

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

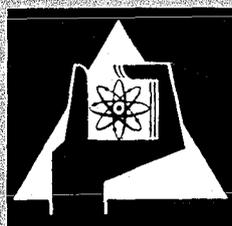
Juli 1971

KFK 1438

Institut für Material- und Festkörperforschung
Projekt Schneller Brüter

Defekterzeugungsraten und Verlagerungsquerschnitte in Metallen
und Legierungen bei Bestrahlung in Reaktoren und Beschleunigern

K. Ehrlich, D. Kaletta, W. Schneider



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Juli 1971

KFK 1438

Institut für Material- und Festkörperforschung
Projekt Schneller Brüter

Defekterzeugungsraten und Verlagerungsquerschnitte in Metallen und Legierungen
bei Bestrahlung in Reaktoren und Beschleunigern

K. Ehrlich, D. Kaletta, W. Schneider

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

Zusammenfassung

Die Berechnung der Defekterzeugungsraten infolge elastischer Wechselwirkung zwischen den Stoßpartnern erfolgt für Neutronen über ein Harte-Kugel-Modell, für die geladenen Teilchen (α , C^{++12} , Ni^{+58}) über ein modifiziertes Inverspotential. Der untersuchte Energiebereich für die Einschußenergie E_0 liegt zwischen 25 eV und 100 MeV. Referenztargets sind Nickel und stabilisierter 4988 Stahl. Unter der Annahme ausschließlicher singulärer Frenkeldefektpaar-Erzeugung folgt, daß die Reaktoren EBR II und DFR fast doppelt so hohe Schädigungsraten pro Dosiseneinheit hervorrufen als der SNR. Im Bereich der maximalen elastischen Schädigung erzeugen die geladenen Teilchen eine um mehrere Größenordnungen höhere Defektrate als Neutronen, was zu kürzeren Bestrahlungszeiten führt. Das Problem der Spike- und Frenkeldefektpaar-Erzeugung wird in Termen der mittleren freien Verlagerungsweglänge und der mittleren übertragenen Energie diskutiert.

Summary

Defect production rates due to nuclear interaction between bombarding and target atom have been calculated for the case of neutron with the hard-sphere-model, for the case of charged particles (α , C^{++12} , Ni^{+58}) with a modified inverse power potential. Results are reported for bombarding energies E_0 between 25 eV and 100 MeV for nickel and stabilized 4988 ss. With the simplified assumption that only simple Frenkel defects (vacancy-interstitial pairs) are produced it follows that the reactors EBR II and DFR have almost twice the damage rate as obtained in SNR. In the case of ion bombardment the damage rate near the end of range is several orders of magnitude larger than in the neutron case, consequently much shorter irradiation times are required. In a closing discussion the problems of spikes vs. Frenkeldefect production are discussed in terms of the mean free displacement path and of the mean transferred energy.

Einführung

Die elastische Wechselwirkung von Neutronen bzw. geladenen Teilchen mit einem Festkörper bestimmt Art und Umfang der Strahlenschädigung. Als ein charakteristisches Maß kann dafür der sogenannte Verlagerungs-Wirkungsquerschnitt σ_D definiert werden, der die Verlagerung von einzelnen Gitteratomen durch Primärstöße und sich daraus ergebende Stoßfolgen (Kaskaden) gleichermaßen beinhaltet.

Von technologischem wie grundlegendem Interesse ist dabei die Frage der Vergleichbarkeit verschiedener Bestrahlungsquellen im Hinblick auf ihre Defekterzeugung in metallischen Festkörpern. In den folgenden Berechnungen werden verschiedene Reaktoren und Bestrahlungsquellen wie Zyklotron und Schwerionenbeschleuniger in ihrer Wirksamkeit miteinander verglichen.

Im allgemeinen ist zur Verlagerung eines Gitteratoms in eine stabile Zwischengitteratomlage eine Verlagerungsenergie E_D notwendig, die gitteranisotrop ist. In erster Näherung wird bei hier vorliegenden Berechnungen diese Anisotropie jedoch nicht berücksichtigt. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß Primärstöße mit übertragenen Energien $T > E_D$ auftreten, ist gegeben durch

$$\sigma_D^+ = \int_{E_D}^{T_{\text{Max}}} d\sigma(E_0, T) \quad (1)$$

mit E_0 als der Energie des primär eingeschossenen Teilchens und T_{Max} der maximal übertragenen Energie. Bezieht man gleichzeitig die durch Sekundärstoßprozesse entstehenden Frenkeldefekte durch einen sogenannten Vervielfältigungsfaktor $\nu(T)$ mit ein, so kann man den eigentlichen Verlagerungsquerschnitt σ_D definieren zu:

$$\sigma_D = \int_{E_D}^{T_{\text{Max}}} \nu(T) d\sigma(E_0, T) \quad (2)$$

Der Verlagerungsquerschnitt σ_D von Legierungen setzt sich additiv aus den gewichteten σ_D 's der einzelnen Legierungskomponenten zusammen (Compoundformel). Handelt es sich - wie im Falle von Reaktorbestrahlungen - um Primärteilchen unterschiedlicher Energie E , so erhält man eine differentielle Erzeugungsrate dk von Frenkel-paaren nach folgendem Ausdruck

$$dk = \sigma_D(E) \phi(E) dE \quad (3)$$

mit $\phi(E)$ dem Teilchenstrom der Energie E . Die Erzeugungsrate k an singulären Frenkeldefekten geht wesentlich in alle Überlegungen ein, nach denen die tatsächlichen Übersättigungen an Leerstellen und Zwischengitteratomen errechnet werden. Sie beeinflusst damit z.B. Keimbildung und Wachstum von Poren, in-pile-Kriechen und führt zu bestrahlungsinduzierter Diffusion.

1. Harte-Kugel-Näherung für Neutronenstreuung

Bei Bestrahlung mit Neutronen kann in erster Näherung im Primärstoß mit der sogenannten Harte-Kugel-Näherung (HKN) gerechnet werden. Das Potential wird dabei beschrieben durch:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r > R \\ \infty & \text{für } r < R \end{cases} \quad R \equiv \text{H.K. - Radius} \quad (4)$$

Dies hat im wesentlichen zur Folge, daß die Streuung im Schwerpunktsystem isotrop ist und der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma$ eine einfache isotrope Verteilungsfunktion $\kappa(E, T)$ beinhaltet. Die Formulierung des Vervielfältigungsfaktors wurde nach Kinchin und Pease übernommen [11]. Sie basiert auf der HKN-Näherung

$$v(T) = \begin{cases} 0 & \text{für } T < E_D \\ 1 & \text{für } E_D \leq T < 2E_D \\ \frac{T}{2E_D} & \text{für } 2E_D \leq T < E_I \\ \frac{E_I}{2E_D} & \text{für } T \geq E_I \end{cases} \quad (5)$$

Mit dieser Formulierung wird im wesentlichen der Tatsache Rechnung getragen, daß bei übertragenen Energien $T \geq E_I$ die Ionisation, d.h. die inelastische Wechselwirkung des primär angestoßenen Gitteratoms mit seinen Nachbarn überwiegt.

Die miteinander verglichenen Reaktorspektren (DFR, EBR II, FR 2, SNR und BR 2) sind im 26-Gruppensatz nach Abagjan [1] dargestellt (Fig. 1). Dabei wurden innerhalb der einzelnen Gruppen folgende Mittelungen vorgenommen:

$$\phi_g = \frac{\int_{E_g^u}^{E_g^o} d\phi(E)}{E_g^o - E_g^u}; \quad \sigma_g = \frac{\int_{E_g^u}^{E_g^o} \sigma(E) dE}{E_g^o - E_g^u}$$

mit E_g^O bzw. E_g^U als der gewählten oberen bzw. unteren Energiegrenze innerhalb einer Gruppe. Unter Berücksichtigung der verschiedenen Vervielfältigungsfaktoren (4) wurde folgender Ausdruck für die integrale Erzeugungsrate K entwickelt:

$$k = \sum k_g = \frac{\alpha_o}{4E_D} \left\{ \sum_A \phi_g \sigma_g \cdot \frac{(E_g^O + E_g^U)}{2} + \frac{E_1}{\alpha_o} \cdot \sum_B \phi_g \sigma_g \cdot \left[2 - \frac{E_1}{\alpha_o} \cdot \ln E_g^O/E_g^U \cdot (E_g^O - E_g^U)^{-1} \right] \right\}$$

$$\text{mit } \alpha_o = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (6)$$

Die Summation A erstreckt sich über die Gruppen, deren Energie $E \leq E_1/\alpha_o$, wobei die Gruppe, in der $E_1/\alpha_o = E$ entsprechend in zwei Untergruppen aufgeteilt ist. Analog umfaßt B alle Gruppen mit $E > E_1/\alpha_o$.

11. Erweiterte Impuls-Näherung für Streuung mit geladenen Teilchen

Bei Einschub mit geladenen Teilchen auf metallische Targets wird zunächst kurz auf die Gültigkeitskriterien für den Anwendungsbereich der klassischen Mechanik eingegangen. Stöße zwischen Atomen werden bei quantenmechanischer Behandlung in Termen der Superposition von Wellenfunktionen der Primär- und Targetatome ausgedrückt, wobei das Stoßgesetz durch Lösung der Wellengleichung determiniert wird. Wesentlich einfachere Resultate erhält man jedoch durch klassische Näherungsmethoden, deren Gültigkeitsgrenzen hier kurz diskutiert werden. Die Anwendung der klassischen Mechanik setzt voraus, daß die physikalischen Dimensionen des zu beschreibenden Systems größer als die effektive Wellenlänge λ des Zweikörpersystems ist:

$$\lambda = \hbar/m \cdot v$$

wenn m die reduzierte Masse $m = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ und v die Geschwindigkeit der Partikel ist. Für Zentralstöße in einem Coulombfeld ist der Stoßparameter $b = Z_1 Z_2 e^2 / E_{\text{Rel}}$, die kleinste physikalische Dimension, während für Streuprozesse in einem abgeschirmten Potential die Abschirmlänge a mit $b > a$ die kleinste physikalische Dimension bedeutet. E_{Rel} ist dabei die Relativenergie. Wird für a der übliche Ansatz

$$a = a_H \cdot (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$

(a_H = Bohrscher Wasserstoffradius; $Z_{1,2}$ Kernladungszahl der Stoßparameter) gewählt, so folgt aus der Bedingung

$$\chi > \xi \quad (\chi = b/\lambda ; \quad \xi = b/a)$$

für die untere Grenze der Energie E_o des Primärteilchens E_o

$$E_0 > \left(\frac{h}{a_H} \right)^2 \cdot \left(\frac{1+A}{A} \right)^2 \cdot \frac{1}{2M_1} (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})$$

Mit $A = M_2/M_1$ und aus der Bedingung $\chi \gg \xi$ und $\chi \gg 1$ als obere Grenze für E_0

$$E_0 \ll 2M_1 \left(\frac{Z_1 Z_2 \cdot e^2}{h} \right)^2$$

Damit ist die klassische Näherung innerhalb des hier untersuchten Energiebereiches $25 \text{ eV} \leq E_0 \leq 100 \text{ MeV}$ für die Systeme $(Z_1, Z_2) = (2, 28); (6, 28); (28, 28)$ anwendbar.

Anstelle der harten Kugelnäherung wird für die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen stoßendem und gestoßenem Teilchen ein inverses Potential der Form

$$V_{\text{inv}}(r) = \frac{Z_1 Z_2 \cdot e^2}{s \cdot r^s} \cdot a_{\text{inv}}^{s-1}; \quad \text{mit } 1 \leq s < 15 \quad (7)$$

gewählt. Die Bestimmung der Abschirmlänge a_{inv} und des Exponenten s erfolgt semiempirisch. Die experimentelle Abschirmlänge a_{inv} ist das Produkt aus einem empirischen Faktor β und der klassischen Abschirmlänge a , die gewöhnlich anstelle von a_{inv} in diesem Ansatz verwendet wird. Die Größe des s -Exponenten bestimmt die Form des Wechselwirkungspotentials, wobei s selbst eine Funktion des Abstands der beiden Stoßpartner ist. Da a priori über den funktionellen Zusammenhang von s und r keine Aussagen vorliegen, werden zunächst für verschiedene Wechselwirkungsabstände analytische Potentiale vorgegeben, deren Gültigkeit für bestimmte Abstandsintervalle als relativ gesichert angenommen werden kann. Anschließend werden diese Potentiale einem Fit an das Invers-Potential unterworfen, aus dem der funktionelle Zusammenhang von s und r folgt. Für die Abstandseparation der beiden Stoßpartner mit den zugeordneten Potentialen gilt:

$$\begin{aligned} V_C &= \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \quad \text{für } \tilde{r} < 0.05 \\ V_B &= \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \exp(-r/a_B) \quad \text{für } 0.05 \lesssim \tilde{r} \lesssim 0.8 \\ V_{BM} &= A_{BM} \exp(-r/a_{BM}) \quad \text{für } 0.8 \lesssim \tilde{r} \lesssim 1.35 \\ V_{MO} &= A_{MO} \exp(-r/a_{MO}) - A'_{MO} \exp(-r/a'_{MO}) \quad \text{für } \tilde{r} = \sqrt{3} \end{aligned} \quad (8)$$

mit $\tilde{r} = \sqrt{3} r/D$ und D als dichtestem Abstand zweier Nachbarn.

Die Parameter für das Morse-Potential wurden aus Gleichgewichtsdaten [2] und die Konstanten für das Born-Mayer-Potential aus korrigierten elastischen Konstanten

gewonnen - ähnlich der Huntington-Seitz-Prozedur [3]. Der Anschluß der Potentiale untereinander und ihr gleichzeitiger Fit an das Inverspotential unterlag den Forderungen der Stetigkeit der Potentiale und der Stetigkeit ihrer Ableitungen sowie der Stetigkeit von r , s und a_{inv} in den Anschlußpunkten. Durch diese Randbedingungen wurden die jeweiligen Anschlußpunkte und Fit-Parameter programmintern festgelegt.

In den hier beschriebenen Rechnungen geht das Morse-Potential nicht mehr ein, da die diesem Anschlußradius $\tilde{r} = 1.35$ zugeordnete Energie unterhalb der 25 eV-Grenze [12] liegt und damit für Verlagerungsprozesse nicht wirksam sind. Das semiempirisch gewonnene Born-Mayer-Potential

$$V_{BM} = 24.4 \cdot \exp(-r/0.23 \text{ \AA}) \quad [\text{keV}]$$

wurde analytisch durch den Brinkmannschen Ansatz

$$V_{Br}(r) = \frac{Z^2 \cdot e^2}{2a_{Br}} \exp(-r/a_{Br})$$

dargestellt. Für ungleiches Z der Stoßparameter im Born-Mayer-Bereich wurde a_{BM} in Ermangelung genauer Daten durch einen simplen Ansatz gewonnen:

$$a_{BM}(Z_1 \neq Z_2) = k_1 \cdot a_H (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$

wobei k_1 so gewählt wurde, daß für $Z_1 \rightarrow Z_2$ die Abschirmlänge $a_{BM}(Z_1 \rightarrow Z_2)$ in die experimentelle Abschirmlänge $a_{BM}(Z_1 = Z_2 = Z)$ übergeht.

Der Coulomb-Bereich setzt bei Energien ein, bei denen die Geschwindigkeit der Primärteilchen größer als $v_e = e^2/h$ ist. Figur 2 zeigt die verschiedenen Potentialverläufe, wie sie im statischen Computermodell verwendet wurden.

Aus dem Inverspotential wird nach Lindhard et al. (4) der differentielle Wirkungsquerschnitt durch folgenden Ausdruck abgeleitet:

$$d\sigma(E, T) = (\pi \alpha_{inv}^2 / s) (T_{Max} / T)^{1+1/s} dT / T_{Max} \quad (9)$$

$$\text{wobei: } \alpha_{inv} = \left[0.5 \sqrt{\pi} L_{inv} \Gamma(0.5 s + 0.5) / \frac{M_1 + M_2}{4M_1} T_{Max} \Gamma(0.5 s) \right]^{1/s}$$

$$L_{inv} = \frac{Z_1 Z_2 \cdot e^2}{s} a_{inv}^{s-1}$$

$$a_{inv} = \beta \cdot a = \beta \cdot a_H (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$

Der unter 1. bereits zitierte Kinchin und Pease Ansatz (4) für $v(T)$, der auf der Harten-Kugelnäherung beruht, wird hier durch faktorielle Einführung des Lindhard-faktors $v(s)$ an das Inverspotential angeglichen [5].

Fig. 3 zeigt die Variation von $v(s)$ mit s , die im Kinchin und Pease Modell unabhängig von s ist und 0.5 beträgt. Für $s \gtrsim 4$ bricht der Lindhard-Ansatz zusammen, da für $T_{\text{Max}} = 2E_D$ der Wert $v(2E_D) = 1$ nicht erreicht wird. Das benutzte Kaskadenmodell vernachlässigt, wie weiter unten erläutert wird, gitterspezifische Effekte. Der Stufencharakter der Kaskadenfunktion wird nur im oberen Energiebereich stetig angepaßt, indem die Kaskadenwerte im Bereich der Sprungenergie $E_1 = M_1 \cdot E_F / m_e \cdot 16$ ($E_F \equiv$ Fermienergie) von dem Quotienten aus inelastischem und elastischem Energieverlust abhängig werden. Die Berechnung von $v(T)$ unter Berücksichtigung des inelastischen Stoßverlustes bis zu den unteren Energien mittels der von Lindhard et al. vorgeschlagenen Integralgleichung wird jedoch nicht vorgenommen.

Die Berechnung von σ_D erfolgt analog zu dem in Abschnitt 1. angegebenen Formalismus durch Einsetzen des Ausdruckes (9) und des um $v(s)$ korrigierten Kaskadenfaktors (5) in Gl. (2). Die Erzeugungsrate k erhält man durch einfache Multiplikation von σ_D mit dem monoenergetischen Ionenfluß $\phi(E_0)$.

III. Ergebnisse und Diskussion

Für verschiedene Reaktoren und Reaktorzonen sind in Tab. 1 die integrierten Neutronenflüsse, die damit errechneten integralen Defekterzeugungsrate k und die spektrumspezifischen mittleren Verlagerungsquerschnitte σ_D eingetragen. Die Rechnungen sind bezogen auf den stabilisierten Stahl 4988 als Referenzmaterial. Dies bedeutet, daß die elastischen Wechselwirkungsquerschnitte $\sigma(E)$ der einzelnen 3 dominanten Komponenten Eisen, Chrom und Nickel entsprechend der Zusammensetzung innerhalb der einzelnen Energiegruppen gemittelt wurden. Die Rechnungen sind dahingehend zu interpretieren, daß - unter den erwähnten Annahmen - die Reaktoren EBR 2 und DFR pro Dosiseneinheit fast doppelt so hohe Schädigungsraten in Stählen hervorrufen als der SNR. Allerdings bezieht sich diese Aussage ausschließlich auf den Vergleich singularer Verlagerungsstöße, d.h. eine Abschätzung der Clusterbildung ist darin nicht enthalten. Hier sind weitere theoretische Modellrechnungen vorzunehmen. Dieses Resultat ist insofern von Bedeutung, als die Extrapolation auftretender Bestrahlungsdefekte im SNR zu sehr hohen Neutronendosen hin (z.B. das Phänomen der Porenbildung, des in-pile Kriechens etc.) etwas entschärft wird, da den fast ausschließlich im EBR 2 und DFR gewonnenen Experimenten entsprechend höhere Neutronendosen im SNR zugeschrieben werden können.

Gleichzeitig wurde hier der Versuch unternommen, die verschiedenen Bestrahlungsquellen, welche zur Simulation von Strahlenschäden herangezogen werden, zu vergleichen. In Fig. 4 sind in Abhängigkeit von der Primärenergie der eingeschossenen Teilchen die σ_D -Werte mit den entsprechenden Daten monoenergetischer Neutronen verglichen. Als Targetmaterial ist dabei Nickel eingesetzt. Wichtigstes Ergebnis dieser Zusammenstellung ist, daß die hier aufgeführten Ionen im Bereich der maximalen elastischen Schädigung einen um mehrere Größenordnungen höheren Verlagerungsquerschnitt σ_D erzeugen als Neutronen gleicher Energie E_0 . Dies hat den Vorteil, daß dieselbe integrale Schädigung in entsprechend kürzeren Zeiten erreicht werden kann. Allerdings existieren zwei entscheidende Nachteile: Zumindestens für schwerere Ionen ($Z > 10$) ist die für Experimente bei $E_0 \sim 200$ keV zur Verfügung stehende Eindringtiefe vergleichsweise gering ($\approx 1000 \text{ \AA}$). Damit können die Oberflächen als Senken wirksam werden und Verfälschungen der Konzentration der Strahlenschädigung ergeben. Desweiteren ist die Schädigungsrate innerhalb des Bereichs der Eindringtiefe sehr stark ortsabhängig, man beobachtet die maximale Schädigungsrate gegen Ende der Reichweite. Damit baut sich ein Gradient der Schädigung auf, der ebenfalls zu Ausgleichvorgängen führen kann. Im letzteren Falle kann allerdings durch variierende Energie oder Verkipfung des Targets eine quasihomogene Verteilung erreicht werden.

Für eine erste Abschätzung der zu erwartenden Defektstrukturen ist ein Vergleich der beim Primärstoß übertragenen Energien instruktiv. In Abb. 5 sind die mittleren übertragenen Energien $\langle T \rangle$ und die mittleren freien Verlagerungsweglängen

$$\lambda_D = (\eta \cdot \sigma_D)^{-1} \quad (\eta = \text{Targetdichte}),$$

normiert auf den dichtesten Abstand zweier Ni-Targetatome, in Abhängigkeit von der Einschußenergie E_0 eingetragen. Wenn man der Einfachheit halber beim Einschuß mit geladenen Teilchen eine Coulomb'sche Wechselwirkung voraussetzt, dann liegt die im Mittel beim Primärstoß übertragene Energie bei $\langle T \rangle \approx E_D \cdot \ln T_{\text{Max}}/E_D$, also in der Größenordnung der Verlagerungsenergie E_D . Bei Beschuß mit Neutronen hingegen wächst $\langle T \rangle$ proportional zu T_{Max} an: $\langle T \rangle = 1/2 T_{\text{Max}}$. Qualitativ kann man also erwarten, daß die primären Rückstoßatome bei gleicher Einschußenergie im Falle der Neutronenbestrahlung wesentlich energiereicher sind. Da die Neutronen selbst wegen der großen mittleren freien Weglänge im wesentlichen nur über primäre Stöße einwirken, würden z.B. einer Neutronenenergie von 1 MeV mittlere Rückstoßenergien der Gitteratome von etwa 40 keV entsprechen.

Für die Primärwechselwirkung von Neutronen mit Targetatomen wird die Harte-Kugelnäherung (HKN) verwendet. Dies hat zur Folge, daß beim Primärstoß hohe mittlere Energien $\langle T \rangle$ übertragen werden. Durch die hier gewählte Aufspaltung des differentiellen Wirkungsquerschnitts $d\sigma(E, T)$

$$d\sigma(E, T) = \sigma(E) \cdot \kappa(E, T) dT$$

in einen experimentell vorgegebenen und innerhalb der einzelnen Energiegruppen geglätteten $\sigma(E)$ -Wert und eine isotrope Verteilungsfunktion $\kappa(T) = \kappa(T_{\text{Max}})$ wird zweifellos die Unsicherheit bei $\kappa(E, T)$ liegen. Leibfried (6) gibt eine obere Grenzenergie E_S an, bis zu der isotropes Verhalten beim Primärstoß innerhalb einer 20%igen Abweichung gesichert ist. Für den Fall der Wechselwirkung von Neutronen auf Nickel würde das einer Energie von 0.125 MeV entsprechen. Beim Übergang zu höheren Neutronenenergien tritt eine Bevorzugung kleiner Streuwinkel bzw. kleiner Energieübertragungen auf (7), ohne daß dadurch das Ergebnis größenordnungsmäßig geändert wird. Eine quantitative Erfassung dieser Anisotropie bei höheren Neutronenenergien setzt allerdings quantenmechanische Rechnungen voraus. Der von Nelson [10] gemachte Vorschlag, die Anisotropie durch einen fixierten numerischen Vorfaktor auszugleichen, kann allerdings nur bedingt als Verbesserung gegenüber dem HKN-Modell geltend gemacht werden.

Die Isotropieannahme führt also zu überhöhten Werten der mittleren übertragenen Energie $\langle T \rangle$ und damit - wegen des in diesem Modell gewählten Vervielfältigungsfaktors $\nu(T)$ - zu überhöhten Erzeugungsraten k .

Für Simulationsversuche, bei denen geladene Ionen mit einem Energiespektrum eingeschossen werden, welches möglichst dem Spektrum der primären Rückstoßatome bei Beschuß mit Neutronen entspricht, erscheint es sinnvoll, das Neutronenspektrum $\phi(E)$ in $\phi(P)$ der primären Rückstoßatome zu transformieren. Damit kann das Problem der Nachfolgeprozesse unabhängig von der Art der eingeschossenen Teilchen auf das Wechselwirkungspotential zwischen geladenen Teilchen und Gitteratomen sowie auf die Frage der Formulierung des Vervielfältigungsfaktors reduziert werden. Die Diskussion wird hier der Einfachheit halber auf die Wechselwirkung von Nickelionen mit einem Nickeltarget beschränkt.

Die Zuverlässigkeit der gewählten Potentialparameter kann indirekt durch die Berechnung der Reichweiten und den Vergleich mit den experimentellen Daten überprüft werden. Es zeigt sich dabei für den obigen Fall, daß für Primärenergien < 20 keV die Wahl der Born-Mayer-Parameter empfindlich das Ergebnis beeinflusst,

falls der Potentialfit an das Inverspotential für die verschiedenen Wechselwirkungsbereiche disjunkt erfolgt. (Die BM-Konstanten sind nur bis auf einen Faktor 2 genau ermittelbar.) Wird allerdings eine Superposition der verschiedenen Potentiale mit anschließender Anpassung (s und r sind laufende Parameter) vorgenommen, so ist der Einfluß der experimentellen Unsicherheiten der Born-Mayer-Konstanten weniger gravierend und Reichweitenrechnungen reproduzieren die experimentell gewonnenen Reichweiten innerhalb des Faktors 1,1. Kurz angeschnitten sei das Problem des Vervielfältigungsfaktors $\nu(T)$. Dieser ist so formuliert, daß die beim Primärstoß übertragene Energie T - entsprechend der auf HKN beruhenden klassischen Kaskadentheorie - in Verlagerungsstöße der Energie E_D aufgeteilt ist, unabhängig davon, ob das eingeschossene Teilchen neutral oder geladen ist. Gitterspezifische Effekte wie channeling oder die Ausbildung von spikes sind darin nicht berücksichtigt. Bei der Berechnung von σ_D wird durch die Einführung einer Ionisationsenergie E_I der Anteil $W(T)$ der primären Rückstoßenergie, welcher durch elastische Stoßprozesse innerhalb der Kaskade umgesetzt wird, bei höheren Energien begrenzt (Fig. 6). Eine Berücksichtigung der inelastischen Energieverluste, wie sie nach Modellen von LSS [5] innerhalb der einzelnen Kaskaden für Nickel aussieht, gibt die Funktion $W_1(T)$ wieder. Tatsächlich wird in dem hier vorliegenden konkreten Falle die größere Abweichung bei höheren Rückstoßenergien ($T_p > 0.1$ MeV) nicht stark wirksam, da die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieser primären Rückstoßenergien klein ist.

Schwer abschätzbar ist, inwieweit durch channeling-Effekte die Funktion $W(T)$ insbesondere bei hohen Energien reduziert wird. Folgt man den Berechnungen von Beeler und Besco [9], die an kubisch-raumzentriertem Eisen durchgeführt wurden, so würde bei Primärenergien E_0 von 0.1 MeV die Effektivität für Verlagerungsstöße von dem im Kinchin und Pease Modell verwendeten Faktor 0.5 auf 0.2 abfallen. Allerdings liegen diesen Berechnungen einige Argumente zugrunde, welche nicht ohne weiteres auf die bei uns vorliegenden Verhältnisse übertragen werden können. Interessanterweise führt das Kinchin und Pease-Kaskadenmodell in der von uns verwendeten Form, d.h. also einschließlich der Modifikation über die Ionisationsenergie E_I und des Lindhard-Faktors $\nu(s)$ zu dem gleichen Ergebnis wie die Einführung eines Faktors $W(T)$ und des channeling-Effektes.

Die vorliegenden Berechnungen wurden mit dem Ziel durchgeführt, Erzeugungsraten und Verlagerungsquerschnitte für die Bildung singulärer Defektpaare - also sogenannte Frenkeldefekte - zu halten. Dabei ist angenommen, daß innerhalb der Stoßkaskaden aus-

schließlich Frenkelpaare auftreten würden - eine Annahme, die mit Sicherheit zu überhöhten k -Werten führt. Folgt man den Vorstellungen von Brinkmann (8), so gibt es zwei Energiebereiche, in denen alternativ Singulärdefekte oder sogenannte displacement spikes auftreten. Die Übergangsenergie T_{tr} liegt für Nickel-Nickel-Stoßprozesse, z.B. bei 23 keV. Dies würde in der Tat bedeuten, daß k um Größenordnungen kleiner sein kann. Etwas vereinfacht kann die Brinkmannsche Vorstellung folgendermaßen dargestellt werden: Erreicht die mittlere freie Weglänge für eine Verlagerung λ_D den Wert der Gitterkonstanten des Targetmaterials, dann sind nurmehr displacement spikes zu erwarten. Nach Abb. 5b würde dies bedeuten, daß für Ni-Ni in dem Bereich $500 \text{ eV} \leq T \leq 80 \text{ keV}$ wegen $\lambda_D \leq 1$ ausschließlich mit einer displacement spike formation zu rechnen ist. Eine Erzeugung freier Frenkelpaare sollte somit nicht auftreten. Inwieweit diese Aussage physikalisch noch gerechtfertigt ist, bleibt offen, da das dem Brinkmannschen λ_D -Modell zugrundeliegende Konzept der mittleren freien Weglänge der statistischen Gastheorie für atomare Größenordnungen nicht mehr wohl definiert ist.

Aus den genannten Gründen kann der Vergleich verschiedener Bestrahlungsquellen nur als erste Näherung betrachtet werden, da insbesondere die Frage der Bildung von spikes oder alternativ von Frenkeldefekten bis heute nicht hinreichend aufgeklärt ist. Das kann aber gleichzeitig nur heißen, daß Simulationsversuche mit Schwerionenbeschleunigern nur dann direkt übertragbar sind, wenn die Primärenergien der Ionen dem Rückstoßspektrum bei Neutronenbeschuß entsprechen. Diese Frage aber bedarf noch weiterer Untersuchungen. Eine Betrachtung mit Mittelwerten von $\langle T \rangle$ ist hierzu jedenfalls nur in erster Näherung hinreichend.

Literatur

- (1) Abagjan, L.P., et al., Gruppenkonstanten schneller und intermediärer Neutronen für die Berechnung von Kernreaktoren.
KFK-tr.-144
- (2) L.A. Girifalco und V.G. Weiger, Phys. Rev. 114 (1959) 687;
J. Phys. Chem. Sol. 12 (1960) 260
- (3) H. B. Huntington und Fr. Seitz, Phys. Rev. 61 (1942) 315
- (4) J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36
(1963) 10
- (5) J. Lindhard, M. Scharff, H. Schiøtt. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33
(1963) 14
- (6) G. Leibfried, Bestrahlungseffekte in Festkörpern, B.G. Teubner Verlag,
Stuttgart, 1965
- (7) Robinson, M.T., Phil. Mag. 12, (1965) 741; 17 (1968) 639
- (8) Brinkman, J.A., J. appl. Phys. 25, 8 (1954) 961
- (9) Beeler, J.R., Besco, D.G. J. appl. Phys. 34 (1963) 2873;
Phys. Rev. 134, A 530 (1964)
- (10) Nelson, R.S., AERE-R 6092 (1969)
- (11) G.H. Kinchin und R.S. Pease, Reports on Progress in Physics, Vol. 18 (1955),
The Physical Society, London
- (12) P.G. Lukasson und R.M. Walker, Phys. Rev. 127 (1962) 485
 $E_D = 24$ eV für polykrist. Nickel
A. Bourret, Phys. Stat. Sol. (a) 4 (1971) 831
 $E_{110} = 21$ eV, $E_{100} = 30,5$ eV, $E_{111} = 29$ eV für Ni-Einkristall

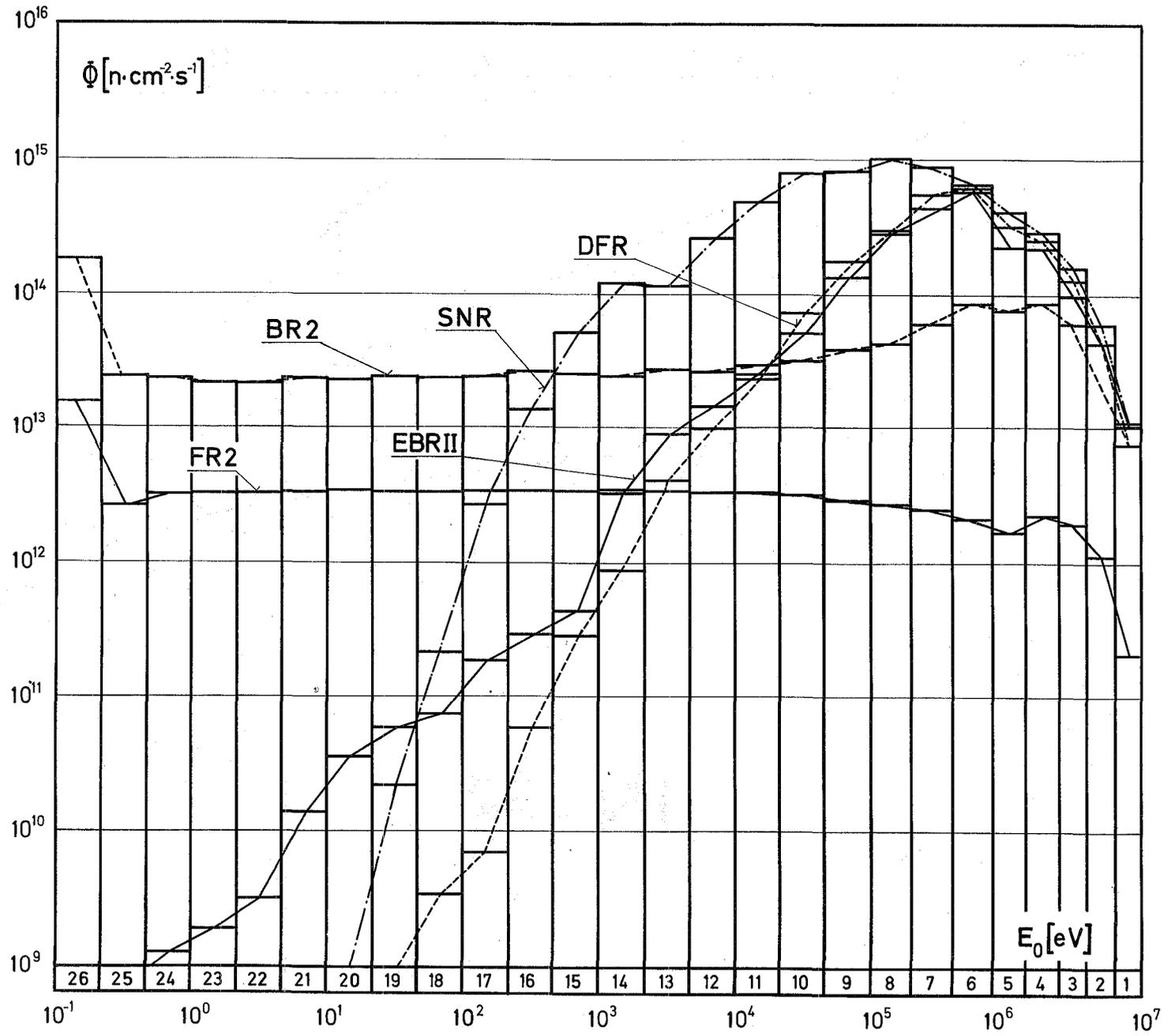
Verzeichnis der Abbildungen

- Fig. 1 Verschiedene Reaktorspektren in der 26-Gruppensatz-Darstellung.
- Fig. 2a Darstellung der in den Computerrechnungen verwendeten Potentiale;
Alphas in Nickel.
- Fig. 2b Darstellung der in den Computerrechnungen verwendeten Potentiale;
Nickelionen in Nickel.
- Fig. 3 Darstellung des Lindhard-Faktors $\nu(s)$ in Abhängigkeit von s .
- Fig. 4 Verlagerungsquerschnitte σ_D für verschiedene Einschubteilchen in
Abhängigkeit von der Primärenergie E_0 .
- Fig. 5a Mittlere, beim Primärstoß übertragene Energien $\langle T \rangle$ und freie Verlagerungs-
Weglängen λ_D (normiert auf den dichtesten Abstand zweier Ni-Targetatome);
für Alphas in Nickel.
- Fig. 5b Mittlere, beim Primärstoß übertragene Energien $\langle T \rangle$ und freie Verlagerungs-
Weglängen λ_D (normiert auf den dichtesten Abstand zweier Ni-Targetatome);
für Nickelionen in Nickel.
- Fig. 6 Für elastische Wechselwirkung zur Verfügung stehender Energieanteil
 $W(T)$ in Nickel in Abhängigkeit von T bzw. E_0 .
- Tab. 1 Verlagerungsquerschnitte σ_D und integrale Defekterzeugungsraten k in
Abhängigkeit von verschiedenen Reaktorspektren.

Tabelle 1 Mittlere Verlagerungsquerschnitte $\langle \sigma_D \rangle$ und integrale Defekterzeugungsraten k in Abhängigkeit von verschiedenen Reaktorspektren

Reaktor	Integraler Fluß [n/cm^2s]	k [s^{-1}]	$\langle \sigma_D \rangle$ [cm^2]	$\langle \sigma_D \rangle / \langle \sigma_D \rangle$ (EBR II)
EBR II	$2,1 \cdot 10^{15}$	$2,75 \cdot 10^{-6}$	$1,31 \cdot 10^{-21}$	1,00
DFR	$2,5 \cdot 10^{15}$	$3,22 \cdot 10^{-6}$	$1,29 \cdot 10^{-21}$	0,98
SNR	$6,0 \cdot 10^{15}$	$4,82 \cdot 10^{-6}$	$8,03 \cdot 10^{-22}$	0,61
BR 2	$1,0 \cdot 10^{15}$	$6,09 \cdot 10^{-7}$	$6,09 \cdot 10^{-22}$	0,54
FR 2	$0,7 \cdot 10^{14}$	$2,42 \cdot 10^{-8}$	$3,46 \cdot 10^{-22}$	0,26

Fig. 1 Verschiedene Reaktorspektren in der 26-Gruppensatz-Darstellung.



$\alpha: Ni$

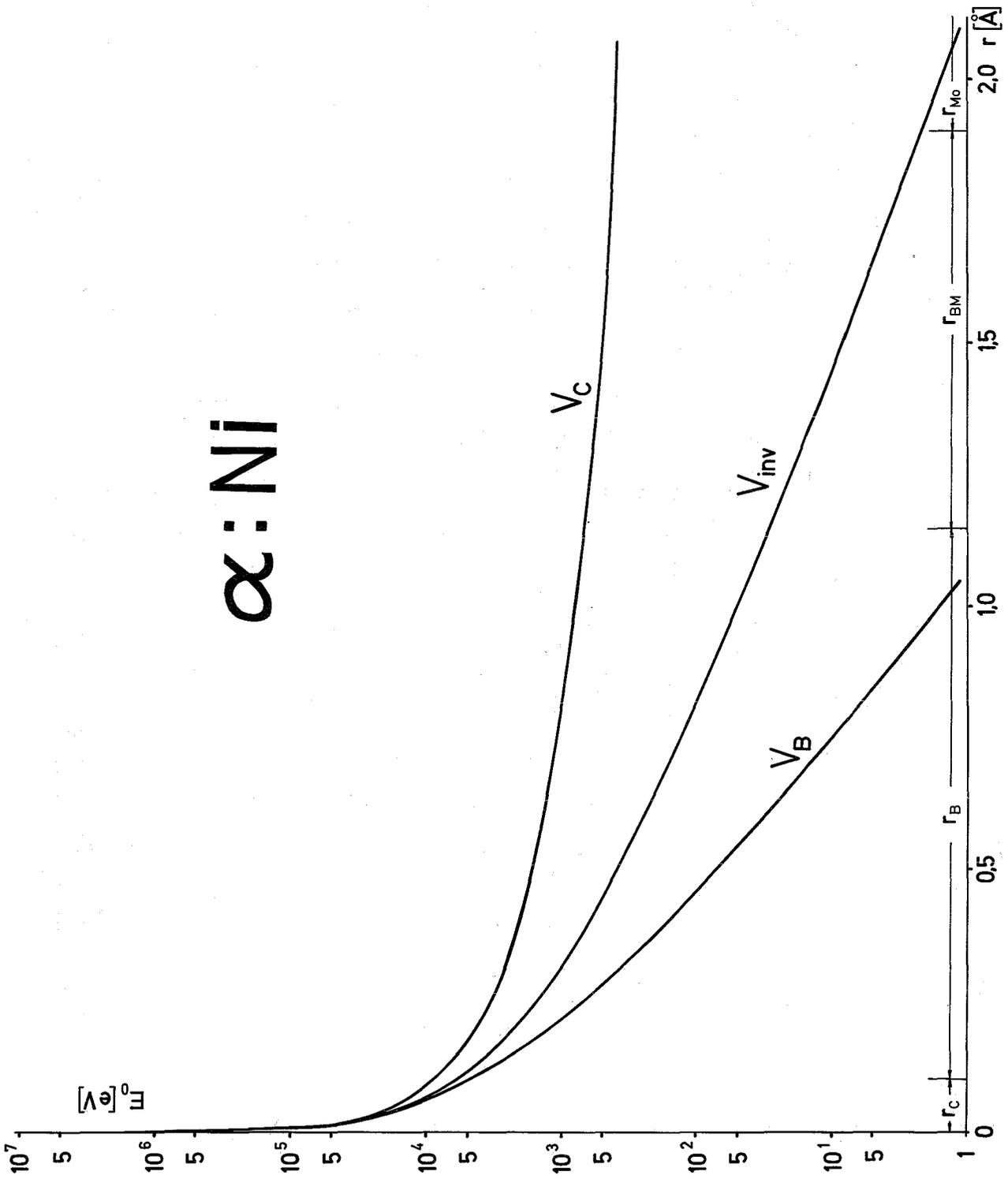


Fig. 2a Darstellung der in den Computerrechnungen verwendeten Potentiale.

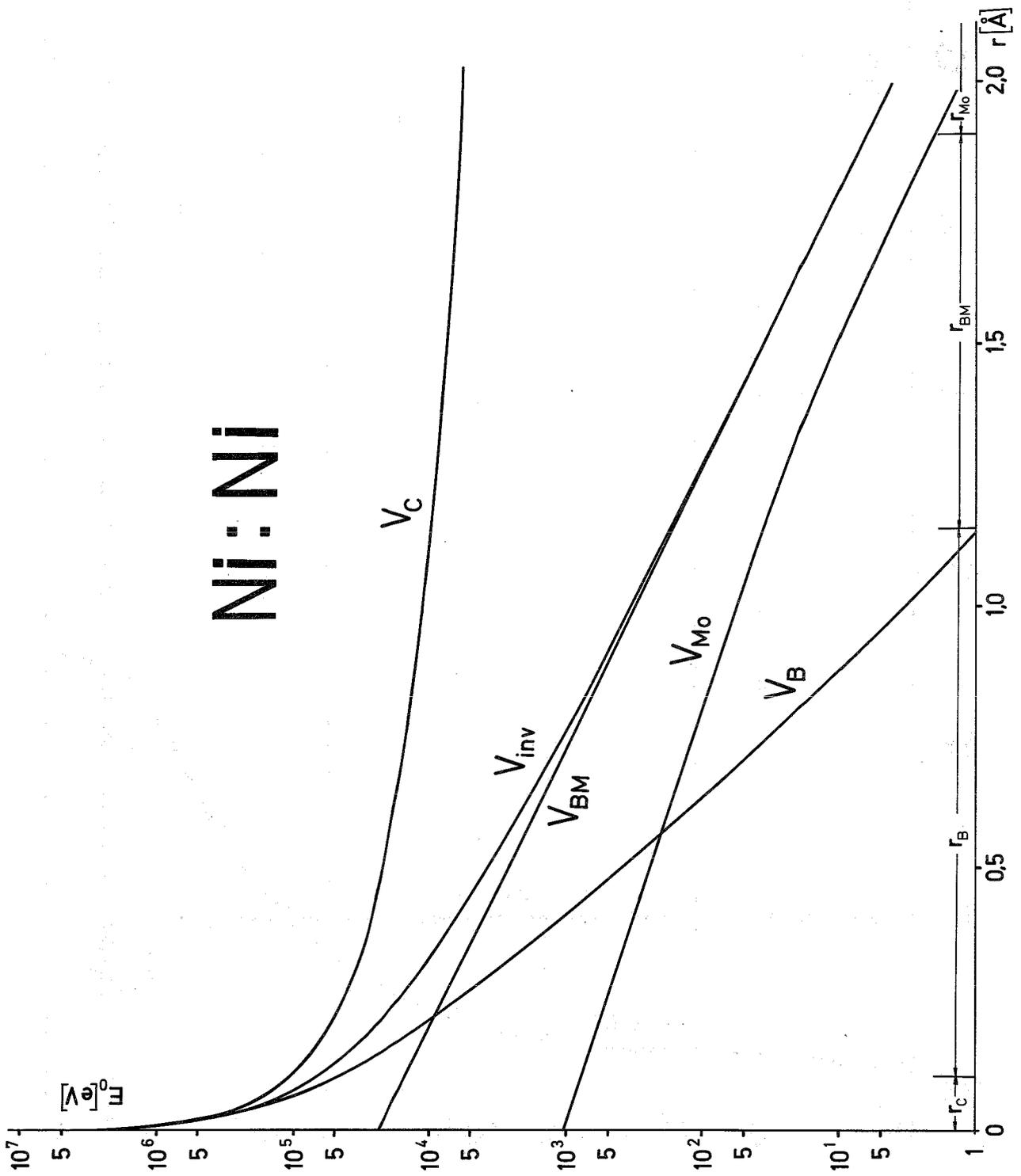


Fig. 2b Darstellung der in den Computerrechnungen verwendeten Potentiale.

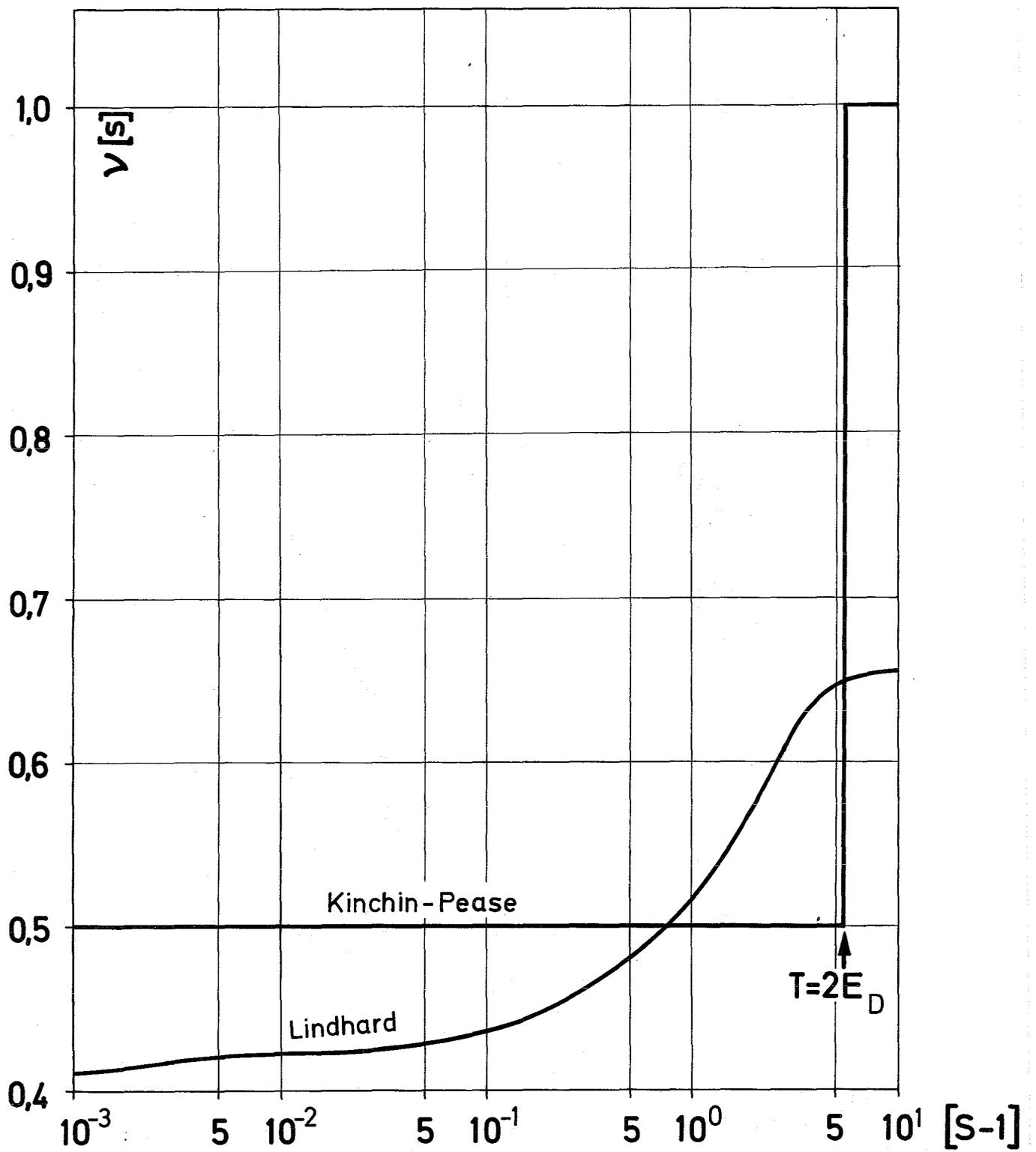


Fig. 3 Darstellung des Lindhard-Faktors $\nu(s)$ in Abhängigkeit von s .

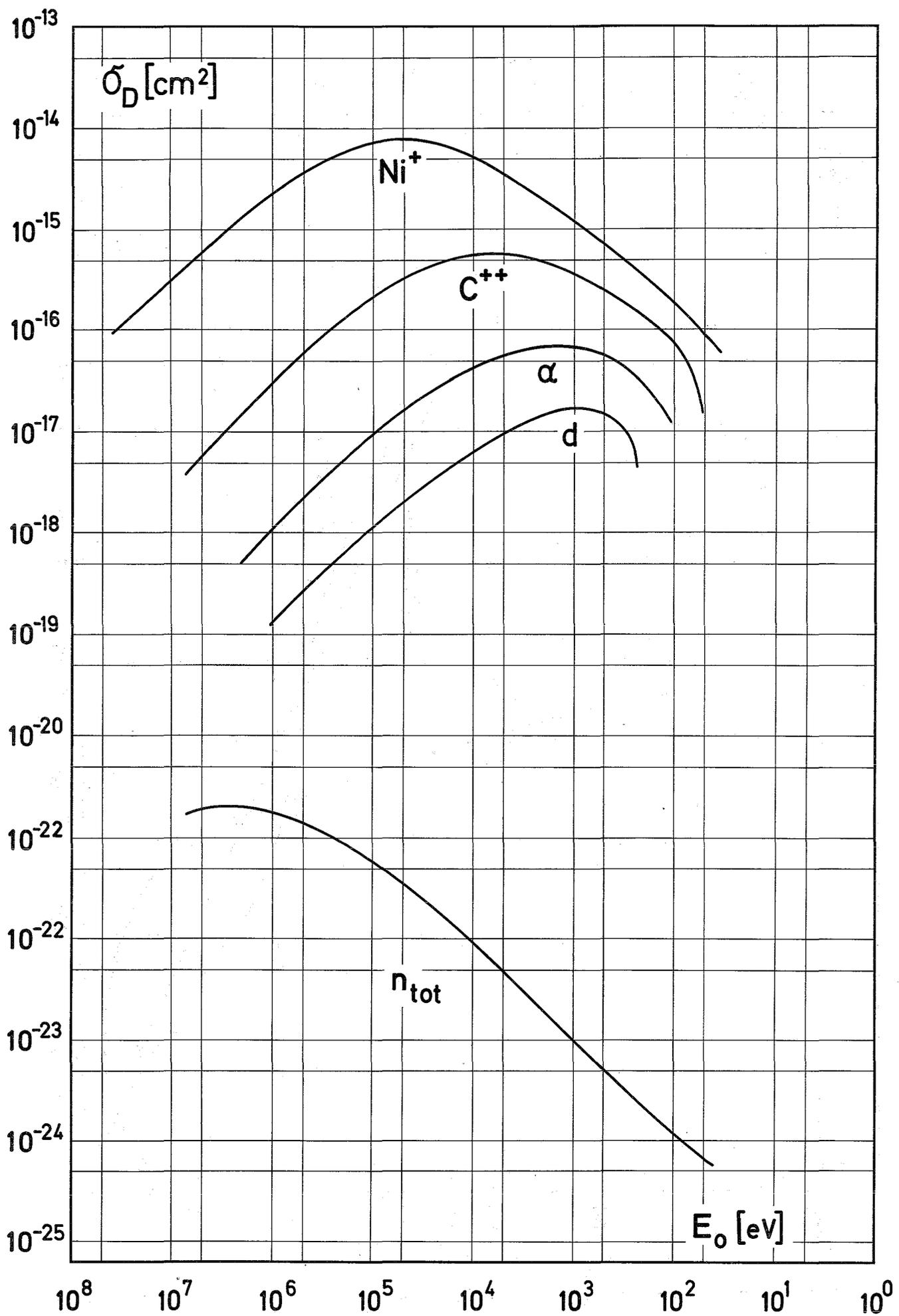


Fig. 4 Verlagerungsquerschnitte σ_D für verschiedene Einschubteilchen in Abhängigkeit von der Primärenergie E_0 .

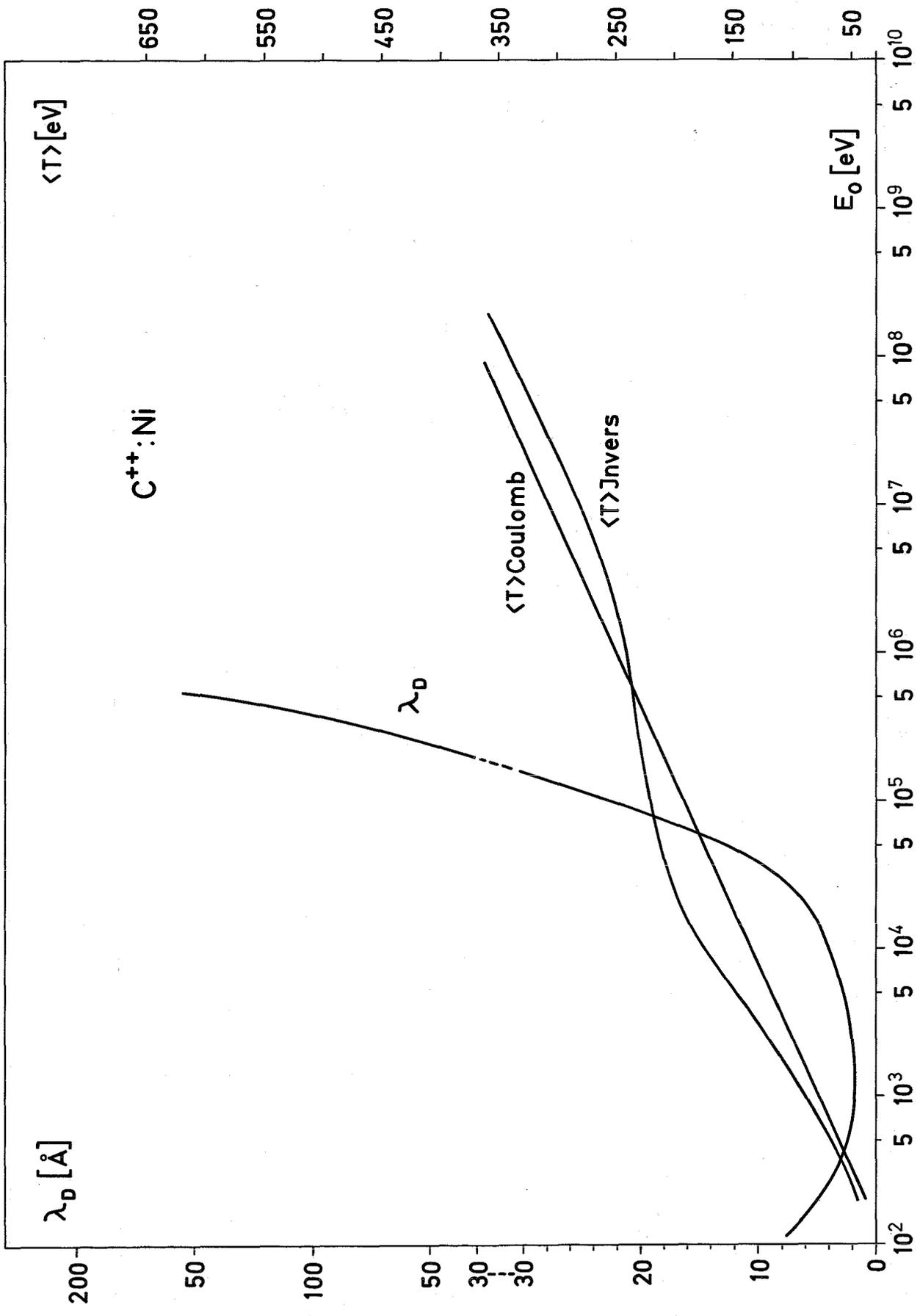


Fig. 5a Mittlere beim Primärstoß übertragene Energien $\langle T \rangle$ und freie Verlagerungsweglängen λ_D (normiert auf den dichtesten Abstand zweier Ni-Targetatome)

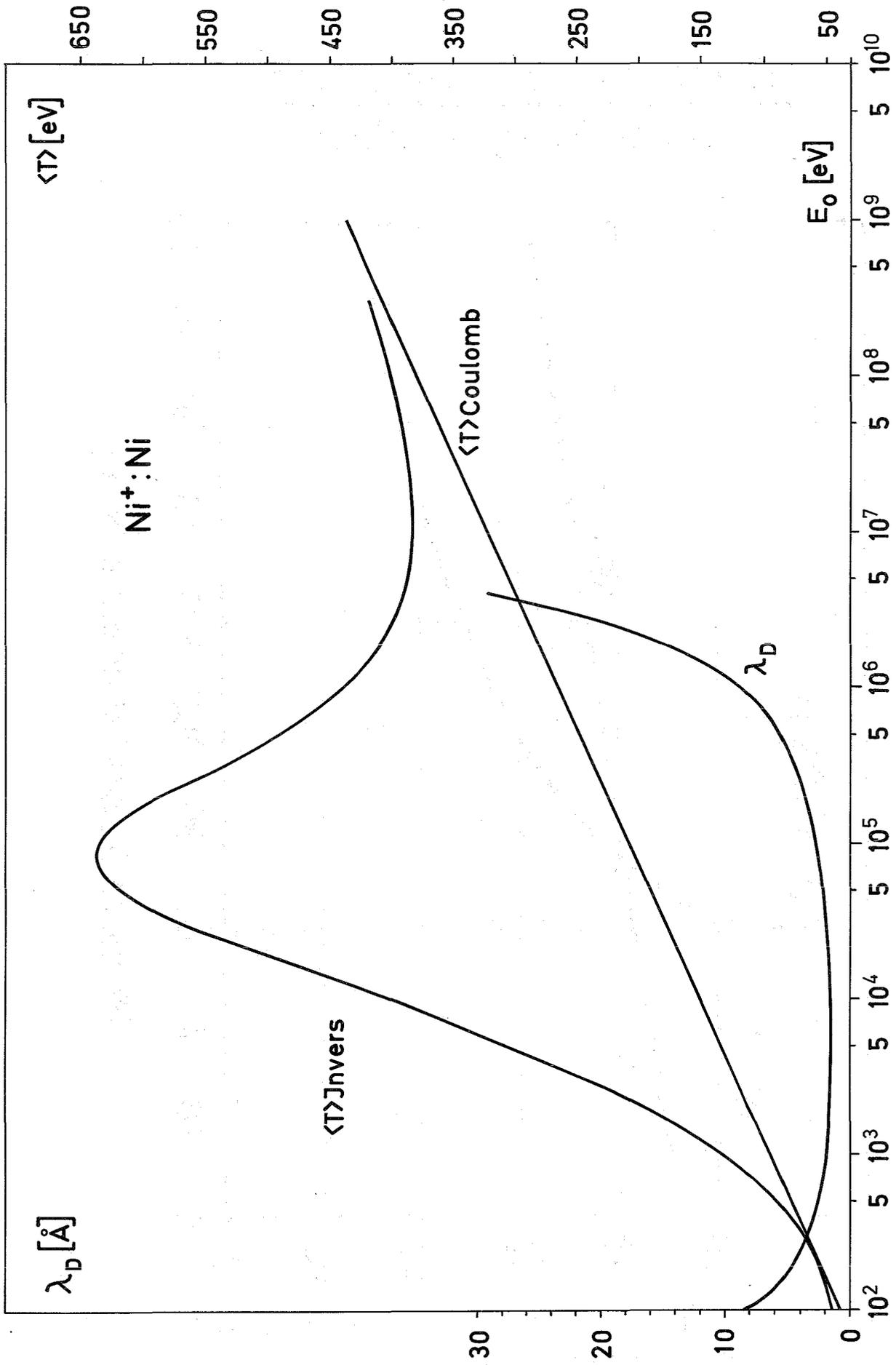


Fig. 5b Mittlere beim Primärstoß übertragene Energien $\langle T \rangle$ und freie Verlagerungsweglängen λ_D (normiert auf den dichtesten Abstand zweier Ni-Targetatome).

Elastischer Energieverlust
Totaler Energieverlust

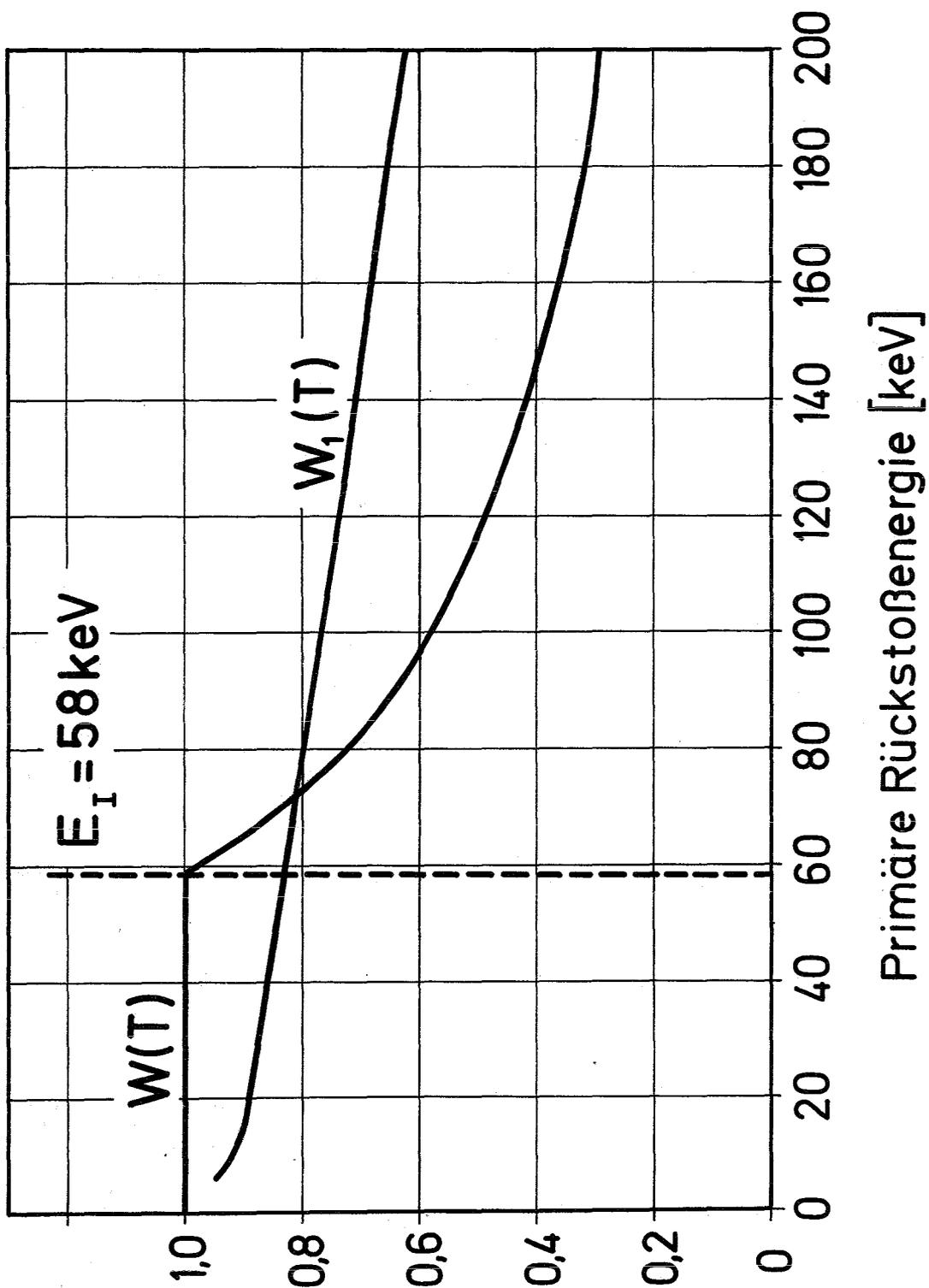


Fig. 6 Für elastische Wechselwirkung zur Verfügung stehender Energieanteil $W(T)$ in Nickel in Abhängigkeit von T bzw. E_0 .