

JAERI - M  
85-118

固体内原子衝突の計算に関する調査

1985年8月

布施 元正\*・岩田 忠夫

JAERI-Mレポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。  
入手の間合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division  
Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-  
mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

©Japan Atomic Energy Research Institute, 1985

編集兼発行 日本原子力研究所  
印 刷 いばらき印刷(株)

固体内原子衝突の計算に関する調査

日本原子力研究所東海研究所物理部

布施元正<sup>\*</sup>・岩田忠夫

(1985年7月17日受理)

核融合炉材料の照射損傷は固体内原子衝突によって生じるが、この現象に関する理論的研究は大型計算機の発達とともに、近年急速な進展をみせている。本報では、固体内原子衝突過程の計算機シミュレーション手法のうち、分子動力学法と呼ばれている計算手法による多体原子衝突の計算に関する文献を中心に調査し、その結果をまとめた。調査項目は、1) 原子間ポテンシャルとその適用性、2) 分子動力学手法、3) フレンケル対生成過程などのシミュレーション結果、である。

計算機シミュレーションによる多体原子衝突過程の解析の結果、集束置換衝突現象、結晶中ではじき出し エネルギーの異方性、等が解明されている。

---

本報告書は昭和59年度における日立製作所<sup>株</sup>との共同研究の成果をまとめたものである。

<sup>\*</sup>) 株式会社 日立製作所 エネルギー研究所

Review on the Calculations of Atomic Collisions in Solids

Motomasa FUSE\* and Tadao IWATA

Department of Physics,  
Tokai Research Establishment, JAERI

(Received July 17, 1985)

Radiation damage of fusion reactor materials is caused by the atomic collision processes in solids. The theoretical approach to this phenomena has achieved a rapid progress by the recent advent of fast computing machine. This report surveys the literatures which concern the analyses of atomic collision processes with the use of molecular dynamical simulation methods, and summarizes their results. The surveyed items include, 1) interatomic potentials and their applicability, 2) dynamical simulation methods, 3) results of computer simulations such as Frenkel pair production processes.

Many-body effects such as focussing replacement phenomenon and anisotropic aspects of displacement energy threshold have been realized by the computer simulations of atomic collision processes.

Keywords: Radiation Damage, Atomic Collisions, Solids, Fusion Reactor Materials, Computer Simulation, Molecular Dynamics, Review of Theoretical Approach

---

Work supported by JAERI under contract with Hitachi, Ltd. in the fiscal year 1984.

\* Energy Research Laboratory, Hitachi, Ltd., Hitachi-shi.

## 目 次

1. 序 論 .....	1
2. 計算機シミュレーション手法 .....	2
3. 動力学的シミュレーション手法 .....	3
3.1 計算手法 .....	3
3.2 静的平衡解計算 .....	5
3.3 熱的振動 .....	7
3.4 速度減衰法 .....	8
4. カスケード計算 .....	9
5. 原子間ポテンシャル .....	13
5.1 経験的ポテンシャル .....	13
5.2 半経験的ポテンシャル .....	15
5.3 その他のポテンシャル .....	16
5.4 照射過程の解析に使われたポテンシャル .....	18
6. フレンケル対生成シミュレーション .....	23
6.1 銅におけるフレンケル対生成過程 .....	23
6.2 bcc 鉄中のフレンケル対生成過程 .....	28
6.3 タングステンにおけるフレンケル対生成過程 .....	31
6.4 fcc 鉄における衝突過程 .....	31
6.5 その他の計算結果 .....	33
7. ま と め .....	35
参考文献 .....	36

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Computer simulation methods .....	2
3. Dynamical computer simulation method .....	3
3.1 Computational method .....	3
3.2 Static equilibrium solution .....	5
3.3 Thermal vibration .....	7
3.4 Velocity damping method .....	8
4. Cascade simulation .....	9
5. Interatomic potentials .....	13
5.1 Empirical potential .....	13
5.2 Semi-empirical potential .....	15
5.3 Other potential .....	16
5.4 Potentials used in radiation damage analysis .....	18
6. Simulations for Frenkel pair production .....	23
6.1 Frenkel pair production in copper .....	23
6.2 Frenkel pair production in bcc iron .....	28
6.3 Frenkel pair production in tungsten .....	31
6.4 Collision process in fcc iron .....	31
6.5 Other results .....	33
7. Summary .....	35
References .....	36

## 1. 序 論

中性子あるいは荷電粒子の照射を受けている固体材料中では、格子原子のはじき出しにより、カスケード現象が発生する。このため材料中に多数のフレンケル対が生じるとともに、その後のアニーリング過程により、点欠陥のクラスタリングなどの再配置が起る。これらの過程を通じて材料の照射特性が決定されることになる。従って照射下での材料挙動を解析するには原子レベルでの取り扱いが要求される。しかしながら、理論解析の面からは、対象が多体系であることにより、純粋な解析的取扱いは不可能に近い。一方、実験面では、対象が点欠陥である場合には、現在の大型電子顕微鏡をもってしても1個の点欠陥をとらえるのはもちろん、その動的過程を追跡するのはむづかしい。これに対し、近年、大型計算機の進歩に伴ない、結晶格子中での点欠陥の関与している過程を直接シミュレートすることが試みられ、成功を収めている。扱う対象が多体原子系であり、現在の計算機能力からしても結晶サイズ等の制限はあるが、1次はじき出し原子(PKA: Primary Knock-on Atom)による衝突過程、はじき出しカスケード現象、アニーリング過程、などの計算が実施されている。

多体原子系におけるカスケード計算は日本においても吉田により、<sup>1)</sup>はやくから行われていた。一方、米国のBrookhaven 国立研究所のVineyardのグループにより、大規模結晶格子系で現実に近い形での計算がなされ、これにより計算機シミュレーションの有用性が示されることになった。<sup>2),3)</sup>更に、はじき出しカスケードシミュレーションの手法がBeeler<sup>4)</sup>やRobinson<sup>5)</sup>らにより開発され、bcc格子とfcc格子中における計算が実施された。この他、照射効果の解析とは直接関連しないが、堂山らにより、結晶中の転位特性解析のためのシミュレーションが実施されている。<sup>6),7)</sup>これらのシミュレーションに関してその妥当性に影響する因子は、1つは原子間ポテンシャルであり、他は、計算機内に作る結晶格子がいかに現実の格子をあらわしているか、という点である。後者については、計算容量の点から、有限の格子をとらざるを得ないことに起因している。具体的には計算セルの境界条件のとり方の問題となる。現在の計算機からしてもとりうる計算セルの大きさは2,000~4,000個程度の原子数からなるものである。

原子間ポテンシャルに関しては、従来、種々な形のものが提案されている。現在最も良く使われているものはR. A. Johnsonにより提案された弾性定数等にフィッティングして求める方法である。<sup>8),9)</sup>その他、金属原子間の相互作用に関しては擬似ポテンシャルを採用している場合もあり、最近ではまったく第1原理的にポテンシャルを導出しようとするab-initio計算手法も検討されている。<sup>10)</sup>

照射下材料、あるいはもっと広く、材料中における格子欠陥特性の解析のために、計算機シミュレーションを有効に活用することは、今後超高速計算機の普及に伴ってますます現実的になってくるものと考えられる。将来は、原子レベルの情報をもとに所定の特性をもった材料の設計が可能になると期待される。もちろん、その前提として解決しなければならない点がいくつかあるのは事実である。特に、原子間ポテンシャルの決定法についてはより進んだ汎用性のある手法の確立が求められている。

本報告書では、まず多体原子系のシミュレーション手法について概観したあと、原子間ポテンシャルに関してまとめる。最後に、具体的な従来の計算結果をまとめる。

## 2. 計算機シミュレーション手法

照射下材料に関する計算機シミュレーション手法はその目的に応じ種々考えられている。計算の目的としては、(1)格子欠陥特性解析、(2)格子欠陥生成過程解析、(3)アニーリング過程解析、に大別することができる。手法としては決定論的方法と確率論的方法に分けられる。各々の適用分野は Table 1 のようにまとめられる。<sup>11)</sup>

Table 1 Computer simulation methods.

defect properties	defect production process	annealing process
dynamical	dynamical	dynamical
Monte Carlo	Monte Carlo	Monte Carlo
variational	---	---

決定論的方法としては動力学的方法と変分法<sup>12)</sup>が存在する。

格子欠陥特性解析は本来、すべての解析の基礎として実施される。すなわち、格子欠陥の生成、アニーリング過程の解析の入力定数として、格子間原子の配位形態、格子間原子と空孔の再結合係数、点欠陥の移動エネルギー、結合エネルギー、などの諸量が必要となるが、これらの特性を格子欠陥特性解析で調べることになる。この解析の中には点欠陥のみでなく、転位ループ、転位、あるいはボイドなどの特性解析も含まれる。格子欠陥特性解析の手法として現在最も広く用いられているのは動力学的方法である。これは Vineyard ら<sup>2)</sup>が最初に用いて以来、様々な形で改良がなされている。<sup>11)</sup>

格子欠陥生成過程に関しては PKA による格子原子のたたき出しを調べるわけであるが、高エネルギーの場合には 2 体衝突近似を用いた CASCADE/CLUSTER コード<sup>13), 14)</sup> MARLOWE コード<sup>15), 16)</sup>などが有名である。低エネルギー PKA に対しては GRAPE コード<sup>17)</sup>で格子原子のたたき出し特性を評価することができる。手法としてはやはり動力学的方法が主流である。

たたき出し過程により発生した空孔と格子間原子は、その後の熱的な励起過程により相互に運動しある範囲内に近づくと再結合を起す。また、点欠陥のクラスターを形成し、転位ループ等へ成長する。この過程は確率的な要素をもつため、モンテカルロ法が最も良く使われている。



### 3. 動力学的シミュレーション手法

中性子や荷電粒子の照射による材料損傷の研究は、結晶格子を構成している原子の挙動を第1原理的に追跡する動力学シミュレーションを採用することにより大きく前進した。その際の前提として原子間に働く相互作用ポテンシャルは近距離にのみ作用する2体力がとられている。ポテンシャル力に関しては後章にて詳述する。

通常の計算は、計算機内に構成した計算セル内で実行される。計算セルは、回りの原子からの力に応じて自由に動くことができる原子の集合である。計算の目的に応じ、計算セルの境界条件が決定される。大別すると、(1)周期境界条件、(2)表面原子に特別の考慮をほどこした固定境界、の2つに分けられる。<sup>11)</sup>

動力学法では、計算セルを構成するN個の原子について、その初期位置と初期速度から出発し、3N個の運動方程式を同時に積分することにより、6N次元の位相空間中で各原子のトランジェクトリを求める。計算セル原子の初期条件としては、静的状態（絶対温度零度の状態）をとる場合と熱平衡状態をとる場合がある。熱平衡状態を採用する場合には各原子の位置と速度をMaxwell分布に従うように割り当てる。運動方程式の数値解を求める方法としては、(1)中心差分法、(2)Euler-Cauchy法、(3)予測子-修正子法、(4)Nordsieck法などが使われる。中心差分法はGibson<sup>12)</sup>らが用いたこともあり、その後作成されたコードの大部分は、この中心差分法を採用している。Rahman<sup>18)</sup>は彼のプログラムには(4)のNordsieck法を用いている。Beelerはこの方法が最も良いとしている<sup>11)</sup>。しかし、中心差分法は扱いが簡単なわりには十分な精度が得られるという点で広く使われている。以下、各計算法について簡単にまとめておく。

#### 3.1 計算法

##### (1) 中心差分法

解くべき方程式は原子の個数をNとすると3N個の連立常微分方程式であり、位置を $x_i(t)$ 、速度を $v_i(t)$ 、力を $F_i(t)$  ( $i = 1, \dots, 3N$ ) とすると

$$\dot{v}_i(t) = F_i [x_1(t), \dots, x_{3N}(t); v_i(t)] / m \quad (1)$$

$$\dot{x}_i(t) = v_i(t) \quad (2)$$

となる。上式でmは原子の質量であり、 $F/m$ が加速度となる。Gibsonらの用いた中心差分法では、原子座標については時間積分ステップ $\Delta t$ の整数倍の点を取り、速度については $\Delta t$ の半整数倍の点をとる。<sup>12)</sup>この差分のとり方をFig.1に示す。各積分ステップでの既知量は $x(t)$ と $v(t - \Delta t/2)$ である。時刻tで原子iに作用する力 $F_i(t)$ は、時刻tでの各原子の相対位置により決定される。加速度は $a(t) = F(t)/m$ で決められる。これから、先の座標と速度は

$$v_i(t + \Delta t/2) = v_i(t - \Delta t/2) + a_i(t) \Delta t \quad (3)$$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + v_i(t + \Delta t/2) \Delta t \quad (4)$$

時間ステップ  $\Delta t$  の間の速度変化  $\Delta v_i$  は

$$\Delta v_i = [F_i(t)/m] \Delta t \quad (5)$$

となる。この方法では時間ステップ  $\Delta t$  の間には一定の加速度が働いているとしていることになる。

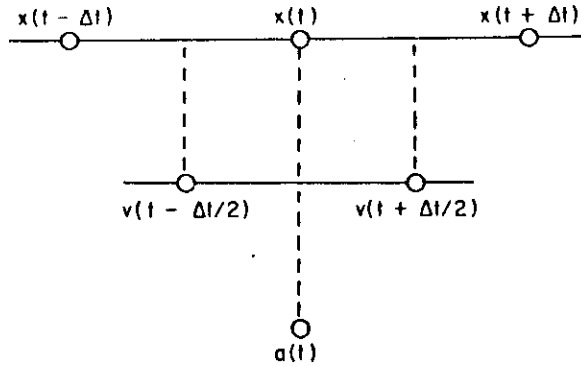


Fig.1 Central difference method for one dimension.

(2) Euler-Cauchy 法

この方法では座標と速度について収束するまで繰り返し計算を行う。既知量は時間ステップ  $\Delta t$  の整数倍の点で計算された  $x(t)$  と  $v(t)$  である。1 回目の計算で  $x(t + \Delta t)$  と  $v(t + \Delta t)$  は次のように与えられる。

$$x^{(1)}(t + \Delta t) = x(t) + v(t) \Delta t + a(t) (\Delta t)^2 / 2 \quad (6)$$

$$v^{(1)}(t + \Delta t) = v(t) + a(t) \Delta t \quad (7)$$

n 回目の繰り返し計算では次のようになる。

$$a^{(n)}(t + \Delta t) = F [x^{(n-1)}(t + \Delta t)] / m \quad (8)$$

$$v^{(n)}(t + \Delta t) = v(t) + (\Delta t / 2) [a(t) + a^{(n)}(t + \Delta t)] \quad (9)$$

$$x^{(n)}(t + \Delta t) = x(t) + (\Delta t / 2) [v(t) + v^{(n)}(t + \Delta t)] \quad (10)$$

(3) 予測子-修正子法

本方法は Rahman<sup>18)</sup> により最初に使われた。  $x_p(t)$  と  $v_p(t)$  は予測値であり、  $x_c(t)$  と  $v_c(t)$  は修正値である。既知量は  $v(t)$  と  $x(t - \Delta t)$  である。1 回目の繰り返し計算では

$$x_p(t + \Delta t) = x(t - \Delta t) + 2 \Delta t v(t) \quad (11)$$

$$a_p^{(1)}(t + \Delta t) = F [x_p(t + \Delta t)] / m \quad (12)$$

$$v_c^{(1)}(t + \Delta t) = v(t) + (\Delta t / 2) [a_p(t + \Delta t) + a(t)] \quad (13)$$

$$x_c^{(1)}(t + \Delta t) = x(t) + (\Delta t / 2) [v_c(t + \Delta t) + v(t)] \quad (14)$$

となり、n 回目の繰り返し計算では次のようになる。

$$a_p^{(n)}(t + \Delta t) = F [x_c^{(n-1)}(t + \Delta t)] / m \quad (15)$$

$$v_c^{(n)}(t + \Delta t) = v(t) + (\Delta t / 2) [a_p^{(n)}(t + \Delta t) + a(t)] \quad (16)$$

$$x_c^{(n)}(t + \Delta t) = x(t) + (\Delta t / 2) [v_c^{(n)}(t + \Delta t) + v(t)] \quad (17)$$

## (4) Nordsieck 法

本方法は Nordsieck<sup>19)</sup> により提案されたものである。x(t) を原子の座標とし、その 5 階微分値を次のように表わす。

$$u_1 = (dx/dt) \Delta t \quad (18a)$$

$$u_2 = (1/2) (d^2 x/dt^2) (\Delta t)^2 \quad (18b)$$

$$u_3 = (1/6) (d^3 x/dt^3) (\Delta t)^3 \quad (18c)$$

$$u_4 = (1/24) (d^4 x/dt^4) (\Delta t)^4 \quad (18d)$$

$$u_5 = (1/120) (d^5 x/dt^5) (\Delta t)^5 \quad (18e)$$

x と  $u_n$  に対する予測値を次のように与える。

$$x(t + \Delta t) = x(t) + u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5 \quad (19a)$$

$$u_1(t + \Delta t) = u_1(t) + 2u_2(t) + 3u_3(t) + 4u_4(t) + 5u_5(t) \quad (19b)$$

$$u_2(t + \Delta t) = u_2(t) + 3u_3(t) + 6u_4(t) + 10u_5(t) \quad (19c)$$

$$u_3(t + \Delta t) = u_3(t) + 4u_4(t) + 10u_5(t) \quad (19d)$$

$$u_4(t + \Delta t) = u_4(t) + 5u_5(t) \quad (19e)$$

$$u_5(t + \Delta t) = u_5(t) \quad (19f)$$

上記の x(t + Δt) を用いて力 F(t + Δt) を計算し、次の関数を定義する。

$$\phi = (1/2) (F/m) (\Delta t)^2 - u_2(t + \Delta t) \quad (20)$$

これから、x と  $u_n$  の修正値は次のように得られる。

$$x^c(t + \Delta t) = x(t + \Delta t) + (3/16) \phi \quad (21a)$$

$$u_1^c(t + \Delta t) = u_1(t + \Delta t) + (251/360) \phi \quad (21b)$$

$$u_2^c(t + \Delta t) = u_2(t + \Delta t) + \phi \quad (21c)$$

$$u_3^c(t + \Delta t) = u_3(t + \Delta t) + (11/18) \phi \quad (21d)$$

$$u_4^c(t + \Delta t) = u_4(t + \Delta t) + (1/6) \phi \quad (21e)$$

$$u_5^c(t + \Delta t) = u_5(t + \Delta t) + (1/60) \phi \quad (21f)$$

上式にあらわれている φ の係数は 5 次のオーダーまでの計算に特有なものであり、他のオーダーまで考慮すると値は全く異ってくる。

### 3.2 静的平衡解計算

結晶中の格子欠陥の静的平衡解を求める方法を簡単にまとめる。これはある時刻において結晶の運動エネルギーを強制的に零とすることにより実行される。現在用いられている代表的な 2 例をまとめる。

#### (1) 準動力的収束法

この方法では結晶全体の運動エネルギーがピーク値をとるまでは完全な動力的モードで計算が進められる。全運動エネルギーが一度ピーク値に達するとその時点で結晶中の各原子の位置は保

ったまま、各原子の速度を零にセットする。その後、再び完全動力的な計算を繰り返し、前と同じ手続きを行う。この操作を繰り返すことにより、結晶の全運動エネルギーは零に収束していく。結果的に各原子の位置は静的平衡点に落ち着く。この様子を模式的に示したのがFig.2である。本方法は最初、Gibsonらにより適用された。<sup>12)</sup>ポテンシャル場の中で振動している粒子では、運動エネルギーが最大となる点がポテンシャル極小となることに対応していることが本方法の根拠となっている。

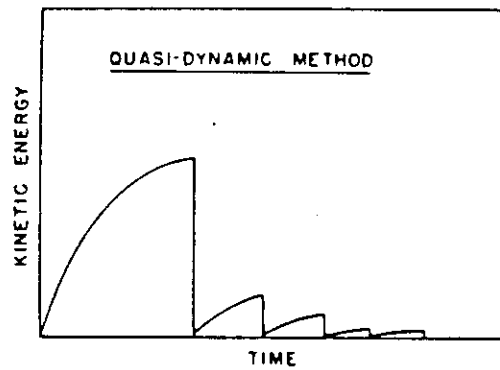


Fig.2 Total kinetic energy versus time in a quasidynamical method.

(2) 微視的収束法

ポテンシャル場の中で周期的振動を行っている粒子に対しては力が零となる点で加速度の符号が変化する。微視的収束法は上記の事実を利用したものである。最初 Evans により導入された。<sup>20)</sup> Fig. 3には本方法の背景となる振動系の状態を示す。今、粒子が平衡位置に近づいてくると速度

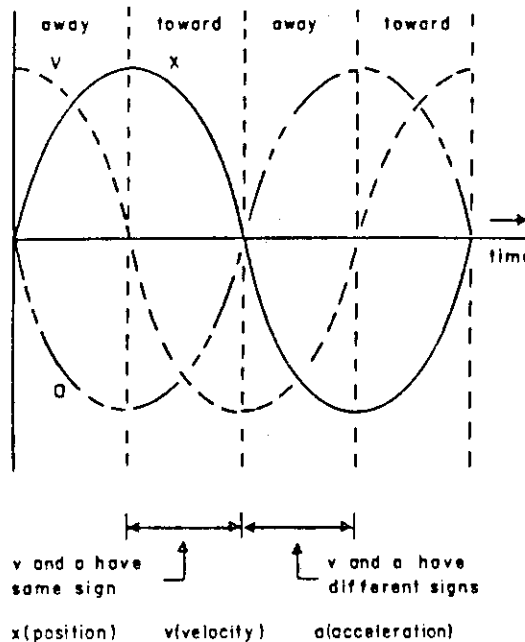


Fig.3 Microconvergence damping method. When an oscillating particle passes through the equilibrium position, the acceleration changes sign.

は極値をとるが、加速度は零に近づいて行き平衡点を過ぎると符号が変化する。加速度と速度の積を考えると、平衡点に近づく側では正であるが、平衡点を過ぎると負となる。このことから、微視的収束法では粒子の加速度と速度の積を常時モニターし、その符号が正から負に変化したときに粒子の速度を零にセットする。この収束法は粒子の  $x, y, z$  の各成分毎に独立に実施する。

準動学的収束法では質量の大きい粒子と小さい粒子が混在している場合には収束が遅くなる可能性がある。これは、軽い粒子の方が速く振動するのに対し、重い粒子はゆっくり振動することにより全運動エネルギー極大点が両方の粒子にとって共通のダンピングの点とは限らないためである。これに対して、微視的収束法では上記のような場合に対しても有効な収束法となる。

### 3.3 熱的振動

有限温度  $T$  の状態では結晶格子はその平衡点の回りで熱的な振動を行っている。動学的シミュレーションの場合、この有限温度での振動の効果を取り入れるために原子の初期状態としてランダムにその位置と速度を与える方法が考えられている。温度が Debye 温度以上の場合には、Einstein モデルに基づいて初期状態を設定する。このモデルでは、平衡位置からの変位  $u$ 、そのときの速度  $v$  は次のように与えられる。

$$u = d \{ \sin(\omega_E t + \varphi) \} \quad (22)$$

$$v = d \omega_E \{ \cos(\omega_E t + \varphi) \} \quad (23)$$

$$\omega_E = (K_E/m)^{1/2} \quad (24)$$

ここで、 $\omega_E$  は Einstein 角周波数、 $k_E$  は実効的なバネ定数、 $m$  は原子の質量、 $d$  は最大変位の大きさである。Chell and Zucker<sup>21)</sup> は完全結晶中での 3 次元的な変位  $d$  に伴うポテンシャルエネルギーの変化  $\Delta P$  は次のように表わされることを示した。

$$\Delta P = \Delta P_1 + \Delta P_2 + \Delta P_3 + \dots \quad (25)$$

$$\Delta P_n = (1/2) k_n (Z_n/L) d^2 \quad (26)$$

この式は第  $n$  近接の原子からの寄与を示しており、 $Z_n$  は第  $n$  近接原子の配位数、 $k_n$  はバネ定数、 $L$  は次元数である。原子間ポテンシャル  $V(r)$  で表わすと上式は次のようになる。

$$\Delta P_n = (d^2/6) Z_n (V'' + 2V'/r)_{r_n} \quad (27)$$

ここで  $V', V''$  はポテンシャル関数の  $r$  に関する 1 次、2 次微分である。また、 $r_n$  は第  $n$  近接原子までの距離を示す。これから、第 1 近接と第 2 近接の原子については

$$k_1 = (V'' + 2V'/r)_{r_1} \quad (28)$$

$$k_2 = (V'' + 2V'/r)_{r_2} \quad (29)$$

$$k_E = (1/3)(Z_1 k_1 + Z_2 k_2) \quad (30)$$

と与えられる。

次に具体的に初期状態を与える方法を示す。まず、各原子の平衡位置の回りの変位と速度は、位相空間の中で全くランダムに分布しているとする。すると、時刻  $t$  での変位  $u$  と速度  $v$  は次のように与えることができる。

$$u = d \{ \sin(2\pi r) \} = \alpha d \quad (31)$$

$$v = d\omega_E [\cos(2\pi\gamma)] = \beta d \quad (32)$$

上式で、 $\gamma$  は (0, 1) の範囲から全くランダムに選んだ数である。最大変位  $d$  は次式で与えられる。

$$d = (6k_B T/k_E)^{1/2} \quad (33)$$

ここで  $k_B$  は Boltzmann 定数である。変位と速度の各座標軸への分布は方向余弦 ( $a, b, c$ ) をやはりランダムに選ぶことにより、

$$u_x = au, \quad u_y = bu, \quad u_z = cu \quad (34)$$

$$v_x = av, \quad v_y = bv, \quad v_z = cv \quad (35)$$

と与えることができる。以上の手続きにより、原子の平均熱エネルギーとして  $3k_B T$  を与えることができ、かつ、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの間に等分配則が成立する。

上記のように各原子に初期状態を与えたあと、動力学的モードで原子を動かすと結晶全体での熱平衡状態が実現される。このとき次式で得られる温度  $T_a$  は初期に与えた温度  $T$  とは必ずしも一致しない。

$$T_a = 2\langle KE \rangle / 3k_B \quad (36)$$

上式で  $\langle KE \rangle$  は運動エネルギーの平均値を示す。これは、通常用いるポテンシャル関数  $V(r)$  は非調和関数となっているためである。同時にポテンシャルエネルギーの平均  $\langle PE \rangle$  と  $\langle KE \rangle$  の比  $\langle KE \rangle / \langle PE \rangle$  も 1 からずれる。

以上述べた方法の他に、初期速度のみ、あるいは初期位置のみを熱平衡条件に従って与え、動力学的モードで原子を動かして最終的に熱平衡状態を実現する方法もある。この方法では最終的な熱平衡状態を実現するための所要時間は前記の方法に比べて長くなる。

### 3.4 速度減衰法

計算セル内でのフレンケル対生成過程の計算では、運動量が境界で反射されないようにしておかなければならない。このため、境界での速度減衰法を考えなければならない。一般に減衰項は速度に比例し、その運動方程式は次のように表わされる。

$$m(d^2u/dt^2) - ku - R(du/dt) = 0 \quad (37)$$

上式で、 $m$  は質量、 $k$  はバネ定数、 $R$  は減衰定数である。このような振動系では  $R = (4mk)^{1/2}$  のとき最も効率的に減衰する。通常は境界の原子に対して、第 1, 2 近接程度の距離にある原子の運動方程式に減衰項  $-R(du/dt)$  を加えて減衰させる。

#### 4. カスケード計算

結晶格子を形成している原子のはじき出しエネルギーが大きい場合には通常の動力的方法では計算時間、計算セルの点で計算は不可能となる。このため、2体原子間衝突のみを考慮したカスケード法が開発された。この方法による計算は吉田<sup>1)</sup>によるものが最初である。この計算はGeのアモルファス体系について行われたものである。Fig. 4に10keVのカスケードについての計算結果を示す。

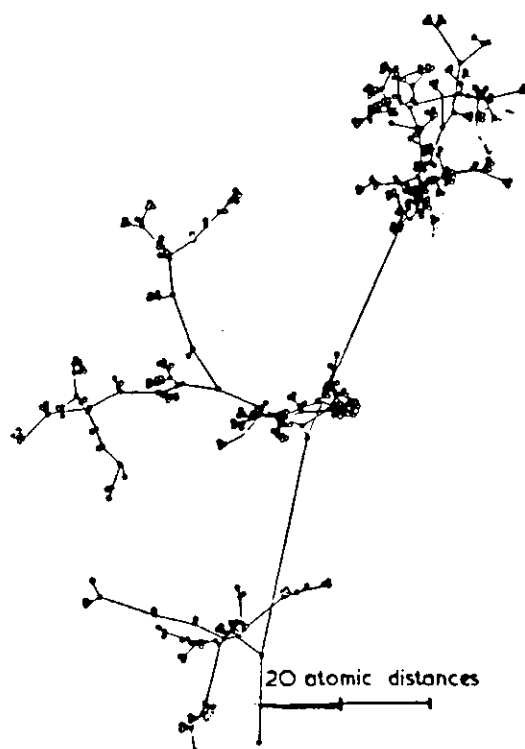


Fig.4 Vacancies(dots) and interstitials(open circles) produced by a 10 keV collision cascade in an amorphous model of germanium(Ref.1)).

結晶構造を組んだ状態での2体衝突近似での計算はBeeler and Bescoにより行われた。<sup>4),22)</sup> 彼らはウルツ構造を持つBeO中にIイオンとKrイオンを打ち込んだときのカスケード計算をしている。Fig. 5には9 keVのBe PKAによるカスケード発生の様子が示されている。図には9 keV PKAに直接関連したトラジェクトリのみ記入してある。Beelerはこの後、bcc Fe, Cu, Wに関するカスケード計算を実施している。<sup>23)</sup>

Beeler and Bescoは衝突カスケード計算にはCASCADEコード<sup>24)</sup>を、生成した点欠陥のその後の発展についてはCLUSTERコードを用い、<sup>14)</sup> 欠陥の分布等を評価した。その後、2つのコードはCASCADE/CLUSTER<sup>14)</sup>にまとめられ、任意の初期欠陥状態を考慮できるように改良された。LekkerkerkerらはCASCADEコードをもとにSICと呼ばれるコードを作成している。<sup>25)</sup> CASCADE/CLUSTER, SICともに弾性衝突のみを考慮しており、非弾性衝突の効果は含め

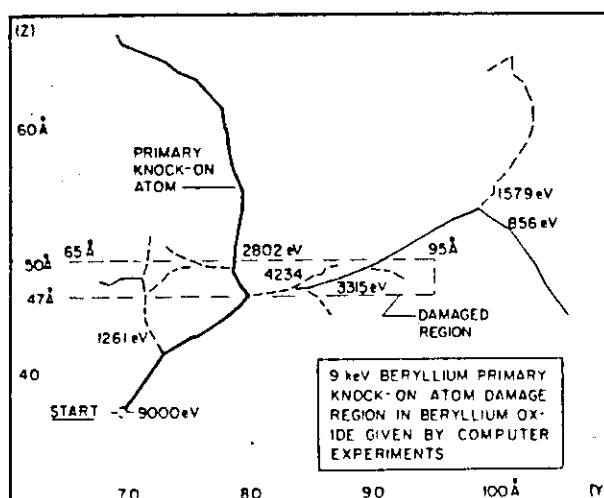


Fig.5 Trajectory map for a 9 keV collision cascade in a crystalline model of BeO. The initiating PKA was a Be atom( Ref.28)).

ていない。

一方、Robinson and Torrens は MARLOWE コードを開発している。<sup>16)</sup>これは前記の CASCADE/CLUSTER に比べ、いくつかの改良を行っている。具体的には、非弾性散乱を考慮できるように Filsov モデルを採用したこと、<sup>26)</sup>多重衝突過程の扱い方を改良したことなどである。Beeler らは、オーステナイト鋼とニッケル合金に、MeV 領域の自己イオンを照射したときの損傷エネルギーを評価する目的で COLLIDE と呼ばれるコードを開発している。<sup>27)</sup>このコードではアモルファス状のターゲットを用いている。一般に 2 体衝突近似のカスケード計算は 1) アモルファス体系に適用する単純な場合、2) 結晶格子をもっている体系に使える場合、の 2 通りに分けられる。1) では 1 回の衝突ごとに 1 つのターゲットしか考えないのに対し、2) ではフォーカシングとかチャンネルングといった現象のように、多数のターゲットを同時に考慮することができる。

次に 2 体衝突近似によるカスケード計算の一般的な特徴をまとめる。まず、原子間の適当なポテンシャル関数を仮定し、衝突過程には剛体球散乱モデルを用いる。原子が格子点からはじき出されるかどうかの判定は、結晶によって一定の値を持つ閾値エネルギー  $E_d$  により決める。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け取ったエネルギーを  $E_2$  とすると、次の 4 通りの場合が考えられる。

- (1)  $E_1 \leq E_d$  かつ  $E_2 \leq E_d$  ; 衝突によるはじき出しは起らず、入射原子は格子間原子となる。
- (2)  $E_1 > E_d$  かつ  $E_2 \leq E_d$  ; 衝突された原子ははじき出されず、入射原子は散乱される。
- (3)  $E_1 \leq E_d$  かつ  $E_2 > E_d$  ; 衝突された原子と入射原子が入れ替り、衝突された原子がはじき出される。
- (4)  $E_1 > E_d$  かつ  $E_2 > E_d$  ; 衝突された原子と入射原子ともに自由原子として衝突点から移動していく。

以上の過程を追跡し、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を静止させ、その原子についての計算を打ち切る。

カスケードは 1 次粒子によりたたき出された PKA が、元の格子点から一定のエネルギーを持



って動き出すことにより始まる。この PKA が最初の入射粒子となり、ターゲットとなる格子原子と衝突する。もし、上記(4)の条件が満たされていれば、相方の原子とも移動し、十分なエネルギーを持っていれば次のたたき出しを生じる。この分岐過程を模式的に示したのが Fig. 6 である。<sup>28)</sup> 図で、“0”は初期の PKA はじき出し過程を、“1”は第1回目の衝突過程を示す。第1回目の衝突は第1世代  $g=1$  に対応する。第2世代は衝突“2”“3”からなり、以下同様に各世代が現われる。衝突番号を  $c$  とすれば、 $E(c, 1)$ にはエネルギーが大きい方の値を、 $E(c, 2)$ には小さい方のエネルギー値を収納する。 $E_{in}(c)$ は衝突過程での非弾性エネルギー損失量を表わしている。カスケード計算では、1度に1つの衝突過程しか扱えないため、各衝突過程で発生したはじき出し原子の情報、はじき出し位置、はじき出し原子の速度ベクトル、は記憶しておく必要がある。この点がカスケード計算の最も大きな問題となる。

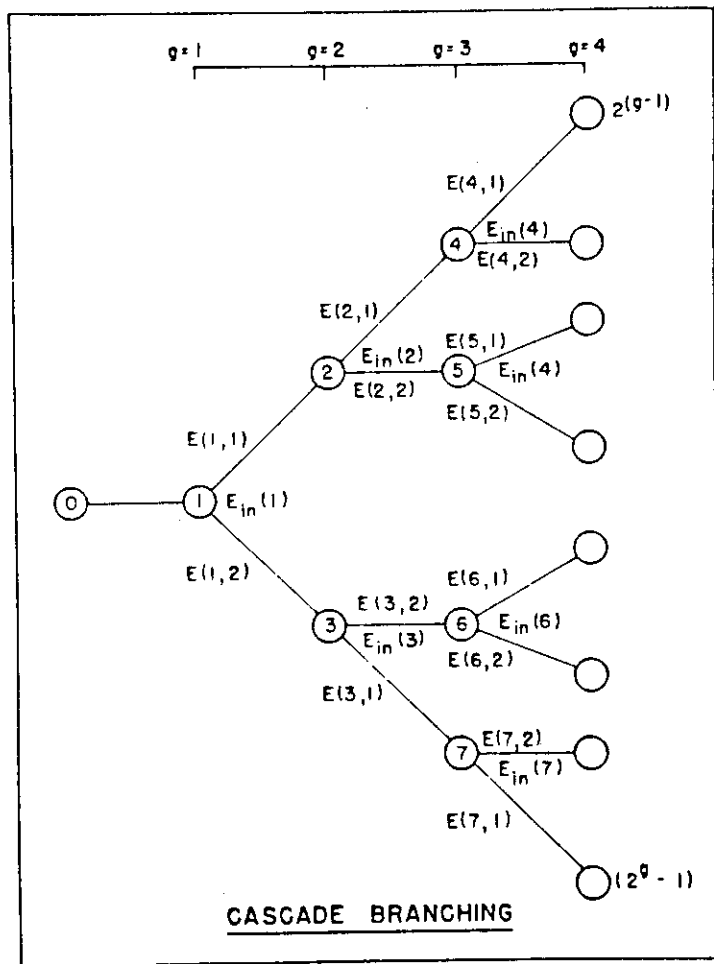


Fig.6 Schematic diagram of branching collision chain for a binary collision model.

Fig. 7は、fcc 鉄中の 200 eV カスケード過程の例である。本例では、 $E_c = 25$  eVをとってある。アンダーラインを付した数値は衝突回数であり、各分岐に付してある数値はエネルギー値である。

ターゲット粒子を選択する方法について簡単に触れる。ターゲット原子は、入射粒子がはじき出される点、方向、速度、それにターゲット候補との間の距離を見ることにより決められる。ターゲット粒子選択法としては、1) セル法と2) 隣接シェル法の2つがある。セル法では、入射粒子の回りに正方格子をとる。各格子点は正常結晶の格子点、あるいは格子間原子位置に対応する。ターゲット粒子はこのセル構造をベースにして決める。隣接シェル法では、入射粒子に対して最も近い距離にある格子原子の回りの第1、第2近接距離にある原子をすべてリストアップし、その中からターゲットを選択する。

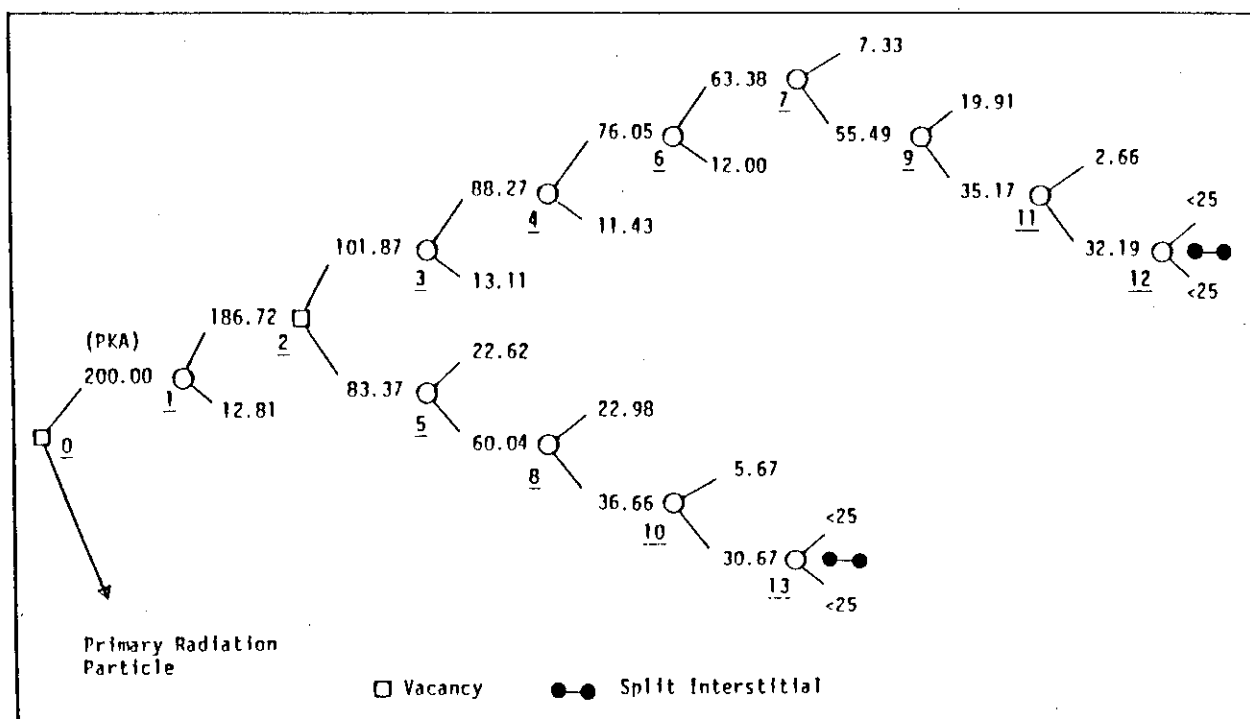


Fig.7 Schematic diagram of a 200 eV collision cascade in fcc iron. Underscored numbers 0,1,2, etc. are collision numbers. Numbers not underscored are knock-on atom energies in eV. In the model selected for this simulation, an interstitial was formed when the energies of the projectile and target atoms after collision were less than 25 eV.

## 5. 原子間ポテンシャル

多体原子系の動力的シミュレーションで最も重要となるのは言うまでもなく、原子間相互作用ポテンシャルである。これの妥当性が直接、計算結果の正否にかかわることになる。一方、計算時間の制約から、ポテンシャル関数の形状は単純な方が望ましく、通常は2体原子間距離  $r$  のみの関数として表わされる。従来から、動力的シミュレーションの中心的課題として多くの研究者が、より現実的なポテンシャルの作成方法について研究を進めている。本章では、各種のポテンシャル作成の考え方をまとめ、最後に、従来のシミュレーションで使われているポテンシャルをリストアップする。

### 5.1 経験的ポテンシャル

#### (1) Johnson 型ポテンシャル

経験的ポテンシャルは弾性定数などの実験値にフィッティングするよう決められる。通常、その関数形は原子間距離  $r$  の高次式の形で表現される。この代表的なものとして、現在広く使われているのが Johnson 型と呼ばれるポテンシャルである。当初、Johnson により、bcc 金属<sup>8)</sup>と fcc 金属中<sup>9),29)</sup>の欠陥特性を評価する目的で作られた。鉄の場合には Johnson-1 (bcc), Johnson-2 (fcc) ポテンシャルと呼んでいる。

$\alpha$ -鉄の場合の Johnson-1 ポテンシャルでは、第1近接と第2近接距離にある原子間の相互作用のみを考慮する。弾性定数  $C_{ij}$  と、第1近接距離  $r_1$ 、第2近接距離  $r_2$  でのポテンシャル  $V(r)$  の1階微分  $V'$  と2階微分  $V''$  との間には次のような関係が存在している。

$$C_{11} - C_{12} = \frac{2}{3r_2} \left( \frac{6}{r_1} V_1'' + 3V_2'' + \frac{3}{r_2} V_2' \right) \quad (38a)$$

$$C_{44} = \frac{2}{3r_2} \left( V_1'' + \frac{2}{r_1} V_1' + \frac{3}{r_2} V_2' \right) \quad (38b)$$

$$B = \frac{2}{3r_2} \left( V_1'' - \frac{2}{r_1} V_1' + V_2'' - \frac{2}{r_2} V_2' \right) \quad (38c)$$

上式で、 $V_1^{(n)}$ 、 $V_2^{(n)}$  は各々  $r_1$  と  $r_2$  での微分値を示している。B は体積弾性率である。これらの関係式から、ポテンシャルは  $r$  の3次式でフィッティングする。その際、短距離部分のはじき出し計算に Erginsoy が用いたポテンシャル<sup>3)</sup>に接続するようにし、第2近接距離と第3近接距離の中間でスムーズに零になるように係数を選ぶ。具体的な表現は後節にまとめる。この Johnson-1 ポテンシャルでは凝集エネルギーなどへのフィッティングはなされていないにもかかわらず、空孔形成エネルギーなどは実験値に近い値を与えている。

Johnson-2 ポテンシャルは  $\gamma$ -鉄用に導出された。相互作用は第1近接のみを考えている。このときの弾性定数との関係式は次のようになる。

$$V_1' = -\frac{r_1^2}{2\sqrt{2}} \left[ C_{44} - \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) \right] \quad (39a)$$

$$V_1'' = \frac{r_1}{2\sqrt{2}} \left[ 7C_{44} - \frac{3}{2} (C_{11} - C_{12}) \right] \quad (39b)$$

$$3B = 9C_{44} - \frac{5}{2} (C_{11} - C_{12}) \quad (39c)$$

得られたポテンシャルはフォノン分散関係を良く再現する。

Johnson and Wilson は Wedepohl の方法に基づいて、V, Mo, W, Ta, Fe などの bcc 金属の相互作用ポテンシャルを決定している<sup>29)</sup>。Wedepohl の方法は原子間の相互作用エネルギーを、原子核の回りに球対称的に分布した電子密度  $\rho(r)$  を用いて表現するもので電子の交換相互作用も含めている<sup>30)</sup>。Johnson and Wilson は原子の内側のカットオフ半径  $r_n$  に対応した  $V(r_n)$  と  $V'(r_n)$  を Wedepohl の方法で求め、外側のカットオフ半径  $r_c$  では  $V(r_c) = V'(r_c) = 0$  となるように係数を決めている。なお、(38a-c) 式により  $r_1$  と  $r_2$  での  $V', V''$  を決めるのは前と同じである。結局求められた関数形は次のようなものである。

$$V(r) = a_4 r^4 + a_3 r^3 + a_2 r^2 + a_1 r + a_0 : r_n \leq r < r_m \quad (40a)$$

$$V(r) = b_5 r^5 + b_4 r^4 + b_3 r^3 + b_2 r^2 + b_1 r + b_0 : r_m \leq r < r_c \quad (40b)$$

$r_m$  は  $r_1$  と  $r_2$  の中間点にとられ、 $r_c$  は  $r_2$  と第3近接距離との中間点に設定している。この方法では、 $r_n$  のとり方には任意性がある。 $r_n$  を変化させて  $V(r)$  の形状がなめらかな形をとるように、 $r_n$  を決めている。本方法では、この他、空孔形成エネルギーへのフィッティングも行っているが、V, Mo, W, Ta, Fe のすべてについて 1.8 eV という値を用いている。この点は現実との違いがでてくる可能性がある。以上述べた Johnson and Wilson の方法をまとめると次のようになる。

- $V_1', V_2', V_1'', V_2''$  は (38) 式から決定。
- 内側カットオフ半径  $r_n$  での  $V(r_n), V'(r_n)$  を Wedepohl 法により決定。
- 外側カットオフ半径  $r_c$  は第2と第3近接距離の間にとり、 $V(r_c) = V'(r_c) = 0$  とする。
- 空孔形成エネルギー  $E_V^f$  の実験値を用い  $E_V^f = -(4V_1 + 3V_2)$  の関係式をたてる。
- (40) 式の形の係数を決定する。但し、 $r_m$  は  $r_1$  と  $r_2$  の中間とし、 $r_m$  で関数は連続とする (曲率も含め)。

以上により決められたポテンシャルの形状を Fig. 8 に示す。

fcc 金属中の格子欠陥評価に関連して Johnson and Wilson は非中心力ポテンシャルの作成を示唆している<sup>29)</sup>。その形は

$$\psi(\vec{r}) = \alpha(r) + \beta(r) f(\theta, \phi) \quad (41)$$

$$f(\theta, \phi) = \frac{x^4 + y^4 + z^4}{r^4} - \frac{3}{5} \quad (42)$$

であり、いくつかの計算に使われている。このような非中心力ポテンシャルを用いる理由は、多くの場合、fcc 金属では第1近接だけの短距離相互作用による弾性定数のフィッティングがむづかしい、ということにある。逆に、相互作用のわくを大きくしていくとポテンシャル自体がスムーズでなくなる、という難点が出てくる。

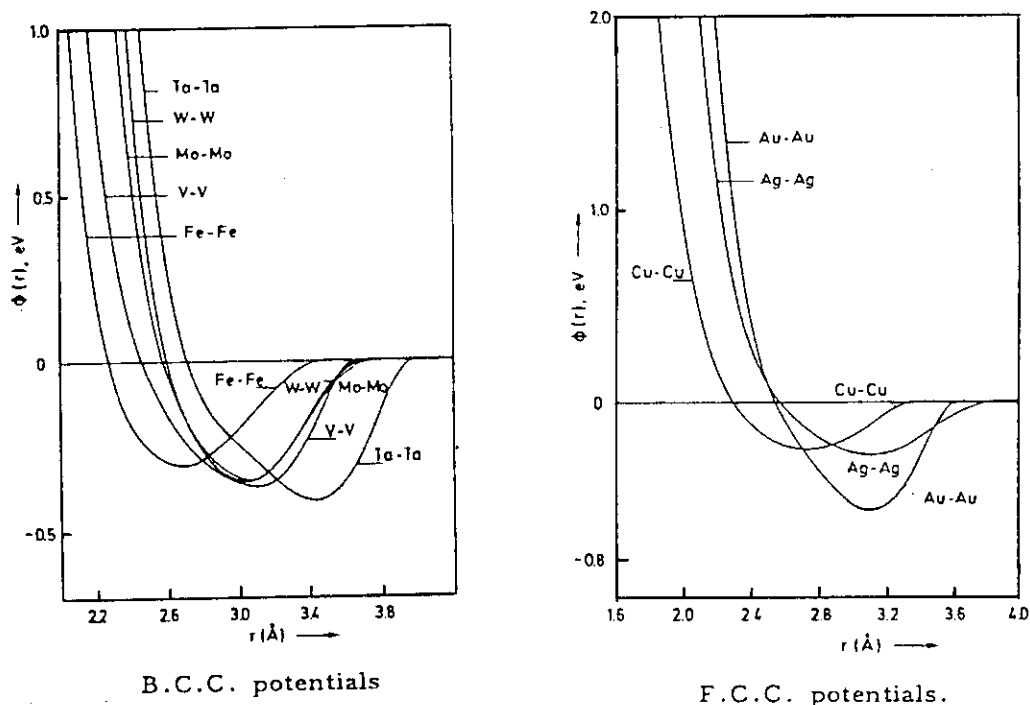


Fig.8 Interatomic potentials for bcc and fcc lattice atoms.

Baskes and Melius は fcc 金属の Ni, Au, Ag, Pt, Pd, Cu, Al について長距離ポテンシャルの形成を試みている。<sup>31)</sup> フィッティングする実験値は、昇華エネルギー、積層欠陥エネルギー、空孔形成エネルギー、それに弾性定数である。

(2) フォノンスペクトルから決定する経験的ポテンシャル

Brosens et al.,<sup>32)</sup> Cornelis et al.<sup>33)</sup> それに Van Heugten et al.<sup>34)</sup> は、フォノンスペクトルから原子間相互作用ポテンシャルを導く方法を提案している。フォノンの分散式は次のように書ける。

$$M\omega_k^2 = \sum_{j=1}^N \left\{ A_{kj} \frac{V'(r_j)}{r_j} + B_{kj} V''(r_j) \right\} \quad (43)$$

ここで、N は隣接原子数、 $A_{kj}$ ,  $B_{kj}$  は波数  $\vec{k}$  と原子の位置  $\vec{r}_j$  に依存する係数である。上式を用いることにより、 $V'(r_j)$ ,  $V''(r_j)$  の数値解が得られる。これらのセットからポテンシャルの形状をフィッティングで求める。

## 5.2 半経験的ポテンシャル

ポテンシャルの関数形が与えられており、その中のパラメータを実験値に基づいて決定する場合、これを半経験的ポテンシャルと呼ぶ。 $V(r)$  が安定な結晶中の原子間ポテンシャルとすると、これは次の条件を満足しなければならない。

- a)  $-dV/dr$  は遠方では引力、近距離では斥力でなければならない。従ってある距離  $r = r_0$  で  $V(r)$  は極小値をとる。

b)  $V(r)$ は $r^{-3}$ よりすみやかに減衰しなければならない。これは凝集エネルギーが有限であることに対応する。

c) すべての弾性定数 $C_{ij}$ は正である。

d)  $C_{11} - C_{12} > 0$

これらの条件を満たすポテンシャル形は Morse 関数と呼ばれる。<sup>35)</sup>

$$V(r) = V_0 \{ \exp[-2\alpha(r-r_0)] - 2 \exp[-\alpha(r-r_0)] \} \quad (44)$$

$\alpha$ ,  $V_0$ は定数であり、実験値にフィットさせる。 $r_0$ は2原子間の平衡距離である。Cotterill and DoyamaはこのMorseポテンシャルを用いてfcc金属中の転位の原子構造をシミュレートした。<sup>6) 7)</sup>Morseポテンシャルの難点は長距離の相互作用を持っていることであり、このため、原子和をとる範囲が増大し計算時間に影響する。Morseポテンシャルの第1項目はBorn-Mayerポテンシャルに対応している。Born-MayerとVan der Waalsを組み合わせたものはBuckinghamポテンシャルと呼ばれる。

Lennard-Jonesポテンシャルは当初、気体の第2ビリアル係数を計算するのに使われ、<sup>36)</sup>その後格子欠陥シミュレーションにも用いられている。

$$V(r) = V_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (45)$$

引力項は双極子間の相互作用を表わしている。

### 5.3 その他のポテンシャル

前節までにまとめたポテンシャル形成法は経験的ないし半経験的に形状を決めるものであった。これに対し、電子論の立場から、原子間の相互作用力を決めようとする試みがいくなされていく。今後、異種原子間の相互作用、あるいは原子間相互作用ポテンシャルの信頼性を高める上で、このようなアプローチが重要性を増してくると考えられる。本節ではいくつかのアプローチを簡単にまとめておく。

#### (1) 擬似ポテンシャル法

擬似ポテンシャル法の基本的考え方は、原子価状態の固有エネルギーを変化させないように、原子のコアに作用している強結合ポテンシャルをもっと弱いポテンシャルに置き換えることにある。<sup>37) 38)</sup>これにより、摂動論的取り扱いが可能となる利点が生じる。この手法は主としてアルカリ金属などの原子間ポテンシャルの解析に適用され成功している。<sup>39) 40) 41) 42) 43)</sup>しかし、遷移金属などのd-軌道成分が含まれてくると本手法では十分扱えない。

Dagens et al.<sup>44)</sup>あるいはLam et al.<sup>45)</sup>は最近同様の考え方で合金元素間の相互作用ポテンシャルを作成し、格子間原子同士の配位、結合エネルギーなどを評価している。Fig. 9, 10には用いたポテンシャルを示す。

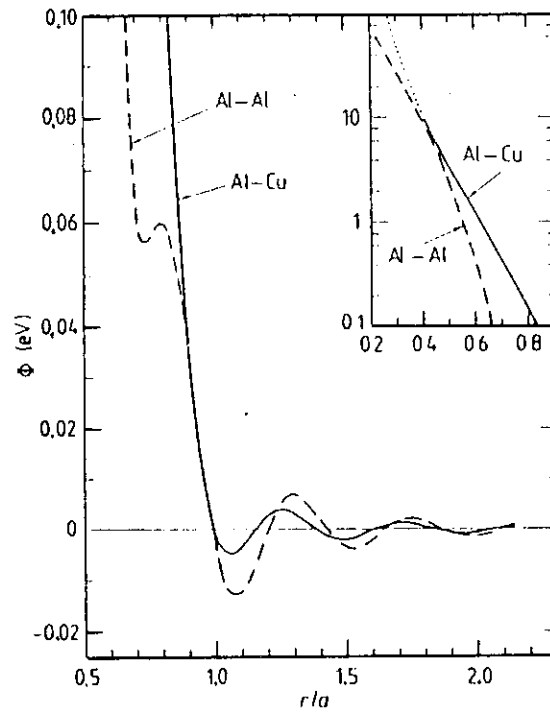


Fig.9 Interatomic potentials for interactions between the elements in Al-Cu alloys.

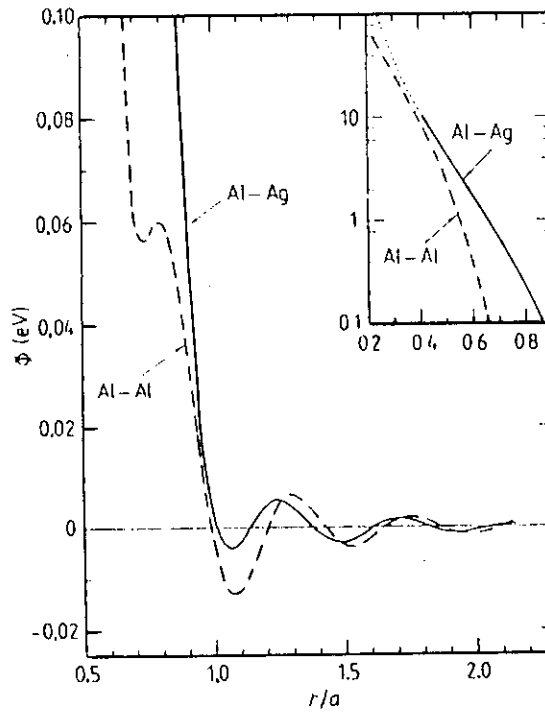


Fig.10 Interatomic potentials for interactions between the elements in Al-Ag alloys.

## (2) 強結合近似 (Tight binding 法)

d-軌道を持つ遷移金属に対し, Cyrot-Lackmann and Ducastelle<sup>46) 47)</sup>により発展された強結合近似法が適用されている。Masuda et al.<sup>48) 49)</sup>はこの方法を用いて bcc 金属中の  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  らせん転位のパイエルスエネルギーとコアエネルギーを評価している。短距離の斥力項には Born-Mayer ポテンシャルを用いている。

## (3) ab-initio ポテンシャル

これは、完全に第1原理的にポテンシャルを決定するもので、実験的にフィットする量を含まない。必要な物理量はすべてエネルギーバンド計算と同様な方法で求められる。Williams は ASW法 (augmented spherical wave method) を発展させている。<sup>50)</sup>これは APW 法, linear-muffin-tin 軌道法と考え方の上では同じものである。ASW法では1粒子状態の波動関数と固有エネルギーを近似的に求める方法を提供する。本方法を用いて De Hosson et al.<sup>51)</sup>は Cu<sub>2</sub>NiZn のバンド構造と凝集エネルギーを計算している。

## 5.4 照射過程の解析に使われたポテンシャル

本節には代表的なポテンシャルをまとめる。表に係数を与える場合、それは  $V(r) = Ar^3 + Br^2 + Cr + D$  と定義される。距離  $r$  は Å,  $V(r)$  は eV の単位で測られている。

## (1) Johnson ポテンシャル (bcc)

bcc 鉄用に Johnson が作成したものである。この係数を Table 2 にまとめる。

Table 2  
Johnson's iron potential for bcc lattice.

$r$	A	B	C	D
0 < $r$ ≤ 2.4	-2.195973	20.40878	-60.52057	57.85164
2.4 < $r$ ≤ 3.0	-0.639230	5.975194	-18.13979	17.75493
3.0 < $r$ ≤ 3.44	-1.115032	10.25744	-30.98654	30.60164
3.44 < $r$	0.0	0.0	0.0	0.0

## (2) Erginsoy-Vineyard-Johnson ポテンシャル

Beeler が Johnson ポテンシャルを Erginsoy-Vineyard ポテンシャル(47)式に接続したものである。100 eV 以下の PKA によるフレンケル対生成の計算に使っている。この係数を Table 3 にまとめる。



Table 3  
Coefficients for the Erginsoy-Vineyard-Johnson composite pair potential for iron.

r	A	B	C	D
0 < r ≤ 1.50	-540.2727	2358.874	-3489.483	1759.117
1.50 < r ≤ 1.816	-40.85643	248.1472	-506.5398	348.3079
1.816 < r ≤ 2.40	-2.1959734	20.403783	-60.520569	57.851639
2.40 < r ≤ 3.0	-0.63922983	5.975194	-18.139786	17.754929
3.0 < r ≤ 3.44	-1.1150322	10.25744	-30.986542	30.601639
3.44 < r	0.0	0.0	0.0	0.0

(3) 鉄-炭素ポテンシャル

Johnson et al. により作成されたもので bcc 鉄が対象。係数を Table 4 に示す。ポテンシャルを Fig. 11 に示してある。

Table 4.  
Johnson et al. iron-carbon potential.

r	A	B	C	D
0 < r ≤ 2.527	-3.365	22.57239	-49.58591	35.46239
2.527 < r	0.0	0.0	0.0	0.0

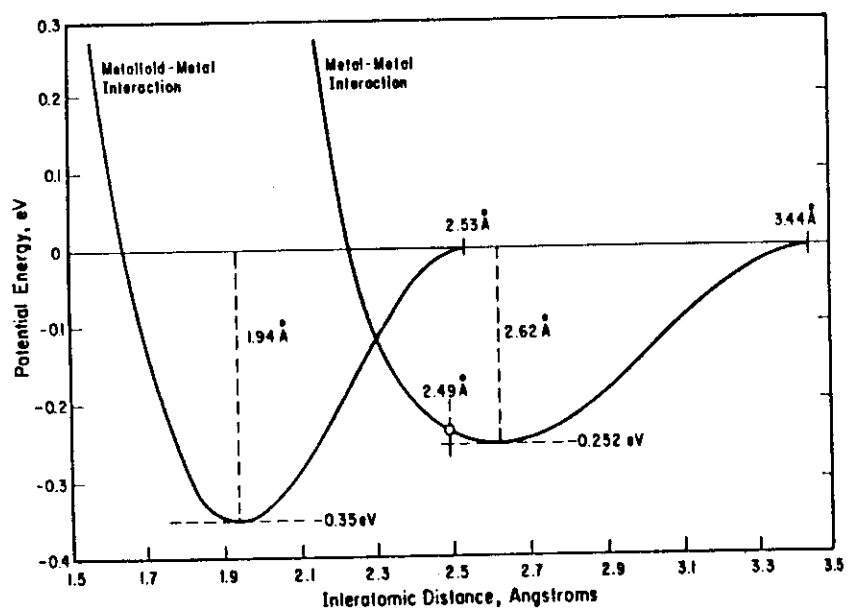


Fig.11 Johnson's iron potential (metal-metal interaction) and iron-carbon potential (metalloid-metal interaction).

(4) 鉄-ヘリウムポテンシャル

Wilson and Johnson により作成されたもの。この係数を Table 5 に示す。また Wilson and Bisson により作成されたヘリウム-ヘリウムポテンシャルの係数も Table 6 に示す。これらのポテンシャルは Fig. 12 に示す。

Table 5 Wilson-Johnson iron-helium potential.

r	A	B	C	D
$0 < r \leq 2.04$	-3.113823	21.17966	-48.81856	39.39387
$2.04 < r \leq 3.0$	-0.6303052	5.384065	-15.47143	15.00647
$3.0 < r \leq 3.44$	-0.1048980	1.081429	-3.748736	4.376126
$3.44 < r$	0.0	0.0	0.0	0.0

Table 6 Wilson-Bisson helium potential.

r	A	B	C	D
$0 < r \leq 1.6$	-9.06632	43.90215	-72.6815	41.3882
$1.6 < r \leq 2.7$	-0.5012284	3.71889	-9.20855	7.618409
$2.7 < r$	0.0	0.0	0.0	0.0

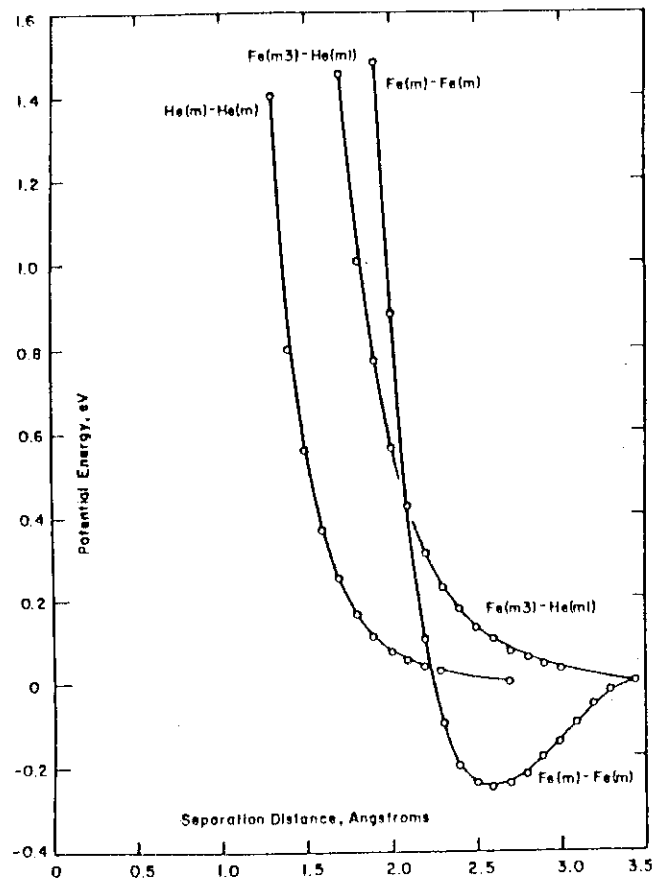


Fig.12 Interatomic potentials for He-He and He-Fe interactions.

## (5) 鉄-置換型元素相互作用ポテンシャル

不純物元素と鉄との相互作用を表わすポテンシャルである。母相の元素より大きい元素 LIA (large impurity atom) の場合と、逆の場合 SIA (small impurity atom) について示されている。次の Table 7, 8 に係数をまとめる。

Table 7

Interatomic potentials for (a) iron-LIA pair, and (b) LIA-LIA pair in bcc iron. LIA is an acronym for large impurity atom. LIA is a 10 % oversize impurity in bcc iron.

(a) iron(m)-LIA(m)				
r	A	B	C	D
$0 < r \leq 2.53$	-2.195973	21.26520	-65.93820	66.06905
$2.53 < r \leq 3.13$	-0.639230	62.24450	-19.72574	20.21538
$3.13 < r \leq 3.57$	-1.115032	10.69230	-33.71001	34.80560
$3.57 < r$	0.0	0.0	0.0	0.0
(b) LIA(m)-LIA(m)				
r	A	B	C	D
$0 < r \leq 2.66$	-2.195973	22.12163	-71.57848	75.00523
$2.66 < r \leq 3.26$	-0.639230	6.473792	-21.37651	22.88631
$3.26 < r \leq 3.70$	-1.115032	11.12717	-36.54652	39.37105
$3.70 < r$	0.0	0.0	0.0	0.0

Table 8

Interatomic potentials for (a) iron-SIA pair, and (b) SIA-SIA pair in bcc iron. SIA is an acronym for small impurity atom. SIA is a 10 % undersize impurity in bcc iron.

(a) iron(m)-SIA(m)				
r	A	B	C	D
$0 < r \leq 2.27$	-2.195973	19.55235	-55.32559	50.32416
$2.27 < r \leq 2.87$	-0.639230	5.725894	-16.61862	15.49631
$2.87 < r \leq 3.31$	-1.115032	9.822576	-28.37611	26.74422
$3.31 < r$	0.0	0.0	0.0	0.0
(b) SIA(m)-SIA(m)				
r	A	B	C	D
$0 < r \leq 2.14$	-2.195973	18.69592	-50.35333	43.45735
$2.14 < r \leq 2.74$	-0.639230	5.476594	-15.16232	13.43117
$2.74 < r \leq 3.18$	-1.115032	9.387712	-25.87878	23.21886
$3.18 < r$	0.0	0.0	0.0	0.0

## (6) Gibson ポテンシャル

フレンケル対生成計算に使われており次の形をもつ。

$$V(r) = (2.2563 \times 10^4) \exp(-5.096 r) \text{ eV} \quad (46)$$

## (7) Erginsoy-Vineyard ポテンシャル

bcc 鉄のフレンケル対生成計算に使われた。ポテンシャル形は次のような形をとる。

$$\begin{aligned} V(r) &= (8573/r) \exp(-4.5829 r) \text{ eV} && \text{for } r \leq 1 \text{ \AA}, \\ V(r) &= (8573.0) \exp(-4.5829 r) \text{ eV} && \text{for } 1 < r \leq 1.93 \text{ \AA}, \\ V(r) &= (0.4174) \exp[-2.7770 (r-2.845)] \\ &\quad - 2 \exp(1.3885 (r-2.845)) \text{ eV} && \text{for } 1.93 < r \leq 3.575 \text{ \AA} \\ V(r) &= 0.0 && \text{for } 3.575 \text{ \AA} < r. \end{aligned} \quad (47)$$

## (8) Besco-Beeler ポテンシャル

タングステンのカスケード計算用に作られた。次の形をもつ。

$$\begin{aligned} V(r) &= (24500.0/r) \exp(-4.55 r) \text{ eV} && \text{for } r \leq 1 \text{ \AA}, \\ V(r) &= (24500.0) \exp(-4.55 r) \text{ eV} && \text{for } 1 \text{ \AA} < r. \end{aligned} \quad (48)$$

## (9) Johnson-Wilson ポテンシャル

前節で説明したポテンシャルであり、その形は文献(29)にまとめられている。但し、Fe と Ta については係数が誤っているので注意を要する。タングステンの場合については次のように与えられる。

$$\begin{aligned} V &= a_4 r^4 + a_3 r^3 + a_1 r + a_0 \text{ eV} && \text{for } 1.72 \leq r \leq 2.948320 \text{ \AA}, \\ V &= b_5 r^5 + b_4 r^4 + b_3 r^3 + b_2 r^2 + b_1 r + b_0 \text{ eV} \\ &&& \text{for } 2.948320 \leq r \leq 3.814457 \text{ \AA}, \end{aligned} \quad (49)$$

ここで

$$\begin{aligned} a_4 &= 13.73968 && b_5 = 5.078514 \\ a_3 &= -158.4247 && b_4 = -85.06017 \\ a_2 &= 658.8136 && b_3 = 566.3906 \\ a_1 &= -1321.530 && b_2 = -1873.738 \\ a_0 &= 956.4773 && b_1 = 3079.346 \\ &&& b_0 = -2011.494 \end{aligned}$$

## (10) Moliere ポテンシャル

これは MARLOWE, COLLIDE などの 2 体衝突近似のカスケード計算に使われている。

$$\begin{aligned} V(r) &= (14.399107 Z_1 Z_2) F(r) \text{ eV} \\ F(r) &= [0.35 \exp(-0.3 r/a) + 0.55 \exp(-1.2 r/a) + 0.10 \exp(-6 r/a)] \quad (50) \\ a &= 0.4683237 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} \end{aligned}$$

## 6. フレンケル対生成シミュレーション

フレンケル対は結晶中に存在する格子間原子と空孔の対からなっているものであり、照射下の材料中で形成される最も単純な格子欠陥の構造である。この過程は、1個の格子原子がはじき出されてそのあとに空孔を形成し、はじき出された原子が格子間原子となるものである。このフレンケル対生成過程の解析は照射損傷理論にとって最も基本的な事項に属し、従来から計算機シミュレーションにより種々の有益な情報が得られている。本章ではこれらの結果についてまとめる。

### 6.1 銅におけるフレンケル対生成過程

この計算は動力的シミュレーションに関する草分け的存在である Gibson らのグループにより最初になされた。<sup>2)</sup> この計算により、計算機シミュレーションの有効性が一躍注目されることになった。彼らの計算は 85 eV 以下の PKA によるフレンケル対生成過程を扱っている。

#### (1) 集束衝突

簡単な場合として剛体球による衝突連鎖過程を考えてみる。Fig.13 のような剛体球の衝突過程では簡単な計算から

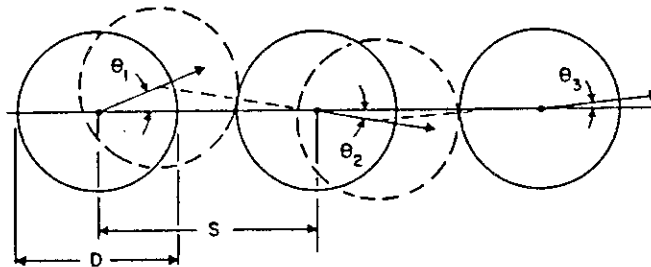


Fig.13 Hard sphere collision chain(Ref. 2)).

$$A \equiv \theta_2 / \theta_1 = S/D - 1 \quad (51)$$

なる関係が成立する。S は平衡時の原子間隔、D は原子の直径である。もし  $\theta_2 < \theta_1$  であれば飛行方向が  $\theta \rightarrow 0$  の方向にしばられて集束を起すと考えられる。実際の原子では剛体球モデルからはずれてむしろソフトな球として考えた方がよい。原子間ポテンシャルとして Born-Mayer 型をとると  $V(r) = A \exp(-r/b)$  であり、この有効半径としては相対運動エネルギーがポテンシャルエネルギーに等しくなる距離として定義することができる。すると

$$D_e = b \log(2A/E) \quad (52)$$

と与えられる。集束衝突が起るためには少なくとも  $A = 1$  以下でなければならないから、臨界点では  $D_e = S/2$  である。これに対応する実験室系のエネルギー  $E_f$  は

$$E_f = 2V(S/2) = 2A \exp(-S/2b) \quad (53)$$

となる。このエネルギーを集束衝突エネルギーと呼んでいる。これ以下のエネルギーで集束衝突がおこる可能性がある。

Fig. 14には剛球モデルによる $A$ の値と、銅の $\langle 110 \rangle$ 方向で計算された $A$ の値を比較してある。動力学的シミュレーションの結果では集束エネルギーは30eVであり、剛体球モデルでは75eVとなっており、集束効果を過大評価している。Fig. 15は $\langle 100 \rangle$ 方向の衝突過程の $A$ 値を示している。集束衝突エネルギーは40eVである。剛体球モデルでは $S$ が大となることから、集束衝突エネルギーは4.5 eVと逆の結果を与える。このように簡単なモデルでは多体原子系の振舞いを正確にあらわすことができず、シミュレーションにたよらざるを得ない、という状況にあるといえる。

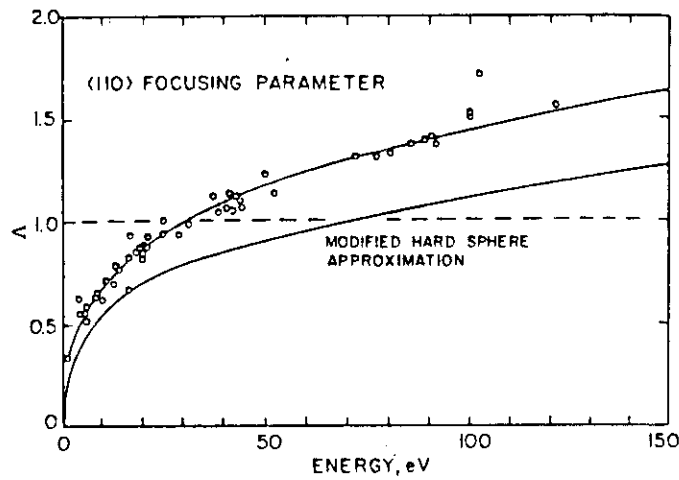


Fig.14 Focussing parameter  $A = \theta_2/\theta_1$  for  $\langle 110 \rangle$  chains in copper (Ref.2).

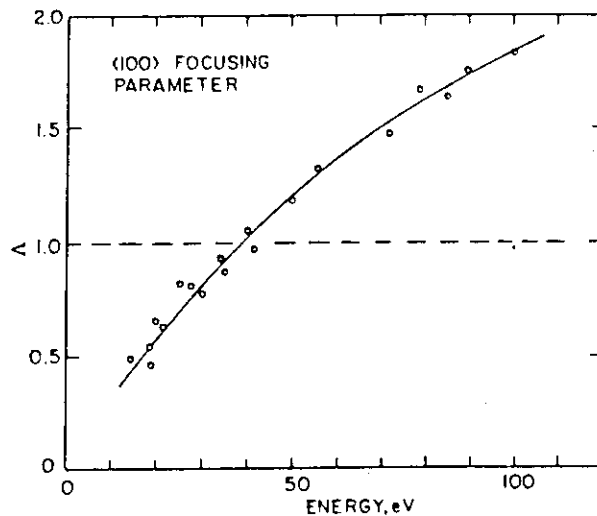


Fig.15 Focussing parameter  $A = \theta_2/\theta_1$  for  $\langle 100 \rangle$  chains in copper (Ref.2).

Fig. 16は初期の原子エネルギーが集束衝突エネルギーより大きい場合の衝突過程を示している。この場合、初期にはエネルギーの分散が激しく生じているが、集束衝突エネルギー以下となったあとは通常の集束衝突モードとなっている。

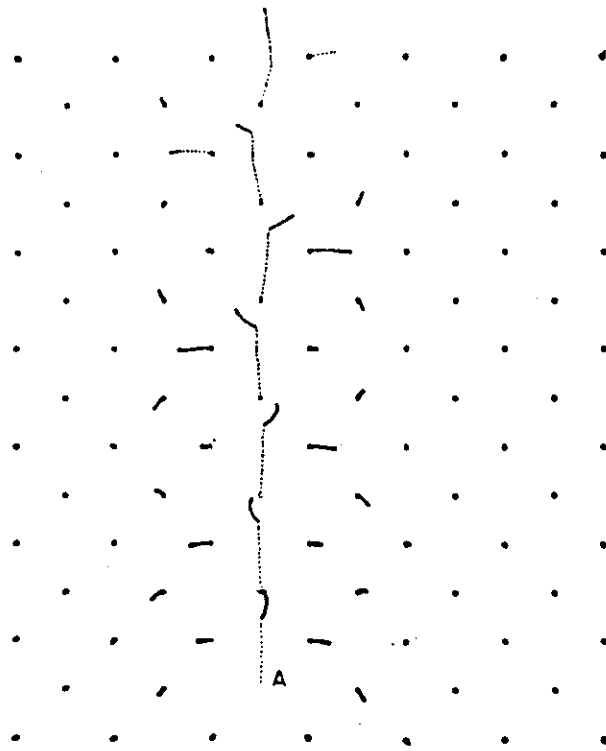


Fig.16 Trajectories in a (100) plane in copper, caused by a 100 eV PKA starting at A, initially directed  $1^\circ$  away from the z-axis. This  $\langle 100 \rangle$  collision chain shows pronounced defocussing (Ref.2)).

最密充填方向への集束衝突はわずかなエネルギーでも長距離の衝突過程が生じうる。このため、この方向ではフレンケル対の間の距離は他の場合に比べてきわめて大きい。計算機シミュレーションの立場からいうと、このことは、通常の計算セルではむづかしい、ということを示している。特別の境界条件を考えなければならない。Gibson et al.<sup>2)</sup>は銅について最密充填方向への集束衝突を計算している。Fig. 17とFig. 18は、 $\langle 011 \rangle$ 方向への25 eVと100 eVの衝突過程における、各隣接（チェーン方向の）原子のZ方向への変位を示したものである。25 eVでは最初の原子は中間変位点をわずかにこえたあと、元の位置にもどっているが、その他の原子は中間点付近にうろついている。このためフレンケル対ができたかどうかははっきりしない。100 eVの場合には各原子は中間点をこえて前方の位置に向っている。格子間原子が空孔の位置から150原子間距離はなれた所に生じたと評価している。

Fig. 19は40 eV PKAによる衝突過程を示している。PKAはA点から放出されており、その後 $[0\bar{1}0]$ 方向へのADチェーン、 $[00\bar{1}]$ 方向へのFGチェーン、 $[0\bar{1}1]$ 方向へのAEチェーン、 $[0\bar{1}\bar{1}]$ 方向へのBHチェーンを形成している。全体としてこの過程では、1個の置換衝突（ADチェーン）と、1個の安定なフレンケル対が発生している。なお、スプリット型格子間原子の軸は衝突チェーンの方向と垂直となっている。Fig. 20は最密充填方向への置換衝突過程を含んでいる場合である。

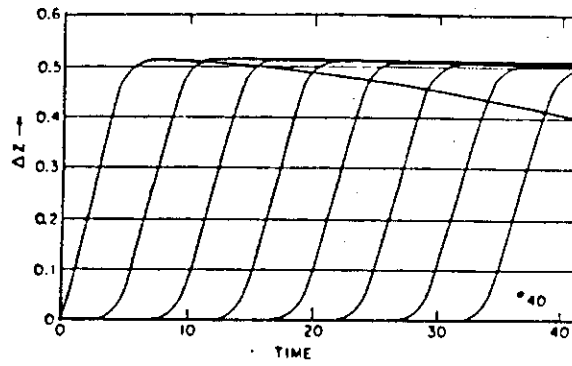


Fig.17  $\Delta z$  versus time for the chain axis atoms in a [011] chain in copper. The PKA was started at time zero with 25 eV kinetic energy directed along [011]. The time unit is  $3.27 \times 10^{-15}$  s (Ref.2)).

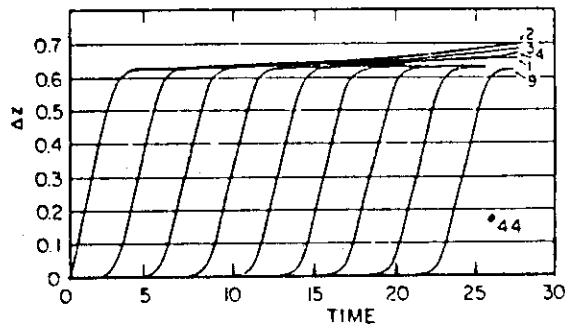


Fig.18  $\Delta z$  versus time for the chain axis atoms in a [011] chain in copper. The PKA was started at time zero with 100 eV kinetic energy directed along [011]. The time unit is  $3.27 \times 10^{-15}$  s (Ref.2)).



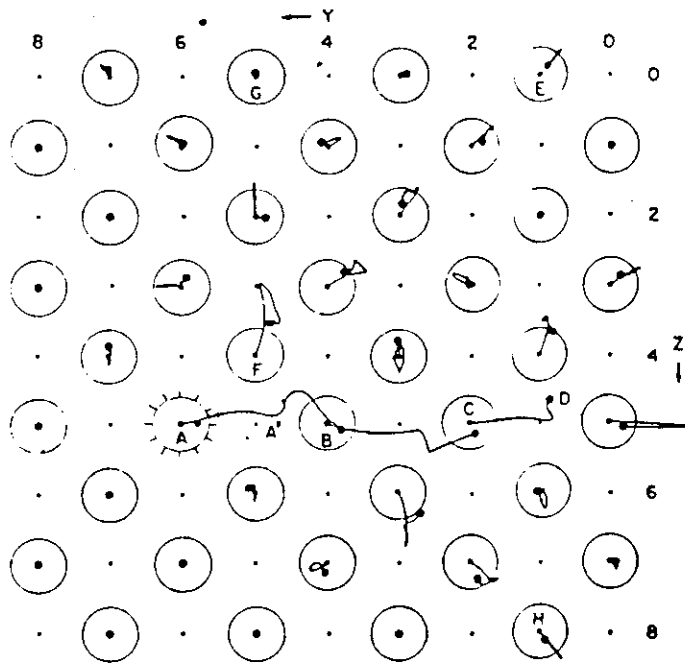


Fig.19 Atom trajectories in a 40 eV cascade in copper. The PKA was ejected from site A in the  $x=3$  plane along a line  $15^\circ$  above the  $-y$  axis. Large circles represent atom sites in the  $x=3$  plane; dots represent atom sites in the  $x=2,4$  planes. A vacancy was produced at A and a split interstitial at D(Ref.2)).

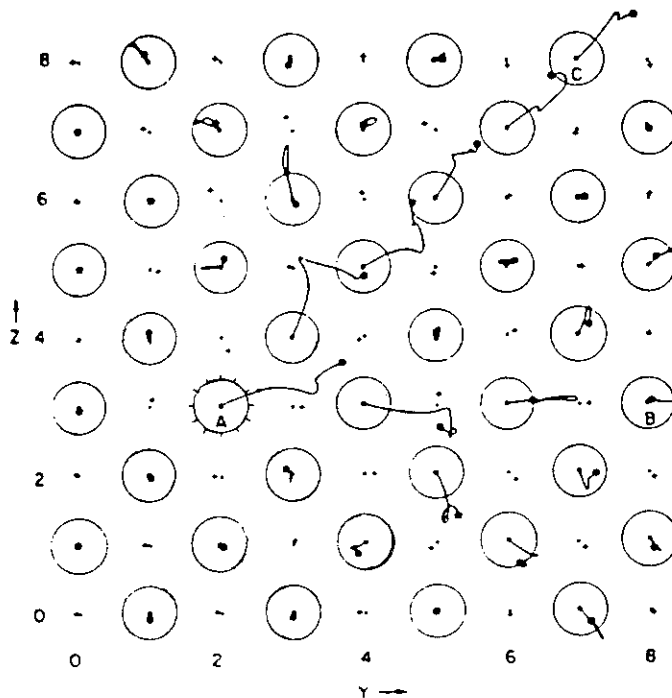


Fig.20 Atom trajectories in a 40 eV cascade in copper. The PKA was ejected from site A in the  $x=7$  plane along a line  $22.5^\circ$  above the  $y$ -axis. Large circles represent atom sites in the  $x=7$  plane; dots represent atom sites in the  $x=6,8$  planes. A vacancy was formed at A and a split interstitial at C(Ref.2)).

## 6.2 bcc 鉄中のフレンケル対生成過程

これは Erginsoy et al.<sup>3)</sup> の計算が最初である。計算は GRAPE プログラムを用いて行われている。仕事の目的は、方向依存のはじき出しエネルギーの計算と、与えられたエネルギーの PKA に対する置換確率を求めることにある。

## (1) はじき出しエネルギーの方向依存性

Fig. 21 は球面三角形上に示したはじき出しエネルギーの閾値を表わしている。また、Fig. 22 は、PKA のエネルギー  $E$  の関数として考えたときにはじき出し確率  $P_d(E)$  を表わす。 $P_d(E)$  の定義は、エネルギー  $E$  の PKA が安定なフレンケル対を形成する方向に対する立体角の和をとり、 $4\pi$  で割ったものである。ステップ状の変化をしているのが  $P_d(E)$  の特徴である。

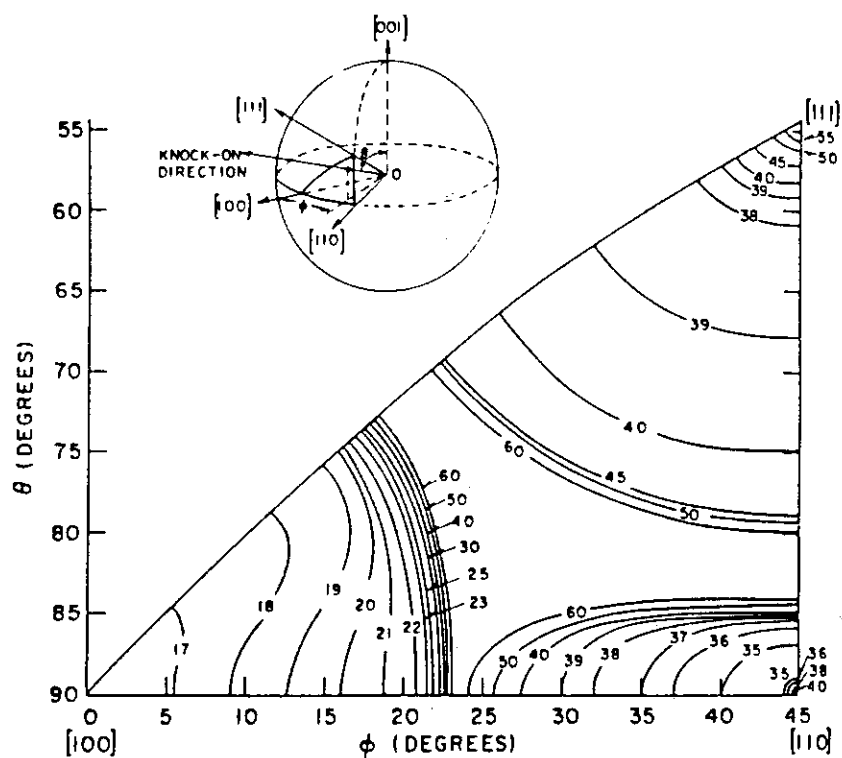


Fig.21 Contours of constant displacement energy threshold in bcc iron. The polar and azimuthal angles  $\theta$  and  $\phi$  define the PKA ejection direction. The energy contours are expressed in eV(Ref.3)).

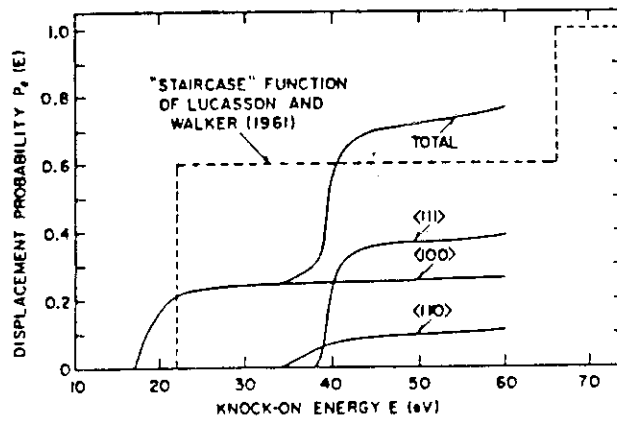


Fig.22 Integrated displacement probability  $P_d(E)$  for a PKA of energy  $E$  and random direction in bcc iron. Contributions of three low-index directions are shown separately. Note the complexity caused by the directional dependence of displacement energy threshold. The staircase function of Lucasson and Walker, which gave a good fit to their electron irradiated bcc iron data is shown for comparison(Ref.3)).

(2) はじき出しチェーン

最密充填方向<111>への衝突チェーンでは各ステップでのエネルギー損失は少なく、エネルギーが遠方まで伝わる。<100>方向への衝突チェーンでは1ステップ当りのエネルギー損失は<111>方向より大きい。<110>方向への衝突チェーンでは前の2つより更にエネルギー損失は大きくなる。Fig. 23は(001)面内の[110]方向に対して、 $1^\circ$ の角度で放出したPKA(100eV)により発生した置換衝突の過程を示す。[110]チェーンは途中で[010]方向のチェーンに変化している様子がわかる。

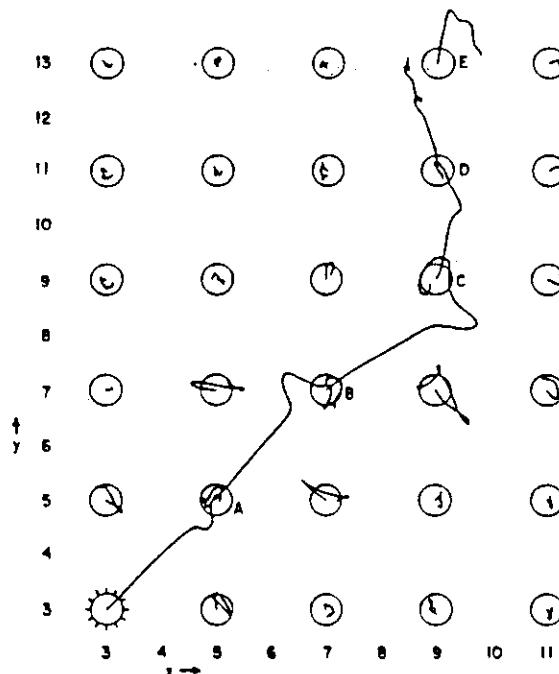


Fig.23 A [110] direction replacement collision chain in bcc iron is not stable. A 100 eV PKA ejected at  $1^\circ$  to [110] initiates a [110] chain which defocusses and converts to a [010] chain(Ref.3)).

Fig. 24 と Fig. 25 は、 $\langle 100 \rangle$  軸に対して  $25^\circ$  の角度で放出した PKA の衝突過程を示している。Fig. 24 は  $(001)$  面内で  $[100]$  方向に対して  $25^\circ$  の PKA, Fig. 25 は  $(1\bar{1}0)$  面内で  $[001]$  に対して  $25^\circ$  の角度で放出した PKA の場合である。前者の場合には衝突チェーンは  $[010]$  軸となっている。後者の場合には複数の衝突チェーンが発生している。

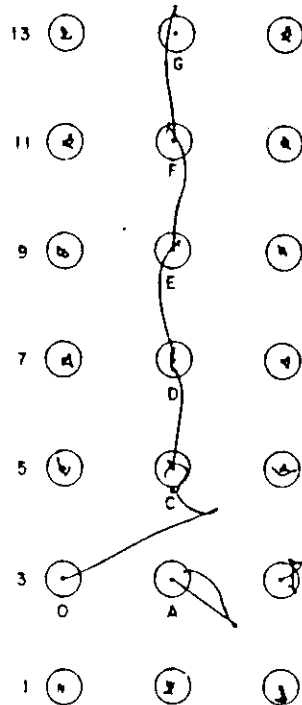


Fig.24 Example of how unstable replacement chains close to a  $(100)$  plane tend to defocuss and become  $\langle 100 \rangle$  chains in bcc iron. In this instance, a 60 eV PKA was ejected from site O in a direction  $25^\circ$  from  $[100]$  in a  $(001)$  plane. The initial trajectory line converts to a  $[010]$  replacement chain (Ref.3)).

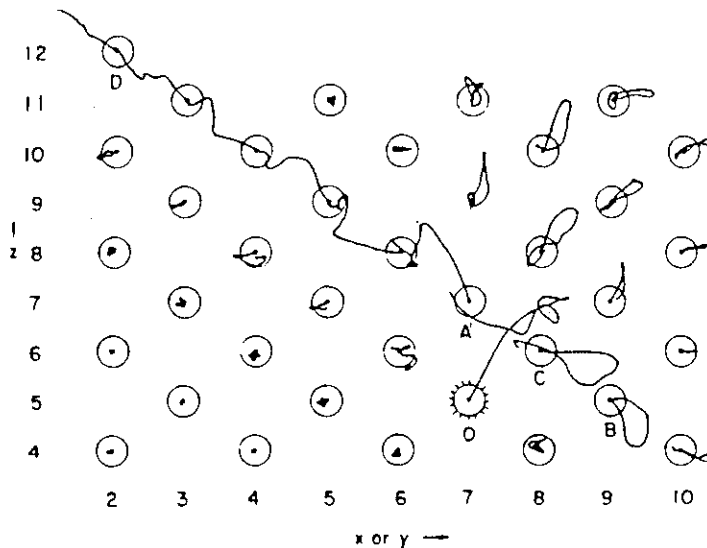


Fig.25 Conversion of an unstable chain to a  $[111]$  chain in bcc iron. A 65 eV PKA is ejected from site O along a line at  $25^\circ$  to  $[001]$  in the  $(1\bar{1}0)$  plane. A  $[111]$  replacement collision chain results as a rebound phenomenon (Ref.3)).

### 6.3 タングステンにおけるフレンケル対生成過程

これはBURSTプログラムを用いてStuart et al.<sup>52)</sup>により計算されている。彼らの採用した計算セルは2000個の原子からなり、周期的境界条件をもっている。彼らの結果によると、 $\langle 100 \rangle$ 方向へのエネルギー $E_d$ は約66 eV、 $\langle 110 \rangle$ 方向へは $\sim 100$  eV、 $\langle 111 \rangle$ 方向へは $\sim 250$  eVであった。

### 6.4 fcc 鉄における衝突過程

Gibson et al.<sup>2)</sup>の銅についてははじき出し計算では、PKAの放出方向は、ほぼ $\{100\}$ 面近傍に限られている( $\langle 111 \rangle$ 方向への計算例を除いて)。このため、はじき出しのエネルギー $E_d(\vec{D})$ の方向依存を十分調べることはできない。このため、Beeler and Beeler<sup>53) 54)</sup>はfcc鉄について衝突チェーンを球面三角形上のあらゆる方向にわたり計算した。Fig. 26は、はじき出しの閾エネルギーのマップである。数値はその方向でフレンケル対が生成されうるPKAエネルギーの最低値を示す。Fig. 27はJung et al.<sup>55)</sup>が銅と白金について行った電子線照射実験から決めた閾エネルギーのマップである。また、Fig. 28はfcc鉄における衝突チェーンの数を示す。この衝突チェーンはPKAのはじき出し閾エネルギー値のときに発生する場合の数である。Fig. 26とFig. 28から、衝突チェーン発生数が増大すると閾エネルギーが増大する傾向が見られる。

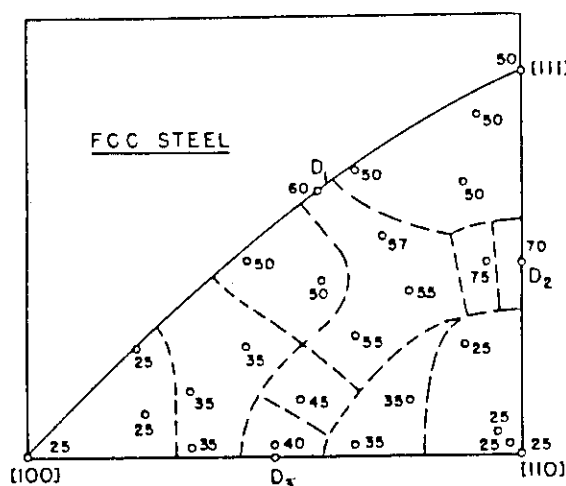


Fig.26 Directional regions of equal displacement energy threshold in fcc iron(Ref.54)).

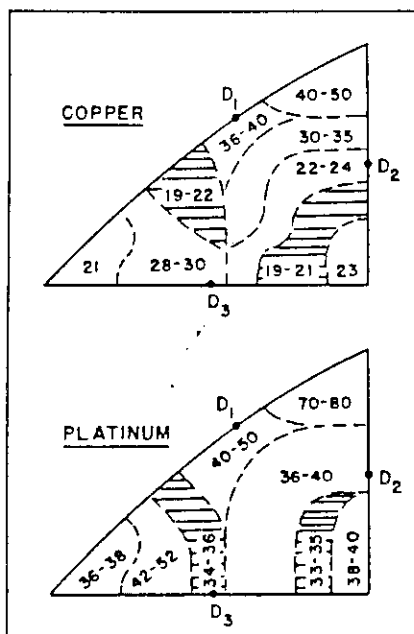


Fig.27 Directional regions of equal displacement energy threshold for copper and platinum as given by the electron irradiation experiments(Ref.55)).

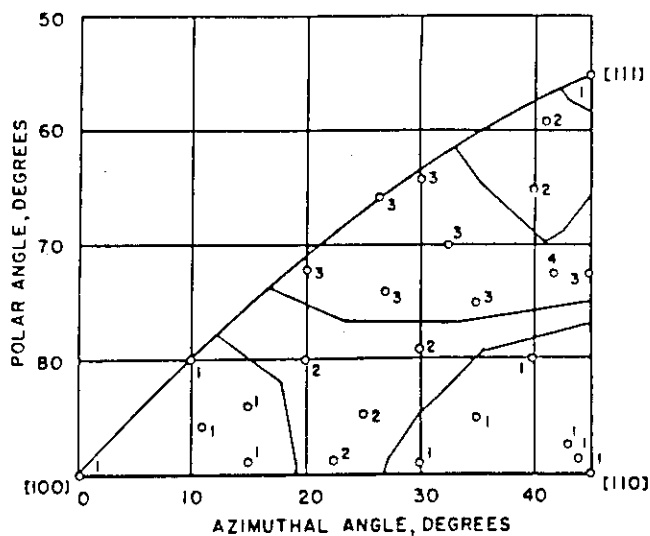


Fig.28 Number of collision chains excited in fcc iron by a PKA ejected with kinetic energy equal to the displacement energy threshold for the direction concerned. A single chain was excited for PKA ejection directions near to [100] , [110] and [111](Ref.54)).

6.5 その他の計算結果

Beeler は hcp 金属中でのフレンケル対生成過程を評価している。<sup>56)</sup> その結果,  $[11\bar{2}0]$ ,  $[0001]$   $[\bar{1}100]$  方向のうち,  $[11\bar{2}0]$  方向への閾エネルギーが最も低く,  $[0001]$ ,  $[\bar{1}100]$  の順で高くなっている。

有限温度効果を取り入れた計算が, Beeler and Beeler,<sup>54) 57)</sup> それに, Stuart et al.<sup>58)</sup> により行われている。前者は fcc と bcc の鉄について, 後者はタングステンについて行っている。この結果, 特定の方向の PKA については, はじき出しの閾エネルギーの値は有限温度効果を入れない場合に比べて小さくなることが明らかになっている。これは, 格子原子が振動していることにより, PKA に働くポテンシャル場の対称性がわずかにくずれ, これがはじき出しエネルギーの低下につながっているとしている。

次に, King and Benedek<sup>59)</sup> の銅についての計算結果をまとめる。彼らは Born-Mayer 型のポテンシャルを用い, フレンケル対生成計算を行い, 実験との比較をしている。Fig. 29 に閾エネルギーの計算結果と, 電子線照射による結果の比較を示す。フレンケル対生成数を PKA エネルギーと PKA の方向でまとめたものが Fig. 30 である。この結果から, 低指数方位から大きくずれており閾エネルギーの高い方向では, 生成数は PKA エネルギーに対して単調な変化をしない。これを "Complex direction" と呼んでいる。

原研の横田, 田次, 岩田は, 最近, Johnson and Wilson ポテンシャルを用いてモリブデン (Mo) の詳細なはじき出し計算を行っている。<sup>60)</sup> その結果, bcc 金属に対しても "complex direction" と "simple direction" の存在が重要であることを指摘している。

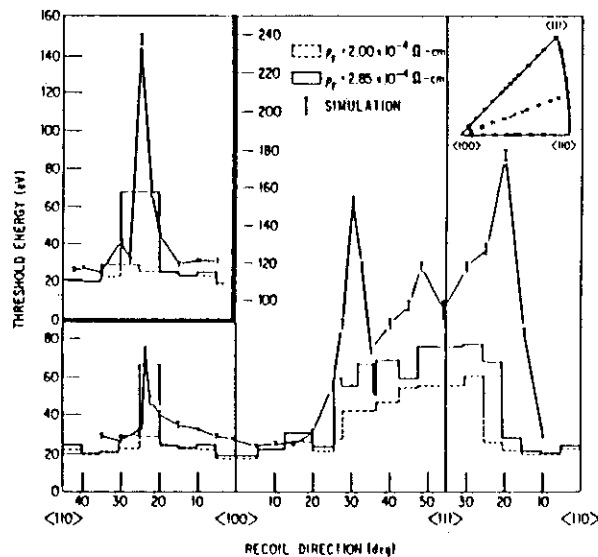


Fig.29 Threshold energy profiles for the scans indicated on the unit triangle shown in inset at right. The inset at left corresponds to the scan through the interior of unit triangle. Both the simulations and results from analyses of experiments of King et al. based on two different values of  $\rho_f$  are shown (Ref.59).

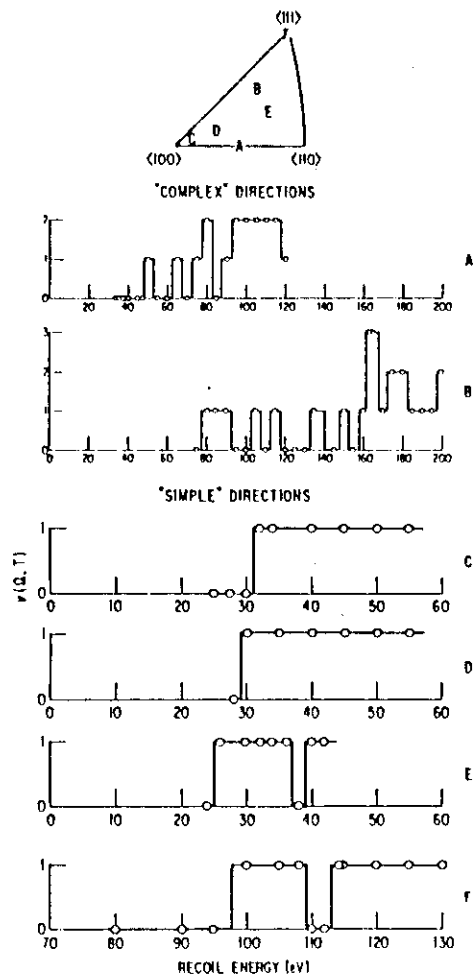


Fig.30 Number of Frenkel pairs produced as a function of energy for directions indicated in the unit triangle at top. Plots A and B correspond to complex directions and C-F to simple directions (Ref.59).



## 7. ま と め

本報告書では文献調査をもとに、近年、急速な進展をみせている固体内原子衝突に関連した計算機シミュレーション手法とそれを用いた計算結果をまとめた。すでに、この分野の文献を広くにまとめたレビュー等がだされており、それらの情報から出発し、必要に応じさらに詳しい調査を進めた。現在、動力的シミュレーション手法として知られている多体原子系の解析手法は、Vineyardらの計算がきっかけでその有用性が認識されて以来、種々の拡張が試みられ、カスケード現象を含む、材料の照射挙動の解析が進められている。これらの解析結果の中で重要なものは、1) 集束衝突過程の解明、2) はじき出し閾エネルギーの異方性解析、3) カスケード過程の解析、等である。これらはいずれも理論的な解析では扱えないものであり、計算機シミュレーションの有効性を示す好例である。

今後、計算機の高速化が進むに伴い、動力的手法を用いた多体原子系のシミュレーションはさらにその守備範囲が拡大し、現象の解析のみならず材料設計等の分野にまで適用できるようになる可能性も考えられる。その際、基本となる原子間ポテンシャルは、経験的ないし半経験的ポテンシャルのみでなく、電子論的立場から導出したものを使えることが望ましい。すでにいくつかの試みがなされ、実験との対応も検討されていることから、今後、上記の要求に沿った原子間ポテンシャルの適用が進展するものと考えられる。

本稿をまとめるに当たって有益な助言をいただいた物理部原子分子物理研究室長小沢国夫博士及び日立製作所エネルギー研究所主管研究員竹田練三博士に感謝申し上げます。

## References

- 1) Yoshida M. : J.Phys.Soc.Japan, 16, 44 (1961).
- 2) Gibson J.B. et al. : Phys.Rev., 120, 129 (1960).
- 3) Erginsoy C. et al. : Phys.Rev., 133, A595 (1964).
- 4) Beeler J.R., Jr. and Besco D.G. : Knock-on Cascades and Point-Defect Configurations in Binary Materials, in Radiation Damage in Solids, vol.1, IAEA (1962).
- 5) Robinson M.T. and Oen O.S. : Phys.Rev., 132, 2385 (1963).
- 6) Cotterill R.M.J. and Doyama M. : Phys.Rev., 145, 465 (1966).
- 7) Doyama M. and Cotterill R.M.J. : Phys.Rev., 150, 448 (1966).
- 8) Johnson R.A. : Phys.Rev., 134, A1329 (1964).
- 9) Johnson R.A. : Phys.Rev., 145, 423 (1966).
- 10) de Hosson J.Th.M. : Interatomic Potentials in the Study of Materials, in Interatomic Potentials and Crystalline Defects, Ed. Jong K. Lee, AIME, 1981.
- 11) Beeler J.R., Jr. : Radiation Effects Computer Experiments, North-Holland, Amsterdam, Chap.2, 1983.
- 12) Johnson R.A. and Brown E. : Phys.Rev., 127, 446 (1962).
- 13) Besco D.G. and Beeler J.R., Jr. : Computer Programs Describing Collision Cascades in Binary Materials, GEMP-356 (1965).
- 14) Besco D.G. and Baumgardt N.R. : CASCADE and CLUSTER, GEMP-356 (1965).
- 15) Holms D.K. and Robinson M.T. : Computer Studies of Replacement Sequences in Solids Associated with Atomic Displacement Cascades, CONF-730958-3 (1973).
- 16) Robinson M.T. and Torrens I.M. : Phys.Rev., B9, 5008 (1974).
- 17) Larsen A. : GRAPE A Computer Program for Classical Many-Body Problems in Radiation Damage, BNL 7979, 1964.
- 18) Rahman A. : Phys.Rev., 136, A405 (1964).
- 19) Nordsieck A. : Math.Comp., 16, 22 (1962).
- 20) Evans R.H. : Ph.D. Thesis, Department of Electrical Eng., North Carolina State University, (1974).
- 21) Chell G.G. and Zucker I.J. : J.Phys.C, 1, 35 (1968).
- 22) Beeler J.R., Jr. and Besco D.G. : J.Appl.Phys., 34, 2873 (1963).
- 23) Beeler J.R., Jr. : Phys.Rev., 150, 470 (1966).
- 24) Besco D.G. and Beeler J.R., Jr. : Computer Programs Describing Collision Cascades in Binary Materials . Body-Centered Cubic and Face-Centered Cubic Structures, GEMP-243 (1963).
- 25) Lekkerker et al. : The SIC and RELAX Programs, Delft Reactor Group, Informal Report.
- 26) Firsov O.B. : Sov.Phys.JETP, 36, 1076 (1959).
- 27) Beeler J.R., Jr. and Beeler M.F. : Atom Bombardment Simulation Program(COLLIDE), in USA AEC Report ORO-3912-21, (1973).
- 28) Beeler J.R., Jr. : Radiation Effects Computer Experiments, North-Holland, Amsterdam, Chap.11, (1983).
- 29) Johnson R.A. and Wilson W.D. : Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects, Gehlen P.C., Beeler J.R., Jr. and Jaffee R.I., eds., Plenum Press, 301 (1972).
- 30) Wedepohl P.T. : Proc.Phys.Soc., 92, 79 (1967).

- 31) Baskes M.I. and Melius C.F. : Phys.Rev., 20B, 3197 (1979).
- 32) Brosens F. et al. : Phys.Stat.Sol.(b) 81, 557 (1977).
- 33) Cornelis J. et al. : Phys.Stat.Sol.(b) 87, K61 (1978).
- 34) van Heuglen W.F.W.M. et al. : Phys.Stat.Sol.(b) 82, 501 (1977).
- 35) Morse P.M. : Phys.Rev., 34, 57 (1929).
- 36) Lennard-Jones J.E. : Proc.Roy.Soc., A106, 463 (1924).
- 37) Harrison W.A. : Pseudopotentials in the Theory of Metals, Benjamin(Reading), p5, (1966).
- 38) Heine V. and Weaire D. : Solid State Physics, Academic Press, p249, (1970).
- 39) Shyu W.M. and Gaspari G.D. : Phys.Rev., 163, 667 (1967).
- 40) Ho P.S. : Phys.Rev., 169, 523 (1968).
- 41) Flocken J.W. and Hardy J.R. : Phys.Rev., 177, 1054 (1969).
- 42) Torrens I.M. and Gerl M. : Phys.Rev., 187, 912 (1969).
- 43) Ashcroft N.W. : Phys.Lett., 23, 48 (1966).
- 44) Dagens L. et al. : Phys.Rev., B11, 2726 (1975).
- 45) Lam N.Q. et al : J.Phys.F, 13, 1369 (1983).
- 46) Ducastelle F. : J.Phys.Paris, 31, 1055 (1970).
- 47) Ducastelle F. and Cyrot-Lackmann F. : J.Phys.Chem.Solids, 32, 285 (1971).
- 48) Masuda K.I. and Sato A. : Phil.Mag., 37, 531 (1978).
- 49) Sato A. and Masuda K.I. : Solid State Comm., 29, 545 (1979).
- 50) Williams A.R. et al. : Phys.Rev., B19, 6094 (1979).
- 51) de Hossen J.Th.M. and de Groot R. : Band Structure of Cu-Ni-Zn Alloys.
- 52) Stuart R.N. and Guinan M.W. : Lawrence Livermore National Laboratory, (1975).
- 53) Beeler J.R., Jr. and Beeler M.F. : Direction Dependent Displacement Energy Threshold for FCC Iron, in USA\_AEC Report ORO-3912-26, p6, (1974).
- 54) Beeler J.R., Jr. and Beeler M.F. : Effects of Thermal Vibrations on the Displacement Energy Threshold, in Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals, CONF-751006-pl, p21, (1976).
- 55) Jung P. et al. : Phys.Rev., B5, 553 (1973).
- 56) Beeler J.R., Jr. : Radiation Effects Computer Experiments, North-Holland, Amsterdam, Chap.10, (1983).
- 57) Beeler J.R., Jr. and Beeler M.F. : Effect of Temperature on the Displacement Energy, in Proceedings of the First ASTM-EURATOM Symp. on Reactor-Dosimetry, Petten, Part , p61, (1975).
- 58) Stuart R.N. et al. : Rad.Eff., 30, 129 (1976).
- 59) King W.E. and Benedek R. : Phys.Rev., B23, 6335 (1981).
- 60) Yokota M., Taji Y. and Iwata T. : JAERI-M83-226, p44, (1984). ( in Japanese ).