自己格子間原子と空孔の相互消滅反応方程式の検証

網野 岳文^{*1} 荒河 一 渡^{*2} 森 博太郎

大阪大学超高压電子顕微鏡センター

J. Japan Inst. Metals, Vol. 75, No. 8 (2011), pp. 460-464
© 2011 The Japan Institute of Metals

Verification of Rate Equation for Recombination between Self-Interstitial Atoms and Vacancies

Takafumi Amino^{*1}, Kazuto Arakawa^{*2} and Hirotaro Mori

Research Center for Ultra-High Voltage Electron Microscopy, Osaka University, Ibaraki 567-0047

Rate equation (RE) and kinetic Monte Carlo (KMC) simulation are widely used to understand the accumulation process of lattice defects upon high-energy particle irradiation. RE is more suitable for the simulation of longer term processes in comparison with KMC simulation. However, the accuracy of the results obtained by RE has not yet been clearly established. In the present study, the accuracy of RE for the reaction between self-interstitial atoms and vacancies in a body-centered cubic lattice is verified using a KMC method. The results show that the accuracy of RE reduces when the spatial correlation among defects is not negligible.

(Received April 11, 2011; Accepted May 16, 2011)

Keywords: crowdion, kinetic Monte Carlo simulation, reaction rate theory, self-interstitial atom, vacancy

1. 緒 言

結晶を高エネルギー粒子で照射すると、一般には自己格子間原子(self-interstitial atom: SIA)と原子空孔(vacancy: V)が同数導入される¹⁾。これらの点欠陥は結晶中を移動し、異種の欠陥同士が会合すると相互消滅を起こし、また、同種の欠陥同士が会合すると結合して転位ループやボイドなどの点欠陥集合体を形成する。これらの欠陥反応による欠陥の蓄積は、照射された材料のサイズ変化や機械的特性の劣化の主要因である¹⁾。それゆえ、点欠陥蓄積過程の理解は、原子炉や核融合炉などの高エネルギー粒子照射下で使用する材料の寿命予測と新規材料開発の上で極めて重要である。

欠陥蓄積過程の理解のために、これまでに kinetic Monte Carlo (KMC)シミュレーションや、欠陥反応速度論に基づくコンピューターシミュレーションが開発され広く用いられている。これらの方法では、個々のタイプの欠陥のデータを入力パラメーターとして用い、膨大な数の欠陥からなる欠陥蓄積過程がシミュレートされる。

KMCシミュレーションでは、個々の欠陥のふるまいが確率論に従い追跡される^{2,3)}。ある反応体積内に共存する2つの欠陥はただちに反応する(反応体積は通常、ある反応半径を持つ球体で近似される)。KMCでは、個々の欠陥種の移動頻度や欠陥同士の反応半径などの入力パラメーターが正しければ得られる計算結果の定量性は優れていると考えられ

る。しかし、アルゴリズムの並列化が困難であり、このため炉材料の寿命に匹敵する数十年のオーダーにわたる欠陥蓄積過程の模擬は困難である。

一方、欠陥反応速度論は、大きく分けて、Frank, SeegerとSchottky⁴⁾、GöseleとFrank⁵⁾、およびGöseleとSeeger⁶⁾によって開発された欠陥同士の空間的相関の効果を取り入れた拡散理論、ならびに、Frank⁷⁾、およびGöseleとFrank⁵⁾によって開発された平均場近似に基づく反応方程式の2つに分類される。このうち拡散理論は、その式が比較的複雑であるため、極めて単純な反応にのみ適用され得る。他方、反応方程式では、個々のタイプの欠陥の濃度の時間微分がそれぞれの欠陥種の濃度および拡散係数(あるいはジャンプ頻度)の比較的簡単な関数として記述される。このため、反応方程式は、KMCに比べ計算時間が短く済み、より長時間にわたる欠陥蓄積過程のシミュレーションに広く適用されている。しかし、反応方程式による欠陥蓄積過程のシミュレーション結果が定量的にどれほど信頼できるものか必ずしも明らかではない。

照射下での欠陥の蓄積における最も基本的な要素過程は、SIAとSIA、VとV、およびSIAとVの3種類の点欠陥同士の反応である。金属中のSIAの移動は、SIAの構造と結びついた移動様式および移動頻度によって特徴づけられる。たとえば、体心立方(BCC)金属および面心立方(FCC)金属において、候補となる複数のSIAの構造のうち、もっとも可能性が高いと考えられる候補は、3次元(3D)移動をするdumbbell、およびその最密軸に沿って1次元(1D)移動をするcrowdionの二つである^{8,9)}。拡散理論および反応方程式に

^{*1} 大阪大学大学院生(Graduate Student, Osaka University)

^{*2} 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業(CREST, JST)

において、移動する SIA と静止した欠陥との反応速度が定式化され、この SIA の移動の次元(3D または 1D)が反応速度に大きな影響を与えるファクターであることが示されている^{5-7,10,11)}。

我々は、BCC 格子における SIA-SIA の反応過程を KMC によって解析し、得られた結果に基づいて SIA-SIA 反応方程式の次数を移動次元が 3D および 1D の場合について求めている¹²⁾。また、複数の SIA のみを含む系のアニーリング過程を KMC によって解析し、反応方程式による解析の定量性を検証している。その結果、平均場近似に基づいて立式された SIA-SIA 反応方程式の結果は半定量的には KMC シミュレーション結果と一致すること、しかしアニーリング時間が長くなると、SIA-SIA 間の空間分布が一様分布から外れていくために反応方程式によるシミュレーションの定量性が悪くなることが明らかにされた¹²⁾。

本研究では、BCC 格子における SIA と V の相互消滅反応に着目し、KMC による解析を行うとともにその結果に基づいて反応方程式の定量性を評価する。SIA-V の反応方程式は、確率論によって既に導出がなされている^{5,7)}。しかし、本研究では、まずは KMC によって反応方程式における V 濃度のべき指数の再評価を行う。ここでは、KMC における反応半径と反応方程式における反応の幾何学的定数との関係も明らかにする。次に、KMC により SIA と V からなる系のアニーリング過程を解析する。得られた解析結果を反応方程式の結果と比較して、反応方程式の定量性を検証する。ここでは併せて、拡散理論式の結果との比較も行い、その定量性を検証する。

2. 方 法

2.1 反応方程式の概要

移動する SIA と静止したトラップとの反応方程式は、Frank⁷⁾、および Gösele と Frank⁵⁾ によって最初に導出された。その後、この反応方程式は膨大な数の系に適用されている^{1,11,13)}。ここでは、Barashev, Golubov と Trinkaus¹⁰⁾ によるレビューを参考にして反応方程式の立式の概要を説明する。本論文では、SIA のトラップとして V のみが存在する系を考えることにする。

SIA の濃度 C_1 の時間変化は次の式で与えられる。

$$-\frac{1}{C_1} \frac{dC_1}{dt} = \frac{1}{\tau} \quad (1)$$

ここで、 t は時間、 τ は、SIA が 1 つのトラップに捕捉されるまでの平均時間、すなわち SIA の平均寿命である。 τ は、トラップの濃度と SIA のジャンプ頻度 M_1 の関数で表すことができる。本論文では、各欠陥種の濃度を格子点数あたりの欠陥の数(無次元量)で定義することとする。

SIA のトラップとして、空間的に一様に分布した静止した V のみを考える。このとき、 τ は確率論に基づいて次式で与えられる。

3D:

$$\tau_{IV, 3D} = \frac{1}{Z_{IV, 3D} M_1 C_V^{\alpha_{IV, 3D}}} (\alpha_{IV, 3D} = 1) \quad (2)$$

1D:

$$\tau_{IV, 1D} = \frac{1}{Z_{IV, 1D} M_1 C_V^{\alpha_{IV, 1D}}} (\alpha_{IV, 1D} = 2) \quad (3)$$

ここで、 Z は幾何学的定数、 C_V は V の濃度、 α はべき指数定数である。下付き文字の IV は SIA と V の反応を、3D および 1D はそれぞれ SIA の移動次元を表す。式(2)および式(3)に示されるように、 τ のトラップ濃度への依存性は SIA の移動次元によって変わる。

式(2)における幾何学的定数 $Z_{IV, 3D}$ の反応半径 r_{IV} に対する関数関係は、反応速度律速、拡散律速およびそれらの混合型の場合でそれぞれ表式が異なる。連続体近似による理論式は、それぞれの場合について次式で与えられる¹⁾。

反応速度律速:

$$Z_{IV, 3D} = 6\pi r_{IV}^2 \quad (4)$$

拡散律速:

$$Z_{IV, 3D} = 4\sqrt{3}\pi r_{IV} \quad (5)$$

混合型:

$$Z_{IV, 3D} = 12\pi r_{IV}^2 / (2 + \sqrt{3} r_{IV}) \quad (6)$$

ここで、 r_{IV} は原子間距離を単位にとることとする。

一方、式(3)における幾何学的定数 $Z_{IV, 1D}$ は、連続体近似によって、

$$Z_{IV, 1D} = \frac{27}{8} (\pi r_{IV}^2)^2 \quad (7)$$

で与えられる¹⁰⁾。本研究では、式(2)および式(3)におけるべき指数定数 $\alpha_{IV, 1D}$ および $\alpha_{IV, 3D}$ を評価する。また、式(4)~(7)の妥当性について検証する。そのための KMC シミュレーションの条件を次節に述べる。

2.2 べき指数定数および幾何学的定数の KMC による評価

空間的に一様に配置された複数の静止した V と 1 つの移動する SIA を含む系を設定する。この SIA がある V と出会うまでの時間(寿命)を、 C_V , r_{IV} の関数として求める。この系では、すべての欠陥の空間分布の一様性はほぼ保たれる。なお、3.2 節で述べるように、複数の V と複数の SIA が配置されたより現実的な系を考えた場合、欠陥の空間分布の一様性は保たれない。

KMC シミュレーションの条件は以下のとおりである。

(1) シミュレーション・セルは、SIA の移動次元が 3D の場合は、 $200 \times 200 \times 200$ 単位 BCC 格子である。SIA の移動次元が 1D の場合は、セルは、 $\langle 111 \rangle$ 方向に中心軸を持つ円筒である。そのサイズは、中心軸に沿って 10^6 格子点、動径方向には r_{IV} の半径を持つ。また、SIA の移動次元が 3D の場合は、すべての方向に周期境界条件を適用する。SIA の移動次元が 1D の場合は、中心軸の方向にのみ周期境界条件を適用する。

(2) SIA および V は格子点に存在する。SIA の移動次元が 1D の場合は、SIA は中心軸上にのみ存在し得る。

(3) V が初期配置される格子点は、 C_V の値(条件(6)参照)に応じた数だけ、全格子点から等確率で選ばれる。この際、同一の格子点に二つ以上の V が重複して存在しないという条件が課される。

(4) SIA の移動は通常の object KMC^{2,3)} の手法に従っ

て、確率的に起こる。即ち、連続する2移動の時間間隔の分布は平均値 $1/M_1$ の指数分布に従う。ここでは、 $M_1 = 4.53 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ とした(この値の詳細は本研究では重要な意味はない)。

(5) SIA の移動方向は、SIA の移動次元が 3D の場合は、8 つの $\langle 111 \rangle$ 方向のいずれかが等確率で選ばれる。SIA の移動次元が 1D の場合は、シミュレーション・セルの中心軸に沿った 2 方向のいずれかが等確率で選ばれる。いずれの場合も、1 回の移動につき、1 原子間距離だけ SIA は移動する。

(6) C_V の値は、 $1 \times 10^{-5} \sim 1 \times 10^{-2}$, r_{IV} の値は、1~8 の範囲で変化させる。

(7) それぞれの C_V , r_{IV} の組み合わせに対して、V の 1000 通りの初期配置について(1)~(5)の条件の下で SIA の寿命を求め、その平均をもって τ とする。

2.3 SIA と V からなる系のアニーリング過程の解析

2.2 節で採用する系は、欠陥どうしの空間分布の一様性を保つために設定するものであり、現実的でない。複数の V と同数の SIA が存在する、より現実的な系のアニーリングを KMC によって行い、2.1 節の手法で求められる反応方程式の定量性をチェックする。この比較的単純な系については、拡散理論による反応速度の近似式が得られている。したがって、拡散理論の定量性についても共に検証する。

ここでの object-KMC の条件は次のとおりである。

(1) シミュレーション・セルは、SIA の移動次元が 3D の場合は、 $200 \times 200 \times 200$ 単位 BCC 格子、1D の場合は、 $290 \times 290 \times 290$ 単位 BCC 格子とする。また、すべての方向に周期境界条件を適用する。

(2) SIA および V は格子点に存在する。

(3) SIA および V が初期配置される格子点は、 C_I と C_V の値(条件(5)参照)に応じた数だけ、全格子点から等確率で選ばれる。この際、同一の格子点に二つ以上の SIA (あるいは V) が重複して存在しないという条件、およびすべての SIA-V 対間の距離は、 r_{IV} (条件(5)参照)より大きいという条件が課される。

(4) SIA の移動の起こり方は、2.1 節と同様とする。ただし、SIA の移動次元が 1D の場合、それぞれの SIA の移動軸は初めに 8 つの $\langle 111 \rangle$ 方向から等確率で選ばれる。その後の移動方向は、初めに選ばれた移動軸に沿った 2 つの方向のいずれかが等確率で選ばれる。

(5) C_I と C_V の初期値は、 1×10^{-2} , r_{IV} の値は 1 とする。

3. 結 果・考 察

3.1 べき指数定数および幾何学的定数の KMC による評価

Fig. 1 は、KMC によって得られた SIA の移動次元が 3D および 1D の場合についての τ の C_V に対する依存性を示す。ここで、 $r_{IV} = 1$ である。平均寿命 $\tau_{IV, 3D}$ と $\tau_{IV, 1D}$ はそれぞれ $1/C_V^{\alpha_{IV, 3D}}$ ($\alpha_{IV, 3D} = 1.03 \pm 0.01$) および $1/C_V^{\alpha_{IV, 1D}}$ ($\alpha_{IV, 1D} = 1.98 \pm 0.03$) にほぼ比例することがわかる。この結果は、既存の理論式、式(2)および式(3)と合致する。

Fig. 2 に KMC で求めた $Z_{IV, 3D}$ および $Z_{IV, 1D}$ の r_{IV} 依存性

Fig. 1 Dependence of the average lifetime of one SIA, τ , on the concentration of vacancies, C_V , for the case of a 3D and 1D migrating SIA. (reaction radius, $r_{IV} = 1$)

Fig. 2 Dependence of the geometrical constant for the reaction between an SIA and a vacancy, Z_{IV} , on r_{IV} , for a 3D and 1D migrating SIA.

をそれぞれ●印および○印にエラーバーをつけて示す。それぞれの $Z_{IV, 3D}$ および $Z_{IV, 1D}$ の r_{IV} 依存性は $Z_{IV, 3D} = (29.5 \pm 0.1)r_{IV}^{1.08 \pm 0.04}$ および $Z_{IV, 1D} = (94.1 \pm 0.8)r_{IV}^{3.16 \pm 0.13}$ で近似的にフィットされる。したがって、 τ は次式で近似されることになる。

$$\tau_{IV, 3D} = \frac{1}{30r_{IV}^{1.1}M_1C_I^1} \quad (8)$$

$$\tau_{IV, 1D} = \frac{1}{94r_{IV}^{3.2}M_1C_I^2} \quad (9)$$

式(1)に式(8)および式(9)を代入すると、SIA の移動次元が 3D および 1D の場合の反応方程式として次式が得られる。

$$\left(-\frac{dC_I}{dt}\right)_{IV, 3D} = 30r_{IV}^{1.1}M_1C_IC_V \quad (10)$$

$$\left(-\frac{dC_I}{dt}\right)_{IV, 1D} = 94r_{IV}^{3.2}M_1C_IC_V^2 \quad (11)$$

Fig. 2 には、式(4)~(7)で与えられた $Z_{IV} = Z_{IV}(r_{IV})$ の理論式により得られる計算値を併せて示した。SIA の移動

次元が 3D の場合, KMC で得られた $Z_{IV,3D}$ の r_{IV} 依存性と最も近い理論式は, 拡散律速反応の場合のもの(式(5))である. これに対して, SIA の移動次元が 1D の場合, KMC で得られた $Z_{IV,1D}$ と既存の連続体近似で求められた理論式(式(7))との合致は良くない. 特に r_{IV} が小さい場合, その偏倚は大きい. これは, r_{IV} が小さいときは, 格子の影響が顕著に効くためと考えられる. 格子の影響を考慮に入れるために, 単純に, 式(7)中の πr_{IV}^2 をシリンダー断面積中の格子点数で置き換えると, 新たに次式が得られる.

$$Z_{IV,1D} = \frac{27}{8}(3r_{IV}^2 + 3r_{IV} + 1)^2 \quad (12)$$

式(12)で与えられる $Z_{IV,1D}$ の値も, Fig. 2 中に示した. 式(7)に格子の影響を取り入れることによって, $Z_{IV,1D}$ の r_{IV} に対する変化の形状は KMC の結果により近づくことがわかる.

3.2 SIA と V からなる系のアニーリング

Fig. 3 は, SIA の移動次元が 3D あるいは 1D の場合の, アニーリングによる C_I の時間依存性を示す. ここで, $r_{IV} = 1$ である. Fig. 4 は, C_I の時間微分を負値 $-dC_I(t)/dt$ の C_I 依存性を示す. Fig. 3 および Fig. 4 中には, 3.1 節で KMC の結果を反映させて求めた式(10)および式(11)の反応方程式の解も表示する. さらに, Gösele と Seeger⁶⁾ によって半解析的に導かれた拡散理論式の解も併せて示す. この拡散理論式は, SIA の移動次元が 3D および 1D のそれぞれの場合について次式で表すことができる.

$$\left(-\frac{dC_I}{dt}\right)_{IV,3D} = \frac{C_I C_V}{\Omega} 4\pi r_{IV} D_I \left[1 + \frac{r_{IV}}{(\pi D_I t)^{1/2}}\right] \quad (13)$$

$$\left(-\frac{dC_I}{dt}\right)_{IV,1D} = \frac{C_I C_V}{\Omega} 2\pi r_{IV}^2 \left(\frac{D_I}{\pi t}\right)^{1/2} \quad (14)$$

ここで, D_I は SIA の拡散係数である. Fig. 3 および Fig. 4 からわかるように, 反応方程式の解は, SIA の移動の次元に関わらず, KMC シミュレーションによる結果と定性的には一致するが, 定量的には一致しない. このことは, 次に述べるように反応方程式では欠陥どうしの空間相関の効果が取り入れられていないためと考えられる. 一方, 拡散理論式の解は, 長時間では, 反応方程式の解とほぼ一致することがわかる. しかし短時間での解は, 拡散理論式が欠陥どうしの空間相関をある程度考慮しているにも関わらず, KMC の結果と定性的にも一致しない. これは, 式(13)における右辺第 2 項(短時間項)の近似の度合いが悪いためであると考えられる.

Fig. 5 は, SIA および V が一様分布している系と, アニーリング後の系について, SIA のまわりの V の動径分布関数を比較するものである. ここに, 前者の系は, C_I および C_V が 1×10^{-3} の条件のもとで SIA および V が一様に配置されたものである. 後者の系は C_I および C_V の初期値が 1×10^{-2} のもとで SIA および V が一様に配置された系を両濃度が 1×10^{-3} になるまでアニーリングしたものである. Fig. 5 より, アニーリングによって, SIA の付近の C_V の値が低下することがわかる. この要因は, その間隔が平均距離よりも短い SIA-V 対が優先的に衝突・反応することによって, 残される SIA-V 対間の距離が一様分布のそれに比べて長く

Fig. 3 Dependence of C_I on time, t , under annealing of systems composed of SIAs and vacancies. ($r_{IV}=1$)

Fig. 4 Dependence of the negative temporal derivative of the SIA concentration, $-dC_I/dt$, on C_I , under annealing of systems composed of SIAs and vacancies. ($r_{IV}=1$)

Fig. 5 Radial distribution function of vacancies around SIAs ($r_{IV}=1$) after its conversion to the local concentration of vacancies. The results are shown for a system with a homogeneous arrangement of vacancies with $C_V=1 \times 10^{-3}$, and for systems annealed from a state including homogeneously arranged SIAs with $C_V=1 \times 10^{-2}$ to that with $C_V=1 \times 10^{-3}$.

なるためであると考えられる。この場合、アニーリング初期には、反応速度は反応方程式よりも高くなると期待される。この傾向は Fig. 4 に示される結果と合致する。一方、アニーリング後期には、SIA のまわりの V の濃度が平均濃度よりも低くなるため、反応速度は反応方程式より短くなるはずである。この傾向も Fig. 4 に示される結果と合致している。

4. 結 言

本研究では、BCC 格子中の SIA と空孔の相互消滅反応について、KMC 法を用いて調べ、次の知見を得た。

第 1 に、複数の静止した V と 1 つの SIA からなる系に対して、SIA の移動次元が 3D および 1D のそれぞれの場合について、反応方程式における、 C_V のべき指数を評価するとともに、 Z_{IV} の r_{IV} 依存性を求めた。 C_V のべき指数は、SIA の移動次元によらず既存の理論と合致した。一方、 Z_{IV} の r_{IV} 依存性は、 $Z_{IV,3D} = 30r_{IV}^{1.1}$, $Z_{IV,1D} = 94r_{IV}^{3.2}$ となった。 $Z_{IV,1D}$ に関する既存の理論式およびその単純な改良版(式(12))は、これらの結果と定量的には一致しなかった。これは、これらの理論式には、格子の影響が十分に取り入れられていないためである。したがって、結晶における幾何学的定数の反応半径依存性を定量評価する場合には、ここで行ったような KMC シミュレーションが必要となる。

第 2 に、SIA と空孔が同濃度で配置された系のアニーリングを調べ、得られた結果を反応方程式および拡散理論式の結果と比較した。その結果、本研究で得られた反応方程式の結果は KMC の結果を定性的には再現したが定量的には KMC の結果と一致しなかった。一方、拡散理論式は、反応方程式よりも再現性が悪かった。アニーリングの進行に伴って、SIA の周りの V の空間分布は一様分布からずれていった。このような欠陥の空間分布の非一様性が、反応方程式の定量性を悪くする要因と考えられる。

本研究は、照射下での欠陥蓄積過程やアニーリングによる

欠陥反応を反応方程式によって解析する際、特に欠陥どうしの相関が問題になると考えられる、高照射量、あるいは長時間アニーリングの条件では、その結果の解釈に注意が必要であることを示す。したがって、照射によって導入された欠陥の数密度やサイズ分布等の観察から、欠陥に関するパラメータを定量評価する場合、併用されるシミュレーション法としては、KMC 法が第 1 選択肢となると考えられる。現在、超高圧電子顕微鏡による高エネルギー電子照射と KMC の組み合わせによる欠陥パラメータの定量的な評価の試みがようやくためされ始めているところである。

本研究は、科学研究費補助金(21560686 および 22224012)、研究拠点形成費補助金グローバル COE プログラム「構造・機能先進材料デザイン教育研究拠点」(大阪大学)、日本鉄鋼協会鉄鋼研究振興助成、および公益財団法人池谷科学技術振興財団の助成のもとに実施された。

文 献

- 1) G. S. Was: *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys*, (Springer-Verlag, Berlin, 2007).
- 2) N. Soneda and T. D. de la Rubia: *Philos. Mag. A* **81**(2001) 331.
- 3) C. Domain, C. S. Becquart and L. Malerba: *J. Nucl. Mater.* **335**(2004) 121.
- 4) W. Frank, A. Seeger and G. Schottky: *Phys. Status Solidi* **8**(1965) 345.
- 5) U. Gösele and W. Frank: *Phys. Status Solidi B* **61**(1974) 163.
- 6) U. Gösele and A. Seeger: *Philos. Mag.* **34**(1976) 177.
- 7) W. Frank: *Defects in Refractory Metals*, ed. by R. D. Batist, J. Nihoul and L. Stals, (SCK/CEN, Mol, 1972) pp. 199-215.
- 8) J. W. Corbett: *Electron Radiation Damage in Semiconductors and Metals*, *Solid State Phys.*, Supplement 7, ed. by F. Seitz and D. Turnbull, (Academic Press New York and London, 1966).
- 9) P. M. Derlet, D. Nguyen-Manh and S. L. Dudarev: *Phys. Rev. B* **76**(2007) 054107.
- 10) A. V. Barashev, S. I. Golubov and H. Trinkaus: *Philos. Mag.* **81**(2001) 2515.
- 11) B. N. Singh, S. I. Golubov, H. Trinkaus, A. Serra, Y. N. Osetsky and A. V. Barashev: *J. Nucl. Mater.* **251**(1997) 107.
- 12) T. Amino, K. Arakawa and H. Mori: *Philos. Mag.* **91**(2011) 3276.
- 13) M. Kiritani and H. Takata: *J. Nucl. Mater.* **69 & 70**(1978) 277.