終るので = がきている。次いでデータ(g)だが、この例題では PKA の初期条件が決められているので、ブランク・カードになっている。

次いでデータ(h)の TITLE が結晶構造と共に入力されてからデータ(i)となるが、MARLOWE では付録 5 にも示したように TYPE='CU' と入力できるが、FORTRAN D の CASCMARL では、それでは読み込まれないので、次にデータ(j)として改めて入力している。その後、データ(k),(l)が入力されてから、MAIN 3 のためのデータとして、グループ(m)の中の CASCSRB のデータ(i),(j)が入力され、= がおかれている。この後に CASCSRB のデータ(k),(l)が入力され、次いで Fig. 3.7 に示されている計算の流れに従い、CASCMARL のデータ(b)として KC=1 を読んでから MAIN 4 に入るわけで、グループ(n)、さらにグループ(o)中の CASCSRB のデータ(n)の後に = がおかれている。次いで CASCSRB のグループ(o)、すなわち欠陥のパターンの図形出力のためのデータが入力されるわけだが、例題ではブランク・カードとなっている。その後は、これまでの繰り返しで、最後は KC=-1 としてあり、さらに図形出力のためのデータも入力されている。

プリント出力については付録 1 4 に、付録 1 3 の問題に対する出力の 1 部を示した。出力プリントの最初の 2 ページは、付録 8 の MARLOWE の出力プリントの最初のページと殆んど完全に同じであるので省略した。出力プリントの 3 ページ目を付録 1 4 の第 1 ページに示しておいたが、ここに入力された最初の PKA の初期条件がプリントされ、それにより作られた欠陥が表になっている。これらは付録 8 の 2 ページ目前半と同様だが、その 2 ページ目後半から 13 ページ目にかけてのカスケード過程の詳細なプリントは、CASCMARL では REPORT を改造して出力しないようにしている。付録 1 4 の第 1 ページ後半には、付録 8 の 3 ページ目と同様な結果が出力されている。次に MAIN 3 による出力となり、まず付録 3 の第 2 ページに示されているように、不安定なフレンケル対のリストがプリントされるが、これは付録 1 4 では省略した。次いで出力される安定な空孔と格子間原子の座標を、付録の第 2 ページに示した。その後は、DAIQUIRI に入り、付録 1 2 の 3 ページ目と同様なものが、第 3 ページに示したように出力される。次いで、次の PKA による計算に移り、まず MARLOWE の出力が、第 4 ページに示したように、前の PKA による 13 個の空孔、格子間原子の位置と共にプリントされる。なお、既存の格子間原子数 NINT1 は、MARLOWE では 100 以下に制限されていたが、CASCMARL では 1,000 までに拡大されている。この後に更に、入力データのプリントが 1 ページあるが、それは省略し、第 1 ページと同様な作られた欠陥のプリントを第 5 ページに示した。これに続く MARLOWE による 2 ページの出力プリント、MAIN 3 による不安定なフレンケル対の出力プリントは省略し、2~3 ページ目と同様な出力を 5~6 ページ目に示しておいた。

付録 1 4 の結果を、CASCSRB システムによる付録 1 2 と比較してみると、MARLOWE

では非弾性的エネルギー損失も考慮しているので、付録14の第1, 第5ページに示されているように、それぞれ88.0 eV, 107.7 eV がこのために使われている。従ってCASC SRBでは、最初の1230.7 eVのPKAで22個の安定なフレンケル対が作られたのに対し、CASC-MARLでは14個となっている。これがannealingにより、それぞれ18個, 13個に減少し、次の1605.2 eVのPKAにより、47個, 32個と増えるが、またannealingにより42個, 28個に減少している。このように、当然のことながら作られる欠陥数はCASC-MARLシステムの方が少なくなるが、非弾性的に消費されるエネルギーを除き、損傷のために使われるエネルギー (damage energy) のみを考慮すれば、結晶に与えられた damage energy が等しいときには、両コードシステムとも大体同数の欠陥を与えることが示されている。²⁸⁾

5. 結 言

固体材質の放射線照射損傷の最初のカスケード過程による点状欠陥生成と、その直後に続く熱振動による回復過程を数値的にシミュレートする計算コードの整備を行った。カスケード過程を取り扱うコードとしては、古いBeelerらによるCASCADE/CLUSTER¹⁵⁾と、最近公開されたばかりのRobinsonらによるMARLOWE¹⁴⁾を整備した。その際、前者については、作られた欠陥のパターンを図形出力できるように改造した。CASCADE/CLUSTERコードとMARLOWEコードの主な差異は、後者では非弾性的エネルギー損失及び結晶格子原子の熱振動も考慮できることである。しかし一方、CASCADE/CLUSTERでは、安定なフレンケル対の作られる条件は、動力学的シミュレーションの結果に基づき非等方的な結合半径によっており、MARLOWEより現実的な物理モデルを用いている。またMARLOWEにはない、生成された欠陥を種々のクラスターに分類して統計的に処理する機能も持っている。CASCADE/CLUSTERとMARLOWEの物理モデルの差異による計算結果への影響については、すでに一部は示されているが、²⁹⁾ 別途まとめられる予定である。

熱振動による点状欠陥の回復過程を取り扱う計算コードとしては、モンテカルロ法によるDAIQUIRI²⁴⁾を整備した。このコードは、最初は常温のbcc体系しか扱えなかったが、本報ではfcc体系も取り扱えるように改造した。このDAIQUIRIコードをCASCADE/CLUSTERコードと結合し、常温立方晶体系材質の重照射を扱うコード・システムとしてCASC SRBを作成した。その際、結晶格子中でのPKAの発生位置などを、MARLOWEと同様に乱数で統計的に選べるようにした。また、CASC SRBシステムでのカスケード過程を、MARLOWEコードで取り扱える重照射解析システムも整備し、CASCMARLと名付けた。このシステムでは、MARLOWEにより作られた点状欠陥を、CLUSTERコードで種々のクラスターに分類するなどの処理も行っている。従ってCASC SRBとCASCMARLとの差異は、CASCADEコードをMARLOWEコードに代えた形になっており、この両コード・システムを1つのシステムにまとめることもできる。しかしMARLOWEは倍精度演算をしているため、大きい計算機容量を要求するので、本報では別個のシステムとしておいた。なお、この両システムによる計算結果の比較についても、一部はすでに発表されているが、²⁸⁾ 先述のCASCADE/CLUSTERとMARLOWEの比較などと一緒にまとめる予定である。

従来、放射線照射損傷の研究は、主として現象論的に進められてきたが、その基礎となる物理モデルの解明は、本報で示したような計算コードによるシミュレーションの結果と、電子顕微鏡像の詳細な解析との比較などを通してなされていく必要がある。

謝 辞

本報の研究に対しては、物理部の小幡行雄次長（現核融合研究部長）、奥田重雄固体物理第2研究室長（現筑波大学教授）、岩田忠夫現固体物理第2研究室長を初めとし、固体物理第2研究室・高村三郎副主任研究員、固体物理第1研究室・数又幸生副主任研究員、燃料工学部・

5. 結 言

固体材質の放射線照射損傷の最初のカスケード過程による点状欠陥生成と、その直後に続く熱振動による回復過程を数値的にシミュレートする計算コードの整備を行った。カスケード過程を取り扱うコードとしては、古いBeelerらによるCASCADE/CLUSTER¹⁵⁾と、最近公開されたばかりのRobinsonらによるMARLOWE¹⁴⁾を整備した。その際、前者については、作られた欠陥のパターンを図形出力できるように改造した。CASCADE/CLUSTERコードとMARLOWEコードの主な差異は、後者では非弾性的エネルギー損失及び結晶格子原子の熱振動も考慮できることである。しかし一方、CASCADE/CLUSTERでは、安定なフレンケル対の作られる条件は、動力学的シミュレーションの結果に基づき非等方的な結合半径によっており、MARLOWEより現実的な物理モデルを用いている。またMARLOWEにはない、生成された欠陥を種々のクラスターに分類して統計的に処理する機能も持っている。CASCADE/CLUSTERとMARLOWEの物理モデルの差異による計算結果への影響については、すでに一部は示されているが、²⁹⁾ 別途まとめられる予定である。

熱振動による点状欠陥の回復過程を取り扱う計算コードとしては、モンテカルロ法によるDAIQUIRI²⁴⁾を整備した。このコードは、最初は常温のbcc体系しか扱えなかったが、本報ではfcc体系も取り扱えるように改造した。このDAIQUIRIコードをCASCADE/CLUSTERコードと結合し、常温立方晶体系材質の重照射を扱うコード・システムとしてCASCSRBを作成した。その際、結晶格子中でのPKAの発生位置などを、MARLOWEと同様に乱数で統計的に選べるようにした。また、CASCSRBシステムでのカスケード過程を、MARLOWEコードで取り扱える重照射解析システムも整備し、CASCMARLと名付けた。このシステムでは、MARLOWEにより作られた点状欠陥を、CLUSTERコードで種々のクラスターに分類するなどの処理も行っている。従ってCASCSRBとCASCMARLとの差異は、CASCADEコードをMARLOWEコードに代えた形になっており、この両コード・システムを1つのシステムにまとめることもできる。しかしMARLOWEは倍精度演算をしているため、大きい計算機容量を要求するので、本報では別個のシステムとしておいた。なお、この両システムによる計算結果の比較についても、一部はすでに発表されているが、²⁸⁾ 先述のCASCADE/CLUSTERとMARLOWEの比較などと一緒にまとめる予定である。

従来、放射線照射損傷の研究は、主として現象論的に進められてきたが、その基礎となる物理モデルの解明は、本報で示したような計算コードによるシミュレーションの結果と、電子顕微鏡像の詳細な解析との比較などを通してなされていく必要がある。

謝 辞

本報の研究に対しては、物理部の小幡行雄次長（現核融合研究部長）、奥田重雄固体物理第2研究室長（現筑波大学教授）、岩田忠夫現固体物理第2研究室長を初めとし、固体物理第2研究室・高村三郎副主任研究員、固体物理第1研究室・数又幸生副主任研究員、燃料工学部・

材料物性研究室・有賀武夫研究員，更に，運輸省・船舶技術研究所・東海支所・遮蔽効果研究室・竹内清室長（当時）の方々からの御指導，あるいは有益な助言をいただいた。ここに謝意を表す次第である。

参考文献

- 1) Larsen A. : "GRAPE, A Computer Code for Classical Many-Body Problems in Radiation Damage," BNL-7979 (1964)
- 2) Beeler J.R., Jr. : "Computer Experiments to Predict Radiation Effects in Reactor Materials," IAEA-SM-120/E-1 in "Radiation Damage in Reactor Materials, Vol. II," IAEA (1969)
- 3) Beeler J.R., Jr., Besco D.G. : "Knock-on Cascades and Point-Defect Configurations in Binary Materials," in "Radiation Damage in Solids, Vol. I," IAEA (1962)
- 4) Robinson M.T., Oen O.S. : "Computer Studies of the Slowing Down of Energetic Atoms in Crystals," Phys. Rev., 132, 2385 (1963)
- 5) Beeler J.R., Jr., Besco D.G. : "Defect Configurations in Heavy-Atom Bombarded BeO," J. Phys. Soc. Japan, 18, Supp. III, 159 (1963)
- 6) Beeler J.R., Jr., Besco D.G. : "Range and Damage Effects of Tunnel Trajectories in a Wurtzite Structure," J. Appl. Phys., 34, 2873 (1963)
- 7) Beeler J.R., Jr., Besco D.G. : "Effects of Channeling on Damage Production in Iron," Phys. Rev., 134, A530 (1964)
- 8) Beeler J.R., Jr. : "Displacement Spikes in Cubic Metals," Phys. Rev., 150, 470 (1966)
- 9) Robinson M.T., Oen O.S. : "The Channeling of Energetic Atoms in Crystal Lattices," Appl. Phys. Letters, 2, 30 (1963)
- 10) Gibson J.B. et al. : "Dynamics of Radiation Damage," Phys. Rev., 120, 1229 (1960)
- 11) Erginsoy C. et al. : "Dynamics of Radiation Damage in a Body-Centered Cubic Lattice," Phys. Rev., 133, A595 (1964)
- 12) Firsov O.B. : "Calculation of the Interatomic Potential of Atoms," Soviet Physics JETP, 6, 534 (1958)
- 13) Torrens I.M., Robinson M.T. : "Computer Simulation of Atomic Displacement Cascades in Solids," in "Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects" (Gehlen P.C. et al. Eds.), Plenum Press, New York (1972)
- 14) Robinson M.T., Torrens I.M. : "Computer Simulation of Atomic-Displacement Cascades in Solids in the Binary-Collision Approximation," Phys. Rev. B, 9, 5008 (1974)
- 15) Besco D.G., Baumgardt N.R. : "CASCADE and CLUSTER," GEMP-356 (1965)

- 16) Besco D.G., Beeler J.R., Jr.: "Computer Programs Describing Collision Cascades in Binary Materials," GEMP-192 (1963)
- 17) Besco D.G., Beeler J.R., Jr.: "Computer Programs Describing Collision Cascades in Binary Materials," GEMP-200 (1963)
- 18) Besco D.G., Beeler J.R., Jr.: "Computer Programs Describing Collision Cascades in Binary Materials," GEMP-243 (1963)
- 19) Dienes G.J., Vineyard G.H.: "Radiation Effects in Solids," Interscience Publishers, New York (1957)
- 20) Kinchin G.H., Pease R.S.: "The Displacement of Atoms in Solids by Radiation," Rept. Prog. Phys., 18, 1 (1955)
- 21) Firsov O.B.: "A Qualitative Interpretation of the Mean Electron Excitation Energy in Atomic Collisions," Soviet Physics JETP, 36, 1076 (1959)
- 22) Lindhard J. et al.: "Integral Equations Governing Radiation Effects," Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 33, No. 10 (1963)
- 23) 藤村統一郎, 西田雄彦, 浅井清 (編) "JSSL (原研版・科学用サブルーチン・ライブラリ) マニュアル," JAERI-M 7102 (1977)
- 24) Besco D.G.: "Computer Simulation of Point Defect Annealing in Metals," GEMP-644 (1967)
- 25) Doran D.G.: "Computer Simulation of Displacement Spike Annealing," Rad. Effects, 2, 249 (1970)
- 26) Johnson R.A.: "Interstitials and Vacancies in α Iron," Phys. Rev., 134, A1329 (1964)
- 27) Doran D.G., Burnett R.A.: "Simulated Annealing of Displacement Cascades in FCC Metals," HEDL-TME 74-56 (1974)
- 28) Asaoka T. et al.: "Computer Simulation of Point-Defect Saturation in Copper and α -Iron," in "Reactor Engineering Division Annual Report," JAERI-M 7291 (1977)
- 29) Asaoka T. et al.: "Computer Simulation of Atomic-Displacement Cascades in Cu by CASCADE/CLUSTER Code," in "Reactor Engineering Division Annual Report," JAERI-M 6710 (1976)

Appendix 1 Card Setup for CASCADE/CLUSTER to Obtain Stable Frenkel Pairs in Cu Lattice due to 1keV Cu PKA of 3 Different Directions

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

```

T,0/TIME 105
C,2/CORE 128
P,0/PCH 0
/00331

#GJOB 3100035,TA,ASAKA,431,22,FEMMONTC
#DLIED J0035,CASCL,GRFD=ON,COML:B=CALL
SGMT MAIN
SELECT RELBIN(FTMAIN,MAIN1,DING,RRDING,RSKIP,BTERR,EREX,NORMEX,GGGG, /
SETIX,ERRORA,UNLOAD,(INTF,XINTF,SIGNF,MINIF,XMODF,XMAXOF, /
FLOATF,XABSF,SORTF,ABSF,EXPF,ATANF,XXXX)
SGMT MAIN1,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(START,ICHECK,RESET,WRITE1,WRITE2,TARGET1,TARGET2,SCATTER, /
BKKEEP,DDDD,PTAB,PTAB1,PTAB2,BIG3,RANGE,INT1,INT2, /
CLPAIR,HAUTUS,SETIST)
SGMT MAIN2,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN2,BTEDIT,TSORT1,TSORT2)
SGMT MAIN3,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN3,BB88,MIDPTV,PRINT1,MIDPT1,MEAND,DISTS,DISTD,STORE, /
PRINT,SPLLOT,GRAPH)
SGMT MAIN31,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN31,AAAA,VACCLU,PRINTV,INTCLU,COMPRV,COMPK1)
SGMT MAIN32,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN32,CCCC,VACCLF,PRINTF,INTCLF,COMPR)
SGMT MAIN4,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN4,EEEE)
FIN
#RUN
#DISK F01
#DISK F02
#DISK F03
#DISK F10
#DISK F13
#FD F78,DUMMY,DEVD=DA
#DATA
0
51D1,15,1 KEY COPPER
51D2,15,DIRECTION 1
5TYPE1,3,COPPER
5TYPE2,3,COPPER
5TYPE3,3,COPPER
5CRYSTL,1,FCC
3PCMG,29,29,29,PMASS,63,63,63,ED,7,7,7,
3CLATT,3,6147,PMAXX,2,RELAX,5,XLMDA,1,
3XD,362,3737,Y0,362,3737,Z0,362,3737,
3COSA,0,01666433,COSB,0,00027776,COSG,0,99986110,
3EQ,1000,
4KPRINT,2,KLUSTR,2,KPRIM,2,KREPL,2,NE,1,KSAT,2,
#
51D2,15,DIRECTION 2
3COSA,0,01197989,COSB,0,01198707,COSG,0,99986110,
#
51D2,15,DIRECTION 3
3COSA,0,01664584,COSB,0,00083299,COSG,0,99986110,
#
8
4NTVAL,40,

```

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

```

3TVALS,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,
3TVALS,20,21,22,23,24,25,30,35,40,45,50,60,70,80,90,100,
3TVALS,35,150,200,250,500,1000,
4RGEN,21109731072,
4KTAPE,0,KRECRD,0,KPRINT,1,KSATUR,0,
#
-1

```

Appendix 2 Card Setup for CASCADE/CLUSTER to Obtain Stable Frenkel Pairs in Cu Lattice due to Successive Two 1 keV Cu PKA's with Different Directions at the Same Position

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

```

C,2/CORE 128
T,0/TIME 105
P,0/PCH 0
/00331

*GJOB 3100035.TA,ASAOKA,431.22,FEMMONTC
*DLIED J0035,CASCL,GRFD=ON,COMLIB=CALL
SGMT MAIN
SELECT RELBIN(FTMAIN,MAIN1,DING,RRDING,RSKIP,BTERR,EREX,NORMEX,GGGG, /
SETIX,ERRORA,UNLOAD,INTF,XINTF,SIGNF,MINIF,XMODF,XMAXOF, /
FLOATF,XABSF, SORTF,ABSF,EXPF,ATANF,XXXX)
SGMT MAIN1,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(START,[CHEK,RESET,WRITE1,WRITE2,TARGET1,TARGET2,SCATTH, /
BKKEEP,DDDD,PTAB,PTAB1,PTAB2,BIG3,RANGE,INT1,INT2, /
CLPAIR,RADIUS,SETIST)
SGMT MAIN2,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN2,BTED1,TSORT1,TSORT2)
SGMT MAIN3,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN3,BBBB,MIDPTV,PRINT1,MIDPTI,MEAND,DISTS,DISTD,STORE, /
PRINT,SPLIT,GRAPH)
SGMT MAIN31,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN31,AAAA,VACCLU,PRINTV,INTCLU,COMPRV,COMPR1)
SGMT MAIN32,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN32,CCCC,VACCLF,PRINTF,INTCLF,COMPR)
SGMT MAIN4,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN4,EEEE)
FIN
*RUN
*DISK F01
*DISK F02
*DISK F03
*DISK F10
*DISK F13
*FD F78,DUMMY,DEVDPDA
*DATA
0
SID1,15,1 KEV COPPER
SID2,15,DIRECTION 2
STYPE1,3,COPPER
STYPE2,3,COPPER
STYPE3,3,COPPER
SCRYSTL,1,FCC
3PCHG,29,29,29,PMASS,63,63,63,ED,7,7,7,
3CLATT,3,6147,PMAXX,2,RELAX,5,XLMDA,1,
3X0,362,3737,Y0,362,3737,Z0,362,3737,
3COSA,0,01197989,COSB,0,01158707,COSG,0,99986110,
3EO,1000,
4KPRINT,2,KLUSTR,2,KPRIM,2,KREPL,2,NE,1,KSAT,2,
3ECO,7,7,7,ESUB,7,7,7,
=
8
4NTVAL,40,
3TVALS,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,
3TVALS,20,21,22,23,24,25,30,35,40,45,50,60,70,80,90,100,
3TVALS,35,150,200,250,500,1000,
4RGEN,21109731072,
4KTAPE,0,KRECRD,0,KPRINT,0,KSATUR,1,

```

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

```

1 1 1 150 250 200 150 250 200 150 250 200
200 200 200
1
4KSAT,1,
4NDELX,0,NDELY,0,NDELZ,0,
5CRYSTL,1,FCC
3CHECK,0,
=
SID1,15,1 KEV COPPER
SID2,15,DIRECTION 3
STYPE1,3,COPPER
STYPE2,3,COPPER
STYPE3,3,COPPER
5CRYSTL,1,FCC
3PCHG,29,29,29,PMASS,63,63,63,ED,7,7,7,
3CLATT,3,6147,PMAXX,2,RELAX,5,XLMDA,1,
3X0,362,3737,Y0,362,3737,Z0,362,3737,
3COSA,0,01664584,COSB,0,00083299,COSG,0,99986110,
3EO,1000,
4KPRINT,2,KLUSTR,2,KPRIM,2,KREPL,2,NE,1,KSAT,1,
3ECO,7,7,7,ESUB,7,7,7,
=
4NDELX,0,NDELY,0,NDELZ,0,
=
8
4NTVAL,40,
3TVALS,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,
3TVALS,20,21,22,23,24,25,30,35,40,45,50,60,70,80,90,100,
3TVALS,35,150,200,250,500,1000,
4RGEN,21109731072,
4KTAPE,0,KRECRD,0,KPRINT,0,KSATUR,1,
1 1 1 150 250 200 150 250 200 150 250 200
200 200 200
-1

```

Appendix 3 A Part of Output Print of CASCADE/CLUSTER for the Problem of Appendix 2

ELASTIC COLLISION CASCADE -- FCC LATTICE

1 KEV COPPER
DIRECTION 2

CRYSTAL ATOMS

	1 COPPER	2 COPPER
MASS	63.	63.
CHARGE	29.	29.
EJECTION ENERGY	7.	7.

PRIMARY ATOM

COPPER MASS = 63, CHARGE = 29,

PRIMARY ATOM ENERGY

1000.0 ELECTRON VOLTS

TAKE-OFF POINT (ANGSTROMS)

X = 362.37370

Y = 362.37370

Z = 362.37370

TAKE-OFF DIRECTION

COS ALPHA = 0.01197989 COS BETA = 0.01158707 COS GAMMA = 0.99986111

THETA = 0.954965 PHI = 44.045069

LATTICE CONSTANT = 3.6147 ANGSTROMS

SCREENING PARAMETER = 1.00 POTENTIAL CUTOFF = 2.00 ANGSTROMS

RELAXATION DISTANCE (SQUARED) = 5.00 COORDINATE UNITS

OUTPUT OPTIONS

KLUSTR= 2 KPRIM= 2 KPRINT= 2 KRLAT= 0 KPLAT= 2 KREPL= 2

DEFECT STATISTICS

	INTERSTITIALS	VACANCIES	REPLACEMENTS
COPPER	14	11	9
COPPER	10	12	15
TOTAL	24	23	24

RANGE OF PRIMARY ATOM

5.93 ANGSTROMS

COORDINATES OF PRIMARY ATOM AT END OF CASCADE

202 202 203

PRIMARY KNOCK-ON ENERGIES (eV)

COPPER	2	COPPER	0
8.87		0.0	
975.94		0.0	

NUMBER OF COLLISIONS RECORDED = 369

VOLUME OF DAMAGED REGION = 1.625E+04 C.A.

MAXIMUM PERMITTED VOLUME = 5.668E+05 C.A.

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

1 KEV COPPER
DIRECTION 2

LATTICE CONSTANT = 3.6147000E+00

RANDOM NUMBER GENERATOR = 21109731072

CONTROL WORDS = KTAPE= 0, KPRINT= 0, KODE= 0, KSATUR= 1, KRECHD= 0,

DEFECT SITES, LIST 1

VACANCIES = 11

201 201 203

201 201 205

207 205 205

199 199 207

202 202 207

203 203 207

198 190 209

198 200 209

202 202 209

191 203 215

189 201 217

0 0 0

0 0 0

0 0 0

INTERSTITIALS = 14

202 203 203

206 208 204

197 187 206

202 207 207

189 200 211

193 206 211

200 202 212

200 203 215

209 195 216

181 200 217

185 200 219

192 203 219

189 201 220

189 214 225

DEFECT SITES, LIST 2

VACANCIES = 12

210 205 204

198 189 208

198 191 208

198 195 208

206 203 208

192 201 212

199 204 212

190 201 214

191 202 214

199 204 214

198 205 216

185 200 218

0 0 0

0 0 0

INTERSTITIALS = 10

214 203 197

201 185 202

213 207 206

183 194 207

197 188 209

209 204 209

194 198 212

199 186 213

189 205 214

199 204 219

0 0 0

0 0 0

0 0 0

0 0 0

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

1 KEV COPPER
DIRECTION 2

UNSTABLE FRENKEL PAIRS = 5

LAST RANDOM NUMBER = 20300571130

VACANCIES INTERSTITIALS

185 200 218 185 200 219

201 201 203 203 203 203

192 201 212 195 198 212

TYPE

1

4

5

VACANCIES

189 201 217

191 202 214

INTERSTITIALS

189 201 219

189 204 214

TYPE

3

4

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

1 KEV COPPER
DIRECTION 2

NUMBER OF INPUT VACANCIES 23

NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 5

NUMBER OF STABLE VACANCIES 18

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS

1-VACANCY 13

2-VACANCY 1

3-VACANCY 1

SINGLE VACANCIES

201 201 205

191 203 215

190 201 214

207 205 205

210 205 204

199 204 214

199 199 207

198 195 208

198 205 216

198 200 209

206 203 208

202 202 209

199 204 212

VACANCY CLUSTERS

2-VACANCY CLUSTER 202 202 207

203 203 207

3-VACANCY CLUSTER 198 190 209

198 189 208

196 191 208

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP768

1 KEV COPPER
DIRECTION 2

NUMBER OF INPUT INTERSTITIALS 24

NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 5

NUMBER OF STABLE INTERSTITIALS 19

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS

1-INTERSTITIAL 19

SINGLE INTERSTITIALS

206 208 205

200 201 212

190 214 225

197 187 209

196 187 206

200 202 215

213 203 197

209 203 209

203 207 207

209 196 216

200 185 202

199 186 214

189 199 211

181 200 218

213 206 206

199 205 219

192 206 211

192 202 219

184 194 207

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP768
FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

1 KEY COPPER
DIRECTION 2

DISTANCE BETWEEN SINGLE VACANCIES

	COORD. UNITS	ANGSTROMS	LATTICE CONSTANTS
AVERAGE DISTANCE	9.6839E+00	1.7502E+01	4.8420E+00
AVERAGE MINIMUM DISTANCE	2.9433E+00	5.3196E+00	1.4717E+00

TOTAL OF COLUMN I 7.8000000E+01
TOTAL OF COLUMN VI 13

INTERVAL	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X
1.0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0.0	0.0	0.0	0.0
2.0	1	1.2821E-02	1.2821E-02	3.4105E-02	5.7768E-03	2	1.5385E-01	1.5385E-01	6.8209E-02	1.1554E-02
3.0	3	3.8462E-02	5.1282E-02	3.7695E-02	6.3849E-03	5	3.8462E-01	3.8462E-01	6.2824E-02	1.0641E-02
4.0	3	3.8462E-02	8.9744E-02	1.9357E-02	3.2787E-03	4	3.0769E-01	6.4613E-01	2.5809E-02	4.3716E-03
5.0	7	8.9744E-02	1.7949E-01	2.7396E-02	4.6404E-03	2	1.5385E-01	1.0000E+00	7.8273E-03	1.3258E-03
6.0	4	5.1282E-02	2.3077E-01	1.0494E-02	1.7773E-03	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
7.0	3	3.8462E-02	2.6923E-01	5.6393E-03	9.5522E-04	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
8.0	6	7.6923E-02	3.4615E-01	8.4757E-03	1.4337E-03	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
9.0	9	1.1538E-01	4.6154E-01	9.9013E-03	1.6771E-03	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
10.0	10	1.2821E-01	5.8974E-01	8.8093E-03	1.4922E-03	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
11.0	4	5.1282E-02	6.4103E-01	2.8850E-03	4.8867E-04	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
12.0	6	7.6923E-02	7.1795E-01	3.6080E-03	6.1115E-04	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
13.0	6	7.6923E-02	7.9487E-01	3.0541E-03	5.1732E-04	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
14.0	4	5.1282E-02	8.4615E-01	1.7458E-03	2.9570E-04	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
15.0	4	5.1282E-02	8.9744E-01	1.5134E-03	2.5634E-04	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
16.0	0	0.0	8.9744E-01	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
17.0	3	3.8462E-02	9.3590E-01	8.7662E-04	1.4849E-04	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
18.0	1	1.2821E-02	9.4872E-01	2.5977E-04	4.4002E-05	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
19.0	1	1.2821E-02	9.6154E-01	2.3246E-04	3.9374E-05	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
20.0	1	1.2821E-02	9.7436E-01	2.0923E-04	3.5440E-05	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
21.0	0	0.0	9.7436E-01	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
22.0	0	0.0	9.7436E-01	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
23.0	2	2.5641E-02	1.0000E+00	3.1433E-04	5.3242E-05	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
24.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
25.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
30.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
35.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
40.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
45.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
50.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
60.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
70.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
80.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
90.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
100.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
150.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
200.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
250.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
300.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
1000.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
INFINITY	0	0.0	1.0000E+00	---	---	0	0.0	1.0000E+00	---	---

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP768
FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

1 KEY COPPER
DIRECTION 2

DISTANCE BETWEEN SINGLE AND DIVACANCIES

	COORD. UNITS	ANGSTROMS	LATTICE CONSTANTS
AVERAGE DISTANCE	7.3084E+00	1.3209E+01	3.6542E+00
AVERAGE MINIMUM DISTANCE	7.3084E+00	1.3209E+01	3.6542E+00

TOTAL OF COLUMN I 1.3000000E+01
TOTAL OF COLUMN VI 13

INTERVAL	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X
1.0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0.0	0.0	0.0	0.0
2.0	0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0.0	0.0	0.0	0.0
3.0	2	1.5385E-01	1.5385E-01	2.5130E-02	4.2566E-03	2	1.5385E-01	1.5385E-01	2.5130E-02	4.2566E-03
4.0	1	7.6923E-02	2.3077E-01	6.4322E-03	1.0929E-03	1	7.6923E-02	2.3077E-01	6.4322E-03	1.0929E-03
5.0	1	7.6923E-02	3.0769E-01	3.9136E-03	6.6291E-04	1	7.6923E-02	3.0769E-01	3.9136E-03	6.6291E-04
6.0	2	1.5385E-01	4.6154E-01	5.2469E-03	8.8874E-04	2	1.5385E-01	4.6154E-01	5.2469E-03	8.8874E-04
7.0	1	7.6923E-02	5.3846E-01	1.8798E-03	3.1841E-04	1	7.6923E-02	5.3846E-01	1.8798E-03	3.1841E-04
8.0	1	7.6923E-02	6.1538E-01	1.4126E-03	2.3928E-04	1	7.6923E-02	6.1538E-01	1.4126E-03	2.3928E-04
9.0	2	1.5385E-01	7.6923E-01	2.2003E-03	3.7270E-04	2	1.5385E-01	7.6923E-01	2.2003E-03	3.7270E-04
10.0	0	0.0	7.6923E-01	0.0	0.0	0	0.0	7.6923E-01	0.0	0.0
11.0	1	7.6923E-02	8.4615E-01	7.2125E-04	1.2217E-04	1	7.6923E-02	8.4615E-01	7.2125E-04	1.2217E-04
12.0	0	0.0	8.4615E-01	0.0	0.0	0	0.0	8.4615E-01	0.0	0.0
13.0	0	0.0	8.4615E-01	0.0	0.0	0	0.0	8.4615E-01	0.0	0.0
14.0	0	0.0	8.4615E-01	0.0	0.0	0	0.0	8.4615E-01	0.0	0.0
15.0	2	1.5385E-01	1.0000E+00	7.3668E-04	1.2817E-04	2	1.5385E-01	1.0000E+00	7.3668E-04	1.2817E-04
16.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
17.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
18.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
19.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
20.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
21.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
22.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
23.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
24.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
25.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
30.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
35.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
40.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
45.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
50.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
60.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
70.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
80.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
90.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
100.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
150.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
200.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
250.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
300.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
1000.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0	0	0.0	1.0000E+00	0.0	0.0
INFINITY	0	0.0	1.0000E+00	---	---	0	0.0	1.0000E+00	---	---

ELASTIC COLLISION CASCADE -- FCC LATTICE

1 KEV COPPER
DIRECTION 3

CRYSTAL ATOMS

	1 COPPER	2 COPPER
MASS	63.	63.
CHARGE	29.	29.
EJECTION ENERGY	7.	7.

PRIMARY ATOM

COPPER MASS = 63, CHARGE = 29.

PRIMARY ATOM ENERGY

1000.0 ELECTRON VOLTS

TAKE-OFF POINT (ANGSTROMS)

X = 362.37370
Y = 362.37370
Z = 362.37370

TAKE-OFF DIRECTION

COS ALPHA = 0.01664584 COS BETA = 0.00083299 COS GAMMA = 0.99986111
THETA = 0.954965 PHI = 2.864802

LATTICE CONSTANT = 3.6147 ANGSTROMS

SCREENING PARAMETER = 1.00 POTENTIAL CUTOFF = 2.00 ANGSTROMS

RELAXATION DISTANCE (SQUARED) = 5.00 COORDINATE UNITS

OUTPUT OPTIONS

KLUSTH= 2 KPRIM= 2 KPRINT= 2 KRLAT= 0 KPLAT= 2 KREPL= 2

DEFECT STATISTICS

	INTERSTITIALS	VACANCIES	REPLACEMENTS
COPPER	28	26	10
COPPER	21	21	10
TOTAL	49	47	20

RANGE OF PRIMARY ATOM

6.45 ANGSTROMS

COORDINATES OF PRIMARY ATOM AT END OF CASCADE

203 201 203

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

1 KEV COPPER
DIRECTION 2

UNSTABLE FRENKEL PAIRS = 15
LAST RANDOM NUMBER = 31444879730

VACANCIES			INTERSTITIALS			TYPE	VACANCIES			INTERSTITIALS			TYPE
194	208	207	194	208	206	1	198	199	216	198	198	216	1
195	200	216	195	201	216	1	201	199	213	200	199	214	2
198	189	208	198	188	209	2	207	205	205	205	205	205	3
204	201	208	204	201	210	3	199	204	212	199	202	212	3
204	204	211	206	204	211	3	193	206	206	191	208	206	4
202	200	211	204	198	211	4	190	201	214	192	199	214	4
202	200	215	200	200	217	4	198	190	209	198	187	206	5
196	202	209	193	202	206	5							

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

1 KEY COPPER
DIRECTION 2NUMBER OF INPUT VACANCIES 47
NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 15
NUMBER OF STABLE VACANCIES 32TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
1-VACANCY 19
2-VACANCY 2
9-VACANCY 1

SINGLE VACANCIES

201	201	203	201	201	205	199	199	207	194	204	207	205	205	209
193	201	213	195	201	213	205	205	213	196	200	215	191	203	215
210	205	204	198	191	208	198	195	208	206	203	208	199	198	210
195	202	210	202	199	212	199	204	214	198	205	216			

VACANCY CLUSTERS

9-VACANCY CLUSTER

201	201	207
202	202	207
203	203	207
199	201	209
201	201	209
198	200	209
202	202	209
200	201	208
201	200	210

2-VACANCY CLUSTER

191	203	209
191	204	208

2-VACANCY CLUSTER

197	196	212
198	197	212

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP768

1 KEY COPPER
DIRECTION 2NUMBER OF INPUT INTERSTITIALS 49
NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 15
NUMBER OF STABLE INTERSTITIALS 34TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
1-INTERSTITIAL 32
2-INTERSTITIAL 1

SINGLE INTERSTITIALS

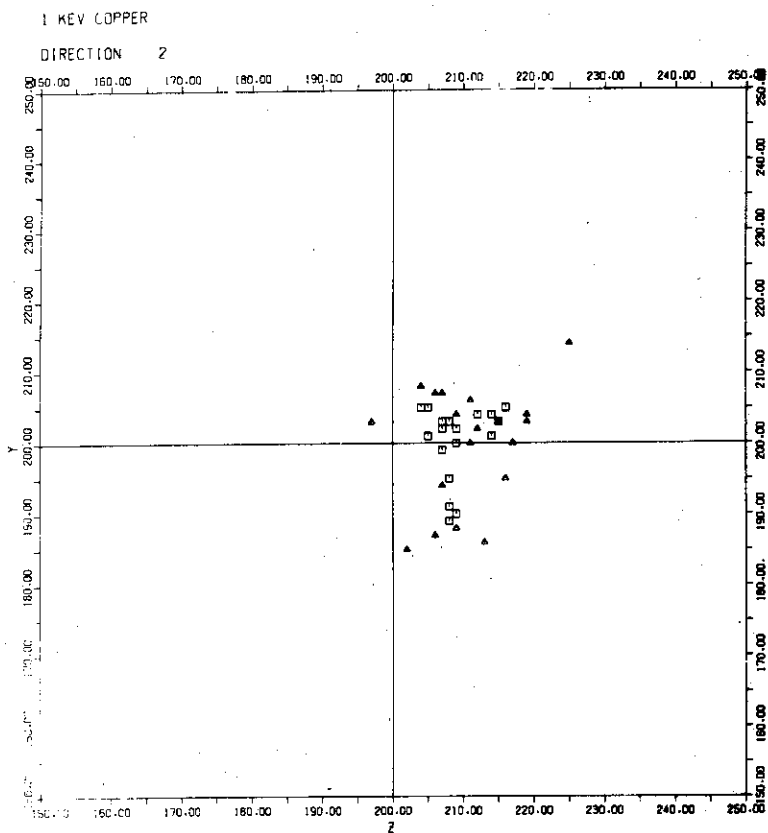
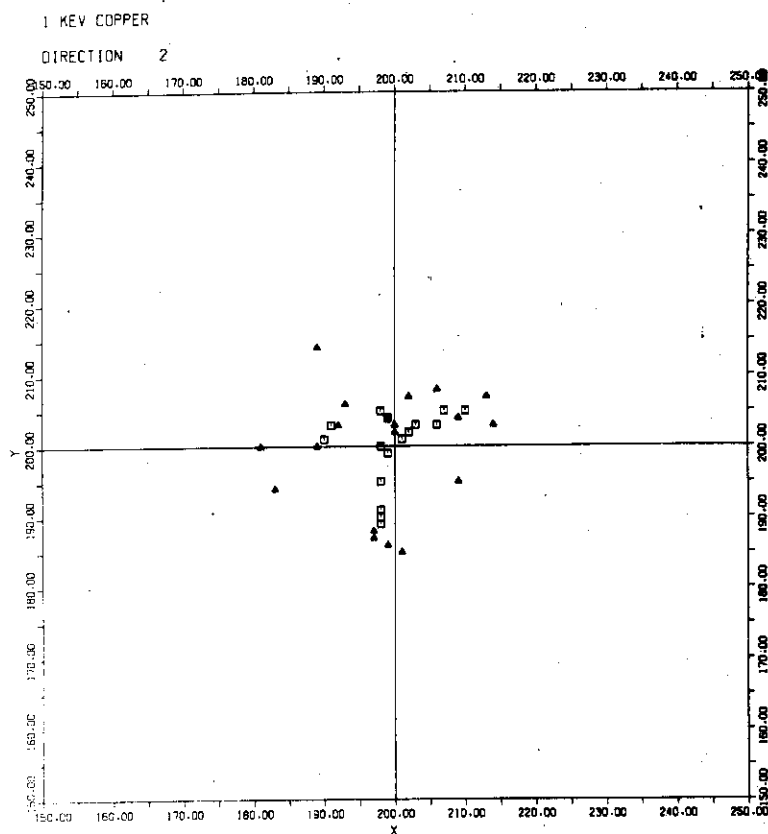
205	201	203	205	208	204	202	206	207	196	194	211	189	200	212
193	205	211	208	209	210	199	213	211	189	202	212	201	203	215
209	194	216	205	206	216	194	196	217	181	200	214	203	201	217
196	198	219	192	204	219	189	213	225	214	203	198	202	185	202
191	191	203	193	208	204	193	203	205	213	207	205	183	194	206
206	199	208	209	204	210	186	203	210	199	186	214	208	202	215
201	199	219	199	204	220									

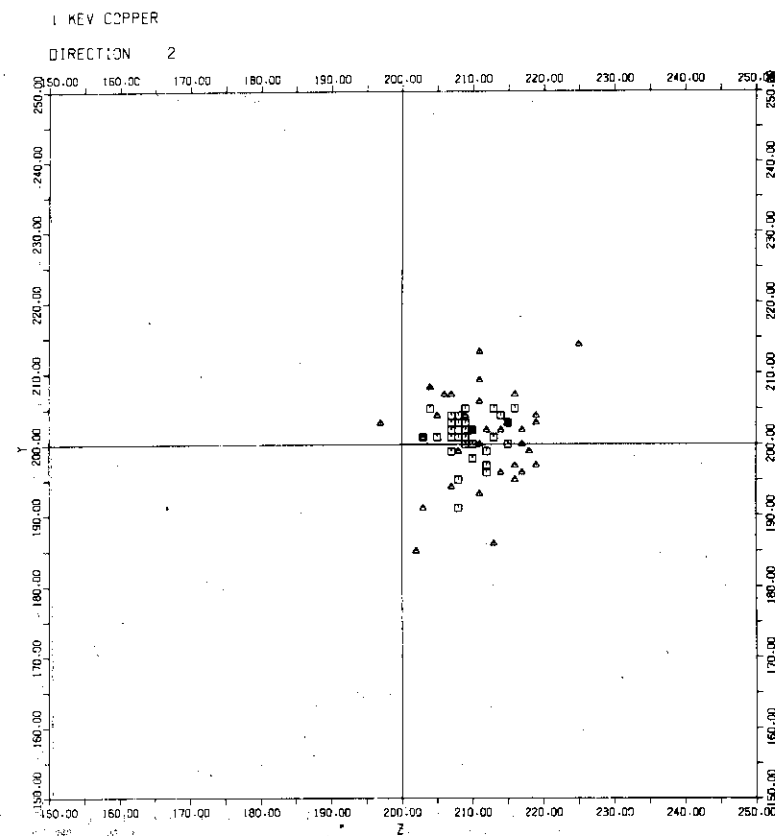
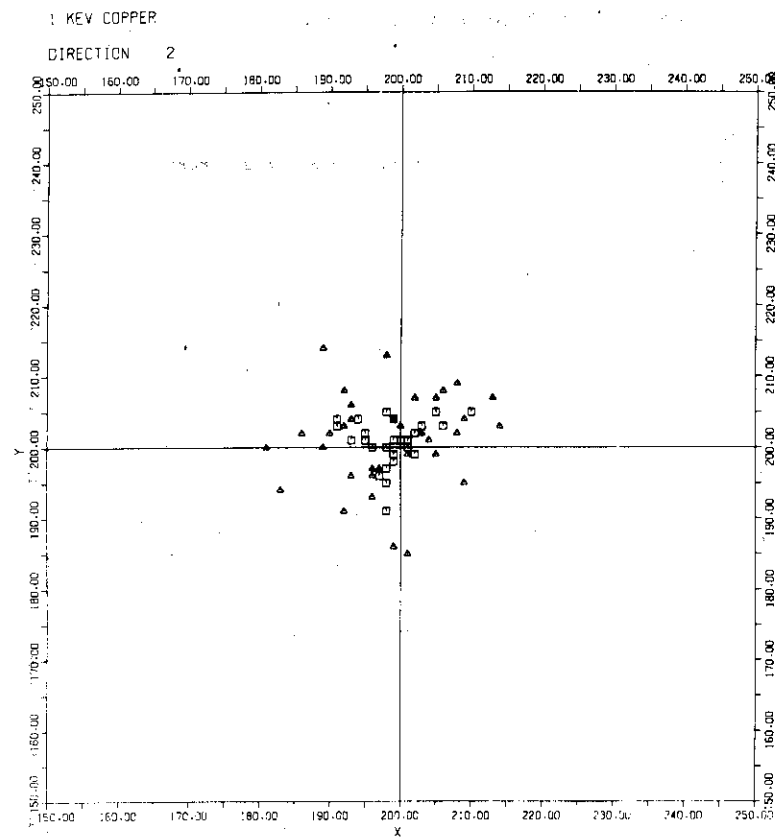
INTERSTITIAL CLUSTERS

2-INTERSTITIAL CLUSTER

196	196	215
196	197	216

Appendix 4 A Part of Output Figure of CASCADE/CLUSTER for the
Problem of Appendix 2





Appendix 5 Card Setup for MARLOWE to Solve 3 Sample Problems

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

```

C.3/CORE 192
T.2/TIME 1M
W.0/PAGE 40
P.0/PCH 0
/00331

#GJOB 3100035.TA.ASAOKA.431.21.SSLNONLN
#HLIEDRUN J0051.MARLOW75
#DATA
SAMPLE DATA SET 1. A STOPPING CROSS-SECTION CALCULATION.
#XTAL NTYPE=2,TYPE='CU','H',Z=2900.1D0,W=63.5400.1.00797D0,ALAT=3*1D0,
SURFCE=T,F*
#SURF RSORT=0D0.0D0.1D0,AXISA=1D0.0D0.0D0,AXISB=0D0.1D0.0D0,SIDEA=2D0,
SIDE=2D0*
#MODL RB=2D0.2D0,EDISP=1D5.0D0,EQUIT=1D0.1D0,TIM(8)=F*
#OUTP INFORM(2)=T*
#PROJ PHIM=T,F,LOG=20,LAIP=2,EKIP=1D3,MAXRUN=1000*
#PROJ EKIP=1D2*

```

C.3/CORE 192
T.2/TIME 1M
W.0/PAGE 40
P.0/PCH 0
/00331

```

#GJOB 3100035.TA.ASAOKA.431.21.SSLNONLN
#HLIEDRUN J0051.MARLOW75
#DATA
SAMPLE DATA SET 2. SPUTTERING OF HEXAGONAL 'CU' BASAL PLANE.
#XTAL NTYPE=3,NEIGH=2*2D0.0,TYPE=2*CU',AR',Z=2*29.18.1,W=2*63.54.39.948,
ALAT=2.556191014.4.427452711.4.174242447,VPR=T,SURFCE=T,T,*
1 1.0 0.0 0.0 1 0.5 0.5 0.0 HCP 0010
1 0.5 -0.5 0.0 1 -0.5 0.5 0.0 HCP 0020
1 -0.5 -0.5 0.0 1 -1.0 0.0 0.0 HCP 0030
2 0.0 -0.33333333 0.5 2 0.5 0.16666667 0.5 HCP 0040
2 0.0 -0.33333333 -0.5 2 -0.5 0.16666667 0.5 HCP 0050
2 0.5 0.16666667 -0.5 2 -0.5 0.16666667 -0.5 HCP 0060
2 1.0 -0.33333333 0.5 2 1.0 -0.33333333 -0.5 HCP 0070
2 -1.0 -0.33333333 0.5 2 -1.0 -0.33333333 -0.5 HCP 0080
2 0.0 0.66666667 0.5 2 0.0 0.66666667 -0.5 HCP 0090
1 0.0 0.0 1.0 1 0.0 0.0 -1.0 HCP 0100
2 1.0 0.0 0.0 2 0.5 0.5 0.0 HCP 0110
2 0.5 -0.5 0.0 2 -0.5 0.5 0.0 HCP 0120
2 -0.5 -0.5 0.0 2 -1.0 0.0 0.0 HCP 0130
1 0.0 0.33333333 0.5 1 0.5 -0.16666667 0.5 HCP 0140
1 0.0 0.33333333 -0.5 1 -0.5 -0.16666667 0.5 HCP 0150
1 0.5 -0.16666667 -0.5 1 -0.5 -0.16666667 -0.5 HCP 0160
1 1.0 0.33333333 0.5 1 1.0 0.33333333 -0.5 HCP 0170
1 -1.0 0.33333333 0.5 1 -1.0 0.33333333 -0.5 HCP 0180
1 0.0 -0.66666667 0.5 1 0.0 -0.66666667 -0.5 HCP 0190
2 0.0 0.0 1.0 2 0.0 0.0 -1.0 HCP 0200
#SURF RSORT=0D0.0D0.1D0,AXISA=1D0.0D0.0D0,AXISB=-1D0.1D0.0D0,SIDEA=1D0,
SIDE=1D0,DEPTH=8.35D0,*
#VPR BPAR(1.1)=738D-4,BPAR(1.2)=738D-4,BPAR(2.2)=738D-4,BPAR(1.3)=8916D-5,
BPAR(2.3)=8916D-5,*
#MODL RB=6D-1.9D-1,EDISP=3*5D0,EQUIT=3*5D0,*
#OUTP INFORM=F,3*T,F,T,DRNG=0.35353391,*
#XTRC PHIA=0D0,PHIB=6D1,EBOX=50D0,*
#PROJ LOG=20,LAIP=3,EKIP=1D3,MAXRUN=10,*

```

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

```

C.3/CORE 192
T.0/TIME 10S
W.0/PAGE 40
P.0/PCH 0
/00331

#GJOB 3100035.TA.ASAOKA.431.22.FEMMONTC
#HLIEDRUN J0051.MARLOW75
#DATA
SAMPLE DATA SET 3. DISPLACEMENT CASCADES IN COPPER.
#XTAL ALAT=3*3.6147D0,NTYPE=1,NEIGH=18,TYPE='CU',W=63.54D0,Z=29D0,VPR=T,*
1 0.5 0.5 0.0 1 0.5 -0.5 0.0 FCC 0010
1 -0.5 0.5 0.0 1 -0.5 -0.5 0.0 FCC 0020
1 0.5 0.0 0.5 1 0.5 0.0 -0.5 FCC 0030
1 -0.5 0.0 0.5 1 -0.5 0.0 -0.5 FCC 0040
1 0.0 0.5 0.5 1 0.0 0.5 -0.5 FCC 0050
1 0.0 -0.5 0.5 1 0.0 -0.5 -0.5 FCC 0060
1 1.0 0.0 0.0 1 -1.0 0.0 0.0 FCC 0070
1 0.0 1.0 0.0 1 0.0 -1.0 0.0 FCC 0080
1 0.0 0.0 1.0 1 0.0 0.0 -1.0 FCC 0090
#VPR BPAR(1.1)=738D-4,*
#MODL RB=42D-2.62D-2,EDISP=7D0,EQUIT=7D0,EBND=7.0D0*
#OUTP INFORM=4*T,INFORM(8)=T,DRNG=25D-2*
#PROJ MAXRUN=0,LOG=0,EKIP=1D3,THA=13.49D0,PHI=13.37D0*

```

Appendix 6 A Part of Output Print of MARLOWE for the Transmission Problems of H Atoms Incident on Cu Crystal Surface

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10) DATE 78-09-23

COMPUTER MODEL FACOM-75

DESCRIPTION OF THE CALCULATIONAL MODEL

SAMPLE DATA SET 1, A STOPPING CROSS-SECTION CALCULATION,

CRYSTAL LATTICE CONSTANTS (ANGSTROMS) 1.0000000 1.0000000 1.0000000

UNITS USED IN REPORTING RESULTS
ATOM AND SITE LOCATIONS ARE IN ORTHORHOMBIC CELL EDGES,
DIRECTIONS ARE PROPORTIONAL TO MILLER INDICES,
LENGTHS ARE IN UNITS OF LATTICE CONSTANT 1.

ATOM	TYPE	CHARGE	MASS (AMU)	ATOM	TYPE	CHARGE	MASS (AMU)
CU	1	29.000000	63.540000	H	2	1.0000000	1.0079782

THE CRYSTAL IS INITIALLY PERFECT.

DESCRIPTION OF THE CRYSTAL SURFACE

DIRECTION OF INWARD NORMAL	DIRECTION OF SURFACE AXIS A	DIRECTION OF SURFACE AXIS B	SURFACE COORDINATE POINT	LENGTH	LENGTH
0.0	1.0000000	0.0	0.0	2.0000000	2.0000000
0.0	0.0	1.0000000	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

THE TARGET CRYSTAL HAS ONLY ONE SURFACE.

THE INTERATOMIC POTENTIAL

$$V(R) = ((Z(1) * Z(2) * E ** 2) / R) * (0.35 * \exp(-0.30 * R / B) + 0.55 * \exp(-1.2 * R / B) + 0.10 * \exp(-6.0 * R / B))$$

THE VALUES OF B ARE IN ANGSTROMS

ATOMS...	B	ATOMS...	B	ATOMS...	B
CU 1 + CU 1	0.96061829D-01	CU 1 + H 2	0.13612003	H 2 + H 2	0.29913237

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10) DATE 78-09-23

THE ELECTRONIC ENERGY LOSS FUNCTION

$$B(R,E) = (FK * \text{SORT}(E) / (PI * FR ** 2)) * 0.045 * \exp(-0.3 * R / FR)$$

THE UNITS OF FK ARE SORT(EV) * (ANGSTROMS ** 2), THE VALUES OF FR ARE IN ANGSTROMS.

ATOMS...	FK	FR	ATOMS...	FK	FR
CU 1 + CU 1	2.7415645	0.96061829D-01	H 2 + CU 1	1.0413909	0.13612003
CU 1 + H 2	0.22990423	0.13612003	H 2 + H 2	0.42822033	0.29913237

THERMAL VIBRATIONS ARE NOT INCLUDED.

SEARCH CYLINDER RADIUS

ABOVE REPLACEMENT THRESHOLD	BELOW REPLACEMENT THRESHOLD
2.0000000	2.0000000

MAXIMUM DISTANCE BETWEEN 'SIMULTANEOUS' COLLISION POINTS

BEFORE 'TIME' CORRECTION	AFTER 'TIME' CORRECTION
0.50000000	0.23000000

INITIAL MINIMUM SEARCH DISTANCE 0.10000000

MAXIMUM ENERGY LOSS IN CHANNELING 1.0000000 E.V.
UP TO 100 COLLISIONS ALLOWED EACH STENON.

MAXIMUM ENERGY RETAINED IN REPLACEMENT SEQUENCES 0.10000000 E.V.
UP TO 10 REPLACEMENTS ALLOWED PER SEQUENCE.

ATOM	TYPE	DISPLACEMENT THRESHOLD (E.V.)	PROJECTILE CUTOFF ENERGY (E.V.)	TARGET BINDING ENERGY (E.V.)
CU	1	100000.00	1.0000000	0.0
H	2	0.0	1.0000000	0.0

CALCULATED TIME INTEGRAL USED
PROJECTILE MUST MOVE FORWARD
FORWARD SEARCH USES TARGET SITE POSITION
RADIAL SEARCH USES TARGET SITE POSITION
TARGET MOVES BEFORE DEFLECTION OCCURS
INELASTIC LOSS APPLIED IN CM SYSTEM
STOPPED CASCADE ATOMS ARE NEVER TARGETS
LOST PROJECTILES (KARMA=8) ALLOWED
SCATTERING ALTERS SIMULTANEITY

NO INDIVIDUAL CASCADE OUTPUT HAS BEEN REQUESTED.

INITIAL VALUE OF RAN = 131075

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-25

1000 PRIMARY PROJECTILES WILL BE SELECTED RANDOMLY USING LOG= 20
 DESCRIPTION OF INCIDENT BEAM (ANGLES IN DEGREES)
 POLAR ANGLE 0.0 AZIMUTHAL ANGLE 0.0 HALF-WIDTH 0.0
 ONLY THE PRIMARY PROJECTILE WILL BE FOLLOWED,
 TARGET DISPLACEMENTS ARE ALLOWED.
 PRIMARY RECOILS ARE H (TYPE 2) OF INITIAL KINETIC ENERGY 1000.0000 E.V.

STATISTICAL ANALYSIS OF SOME QUANTITIES DERIVED FROM 1000 CASCADES

	MEAN	STD. DEV.	PERCENT
NUMBER OF			
COLLISIONS	0.79900	0.40073	50.156
ATOMS INVOLVED	1.0000	0.71290D-09	0.71290D-07
VACANCIES REMAINING	0.0	0.0	0.0
INTERSTITIALS REMAINING	0.0	0.0	0.0
PROPER REPLACEMENTS	0.0	0.0	0.0
IMPROPER REPLACEMENTS	0.0	0.0	0.0
ATOMS ESCAPING FRONT SURFACE	0.10000D-02	0.31607D-01	3160.7
ATOMS ESCAPING BACK SURFACE	0.0	0.0	0.0
STENONS	0.0	0.0	0.0
LONG REPLACEMENT SEQUENCES	0.0	0.0	0.0
REDISPLACED CASCADE ATOMS	0.0	0.0	0.0
LOST PROJECTILES	0.99900	0.31607D-01	3.1639
DISPLACEMENTS (HARD CORE)	1.0000	0.71290D-09	0.71290D-07
ENERGY (E. V.)			
INELASTIC LOSS	1.9279	2.9931	159.26
REMAINING KINETIC	996.76	31.893	3.1996
SUBTHRESHOLD LOSS	0.39221	3.0671	782.01
BINDING LOSS	0.0	0.0	0.0
CARRIED THROUGH FRONT SURFACE	0.92017	29.084	3160.7
CARRIED THROUGH BACK SURFACE	0.0	0.0	0.0
CARRIED BY REDISPLACEMENTS	0.0	0.0	0.0
REDISPLACEMENT THRESHOLD	0.0	0.0	0.0
REPLACEMENT THRESHOLD	0.0	0.0	0.0
AVAILABLE FOR DAMAGE	997.15	29.735	2.9819
CARRIED BY LOST PROJECTILES	996.76	31.893	3.1996
DISPLACEMENT EFFICIENCY	0.0	0.0	0.0
TIME (SEC., FACOM-75) IN			
EVENT	0.24300	0.42890	176.30
SEARCH	0.0	0.0	0.0
SKATR	0.24300	0.42890	176.30
ORGIV	0.0	0.0	0.0

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-25

1000 PRIMARY PROJECTILES WILL BE SELECTED RANDOMLY USING LOG= 20
 DESCRIPTION OF INCIDENT BEAM (ANGLES IN DEGREES)
 POLAR ANGLE 0.0 AZIMUTHAL ANGLE 0.0 HALF-WIDTH 0.0
 ONLY THE PRIMARY PROJECTILE WILL BE FOLLOWED,
 TARGET DISPLACEMENTS ARE ALLOWED.
 PRIMARY RECOILS ARE H (TYPE 2) OF INITIAL KINETIC ENERGY 100.00000 E.V.

STATISTICAL ANALYSIS OF SOME QUANTITIES DERIVED FROM 1000 CASCADES

	MEAN	STD. DEV.	PERCENT
NUMBER OF			
COLLISIONS	0.80000	0.40000	50.000
ATOMS INVOLVED	1.0000	0.71290D-09	0.71290D-07
VACANCIES REMAINING	0.0	0.0	0.0
INTERSTITIALS REMAINING	0.0	0.0	0.0
PROPER REPLACEMENTS	0.0	0.0	0.0
IMPROPER REPLACEMENTS	0.0	0.0	0.0
ATOMS ESCAPING FRONT SURFACE	0.80000D-02	0.89084D-01	1113.6
ATOMS ESCAPING BACK SURFACE	0.0	0.0	0.0
STENONS	0.0	0.0	0.0
LONG REPLACEMENT SEQUENCES	0.0	0.0	0.0
REDISPLACED CASCADE ATOMS	0.0	0.0	0.0
LOST PROJECTILES	0.99200	0.89084D-01	8.9803
DISPLACEMENTS (HARD CORE)	1.0000	0.71290D-09	0.71290D-07
ENERGY (E. V.)			
INELASTIC LOSS	0.49072	0.36737	125.88
REMAINING KINETIC	98.562	8.9262	9.0564
SUBTHRESHOLD LOSS	0.25409	0.83593	328.99
BINDING LOSS	0.0	0.0	0.0
CARRIED THROUGH FRONT SURFACE	0.73306	8.1631	1113.6
CARRIED THROUGH BACK SURFACE	0.0	0.0	0.0
CARRIED BY REDISPLACEMENTS	0.0	0.0	0.0
REDISPLACEMENT THRESHOLD	0.0	0.0	0.0
REPLACEMENT THRESHOLD	0.0	0.0	0.0
AVAILABLE FOR DAMAGE	98.816	8.3711	8.4714
CARRIED BY LOST PROJECTILES	98.562	8.9262	9.0564
DISPLACEMENT EFFICIENCY	0.0	0.0	0.0
TIME (SEC., FACOM-75) IN			
EVENT	0.28800	0.45283	137.23
SEARCH	0.0	0.0	0.0
SKATR	0.28800	0.45283	137.23
ORGIV	0.0	0.0	0.0

Appendix 7 A Part of Output Print of MARLOWE for the Sputtering Problem due to Ar Particles Incident Normally on Cu Crystal Surface

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

COMPUTER MODEL FACOM-75

DESCRIPTION OF THE CALCULATIONAL MODEL

SAMPLE DATA SET 2, SPUTTERING OF HEXAGONAL 'CU' BASAL PLANE,

CRYSTAL LATTICE CONSTANTS (ANGSTROMS) 2.3561910 4.4274527 4.1742424

UNITS USED IN REPORTING RESULTS
 ATOM AND SITE LOCATIONS ARE IN ORTHORHOMBIC CELL EDGES,
 DIRECTIONS ARE PROPORTIONAL TO MILLER INDICES,
 LENGTHS ARE IN UNITS OF LATTICE CONSTANT 1,

ATOM	TYPE	CHARGE	MASS (AMU)	ATOM	TYPE	CHARGE	MASS (AMU)
CU	1	29.000000	63.540000	CU	2	29.000000	63.540000
AR	3	18.000000	39.948000				

DESCRIPTION OF CRYSTAL

NEIGHBORS OF CU ATOM (TYPE 1)				NEIGHBORS OF CU ATOM (TYPE 2)			
ATOM	TYPE	X	Y	ATOM	TYPE	X	Y
CU	1	1.0000000	0.0	CU	2	0.3000000	0.3000000
CU	1	0.3000000	-0.3000000	CU	2	-0.3000000	0.3000000
CU	1	-0.3000000	0.0	CU	2	-1.0000000	0.0
CU	2	0.0	-0.3333333	CU	2	0.3000000	0.1666667
CU	2	0.0	-0.3333333	CU	2	-0.3000000	0.1666667
CU	2	0.3000000	0.1666667	CU	2	-0.3000000	-0.1666667
CU	2	1.0000000	-0.3333333	CU	2	1.0000000	-0.3333333
CU	2	-1.0000000	-0.3333333	CU	2	-1.0000000	-0.3333333
CU	2	0.0	0.6666667	CU	2	0.0	0.6666667
CU	1	0.0	0.0	CU	1	0.0	-1.0000000

THE CRYSTAL IS INITIALLY PERFECT.

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

DESCRIPTION OF THE CRYSTAL SURFACE

DIRECTION OF INWARD NORMAL	0.0	0.0	1.0000000	LENGTH	1.0000000
DIRECTION OF SURFACE AXIS A	1.0000000	0.0	0.0	LENGTH	1.0000000
DIRECTION OF SURFACE AXIS B	-1.0000000	1.0000000	0.0		
SURFACE COORDINATE POINT	0.0	0.0	0.0		

TARGET CRYSTAL THICKNESS 8.3500000

THE INTERATOMIC POTENTIAL

$$V(R) = ((Z(1) * Z(2)) * E) / R = (0.35 * \exp(-0.30 * R/B) + 0.35 * \exp(-1.2 * R/B) + 0.10 * \exp(-6.0 * R/B))$$

THE VALUES OF B ARE IN ANGSTROMS

....ATOMS....	B	ATOMS....	B	ATOMS....	B
CU 1 + CU 1	0.73800000D-01	CU 1 + CU 2	0.73800000D-01	CU 2 + CU 2	0.73800000D-01
CU 1 + AR 3	0.89160000D-01	CU 2 + AR 3	0.89160000D-01	AR 3 + AR 3	0.11261408

THE ELECTRONIC ENERGY LOSS FUNCTION

$$S(R,E) = (FK * \sqrt{E}) / (\pi * FR * 2) * 0.045 * \exp(-0.3 * R/FR)$$

THE UNITS OF FK ARE SORT(EV) * (ANGSTROMS**2), THE VALUES OF FR ARE IN ANGSTROMS.

....ATOMS....	FK	FR	ATOMS....	FK	FR
CU 1 + CU 1	2.7415645	0.73800000D-01	CU 2 + CU 1	2.7415645	0.73800000D-01
AR 3 + CU 1	2.4688426	0.89160000D-01	CU 1 + CU 2	2.7415645	0.73800000D-01
CU 2 + CU 2	2.7415645	0.73800000D-01	AR 3 + CU 2	2.4688426	0.89160000D-01
CU 1 + AR 3	2.1195235	0.89160000D-01	CU 2 + AR 3	2.1195235	0.89160000D-01
AR 3 + AR 3	1.9821118	0.11261408			

THERMAL VIBRATIONS ARE NOT INCLUDED.

SEARCH CYLINDER RADIUS

ABOVE REPLACEMENT THRESHOLD 0.60000000 BELOW REPLACEMENT THRESHOLD 0.90000000

MAXIMUM DISTANCE BETWEEN 'SIMULTANEOUS' COLLISION POINTS

BEFORE 'TIME' CORRECTION 0.19560354 AFTER 'TIME' CORRECTION 0.97801768D-01

INITIAL MINIMUM SEARCH DISTANCE 0.39120707D-01

MAXIMUM ENERGY LOSS IN CHANNELING 1.0000000 E.V.

UP TO 100 COLLISIONS ALLOWED EACH STENOVA

MAXIMUM ENERGY RETAINED IN REPLACEMENT SEQUENCES 0.10000000 E.V.

UP TO 10 REPLACEMENTS ALLOWED PER SEQUENCE.

JAERI-M 8178

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

ATOM	TYPE	DISPLACEMENT THRESHOLD (E.V.)	PROJECTILE CUTOFF ENERGY (E.V.)	TARGET BINDING ENERGY (E.V.)
CU	1	5.0000000	5.0000000	0.0
CU	2	5.0000000	5.0000000	0.0
AR	3	5.0000000	5.0000000	0.0

CALCULATED TIME INTEGRAL USED
 PROJECTILE MUST MOVE FORWARD
 FORWARD SEARCH USES TARGET SITE POSITION
 PARTIAL SEARCH USES TARGET SITE POSITION
 TARGET MOVES BEFORE DEFLECTION OCCURS
 INELASTIC LOSS APPLIED IN CM SYSTEM
 STOPPED CASCADE ATOMS ARE NEVER TARGETS
 LOST PROJECTILES TERMINATE JOB
 SCATTERING ALTERS SIMULTANEITY

NO INDIVIDUAL CASCADE OUTPUT HAS BEEN REQUESTED.

INITIAL VALUE OF RAN = 131075

10 PRIMARY PROJECTILES WILL BE SELECTED RANDOMLY USING LOG= 20

DESCRIPTION OF INCIDENT BEAM (ANGLES IN DEGREES)
 POLAR ANGLE 0.0 AZIMUTHAL ANGLE 0.0 HALF-WIDTH 0.0
 PRIMARY RECOILS ARE AR (TYPE 3) OF INITIAL KINETIC ENERGY 1000.0000 E.V.

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

STATISTICAL ANALYSIS OF SOME QUANTITIES DERIVED FROM 10 CASCADES

	MEAN	STD. DEV.	PERCENT
NUMBER OF			
COLLISIONS	329.40	108.15	32.832
ATOMS INVOLVED	117.70	38.984	33.105
VACANCIES REMAINING	57.900	15.411	26.616
INTERSTITIALS REMAINING	49.700	15.402	30.989
PROPER REPLACEMENTS	58.400	24.868	42.583
IMPROPER REPLACEMENTS	0.40000	0.48990	122.47
ATOMS ESCAPING FRONT SURFACE	4.2000	2.5612	60.982
ATOMS ESCAPING BACK SURFACE	5.0000	2.7928	55.837
STENONS	0.0	0.0	0.0
LONG REPLACEMENT SEQUENCES	0.0	0.0	0.0
REDISPLACED CASCADE ATOMS	0.0	0.0	0.0
LOST PROJECTILES	0.0	0.0	0.0
DISPLACEMENTS (WARD CORE)	61.509	18.221	29.623
ENERGY (E. V.)			
INELASTIC LOSS	74.230	7.6264	10.274
REMAINING KINETIC	128.37	42.653	35.258
SUBTHRESHOLD LOSS	186.72	141.95	29.083
BINDING LOSS	0.0	0.0	0.0
CARRIED THROUGH FRONT SURFACE	49.871	61.961	88.678
CARRIED THROUGH BACK SURFACE	240.80	198.26	82.332
CARRIED BY REDISPLACEMENTS	0.0	0.0	0.0
REDISPLACEMENT THRESHOLD	0.0	0.0	0.0
REPLACEMENT THRESHOLD	217.99	287.99	132.15
AVAILABLE FOR DAMAGE	615.09	182.21	29.623
CARRIED BY LOST PROJECTILES	0.0	0.0	0.0
DISPLACEMENT EFFICIENCY	0.95157	0.63082D-01	6.6293
TIME (SEC. FACOM-75) IN			
EVENT	1048.3	504.12	48.090
SEARCH	691.30	329.79	47.706
SKATR	119.30	73.954	61.990
ORIGV	0.0	0.0	0.0

STATISTICAL ANALYSIS OF REPLACEMENT SEQUENCES

	MEAN	STD DEV
ISOLATED REPLACEMENTS	18.900	7.5423
SEQUENCES OF LENGTH 2	11.500	3.5567
SEQUENCES OF LENGTH 3	1.1000	1.3748

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

SEQUENCE LENGTH	TOTAL		C 1. 1. 0.0		C 1. 0. 0.0	
	MEAN	STD DEV	MEAN	STD DEV	MEAN	STD DEV
4	0.30000	0.43826	0.20000	0.40000	0.10000E+00	0.30000
5	0.30000	0.64031	0.20000	0.60000	0.10000E+00	0.30000
6	0.10000E+00	0.30000	0.10000E+00	0.30000	0.0	0.0
7	0.20000	0.40000	0.20000	0.40000	0.0	0.0
8	0.30000	0.64031	0.0	0.30000	0.64031	0.0
9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
10	0.10000E+00	0.30000	0.10000E+00	0.30000	0.0	0.0
11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
12	0.20000	0.40000	0.20000	0.40000	0.0	0.0
13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
15	0.10000E+00	0.30000	0.10000E+00	0.30000	0.0	0.0
16	0.10000E+00	0.30000	0.10000E+00	0.30000	0.0	0.0
17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

STATISTICAL DISTRIBUTION OF REPLACEMENTS

ATOM TYPE	SITE TYPE	MEAN	STD DEV	ATOM TYPE	SITE TYPE	MEAN	STD DEV
1	1	15.000	8.0000	1	2	13.600	5.0239
1	3	0.0	0.0	2	1	16.400	7.7743
2	2	13.400	9.3295	2	3	0.0	0.0
3	1	0.10000E+00	0.30000	3	2	0.30000	0.45826
3	3	0.0	0.0				

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

ANALYSIS OF PRIMARY RECOIL RANGES (8 PARTICLES)
 RANGE MEAN STD. DEV.
 VECTOR 3.8236021 1.7297043
 PENETRATION 2.4163729 1.4973195
 SPREAD 2.3260705 1.7748109
 TOTAL PATH 6.61372 1.38034

PENETRATION DISTRIBUTION FUNCTION
 (HISTOGRAM CHANNEL WIDTH 0.33333)

0	1	0	1	2	0	2	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

 LARGE RANGES 0

FINAL STATES OF PRIMARY RECOILS
 TARGET ESCAPES FRONT BACK STENONS LOST INTERSTITIALS
 PROPER IMPROPER 0 4 2 0 0 0 4

ANALYSIS OF SPUTTERING YIELDS

TRANSMISSION YIELD MEAN STD DEV
 FOCUSONS 0,0 3,0000 2,7928
 REFLECTION MEAN STD DEV
 0,0 4,0000 2,6833

YIELD DISTRIBUTION FUNCTION

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	OF
0	1	0	3	1	2	0	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	3	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

 EJECTED PARTICLE ENERGY SPECTRA (50,000 E.V. PER CHANNEL)

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	OF
38	6	1	0	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
37	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

TRANSMISSION EJECTION PATTERN
 AZIMUTHAL ANGLE (DEGREES), ORIGIN 0,0 CHANNEL WIDTH 3,0000000
 COS(POLAR ANGLE), 0.05 PER CHANNEL

AZIM	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

 REFLECTION EJECTION PATTERN
 AZIMUTHAL ANGLE (DEGREES), ORIGIN 0,0 CHANNEL WIDTH 3,0000000
 COS(POLAR ANGLE), 0.05 PER CHANNEL

AZIM	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

FINAL VALUES OF RAN = 29884830387

MAXIMUM CASCADE STORAGE USED 183

- 105 -

JAERI-M 8178

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

CASCADE NUMBER 1

POLAR ANGLE 13.4900 DEG

AZIMUTHAL ANGLE 13.3700 DEG

COLLISION 0 CASCADE FILE 1 ATOM TYPE 1 KAPPA ENERGY (E.V.) 100 1000.00 DIRECTION COSINES 0.226953 0.5394230-01 0.972411

PRESENT POSITION 0,0 0,0 0,0 REFERENCE SITE 0,0 0,0 0,0 ORIGINAL SITE 0,0 0,0

MINIMUM SEARCH DISTANCE 0.2766480-01

SUMMARY OF CASCADE NUMBER 1

NUMBER OF COLLISIONS	132	NUMBER OF ATOMS ESCAPING FRONT SURFACE	0
ATOMS INVOLVED	66	ATOMS ESCAPING BACK SURFACE	0
VACANCIES REMAINING	44	TRUNCATED STENOES	0
INTERSTITIALS REMAINING	44	LONG REPLACEMENT SEQUENCES	0
PROPER REPLACEMENTS	22	REDISPLACED CASCADE ATOMS	0
IMPROPER REPLACEMENTS	0	LOST PROJECTILES	0
ENERGY (E.V.)		ENERGY (E.V.)	
INELASTIC LOSS	58.9693	CARRIED THROUGH FRONT SURFACE	0.0
REMAINING KINETIC	121.119	CARRIED THROUGH BACK SURFACE	0.0
SUBTHRESHOLD LOSS	364.912	CARRIED BY REDISPLACED ATOMS	0.0
LOST TO BINDING	462.000	REDISPLACEMENT THRESHOLD	0.0
FOR DAMAGE	941.031	REPLACEMENT THRESHOLD	39.3372
CONSERVATION TEST	1007.00	CARRIED BY LOST PROJECTILES	0.0

DETAILED DESCRIPTION OF THE CASCADE, PART 1 OF 3

FILE	TYPE	KAPPA	COLLISIONS	PROGENY	INITIAL ENERGY	FINAL ENERGY	INELASTIC LOSS	TOTAL PATH
1	CU 1	90	13	7	1000.00	1.79246	26.6161	4.40403
2	CU 1	90	7	2	74.6585	1.43773	0.771461	1.00190
3	CU 1	10	9	4	351.060	0.0	6.28318	2.92142
4	CU 1	10	2	1	17.1187	0.0	0.861691E-01	0.433939
5	CU 1	10	8	7	415.830	0.0	7.08225	2.51080
6	CU 1	10	10	4	184.285	0.0	2.83292	2.45704
7	CU 1	10	6	1	64.0304	0.0	0.788901	1.48332
8	CU 1	10	6	4	225.666	0.0	3.38324	1.95383
9	CU 1	90	0	0	2.77641	2.77641	0.0	0.349048E-02
10	CU 1	10	7	3	119.024	0.0	1.57956	1.93989
11	CU 1	90	0	0	1.06016	1.06016	0.0	0.244980E-02
12	CU 1	10	7	4	177.918	0.0	2.66523	1.94675

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

LOCATIONS OF THE VACANCIES CREATED

FILE	SITE	TYPE	X	Y	Z	NSUBST
28	CU	1	2.0000000	1.5000000	3.5000000	0
29	CU	1	3.0000000	2.0000000	3.0000000	0
30	CU	1	2.0000000	4.5000000	1.5000000	0
31	CU	1	2.5000000	2.5000000	1.0000000	0
32	CU	1	0.5000000	2.0000000	2.5000000	0
33	CU	1	5.0000000	-5.0000000	6.0000000	0
34	CU	1	1.5000000	4.5000000	2.0000000	0
35	CU	1	-0.5000000	-1.5000000	3.0000000	7
36	CU	1	1.5000000	1.0000000	3.5000000	0
37	CU	1	3.5000000	2.0000000	2.5000000	0
38	CU	1	-1.0000000	-0.5000000	1.5000000	0
39	CU	1	2.0000000	-1.0000000	2.0000000	0
40	CU	1	5.5000000	-4.5000000	6.0000000	0
41	CU	1	0.0	2.0000000	3.0000000	0
42	CU	1	2.0000000	3.5000000	4.0000000	9
43	CU	1	3.5000000	1.0000000	2.5000000	0
44	CU	1	4.0000000	2.0000000	3.0000000	10
45	CU	1	2.0000000	2.0000000	4.0000000	0
46	CU	1	5.5000000	-5.0000000	6.5000000	21
47	CU	1	4.0000000	-4.5000000	6.5000000	0
48	CU	1	2.5000000	3.5000000	1.0000000	15
49	CU	1	3.0000000	2.5000000	3.5000000	29
50	CU	1	2.5000000	1.0000000	4.5000000	0
51	CU	1	3.0000000	1.5000000	0.5000000	6
52	CU	1	1.0000000	4.5000000	2.5000000	34
53	CU	1	0.0	1.0000000	3.0000000	24
54	CU	1	3.0000000	-2.0000000	3.0000000	8
55	CU	1	-1.0000000	-1.0000000	2.0000000	38
56	CU	1	0.0	0.5000000	2.5000000	4
57	CU	1	4.5000000	2.5000000	3.0000000	44
58	CU	1	2.5000000	-0.5000000	2.0000000	3
59	CU	1	2.0000000	5.0000000	2.0000000	22
60	CU	1	3.0000000	3.0000000	4.0000000	49
61	CU	1	0.5000000	4.5000000	3.0000000	52
62	CU	1	2.0000000	1.0000000	5.0000000	42
63	CU	1	-1.5000000	-2.5000000	4.0000000	35
64	CU	1	4.0000000	-2.5000000	4.5000000	12
65	CU	1	5.0000000	-6.0000000	6.0000000	33
66	CU	1	3.0000000	5.5000000	0.5000000	48

ANALYSIS OF REPLACEMENT SEQUENCES

ISOLATED REPLACEMENTS	10	SEQUENCES OF LENGTH 2	6	SEQUENCES OF LENGTH 3	0
-----------------------	----	-----------------------	---	-----------------------	---

PRIMARY RECOIL RANGES

VECTOR	3.7557134	PENETRATION	3.1861902	SPREAD	1.9883601	TOTAL PATH	4.4040326
--------	-----------	-------------	-----------	--------	-----------	------------	-----------

JAERI-M 8178

MAKLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 78-09-09

THE DISTRIBUTION OF VACANCY-INTERSTITIAL SEPARATIONS

PAIR NUMBER	VACANCY TYPE	FILE	INTERSTITIAL TYPE	FILE	SEPARATION DISTANCE	PAIR NUMBER	VACANCY TYPE	FILE	INTERSTITIAL TYPE	FILE	SEPARATION DISTANCE
1	CU	1	CU	1	0.244980030-02	2	CU	1	CU	1	0.31500070-02
3	CU	1	CU	1	0.349047750-02	4	CU	1	CU	1	0.596584340-02
5	CU	1	CU	1	0.650099750-02	6	CU	1	CU	1	0.825325420-02
7	CU	1	CU	1	0.897348360-02	8	CU	1	CU	1	0.985381850-02
9	CU	1	CU	1	0.116817310-01	10	CU	1	CU	1	0.117594100-01
11	CU	1	CU	1	0.119397930-01	12	CU	1	CU	1	0.121190380-01
13	CU	1	CU	1	0.139472020-01	14	CU	1	CU	1	0.140295240-01
15	CU	1	CU	1	0.36291123	16	CU	1	CU	1	0.37029350
17	CU	1	CU	1	0.37064465	18	CU	1	CU	1	0.37767677
19	CU	1	CU	1	0.37865605	20	CU	1	CU	1	0.39265260
21	CU	1	CU	1	0.39285485	22	CU	1	CU	1	0.40304172
23	CU	1	CU	1	0.41567922	24	CU	1	CU	1	0.71844858
25	CU	1	CU	1	0.72110352	26	CU	1	CU	1	0.72531831
27	CU	1	CU	1	0.75100878	28	CU	1	CU	1	0.90188150
29	CU	1	CU	1	0.94485187	30	CU	1	CU	1	0.95986776
31	CU	1	CU	1	0.97529094	32	CU	1	CU	1	1.0164087
33	CU	1	CU	1	1.0483264	34	CU	1	CU	1	1.2401605
35	CU	1	CU	1	1.4304713	36	CU	1	CU	1	1.4313925
37	CU	1	CU	1	1.5891177	38	CU	1	CU	1	1.6415158
39	CU	1	CU	1	2.1019698	40	CU	1	CU	1	2.5651354
41	CU	1	CU	1	3.6794015	42	CU	1	CU	1	4.0787004
43	CU	1	CU	1	5.5359380	44	CU	1	CU	1	10.269181

FINAL VALUES OF RAN = 131075

TIME (SECONDS, FACOM-75) SPENT IN
EVENT SEARCH SKATR ORGIV
261.00 158.00 75.00 136.00
CASCADE STORAGE USED 66

Appendix 9 Card Setup for DAIQUIRI to Solve a Sample Problem

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

T.O/TIME 105
W.O/PAGE 40
P.O/PCB 0
/00331

*GJOB 3100035.TA.ASAUKA.431.22.FEMMONTC
*MLIEDRUN J0051.DAIQUIRI
*DISK F01
*DISK F02
*DISK F11
*DATA
2.5 KEV FE (G11)
SAMPLE RUN
*ANNEAL NPROB=999.NTMAA=20.NPRI=10.20.10.LAST=TS

1	105	105	91	1	1	0
2	113	101	101	1	1	0
3	107	103	109	1	1	0
4	108	112	92	1	1	0
5	114	110	94	1	1	0
6	114	110	100	1	1	0
7	116	100	102	1	1	0
8	110	104	102	1	1	0
9	106	106	108	1	1	0
10	110	106	110	1	1	0
11	106	98	112	1	1	0
12	106	94	114	1	1	0
13	109	109	93	1	2	14
14	110	108	94	1	2	13
15	103	101	101	1	2	16
16	104	102	102	1	2	15
17	109	105	105	1	2	18
18	108	104	106	1	2	17
19	109	103	99	1	3	20
20	111	103	99	1	3	21
21	108	102	100	1	3	19
22	105	103	105	1	3	23
23	107	101	107	1	3	24
24	106	102	106	1	3	22
25	116	106	100	1	3	26
26	118	106	100	1	3	27
27	118	108	100	1	3	25
28	111	103	95	1	4	29
29	109	105	95	1	4	30
30	112	102	94	1	4	31
31	110	104	96	1	4	28
32	102	105	86	2	1	0
33	102	105	90	2	1	0
34	111	100	92	2	1	0
35	110	113	94	2	1	0
36	115	114	96	2	1	0
37	118	103	98	2	1	0
38	109	112	98	2	1	0
39	110	98	101	2	1	0
40	122	110	101	2	1	0
41	107	107	102	2	1	0
42	119	102	104	2	1	0

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

43	110	101	106	2	1	0
44	107	102	112	2	1	0
45	104	92	113	2	1	0
46	114	108	113	2	1	0
47	110	105	89	2	1	0
48	109	112	89	2	1	0
49	115	102	95	2	1	0
50	118	113	95	2	1	0
51	113	105	98	2	1	0
52	111	100	99	2	1	0
53	116	113	99	2	1	0
54	119	101	100	2	1	0
55	111	109	100	2	1	0
56	110	107	101	2	1	0
57	118	111	101	2	1	0
58	106	106	104	2	1	0
59	117	100	105	2	1	0
60	105	109	108	2	1	0
61	108	98	115	2	1	0
62	106	95	117	2	1	0
63	113	106	119	2	1	0

63
11441737400

Appendix 10 A Part of Output Print of DAIQUIRI for the Sample of Appendix 9

PROGRAM DAIQUIRI

SIMULATION OF DEFECT ANNEALING IN QUENCHED OR IRRADIATED SPECIMENS

NMPO PROGRAM NO. 859

VERSION FOR PURE ALPHA-IRON (300 DEGREES KELVIN)

FCC GEOMETRY IS ALLOWED, BUT FCC ANNEALING MODEL
IS A TRIVIAL ONE FOR CHECKOUT PURPOSES ONLY

TYPE 1 ELEMENTS ARE VACANCIES

TYPE 2 ELEMENTS ARE INTERSTITIALS

ASSUMPTIONS ON JUMP PROBABILITIES FOLLOW

VACANCIES	P= 0.0	(EA=0.68 EV)
SINGLE INTERSTITIAL (UNCORRELATED JUMP)	P= 0.1	(EA=0.33 EV)
SINGLE INTERSTITIAL (CORRELATED JUMP)	P= 1.0	(EA=0.27 EV)
DI-INTERSTITIAL	30 JUMPS/TIME STEP	(EA=0.18 EV)
LARGER INTERSTITIAL CLUSTERS	P= 0.0	

SINGLE INTERSTITIALS ARE CORRELATED FOR NEIGHBORS 1,2,3,4,5,7, AND 10 (333 ONLY)

THE LAST TWO JUMPS IN DI-INTERSTITIAL FORMATION ARE CORRELATED. THESE ARE OF THE FORM
(2,1) (3,1) (5,1) (4,2) (4,3) (7,3) (7,5) (10,5)

INPUT/OUTPUT FILES

SYSTEM INPUT	NIN = 5
SYSTEM OUTPUT	NOUT = 6
FIRST AUXILIARY	NAUX = 1
SECOND AUXILIARY	NAUX2 = 2
BCD PUNCHED OUTPUT	NPUN = 11

BCC JUMP VECTORS

1	(+1,+1,+1)
2	(+1,+1,-1)
3	(+1,-1,+1)
4	(+1,-1,-1)
5	(-1,+1,+1)
6	(-1,+1,-1)
7	(-1,-1,+1)
8	(-1,-1,-1)

LISTING OF INPUT PARAMETERS

CRYSTAL STRUCTURE	BCC	= 7
PROBLEM NUMBER	NPROB	= 999
FIRST TIME STEP	NTMIN	= 1
LAST TIME STEP	NTMAX	= 20
NUMBER OF ELEMENTS	NE	= 63
TABLE LISTING PARAMETERS	NPR	= 10 20 10
JUMP HISTORY REQUEST	LIST	= 7
CHECKOUT MODE	CHECK	= 1
RANDOM NUMBER GENERATOR	G	= 114417737400

2,5 KEV FE (G11)

SAMPLE RUN

PROBLEM NO. 999

ELEMENT TABLES (INPUT DATA)

I	J	POSITION	TYPE	CLASS	ADJ
51	51	113 100 98	2	1	0
52	52	111 100 99	2	1	0
53	53	116 113 99	2	1	0
54	54	119 101 100	2	1	0
55	55	111 109 100	2	1	0
56	56	110 107 101	2	1	0
57	57	118 111 101	2	1	0
58	58	106 106 104	2	1	0
59	59	117 100 105	2	1	0
60	60	105 109 108	2	1	0
61	61	108 98 115	2	1	0
62	62	106 95 117	2	1	0
63	63	113 106 119	2	1	0

DEFECT POPULATION

TYPE	CLASS	NUMBER
1	1	12
1	2	3
1	3	3
1	4	1
2	1	32

31 TYPE 1

32 TYPE 2

2.5 KEV FE (G11)

SAMPLE RUN

PROBLEM NO. 999

ELEMENT TABLES (INITIAL CONDITIONS FOR SIMULATION)

I	J	POSITION	TYPE	CLASS	ADJ
51	59	116 100 105	2	1	0
52	60	105 109 109	2	1	0
53	61	108 98 114	2	1	0
54	62	107 95 117	2	1	0
55	63	114 106 119	2	1	0

DEFECT POPULATION

TYPE	CLASS	NUMBER
1	1	13
1	2	1
1	3	4
2	1	28

27 TYPE 1
28 TYPE 2

2.5 KEV FE (G11)

SAMPLE RUN

PROBLEM NO. 999

TIME STEP 10

I	J	POSITION	TYPE	CLASS	ADJ
51	63	115 107 120	2	1	0

DEFECT POPULATION

TYPE	CLASS	NUMBER
1	1	12
1	2	2
1	3	3
2	1	23
2	3	1

25 TYPE 1
26 TYPE 2

2.5 KEV FE (G11)

SAMPLE RUN

PROBLEM NO. 999

TIME STEP 20

I	J	POSITION	TYPE	CLASS	ADJ
1	1	105 105 91	1	1	0
2	3	107 103 109	1	1	0
3	4	108 112 92	1	1	0
4	6	114 110 100	1	1	0
5	8	110 104 102	1	1	0
6	11	106 98 112	1	1	0
7	13	109 109 93	1	1	0
8	15	103 101 101	1	2	9
9	16	104 102 102	1	2	8
10	18	108 104 106	1	1	0
11	19	109 103 99	1	3	12
12	20	111 105 99	1	3	13
13	21	108 102 100	1	3	11
14	23	107 101 107	1	2	15
15	24	106 102 106	1	2	14
16	25	116 106 100	1	1	0
17	28	111 103 95	1	3	18
18	29	109 105 95	1	3	19
19	31	110 104 96	1	3	17
20	32	101 105 86	2	1	0
21	33	103 105 90	2	1	0
22	35	109 113 94	2	1	0
23	36	113 111 97	2	1	0
24	37	117 103 98	2	1	0
25	38	111 113 99	2	3	39
26	42	121 103 105	2	1	0
27	43	110 102 109	2	1	0
28	44	108 102 112	2	1	0
29	47	109 103 87	2	1	0
30	48	111 109 88	2	1	0
31	49	114 102 95	2	1	0
32	50	120 112 94	2	1	0
33	52	110 100 99	2	1	0
34	55	110 112 100	2	3	25
35	56	109 111 101	2	3	34
36	59	118 102 107	2	1	0
37	61	108 98 114	2	1	0
38	62	106 96 118	2	1	0
39	63	116 108 119	2	1	0

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	9
1	2	2
1	3	2
2	1	17
2	3	1

19 TYPE 1
20 TYPE 2

4 INITIALLY UNSTABLE PAIRS

34	30
41	17
45	12
51	14

FRENKEL PAIRS ANNIMILATED

TIME	PAIR	
2	60	9
7	58	22
14	53	5
16	46	10
17	39	2
19	57	26
19	54	7
19	40	27

T	FPACT)	CUM
2	1	1
7	1	2
14	1	3
16	1	4
17	1	5
19	3	6

JUMP HISTORY

T=TIME
J=JUMPING ELEMENT
V=JUMP VECTOR

T	J	V	T	J	V	T	J	V	T	J	V	T	J	V
1	43	7	1	59	1	2	33	3	2	60	3	2	32	8
3	38	1	3	35	1	4	48	3	5	59	1	7	58	7
7	54	8	7	56	5	7	55	1	7	56	1	7	55	6
7	56	6	7	55	6	7	56	6	8	47	5	8	36	8
8	42	1	8	50	4	8	35	8	9	63	1	9	48	8
10	57	4	10	62	5	10	53	6	11	47	8	11	49	5
12	57	4	12	48	4	14	43	5	14	53	4	15	42	7
15	32	5	16	36	7	16	46	5	17	33	2	17	39	1
17	42	2	17	54	3	18	63	2	18	47	4	18	54	6
19	57	8	19	47	4	19	54	7	19	40	5	19	49	8
20	43	1	20	36	3									

Appendix 11 Card Setup for CASC SRB to Solve a Heavy Irradiation Problem of Copper

.....*.....1.....*.....2.....*.....3.....*.....4.....*.....5.....*.....6.....*.....7.....*.....8

C.2/CORE 128
W.0/PAGE 40
P.0/PCH 0
/00331

```
*GJOB          3100035.TA.ASAOKA+431.22.FEMMONTC
*DLIED        JOQ35.CASCSRB.GRFD=ON.COMLIB=CALL.RBSPC=30
SGMT          MAIN
SELECT RELBIN(FTMAIN,DING,RDDING,HSKIP,BTERR,EREX,GGGG,
              SETIX,ERRORA,UNLOAD,INTF,XINTF,SIGNF,MINIF,XMODF,XMAXOF,
              FLOATF,XABSF,SQMTF,ABSF,EXPFF,ATANF,XXXX,
              BLOCKD,HANDU,RNNUM,
              START,ICHEK,RESLT,WRTI1,WRTI2,TARGET1,TARGET2,SCATTR,
              BKKEEP,UDDD,PTAB,PTAB1,PTAB2,BIGJ,RANGE,INT1,INT2,
              CLPAIR,KADIUS,SET1ST)

SGMT          MAIN2,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN2,BTED[T.TSORT1,T.SORT2])
SGMT          MAIN3,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN3,BBBB,MIDPTV,PRINT1,MIDPT1,MEAND,DISTS,DISTD,STORE, /
              PRINT)
SGMT          MAIN31,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN31,AAAA,VACCLU,PRINTV,INTCLU,COMPRV,COMPR1)
SGMT          MAIN32,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN32,CCCC,VACCLF,PRINTF,INTCLF,COMPR)
SGMT          DATA,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(CENSUS,CLEAR,CLOSE,CONECT,CORL,DINTY,DSQ,FPSTAT,FRENKL, /
              DATQU,I,NCH,INFO,INPR,INPUT,JPROB,JUMP,LIST1,LIST2,OCTIN, /
              PANIC,PKMUTE,SJD,YTPR,UPDATE)

SGMT          MAIN4,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN4,BEEE,SPLIT,GRAPH)
FIN
#DRUN
#DISK F01
#DISK F02
#DISK F03
#DISK F04
#DISK F10
#DISK F12
#DISK F13
#DISK F14
#FD F78.DUMMY.DEVD=DA
#DATA
255234727400
      0
>ID1,15,0.5--3 KEV COPPER
>ID2,15,DIIRECTION 1
>TYPE1,3,COPPER
>TYPE2,3,COPPER
>TYPE3,3,COPPER
>CRYSTL,1,FCC
>PCHG,29,29,29,PMASS,63.63,63,ED,7.7,7,
>CLATT,3,6147,PMAXX,2,RELAX,3,XLMDA,1,
>KPRINT,3,KLUSTR,2,KPRIM,2,KREPL,2,NE,1,
-
    300,       3000,       175,       225,       175,       225,       175,
8
ARGEN,21109731072,
```

.....1.....*.....2.....*.....3.....*.....4.....*.....5.....*.....6.....*.....7.....*.....8

```

4KTAPE=0,KRECRD=0,KPRINT=-1,
#
5ID1,15,0.5--3 KEV COPPER
5ID2,15,DIRECTION 1
#ANNEAL NPROB=1,NTMAX=20,NPRI=20,20,20,LIST=T,LIST=F,BCC=F #
1
4NDELX,0,NDELY,0,NDELZ,0,
5CRYSTL,1,FCC
5ID1,15,0.5--3 KEV COPPER
5ID2,15,DIRECTION 1
3CHECK,0,CLATT,3,6147,
1111
#
      0      0      0
#
5ID1,15,0.5--3 KEV COPPER
5ID2,15,DIRECTION 2
5TYPE1,3,COPPER
5TYPE2,3,COPPER
5TYPE3,3,COPPER
5CRYSTL,1,FCC
5PCHG,29,29,PMAS5,63,63,63,ED,7,7,7,
3CLATT,3,6147,PMAXX,2,RELAX,5,XLMDA,1,
4KPRINT,3,KLUSTR,2,KPRIM,2,KREPL,2,NE,1,KSAT,1,
#
    500.        3000.        175.        225.        175.        225.        175.        225.
#
8
4RGEN,21109731072,
4KTAPE=0,KRECRD=0,KPRINT=-1,
#
0.5--3 KEV COPPER
5ID2,15,DIRECTION 2
#ANNEAL NPROB=2,NTMAX=20,NPRI=20,20,20,LIST=T,LIST=F,BCC=F #
-1
4NDELX,0,NDELY,0,NDELZ,0,
5CRYSTL,1,FCC
>ID1,15,0.5--3 KEV COPPER
5ID2,15,DIRECTION 2
3CHECK,0,CLATT,3,6147,
1111
#
      1      0      1      150      350      200      150      300      200      150      350      200
      200      200      200

```

Appendix 12 Output Print of CASCARB for the Problem of Appendix 11

ELASTIC COLLISION CASCADE -- FCC LATTICE

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 1

1111

CRYSTAL ATOMS

	1 COPPER	2 COPPER
MASS	63.	63.
CHARGE	29.	29.
EJECTION ENERGY	7.	7.

PRIMARY ATOM

COPPER MASS = 63. CHARGE = 29.

PRIMARY ATOM ENERGY

1230.7 ELECTRON VOLTS

TAKE-OFF POINT (ANGSTROMS)

X = 356.95163

Y = 331.64873

Z = 394.90598

TAKE-OFF DIRECTION

COS ALPHA = 0.27560203 COS BETA = 0.13437220 COS GAMMA = 0.95183383

THETA = 17.855314 PHI = 25.991958

LATTICE CONSTANT = 3.6147 ANGSTROMS

SCREENING PARAMETER = 1.00 POTENTIAL CUTOFF = 2.00 ANGSTROMS

RELAXATION DISTANCE (SQUARED) = 5.00 COORDINATE UNITS

OUTPUT OPTIONS

KLUSTR = 2 KPRIM = 2 KPHINT = 3 KRLAT = 0 KPLAT = 2 KREPL = 2

DEFECT STATISTICS

	INTERSTITIALS	VACANCIES	REPLACEMENTS
COPPER	13	14	30
COPPER	15	14	12
TOTAL	28	28	42

RANGE OF PRIMARY ATOM

75.49 ANGSTROMS

COORDINATES OF PRIMARY ATOM AT END OF CASCADE

199 160 253

NUMBER OF COLLISIONS RECORDED = 532

VOLUME OF DAMAGED REGION = 1.851E+04 C.A.

MAXIMUM PERMITTED VOLUME = 5.668E+05 C.A.

CASCADE PROGRAM RAN ALL CASES TO COMPLETION

WILL NOW WRITE END OF FILE ON 3, REWIND, AND CALL CLUSTER

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 1

1111

LATTICE CONSTANT = 3.6147000E+00

RANDOM NUMBER GENERATOR = 21109731072

CONTROL WORDS = KTAPE = 0, KPHINT = 1, KODE = 0, KSATUR = 0, KRECRD = 0.

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 1

1111

UNSTABLE FRENKEL PAIRS = 6

LAST RANDOM NUMBER =

VACANCIES			INTERSTITIALS			VACANCIES			INTERSTITIALS			TYPE		
205	185	235	205	184	233	203	192	226	203	193	226	1		
199	190	224	199	190	222	209	174	224	209	174	222	4		
200	191	226	202	193	226	199	175	237	199	173	235	4		

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 1 1111

NUMBER OF INPUT VACANCIES 28
NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 6
NUMBER OF STABLE VACANCIES 22

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
1-VACANCY 9
2-VACANCY 3
3-VACANCY 1
4-VACANCY 1

SINGLE VACANCIES														
192 184 223	206 182 225	195 187 225	201 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225	199 187 225
199 177 237	202 183 226	201 184 234	199 186 238											

VACANCY CLUSTERS

3-VACANCY CLUSTER	199 185 223
	199 184 222
	200 185 224
2-VACANCY CLUSTER	197 187 225
	198 187 224
2-VACANCY CLUSTER	193 189 227
	193 188 226
4-VACANCY CLUSTER	201 181 229
	202 182 229
	203 183 231
	203 182 230
2-VACANCY CLUSTER	201 190 224
	200 191 224

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP768

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 1 1111

NUMBER OF INPUT INTERSTITIALS 28
NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 6
NUMBER OF STABLE INTERSTITIALS 22

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
1-INTERSTITIAL 20
2-INTERSTITIAL 1

SINGLE INTERSTITIALS														
219 196 212	192 172 219	204 192 223	202 179 224	216 184 229	198 192 221	207 192 226	201 188 240							
189 191 229	214 198 237	194 187 240	190 186 249	198 192 221	207 192 226	201 188 240								
191 182 222	227 159 223	190 185 224	190 187 226	207 192 226	201 188 240									
195 192 228	200 185 232	198 174 233	206 188 233	201 188 240										

INTERSTITIAL CLUSTERS

2-INTERSTITIAL CLUSTER	199 190 230
	198 191 230

END OF RECORD ENCOUNTERED READING TAPE 3
IERCOD = 3

WILL EXIT
END OF FILE ENCOUNTERED ON TAPE 3
LISTING OF INPUT PARAMETERS

CRYSTAL STRUCTURE	BCC = F
PROBLEM NUMBER	NPROB = 1
FIRST TIME STEP	NTMIN = 1
LAST TIME STEP	NTMAX = 20
NUMBER OF ELEMENTS	NE = 44
TABLE LISTING PARAMETERS	NPR = 20 20 20
JUMP HISTORY REQUEST	LIST = F
CHECKOUT MODE	CHECK = 1
RANDOM NUMBER GENERATOR	G = 000000000000

51D1.15.0.5--3 KEV COPPER

51D2.15.DIRECTION 1

PROBLEM NO. 1

ELEMENT TABLES (INPUT DATA)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	9
1	2	3
1	3	1
1	4	1
2	1	20
2	2	1

22 TYPE 1
22 TYPE 2

51D1.15.0.5--3 KEV COPPER

51D2.15.DIRECTION 1

PROBLEM NO. 1

ELEMENT TABLES (INITIAL CONDITIONS FOR SIMULATION)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	9
1	2	3
1	3	1
1	4	1
2	1	20
2	2	1

22 TYPE 1
22 TYPE 2

51D1.15.0.5--3 KEV COPPER

51D2.15.DIRECTION 1

PROBLEM NO. 1

TIME STEP 20

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	9
1	2	1
1	3	1
1	4	1
2	1	14
2	2	2

18 TYPE 1
18 TYPE 2

FRENKEL PAIRS ANNIHILATED

TIME	PAIR
2	39 8
2	38 13
10	30 9
19	32 22

T	FPA(T)	CUM
2	2	2
10	1	3
19	1	4

CASCADE PROGRAM RAN ALL CASES TO COMPLETION

CLUSTER PROGRAM NOT REQUESTED

WILL NOW WRITE END OF FILE ON 3. REWIND, UNLOAD, AND CALL EXIT

2 TH PROBLEM

MAIN4

MAIN1

ELASTIC COLLISION CASCADE -- FCC LATTICE

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 2

1111

CRYSTAL ATOMS

	1 COPPER	2 COPPER
MASS	63.	63.
CHARGE	29.	29.
EJECTION ENERGY	7.	7.

PRIMARY ATOM

COPPER MASS = 63; CHARGE = 29;

PRIMARY ATOM ENERGY

1605.2 ELECTRON VOLTS

TAKE-OFF POINT (ANGSTROMS)

X = 351.52958

Y = 356.95163

Z = 342.49283

TAKE-OFF DIRECTION

COS ALPHA = 0.99199874 COS BETA = 0.13405924 COS GAMMA = 0.79107725

THETA = 37.713703 PHI = 14.586866

LATTICE CONSTANT = 3.6147 ANGSTROMS

SCREENING PARAMETER = 1.00 POTENTIAL CUTOFF = 2.00 ANGSTROMS

RELAXATION DISTANCE (SQUARED) = 5.00 COORDINATE UNITS

OUTPUT OPTIONS

KLUSTR= 2 KPRIM= 2 KPRINT= 3 KRLAT= 0 KPLAT= 2 KREPL= 2

DEFECT STATISTICS

	INTERSTITIALS	VACANCIES	REPLACEMENTS
COPPER	37	31	17
COPPER	26	31	25
TOTAL	63	62	42

RANGE OF PRIMARY ATOM

43.33 ANGSTROMS

COORDINATES OF PRIMARY ATOM AT END OF CASCADE

199 199 213

NUMBER OF COLLISIONS RECORDED = 570

VOLUME OF DAMAGED REGION = 3.401E+04 C.A.

MAXIMUM PERMITTED VOLUME = 5.668E+05 C.A.

CASCADE PROGRAM RAN ALL CASES TO COMPLETION

WILL NOW WRITE END OF FILE ON 3.REWIND, AND CALL CLUSTER

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 1

1111

LATTICE CONSTANT = 3.6147000E+00

RANDOM NUMBER GENERATOR = 21109731072

CONTROL WORDS = KTAPE= 0, KPRINT=1, KODE= 0, KSATUR= 0, KRECRD= 0.

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

0.5--3 KEV COPPER
DIRECTION 1

1111

UNSTABLE FRENKEL PAIRS = 16

LAST RANDOM NUMBER = 14442530874

VACANCIES			INTERSTITIALS			TYPE	VACANCIES			INTERSTITIALS			TYPE
195	187	187	196	187	187	1	198	200	217	199	200	217	1
197	190	196	197	191	196	1	191	209	197	190	209	196	2
192	209	196	193	210	196	2	201	195	193	201	193	193	3
199	200	196	199	200	194	3	190	210	199	190	210	201	3
201	201	205	201	201	207	3	198	194	203	200	194	205	4
199	199	207	197	201	207	4	197	186	196	195	184	196	4
192	184	223	190	184	223	4	199	198	192	202	198	189	5
198	191	196	201	194	196	5	198	199	196	198	202	199	5

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP779

0.5--3 KEV COPPER

DIRECTION 1

1111

NUMBER OF INPUT VACANCIES 62
 NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 16
 NUMBER OF STABLE VACANCIES 46

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
 1-VACANCY 19
 2-VACANCY 5
 3-VACANCY 3
 4-VACANCY 2

SINGLE VACANCIES

197	189	189	198	194	195	202	200	195	198	198	197	200	198	211
206	182	225	195	187	225	201	187	225	202	183	226	199	177	235
199	177	237	198	193	190	198	203	194	193	206	196	193	208	196
192	205	198	201	196	206	198	187	224	201	190	224			

VACANCY CLUSTERS

3-VACANCY CLUSTER	197	197	191
	196	198	191
	196	199	192
4-VACANCY CLUSTER	196	202	193
	195	203	193
	196	201	192
	195	204	192
2-VACANCY CLUSTER	197	199	195
	197	198	194
2-VACANCY CLUSTER	194	204	195
	194	203	196
2-VACANCY CLUSTER	199	199	201
	199	198	202
3-VACANCY CLUSTER	200	198	205
	200	199	204
	201	200	204
3-VACANCY CLUSTER	199	184	222
	199	185	223
	200	185	224
2-VACANCY CLUSTER	201	196	192
	200	197	192
2-VACANCY CLUSTER	193	184	226
	193	189	227
4-VACANCY CLUSTER	201	181	229
	202	182	229
	203	182	230
	203	183	231

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP768

0.5--3 KEV COPPER

DIRECTION 1

1111

NUMBER OF INPUT INTERSTITIALS 63
 NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 16
 NUMBER OF STABLE INTERSTITIALS 47

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
 1-INTERSTITIAL 41
 2-INTERSTITIAL 3

SINGLE INTERSTITIALS

189	187	185	200	190	191	204	198	193	200	202	193	189	215	193
192	205	194	204	201	196	193	190	196	201	189	197	190	214	199
190	207	200	200	206	203	204	204	205	198	190	207	221	198	208
197	201	219	192	183	220	209	189	221	192	173	222	226	157	222
204	180	223	205	194	222	214	180	229	189	193	229	212	201	234
192	185	250	203	213	183	197	202	188	202	186	189	203	194	190
202	183	196	202	196	197	199	193	201	203	203	203	206	212	203
204	193	208	189	186	226	208	190	223	200	173	232	207	189	235
200	186	243												

INTERSTITIAL CLUSTERS

2-INTERSTITIAL CLUSTER	197	203	197
	197	202	196
2-INTERSTITIAL CLUSTER	191	201	199
	191	202	200
2-INTERSTITIAL CLUSTER	198	190	231
	199	190	230

END OF RECORD ENCOUNTERED READING TAPE 3
IERCOD = 5

WILL EXIT
END OF FILE ENCOUNTERED ON TAPE 3

LISTING OF INPUT PARAMETERS

CRYSTAL STRUCTURE	BCC	=	F
PROBLEM NUMBER	NPROB	=	2
FIRST TIME STEP	NTMIN	=	1
LAST TIME STEP	NTMAX	=	20
NUMBER OF ELEMENTS	NE	=	93
TABLE LISTING PARAMETERS	NPR	=	20 20 20
JUMP HISTORY REQUEST	LIST	=	F
CHECKOUT MODE	CHECK	=	1
RANDOM NUMBER GENERATOR	G	=	000000000000

0,3--3 KEV COPPER

5102.15.DIRECTION 2

PROBLEM NO, 2

ELEMENT TABLES (INPUT DATA)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	19
1	2	5
1	3	3
1	4	2
2	1	41
2	2	3

46 TYPE 1
47 TYPE 2

0,3--3 KEV COPPER

5102.15.DIRECTION 2

PROBLEM NO, 2

ELEMENT TABLES (INITIAL CONDITIONS FOR SIMULATION)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	19
1	2	5
1	3	3
1	4	2
2	1	41
2	2	3

46 TYPE 1
47 TYPE 2

0,3--3 KEV COPPER

5102.15.DIRECTION 2

PROBLEM NO, 2

TIME STEP 20

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	18
1	2	3
1	3	3
1	4	2
2	1	34
2	2	4

41 TYPE 1
42 TYPE 2

FRENKEL PAIRS ANNIHILATED

TIME	PAIR
4	52 29
6	68 19
8	57 16
10	53 3
15	76 39

T	FPACT)	CUM
4	1	1
6	1	2
8	1	3
10	1	4
15	1	5

CASCADE PROGRAM RAN ALL CASES TO COMPLETION

CLUSTER PROGRAM NOT REQUESTED

WILL NOW WRITE END OF FILE ON 3. REWIND, UNLOAD, AND CALL EXIT

3 TH PROBLEM
151425162400

MAIN4

Appendix 13 Card Setup for CASCARL to Solve the Same
Problem as in Appendix 11

```

.....1.....*.....2.....*.....3.....*.....4.....*.....5.....*.....6.....*.....7.....*.....8

C.4/CORE 256
W.0/PAGE 40
P.0/PCH 0
/00331

*GJOB 3100035.TA,ASAOKA,431.21,SSLNONLN
*DLIED J0051.CASCARL,GRFD=ON,COMLIB=CALL,RBSPC=90,DIRECT=200
SGMT MAIN
SELECT RELBIN(FTMAIN,DING,RRDING,RSKIP,BTERR,EREX,GGGG,ICHEK,RESET, /
ERRORA,UNLOAD,INTF,XINTF,SIGNF,MIN1F,XMODF,XMAXOF,SETIX, /
FLOATF,XABSF,SQRTF,ABSF,EXPF,ATANF,XXXX,RANGE, /
BLOCKD,RANDU,RRNUM,START,BLCK1,DRAN)
SGMT MAIN3,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN3,BBBB,MIDPTV,PRINTI,MIDPTI,MEAND,DISTS,DISTD,STORE, /
PRINT)
SGMT MAIN31,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN31,AAAA,VACCLU,PRINTV,INTCLU,COMPRV,COMPRI)
SGMT MAIN32,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(MAIN32,CCCC,VACCLF,PRINTF,INTCLF,COMPR)
SGMT DAIQU,CHN=MAIN3
SELECT RELBIN(CENSUS,CLEAR,CLOSE,CONECT,CORL,DINTY,DSQ,FPSTAT,FRENKL, /
DAIQUI,INCH,INFO,INPR,INPUT,JPROB,JUMP,LIST1,LIST2,OCTIN, /
PANIC,PRMUTE,SJD,TPR,UPDATE)
SGMT MARL,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(DETAIL,EVENT,EXTRA,MARLOW,ICLOCK,INELAS,INELST,INPUTM, /
LINER,MEHLER,ORGIV,POTENS,POTENZ,POTSET,RANGEM,REPORT, /
SAVE,SEARCH,SELECT,SEQUIN,SINGLE,SKATR,SLAVE,TVAMP, /
ARNORM,BCC00,FCC00,CHANGE)
SGMT MAIN4,CHN=MAIN
SELECT RELBIN(MAIN4,EEEE,SPLIT,GRAPH)
FIN
*DRUN
*DISK F01
*DISK F02
*DISK F03
*DISK F04
*DISK F10
*DISK F12
*DISK F13
*DISK F14
*FD F78,DUMMY,DEVDA
*DATA
255234727400
0
5ID1,15,0.5--3 KEV COPPER
5ID2,15,DIRECTION 1
5CRYSTL,1,FCC
3PCHG,29,29,29,PMAS,63,63,63,ED,7,7,7,
3CLATT,3,6147,PMAX,2,RELAX,5,XLMDA,1,
3X0,356,95163,Y0,331,64873,Z0,394,90598,
3COSA,0,27560203,COSB,0,13437220,COSG,0,95183383,
3E0,1230,7,
-
0, 0,
0.5--3 KEV COPPER
*XTAL ALAT=3*3,6147D0,NTYPE=1,NEIGH=18, W=63.54D0,Z=29D0,VPR=T * FCC
CU

```


.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

1	0.5	0.5	0.0	1	0.5	-0.5	0.0	FCC	0010
1	-0.5	0.5	0.0	1	-0.5	-0.5	0.0	FCC	0020
1	0.5	0.0	0.5	1	0.5	0.0	-0.5	FCC	0030
1	-0.5	0.0	0.5	1	-0.5	0.0	-0.5	FCC	0040
1	0.0	0.5	0.5	1	0.0	0.5	-0.5	FCC	0050
1	0.0	-0.5	0.5	1	0.0	-0.5	-0.5	FCC	0060
1	1.0	0.0	0.0	1	-1.0	0.0	0.0	FCC	0070
1	0.0	1.0	0.0	1	0.0	-1.0	0.0	FCC	0080
1	0.0	0.0	1.0	1	0.0	0.0	-1.0	FCC	0090

```

*VPAR BPAR(1,1)=7380-4 *
*MODL RBA=20-2,620-2,EDISP=700,EQUIT=700,EBND=700 *
*OUTP INFORM=44T,INFORM(8)=T,DRNG=23D-2 *
*PROJ MAXRUN=0,LOG=0 *
4RGEN,21109731072,
4KTAPL,U,KRECRD,U,KPRINT,-1,

```

```
0.5--3 KEV COPPER
5102.15.DIRECTION 1
*ANNEAL NPROB=1,NTMAX=20,NPRI=20,20,20, LAST=T,LIST=F,BCC=F *
```

```
4KSAT,0,
4NDELX,0,NDELY,0,NDELZ,0,
5CRYSTL,1,FCC
3CHECK,0,
```

0 0 0

51D1.15.0.5--3 KEV COPPER
51D2.15.DIRECTION 2
5CRYSTL.1.FCC
3PCHG.29.29.29.PMAXSS.63.63.63.ED.7.7.7.
3CLATT.3.6147.PMAXX.2.RELAX.5.XLMDA.1.
3XD.351.52958.YO.336.95163.ZO.342.49283.
3COSA.0.59199874.COSB.0.15405924.COSG.0.79107726.
3K.1609.2.
4SEAT.1.

0.

0.5--3 KEV COPPER

CU	0.5	0.5	0.0	1	0.5	-0.5	0.0	FCC	0010
1	0.5	0.5	0.0	1	0.5	-0.5	0.0	FCC	0020
1	-0.5	0.5	0.0	1	-0.5	-0.5	0.0	FCC	0030
1	0.5	0.0	0.5	1	0.5	0.0	-0.5	FCC	0040
1	-0.5	0.0	0.5	1	-0.5	0.0	-0.5	FCC	0050
1	0.0	0.5	0.5	1	0.0	0.5	-0.5	FCC	0060
1	0.0	-0.5	0.5	1	0.0	-0.5	-0.5	FCC	0070
1	1.0	0.0	0.0	1	-1.0	0.0	0.0	FCC	0080
1	0.0	1.0	0.0	1	0.0	-1.0	0.0	FCC	0090
1	0.0	0.0	1.0	1	0.0	0.0	-1.0	FCC	0090

```
*VPR BPAR(1,1)=738D-4 #
*MODL HB=42D-2,62D-2,EDISP=70D,EQUIT=70D,EBND=70D #
*QUTP INFORM=4*T,INFORM(8)=T,DRNG=25D-2 #
*PROJ MAXRUN=0,LOG=0 #
4HGEN=21109731072.
```

.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....8

4KTAPE,0,KRECRD,0,KPRINT,-1.

0,5--3 KEY COPPER
51D2,15,DIRECTION 2
*ANNEAL NPROH=2,NIMAX=20,NPRI=20,20,20,LIST=F,BCC=F *

```

-1
4KSAT,0,
4NDELX,0,NDELY,0,NDELZ,0,
5CRYSTL,1,FCC
1CHECK,0,

```

	1	0	1	150	350	200	150	300	200	150	350	200
	200	200	200									

Appendix 14 A Part of Output Print of CASCARL for the Problem of Appendix 13

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 79-01-08

CASCADE NUMBER 1

POLAR ANGLE 17.8953 DEG

AZIMUTHAL ANGLE 23.9920 DEG

COLLISION	CASCADE FILE	ATOM	TYPE	KARMA	ENERGY (E.V.)	DIRECTION COSINES	ORIGINAL SITE
0	1	CU	1	100	1230.70	0.275602 0.134372 0.951834	
98,5000	PRESENT POSITION 91,5000	109,000		98,5000	REFERENCE SITE 91,5000	109,000	98,5000 91,5000 109,000
MINIMUM SEARCH DISTANCE 0.276648E-01							

SUMMARY OF CASCADE NUMBER 1

NUMBER OF	NUMBER OF
COLLISIONS	193
ATOMS INVOLVED	85
VACANCIES REMAINING	49
INTERSTITIALS REMAINING	49
PROPER REPLACEMENTS	36
IMPROPER REPLACEMENTS	0
ENERGY (E. V.)	
INELASTIC LOSS	87.9646
REMAINING KINETIC	143.372
SUBTHRESHOLD LOSS	411.384
LOST TO BINDING	392.000
FOR DAMAGE	1142.74
CONSERVATION TEST	1237.70
ATOMS ESCAPING FRONT SURFACE	0
ATOMS ESCAPING BACK SURFACE	0
TRUNCATED STENDONS	0
LONG REPLACEMENT SEQUENCES	0
REDISPLACED CASCADE ATOMS	0
LOST PROJECTILES	0
ENERGY (E. V.)	
CARRIED THROUGH FRONT SURFACE	0.0
CARRIED THROUGH BACK SURFACE	0.0
CARRIED BY REDISPLACED ATOMS	0.0
REDISPLACEMENT THRESHOLD	0.0
REPLACEMENT THRESHOLD	358.286
CARRIED BY LOST PROJECTILES	0.0

ANALYSIS OF REPLACEMENT SEQUENCES

ISOLATED REPLACEMENTS 17

SEQUENCES OF LENGTH 2 3

SEQUENCES OF LENGTH 3 0

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 79-01-08

SEQUENCE	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20+
DIRECTION	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TOTAL	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0 1 1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1 1 1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

VECTOR 6.2373497 PENETRATION 5.7456048 PRIMARY RECOIL RANGES SPREAD 2.4274588 TOTAL PATH 6.7960325

THE DISTRIBUTION OF VACANCY-INTERSTITIAL SEPARATIONS

PAIR NUMBER	VACANCY TYPE	FILE	INTERSTITIAL TYPE	FILE	SEPARATION DISTANCE	PAIR NUMBER	VACANCY TYPE	FILE	INTERSTITIAL TYPE	FILE	SEPARATION DISTANCE
1	CU	1	CU	1	0.99999983E-10	2	CU	1	CU	1	0.10000000E-09
3	CU	1	CU	1	0.10000000E-09	4	CU	1	CU	1	0.44016183E-03
5	CU	1	CU	1	0.97854928E-03	6	CU	1	CU	1	0.26060971E-02
7	CU	1	CU	1	0.65432509E-02	8	CU	1	CU	1	0.79759915E-02
9	CU	1	CU	1	0.86243729E-02	10	CU	1	CU	1	0.95863618E-02
11	CU	1	CU	1	0.10731747E-01	12	CU	1	CU	1	0.11842507E-01
13	CU	1	CU	1	0.13195931E-01	14	CU	1	CU	1	0.13485114E-01
15	CU	1	CU	1	0.13668367E-01	16	CU	1	CU	1	0.15144817E-01
17	CU	1	CU	1	0.35913204	18	CU	1	CU	1	0.38023815
19	CU	1	CU	1	0.40161210	20	CU	1	CU	1	0.46993023
21	CU	1	CU	1	0.47853677	22	CU	1	CU	1	0.69429622
23	CU	1	CU	1	0.71862421	24	CU	1	CU	1	0.71869326
25	CU	1	CU	1	0.72059105	26	CU	1	CU	1	0.72296069
27	CU	1	CU	1	0.72328024	28	CU	1	CU	1	0.72368874
29	CU	1	CU	1	0.72373616	30	CU	1	CU	1	0.72379878
31	CU	1	CU	1	0.90829890	32	CU	1	CU	1	0.92571367
33	CU	1	CU	1	0.94335384	34	CU	1	CU	1	1.0163201
35	CU	1	CU	1	1.0167611	36	CU	1	CU	1	1.2083000
37	CU	1	CU	1	1.2395973	38	CU	1	CU	1	1.4307419
39	CU	1	CU	1	1.5731411	40	CU	1	CU	1	1.3908740
41	CU	1	CU	1	1.5952431	42	CU	1	CU	1	2.1367013
43	CU	1	CU	1	2.5651843	44	CU	1	CU	1	2.8447843
45	CU	1	CU	1	3.5434320	46	CU	1	CU	1	4.1931324
47	CU	1	CU	1	4.8320285	48	CU	1	CU	1	4.8884817
49	CU	1	CU	1	15.489820						

FINAL VALUES OF RAN = 23260802816

TIME (SECONDS, FACOM-75) SPENT IN SEARCH 1.00 SKATR 0.0 OMGIV 0.0

CASCADE STORAGE USED 85

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM: NMP779

0.5--3 KEV COPPER

NUMBER OF INPUT VACANCIES 49
 NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 35
 NUMBER OF STABLE VACANCIES 14

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
 1-VACANCY 6
 2-VACANCY 1
 3-VACANCY 2

SINGLE VACANCIES
 198 184 219 197 187 225 191 189 227 189 189 227 198 190 227
 205 188 228

VACANCY CLUSTERS

• 3-VACANCY CLUSTER 199 184 222
 199 185 223
 199 186 224

 3-VACANCY CLUSTER 201 184 224
 202 183 224
 203 182 224

 2-VACANCY CLUSTER 204 185 226
 204 186 227

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM: NMP760

0.5--3 KEV COPPER

NUMBER OF INPUT INTERSTITIALS 49
 NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 35
 NUMBER OF STABLE INTERSTITIALS 14

TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
 1-INTERSTITIAL 14

SINGLE INTERSTITIALS
 208 182 225 207 183 229 177 199 237 197 192 228 203 179 223
 200 181 222 199 188 230 204 190 225 201 178 222 186 182 223
 204 179 226 202 190 229 191 193 233 206 188 231

END OF RECORD ENCOUNTERED READING TAPE 3
 IERCOB = 5
 WILL EXIT
 END OF FILE ENCOUNTERED ON TAPE 3
 LISTING OF INPUT PARAMETERS

CRYSTAL STRUCTURE	BCC	=	F
PROBLEM NUMBER	NPROB	=	1
FIRST TIME STEP	NTMIN	=	1
LAST TIME STEP	NTMAX	=	20
NUMBER OF ELEMENTS	NE	=	28
TABLE LISTING PARAMETERS	NPR	=	20 20 20
JUMP HISTORY REQUEST	LIST	=	F
CHECKOUT MODE	CHECK	=	1
RANDOM NUMBER GENERATOR	G	=	#000000000000

0.5--3 KEV COPPER

SID2.15.DIRECTION 1

PROBLEM NO. 1

ELEMENT TABLES (INPUT DATA)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	6
1	2	1
1	3	2
2	1	14

14 TYPE 1

14 TYPE 2

0.5--3 KEV COPPER

SID2.15.DIRECTION 1

PROBLEM NO. 1

ELEMENT TABLES (INITIAL CONDITIONS FOR SIMULATION)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	6
1	2	1
1	3	2
2	1	14

14 TYPE 1

14 TYPE 2

0.5--3 KEV COPPER

SID2.15.DIRECTION 1

PROBLEM NO. 1

TIME STEP 20

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	5
1	2	1
1	3	2
2	1	9
2	2	2

13 TYPE 1

13 TYPE 2

FRENKEL PAIRS ANNIHILATED

TIME	PAIR
20	28 6

T	FPA(T)	CUM
20	1	1

2 TH PROBLEM

MAIN4

MAIN1

JAERI-M 8178

MAKLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 79-01-08

COMPUTER MODEL FACOM-75

DESCRIPTION OF THE CALCULATIONAL MODEL

0.5-3 KEV COPPER
CRYSTAL LATTICE CONSTANTS (ANGSTROMS) 3.6147000 3.6147000 3.6147000

UNITS USED IN REPORTING RESULTS
ATOM AND SITE LOCATIONS ARE IN ORTHORHOMBIC CELL EDGES.
DIRECTIONS ARE PROPORTIONAL TO MILLER INDICES.
LENGTHS ARE IN UNITS OF LATTICE CONSTANT 1.

ATOM	TYPE	CHARGE	MASS (AMU)	ATOM	TYPE	CHARGE	MASS (AMU)
CU	1	29.000000	63.540000				

DESCRIPTION OF CRYSTAL

NEIGHBORS OF CU ATOM (TYPE 1)				NEIGHBORS OF CU ATOM (TYPE 1)			
ATOM	TYPE	X	Y	ATOM	TYPE	X	Y
CU	1	0.50000000	0.50000000	CU	1	0.50000000	-0.50000000
CU	1	-0.50000000	0.50000000	CU	1	-0.50000000	-0.50000000
CU	1	0.50000000	0.0	CU	1	0.50000000	0.0
CU	1	-0.50000000	0.0	CU	1	-0.50000000	0.0
CU	1	0.0	0.50000000	CU	1	0.0	0.50000000
CU	1	0.0	-0.50000000	CU	1	0.0	-0.50000000
CU	1	1.00000000	0.0	CU	1	-1.00000000	0.0
CU	1	0.0	1.00000000	CU	1	0.0	-1.00000000
CU	1	0.0	0.0	CU	1	0.0	0.0

LOCATIONS OF VACANCIES PRESENT AT START OF CALCULATION

FILE	SITE	X	Y	Z	FILE	SITE	X	Y	Z
1	CU 1	98.500000	91.500000	109.000000	2	CU 1	98.000000	93.000000	112.000000
3	CU 1	95.000000	94.000000	113.000000	4	CU 1	94.000000	94.000000	113.000000
5	CU 1	98.500000	94.500000	113.000000	6	CU 1	99.000000	91.500000	110.500000
7	CU 1	99.000000	92.000000	111.000000	8	CU 1	99.000000	92.500000	111.500000
9	CU 1	100.000000	91.500000	111.500000	10	CU 1	100.500000	91.000000	111.500000
11	CU 1	101.000000	90.500000	111.500000	12	CU 1	101.500000	92.000000	112.500000
13	CU 1	101.500000	92.500000	113.000000					

LOCATIONS OF INTERSTITIALS PRESENT AT START OF CALCULATION

FILE	ATOM	X	Y	Z	FILE	ATOM	X	Y	Z
1	CU 1	103.500000	91.000000	111.500000	2	CU 1	103.500000	91.500000	113.000000
3	CU 1	88.000000	98.000000	118.000000	4	CU 1	98.000000	96.000000	115.000000
5	CU 1	100.500000	88.500000	111.000000	6	CU 1	99.500000	90.000000	110.500000

MAKLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 79-01-08

LOCATIONS OF INTERSTITIALS PRESENT AT START OF CALCULATION

FILE	ATOM	X	Y	Z	FILE	ATOM	X	Y	Z
7	CU 1	100.000000	93.500000	114.500000	8	CU 1	102.500000	96.500000	110.000000
9	CU 1	100.000000	88.500000	110.500000	10	CU 1	93.000000	90.500000	110.500000
11	CU 1	101.500000	88.500000	113.000000	12	CU 1	99.500000	93.500000	114.000000
13	CU 1	95.000000	97.500000	115.500000					

THE CRYSTAL IS INITIALLY PERFECT.

THE CRYSTAL HAS NO SURFACES.

THE INTERATOMIC POTENTIAL

$V(R) = ((Z(1) * Z(2) * E ** 2) / R) * ((0.35 * \exp(-0.30 * R / B) + 0.55 * \exp(-1.2 * R / B) + 0.10 * \exp(-6.0 * R / B))$

THE VALUES OF B ARE IN ANGSTROMS

....ATOMS....	B	ATOMS....	B
CU 1 + CU 1	0.73800000E-01		

THE ELECTRONIC ENERGY LOSS FUNCTION

$Q(E) = (FK * \text{SQRT}(E) / (\pi * FR ** 2)) * 0.045 * \exp(-0.3 * R / FR)$

THE UNITS OF FK ARE SQRT(EV) * (ANGSTROMS ** 2). THE VALUES OF FR ARE IN ANGSTROMS.

....ATOMS....	FK	FR	ATOMS....	FK	FR
CU 1 + CU 1	2.7415645	0.73800000E-01			

THERMAL VIBRATIONS ARE NOT INCLUDED.

JAERI-M 8178

MARLOWE BINARY COLLISION CASCADE SIMULATION (VERSION 10)

DATE 79-01-08

CASCADE NUMBER 1

POLAR ANGLE 37.7137 DEG

AZIMUTHAL ANGLE 14.5869 DEG

DESCRIPTION OF PROJECTILE
 COLLISION CASCADE FILE ATOM TYPE KARMA ENERGY (E.V.) DIRECTION COSINES
 0 14 CU 1 100 1609.20 0.591999 0.134059 0.791077
 PRESENT POSITION 97.0000 98.5000 94.5000 REFERENCE SITE 97.0000 98.5000 94.5000 ORIGINAL SITE 97.0000 98.5000 94.5000
 MINIMUM SEARCH DISTANCE 0.276648E-01

SUMMARY OF CASCADE NUMBER 1

NUMBER OF COLLISIONS	272	NUMBER OF ATOMS ESCAPING FRONT SURFACE	0
ATOMS INVOLVED	113	ATOMS ESCAPING BACK SURFACE	0
VACANCIES REMAINING	87	TRUNCATED STENOSES	0
INTERSTITIALS REMAINING	87	LONG REPLACEMENT SEQUENCES	0
PROPER REPLACEMENTS	39	REDISPLACED CASCADE ATOMS	0
IMPROPER REPLACEMENTS	0	LOST PROJECTILES	0
ENERGY (E.V.)		ENERGY (E.V.)	
INELASTIC LOSS	107.706	CARRIED THROUGH FRONT SURFACE	0.0
REMAINING KINETIC	259.726	CARRIED THROUGH BACK SURFACE	0.0
SUBTHRESHOLD LOSS	457.768	CARRIED BY REDISPLACED ATOMS	0.0
LOST TO BINDING	791.000	REDISPLACEMENT THRESHOLD	0.0
FOR DAMAGE	1497.49	REPLACEMENT THRESHOLD	146.635
CONSERVATION TEST	1612.20	CARRIED BY LOST PROJECTILES	0.0

ISOLATED REPLACEMENTS 19 ANALYSIS OF REPLACEMENT SEQUENCES
 SEQUENCES OF LENGTH 2 7 SEQUENCES OF LENGTH 3 2

FCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP/14
 0.5--3 KEV COPPER

NUMBER OF INPUT VACANCIES 87
 NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 55
 NUMBER OF STABLE VACANCIES 32
 TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
 1-VACANCY 13
 2-VACANCY 5
 3-VACANCY 3

SINGLE VACANCIES
 198 184 219 197 187 225 191 189 227 189 189 227 198 190 227
 195 198 190 196 198 192 198 205 196 198 195 190 200 199 192
 199 200 196 196 201 198 199 192 196

VACANCY CLUSTERS

3-VACANCY CLUSTER 199 184 222
 199 185 223
 199 186 224
 3-VACANCY CLUSTER 201 184 224
 202 183 224
 203 182 224
 2-VACANCY CLUSTER 204 185 226
 204 186 227
 3-VACANCY CLUSTER 197 198 194
 197 199 195
 198 197 194
 2-VACANCY CLUSTER 196 201 192
 196 202 191
 2-VACANCY CLUSTER 196 205 194
 195 206 194
 2-VACANCY CLUSTER 197 197 191
 198 197 192
 2-VACANCY CLUSTER 195 211 195
 194 211 196

BCC VACANCY CLUSTER SIZE DISTRIBUTION AND DEPLOYMENT PROGRAM, NMP/100
 0.5--3 KEV COPPER

NUMBER OF INPUT INTERSTITIALS 87
 NUMBER OF UNSTABLE PAIRS 55
 NUMBER OF STABLE INTERSTITIALS 32
 TYPE OF CLUSTER NUMBER OF CLUSTERS
 1-INTERSTITIAL 32

SINGLE INTERSTITIALS
 208 184 225 208 184 227 177 196 238 197 194 232 203 178 224
 201 181 223 200 188 231 205 194 222 200 178 223 187 182 224
 204 178 229 200 188 229 191 195 233 202 200 191 196 206 189
 198 196 199 198 212 195 200 206 199 202 202 197 197 201 205
 194 202 201 203 204 198 195 193 193 200 192 187 200 195 186
 192 207 194 191 215 197 200 198 195 203 194 200 199 188 196
 198 207 200 191 212 198

END OF RECORD ENCOUNTERED READING TAPE 3

IERCOD = 5

WILL EXIT

END OF FILE ENCOUNTERED ON TAPE 3

LISTING OF INPUT PARAMETERS

CRYSTAL STRUCTURE	BCC	=	F
PROBLEM NUMBER	NPROB	=	2
FIRST TIME STEP	NTMIN	=	1
LAST TIME STEP	NTMAX	=	20
NUMBER OF ELEMENTS	NE	=	64
TABLE LISTING PARAMETERS	NPR	=	20 20 20
JUMP HISTORY REQUEST	LIST	=	F
CHECKOUT MODE	CHECK	=	1
RANDOM NUMBER GENERATOR	G	=	000000000000

0.5--3 KEV COPPER

51D2.15.DIRECTION 2

PROBLEM NO. 2

ELEMENT TABLES (INPUT DATA)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	13
1	2	5
1	3	3
2	1	32

32 TYPE 1

32 TYPE 2

0.5--3 KEV COPPER

51D2.15.DIRECTION 2

PROBLEM NO. 2

ELEMENT TABLES (INITIAL CONDITIONS FOR SIMULATION)

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	13
1	2	5
1	3	3
2	1	32

32 TYPE 1

32 TYPE 2

0.5--3 KEV COPPER

51D2.15.DIRECTION 2

PROBLEM NO. 2

TIME STEP 20

DEFECT POPULATION

TYPE CLASS NUMBER

1	1	12
1	2	5
1	3	2
2	1	18
2	2	5

28 TYPE 1

28 TYPE 2

FRENKEL PAIRS ANNIHILATED

TIME	PAIR
4	41 19
5	49 32
8	60 10
8	62 13

T	FPA(T)	CUM
4	1	1
5	1	2
8	2	4

3 TH PROBLEM
374061602400

MAIN4