

KERNFORSCHUNGSZENTRUM

KARLSRUHE

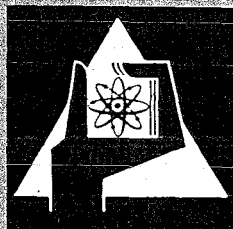
Juli 1972

KFK 1652

Institut für Material- und Festkörperforschung

Punktdefekte und Porenbildung – gebräuchliche Ansätze

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 1972

KFK 1652

Institut für Material- und Festkörperforschung

Punktdefekte und Porenbildung - gebräuchliche Ansätze

von D. Kaletta und W. Schneider

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

VORWORT

Dieser Bericht ist die etwas erweiterte Niederschrift von im Herbst 1971 am Institut für Material- und Festkörperforschung gehaltenen Seminarvorträgen. Darin wurde versucht, dem Interessenten einen kurzen schematischen Überblick über die Materie zu vermitteln.

24. Juli 1972

Die Autoren

Zusammenfassung

Dieser Bericht gliedert sich in zwei Teile. Der erste behandelt die elastische Wechselwirkung zwischen Gitter und eingeschossenem Teilchen und untersucht im wesentlichen nur die durch den Stoßprozeß verursachten Folgen wie die Verlagerung eines Gitterbausteins und die Erzeugung von Verlagerungskaskaden. Diffusionskontrollierte Phänomene werden dabei ausgeschlossen. Die Wechselwirkung wird für einen Energiebereich zwischen einigen keV und einigen MeV untersucht. Stoßpartner sind mittelschwere und schwere Ionen in metallischen Festkörpern.

Der zweite Teil beschäftigt sich mit dem thermodynamischen Verhalten der Defekte bezüglich sich einstellender Gleichgewichtskonzentrationen in Metallen. Die Effekte, die zur Porenbildung führen, werden in klassischer Weise getrennt als Keimbildungs- und Wachstumsprozesse behandelt. Für diese werden verschiedene Modelle diskutiert. Darauf beruhende Computersimulationen zeigen gute Übereinstimmungen mit dem beobachteten Verhalten von bestrahlten metallischen Werkstoffen.

Abstract

This paper consists of two parts. The first one treats the nuclear interaction between target atoms and bombarding particles, investigating the damage due to the collision events, such as atomic displacements and production of displacement cascades. Diffusion-controlled phenomena are excluded. The interaction energy ranges from several keV up to several MeV. Collision partners are medium and heavy ions in metals.

The second part discusses the thermodynamic behavior of the defects under steady-state conditions. The effects building up voids are treated as nucleation and growth processes in classical manner. Several models are sketched, leading to computer simulations, which show a good agreement between the theories and the behavior observed in irradiated materials.

Elastische Wechselwirkung zwischen Festkörper und Strahlung

von D. Kaletta

INHALT

1. Einleitung
2. Strahlungsinduzierte Punktfehler: Frenkel-Defekte
 - 2.1 Allgemeine Modellrichtungen
 - 2.2 Das statistische Modell
 - 2.3 Das atomare Wechselwirkungspotential
 - 2.4 Die Harte-Kugel Näherung für Neutronenstreuung
 - 2.5 Die erweiterte Impulsnäherung für Stoßprozesse mit geladenen Teilchen
 - 2.6 Verlagerungsquerschnitte und Defekterzeugungsraten
3. Spike-Phänomene
 - 3.1 Verlagerungszonen
 - 3.2 Thermische Zonen

1. Einleitung

Die Wechselwirkung zwischen Strahlung und Festkörper führt zu Modifikationen der Festkörpereigenschaften; dieses Phänomen wird gewöhnlich als Strahlungsschaden beschrieben. Die hier interessierende Bestrahlung mit Teilchen endlicher Ruhmasse beeinflusst den Festkörper entweder durch eine Verlagerung von Gitterbausteinen oder durch eine Anregung von Elektronen aus ihrem Grundzustand sowie durch eine Anregung von Gitterwellen. In erster Näherung lassen sich diese überlagernden Effekte nach N. Bohr / 1 / additiv separieren und unabhängig von einander behandeln. Die elastische Wechselwirkung beschreibt die Verlagerung von Gitteratomen und wird verschiedentlich auch als Wigner-Effekt bezeichnet, da E.P. Wigner 1943 diesen Effekt für neutronenbestrahlte Reaktormaterialien vorhersagte. Der inelastische Wechselwirkungsanteil der Stoßpartner soll an dieser Stelle nicht näher behandelt werden.

Die einfachste Störung der dreidimensionalen Kristallgitter-Periodizität besteht in der Heraushebung eines Atoms aus seiner stabilen Position unter Zurücklassung eines unbesetzten Gitterplatzes oder einer Leerstelle. Die thermodynamische Erzeugung dieser Punktdefekte, z.B. bei der Diffusion oder Sublimation ist isothermisch und findet mit allen vibrierenden Atomen statt. Die erforderliche Energie für die Bildung und Wanderung dieser Defektpaare liegt in der Größenordnung einiger eV. Wird auf das Gitteratom infolge eines Stoßprozesses die Energie adiabatisch übertragen, so können die das gestoßene Teilchen umgebenden Atome nicht merklich relaxieren, und das angestoßene Atom muß seine stabile Gitterlage verlassen und zwischen die Gitteratome fliehen. Die zur Verlagerung notwendige Energie E_D wird durch die Gittergeometrie und die Flucht-Richtung des verlagerten Atoms bestimmt; sie ist somit anisotrop. Für Metalle liegt sie in der Größenordnung von 20 - 40 eV, für Halbleiter in der Größenordnung von 5 - 20 eV. Liegt die an das Gitteratom übertragene Energie T in der Nähe der mittleren Verlagerungsenergie, so ist eine genaue Kenntnis des E_D -Spektrums erforderlich. Bei $T \gg E_D$ wird im allgemeinen für E_D eine Sprungfunktion gewählt, so daß für $T < E_D$ keine Verlagerung und für $T \geq E_D$ eine Verlagerung eintritt.

Da im Mittel bei Stößen zwischen Neutronen und Targetatomen Energien von einigen zehntausend keV, bei Ionenstößen Energien von einigen hundert keV an die Gitteratome übertragen werden, besitzen die primär angestoßenen Teil-

chen genügend Energien, um ihrerseits wiederum Verlagerungstöße zu erzeugen, die zur Bildung von ellipsoiden Verlagerungskaskaden führen. Computerberechnungen / 2 / wie analytische Rechnungen / 3 / zeigen, daß die Leerstellenkaskaden von kleinerer Ausdehnung als die Zwischengitteratomkaskaden sind, was zu einer Leerstellencluster-Bildung führt. Die Erzeugung von Verlagerungskaskaden, die in einen Leerstellencluster auslaufen, ist von J.A. Brinkmann / 4 / mittels des Konzepts der mittleren freien Verlagerungsweglänge λ_D diskutiert worden und wird als displacement-spike bezeichnet. Die mittlere freie Verlagerungsweglänge beschreibt die mittlere Separation zwischen zwei Stößen mit Verlagerungsfolgen ($T > 2E_D$). Kommt λ_D in die Größenordnung des dichtesten Abstands zweier Gitteratome, so kommt es zu einer kollektiven Wechselwirkung der Stoßpartner, die nicht mehr durch eine Zwei-Körper-Wechselwirkung beschrieben werden kann und deren Folge die Bildung einer displacement-spike ist. Die Leerstellenagglomeration in der spike führt zu einer Verdichtung um den Cluster-Kern mit einem resultierenden Druck, der die Atome zurück in den Leerstellen-Kern treiben kann. Es ist dabei nicht gesagt, daß das Zurückfallen der Zwischengitteratome in den Cluster wieder zu einer regulären kristallinen Matrix führt. Amorphe Bereiche sind daher in der Spike-Region zu erwarten. Durch Ionenstoß gebildete dreidimensionale Leerstellen-Hohlräume können aus energetischen Gründen, sofern nicht irgendwelche Stabilisierungsphänomene vorliegen, (z.B. innerer Gasdruck - inhomogene Porenkeimbildung / 5 /) zu einer Versetzungsschleife kollabieren. Desgleichen können zweidimensionale Leerstellen-Felder zu einer Versetzungsschleife kollabieren, so daß damit ein Mechanismus zur Erzeugung von Versetzungsschleifen infolge Ionenstoß existiert. Das Kontinuummodell liefert für die Energien der drei Leerstellenaggregationen / 6 / mit den drei Radien r_{sph} , r_{disc} und r_{loop} :

$$E_{sph} = 4 \pi \gamma \left[\frac{3AN}{4\pi} \right]^{2/3}$$

$$E_{disc} = 2\gamma AN/a_0 \quad (1)$$

$$E_{loop} = \frac{2}{5} \pi \mu b^2 \left[\frac{AN}{\pi a_0} \right]^{1/2}$$

wenn N die Zahl der Leerstellen, Λ das Leerstellenvolumen, γ die Oberflächenenergie, a_0 das zweifache des (100)-Netzebenenabstands, b der Burgers-Vektor der perfekten Versetzungsschleife ($\frac{a_0}{2} \langle 111 \rangle$), μ der Schubmodul bedeutet. Aus

der Forderung, daß die Energie für die Versetzungsschleife E_{loop} kleiner als die Energien für den sphärischen Hohlraum und den Diskus ist ($E_{loop} < E_{sph} < E_{disc}$), folgt für die Anzahl der Leerstellen im ersten Fall unter Einsetzung gewöhnlicher Daten ein Wert von einigen 10^3 , für den zweiten Fall einen Wert von einigen 10^1 . Obgleich die Energie eines sphärischen Leerstellenclusters immer geringer als die des korrespondierenden Clusterdiskus ($E_{sph} < E_{disc}$) ist, werden oft Leerstellen-Versetzungsschleifen beobachtet, die sich aus kollabierten planaren Aggregationen entwickelten als aus den größeren dreidimensionalen Clustern. Die Abb. 1 faßt die drei in der Regel beobachteten Defekttypen zusammen: Die Defektcluster, die Versetzungsschleifen und die Poren (voids) / 7 /. Im Falle einer interstitiellen Clusterbildung werden bei Ionenbeschuss in Metalle und Halbleiter bevorzugt Präzipitate, bei Gasionenbeschuss im Festkörper bevorzugt Blasen gebildet. Abb. 2 illustriert diesen Sachverhalt / 7 /.

Die strahlungsinduzierte Frenkelpaardichte wird jedoch durch thermische und athermische Ausheilprozesse reduziert. Zu den athermischen Prozessen gehören mechanische Gitterspannungen wie Attraktionskräfte zwischen den Defekten, die eine Vernichtung der Frenkelpaare mit weniger als 7 Atomlagen Abstand oder die Agglomeration der separierten Punktdefekte zu Leerstellen- und Interstitiellenclustern verursachen. Bei endlichen absoluten Temperaturen führt die Wanderung der singulären Defekte zur Rekombination oder zur Aggregatbildung oder Kondensation an Kristallverunreinigungen wie Versetzungen, Korngrenzen, freier Oberfläche und Fremdatomen. Diese verschiedenen Mechanismen verdeutlichen die komplexe Natur des Defektbildungsprozesses, der durch die Bildung null- und mehrdimensionaler Strukturen gekennzeichnet ist. Die Erzeugung und die Dichte dieser strahlungsinduzierten Gitterfehler hängt von der Energie und der Art des Einschussteilchens und von der Natur, Orientierung und Temperatur des Festkörpers ab, wobei speziell die Bildung der mehrdimensionalen Gitterfehler kritisch vom Festkörperzustand abhängt. In einer makroskopischen Theorie läßt sich das dynamische Verhalten der strahlungsinduzierten Defekte über ein simultanes System von Diffusionsgleichungen der Form

$$\frac{dc_i}{dt} = \Delta(D_i \cdot c_i) + \frac{\nabla(D_i \cdot c_i \nabla E_{ik})}{kT} = \sum K_i - \sum V_{ij,ik}$$

beschreiben / 8 /, wenn $c_i(x, y, z, t)$ die Konzentration des Defekttyps i ,

$E_{ik}(x, y, z)$ die Wechselwirkungsenergie zwischen Defekttyp i und Kristallversetzung k , die gegenüber anderen Wechselwirkungen, wie z.B. Leerstelle-Leerstelle, als dominant angesehen wird, $K_i(t)$ ein Defekterzeugungssystem und $V_{ij,ik}$ ein Defektvernichtungsterm, z.B. Rekombination. Das grundsätzliche Problem besteht jedoch weniger in der (numerischen) Lösung des partiellen parabolischen Gleichungssystems (zumindest nicht für stationären Zustand), wiewohl dieses auch schon erhebliche mathematische Schwierigkeiten bereitet, sondern in der Spezifizierung der Randbedingungen und der Spezifizierung der einzelnen Terme. Gegenstand dieser Arbeit ist die Spezifizierung der Defekterzeugungsrate k , die die Zahl der pro Sekunde unter Bestrahlung erzeugten Frenkelpaare bestimmt.

Bei großen Stoßparametern oder bei Stößen am Ende der Reichweite des stoßenden Teilchens erreicht die übertragene Energie nicht mehr die Verlagerungsenergie, so daß diese Stöße nicht zu Verlagerungen führen. Die in interstitieller Position zur Ruhe kommenden Ionen besitzen dann die unter normalen Umständen kaum beobachtete Möglichkeit der interstitiellen Wanderung entlang einer Kanalachse und dringen um Größenordnungen tiefer in den Kristall ein, als es der erwarteten gechannelten Reichweite entspricht. Der Diffusionscharakter dieses Phänomens ist von Davies und Jespersgaard / 9 / und anderen / 10 / bestätigt worden.

Wenn auch die Energie bei $T < E_D$ nicht zu einer Gitteratomverlagerung ausreicht, so können jedoch die Atome in stärkere Schwingungen um ihre Gleichgewichtslage versetzt werden. Die gewonnene kinetische Energie wird an das umgebende Gitter abgegeben. Das Anwachsen der lokalen Energie kann als Temperaturanstieg interpretiert werden und die Dissipation der Energie als thermische Leitung. Diese allgemeine Vorstellung der Energieverdichtung auf einen kleinen Volumenbereich infolge eines Energieübertrages unterhalb der Schwellenergie wird von Seitz und Köhler / 11 / als "thermal spike" bezeichnet. Da die Spike-Bildung innerhalb sehr kurzer Zeit auftritt, $10^{-12} - 10^{-13}$ s, und zu Temperaturen von $10^3 - 10^4$ Kelvin führt, wird dieser Prozeß vorzugsweise in amorphen Isolatoren angenommen als in bestrahlten Metallen. Das Konzept einer thermischen Leitfähigkeit ist sicherlich nur dann erfolgreich anwendbar, wenn die Entstehung dieser hohen Temperaturgradienten auf einer schlechten Wärmeleitfähigkeit der Umgebung zurückzuführen ist. Die speziell an Halbleiter-Elementen

gemachte Beobachtung der Amorphisation des Materials durch Ionenbeschuss im 50 keV-Bereich / 12 / und die Umkehrung dieses Phänomens in Metalloxiden, deren Quotient aus Kristallisationstemperatur und Schmelzpunkttemperatur (beide in Kelvin) den Wert 0,29 nicht überschreitet, wird der Bildung von thermal spikes zugeschrieben / 13 /. Für Metalle wird angenommen, daß eine derartige lokale Anregung der Atome eine Beschleunigung thermisch aktivierter Prozesse einleitet. So wird beispielsweise ein Teil der Oberflächenerosion beim Sputtern direkt einer thermischen Spike-Bildung zugeordnet / 14 / und ein Teil der strahlungsinduzierten Diffusion auf lokale Aufheizeffekte zurückgeführt.

Qualitativ läßt sich somit sagen, daß das Defektvolumen in etwa dem Volumen, in dem die eingeschossenen Teilchen abgebremst werden, entspricht. Channeling kann die Verteilung der Defekte beeinflussen, während athermische und thermische Ausheildefekte oder Defektwanderung nicht nur die räumliche Verteilung der Defekte und Agglomerate sondern auch deren Dichte verändern.

2. Strahlungsinduzierte Punktfehler, Frenkel-Paare

2.1. Allgemeine Modellrichtungen

Die Erzeugung von Frenkel-Paaren beruht auf einer elastischen Wechselwirkung zwischen Strahlung und Festkörper. Für diese Form der Wechselwirkung wird in der Regel ein Zweikörper-Potential mit Zentralkräften zugrundegelegt. Die drei großen zur Verfügung stehenden Modellrichtungen, das dynamische und das statische Computermodell sowie das statistische Modell unterscheiden sich vor allem hinsichtlich ihrer Verwendbarkeit. Während im dynamischen und statischen Modell ausschließlich die Kristallstruktur des Festkörpers einbezogen wird, wird im statistischen Modell der Fall statistisch verteilter Kristallatome behandelt. Infolge der endlichen Computerdimension können im dynamischen Kristallmodell unter Berücksichtigung der Oberflächenkräfte nur Kristallite mit etwa 1000 Atomen untersucht werden. Die in diesen kleinen Kristallen induzierte Wechselwirkungen zwischen eingestrahlteten Teilchen und Targetteilchen müssen demnach von lokalen Ausmaßen in der Größenordnung weniger Gitterkonstanten sein. M.a.W. Die Zahl der eventuell produzierten Frenkeldefekte muß klein sein, bzw. die Strahlungsenergie darf größenordnungsmäßig für Teilchen mit mindestens einer Nukleonmasse nur einige keV und für Elektronen, deren Wechselwirkung hier jedoch nicht weiter behandelt wird, etwa 0,5 - 1 MeV betragen. Für gitterspezifische Untersuchungen im niederenergetischen Bereich ist das dynamische

Modell extrem nützlich, für hochenergetische Kaskaden ist die simulierte Kristallgröße jedoch zu klein. Im statistischen Modell werden gegensätzlich zum dynamischen ausschließlich die primären Stoßprozesse behandelt, und die Folgeprozesse einschließlich der Ausheilung der Defektstruktur nachträglich eingebaut. Die Anwendung dieses Modells wird grundsätzlich nur nach unten durch die zugrundegelegte Zweikörper-Wechselwirkung beschränkt, die von sich nicht überlappenden Gitteratomen ausgeht; d.h. die anfängliche Energie des eingeschossenen Teilchens muß groß gegen 100 eV sein.

In analytischen Berechnungen ist es bis auf wenige Ausnahmen wie Kanal- und Fokusioneneffekte sehr schwierig, die Gitterstruktur zu berücksichtigen. Insofern wird im statistischen Modell das Gitter durch ein statistisch angeordnetes Atomfeld gleicher Dichte (hochkomprimiertes Gas) ersetzt. Die Fehler in dieser Näherung sind jedoch schwer festzustellen. Für hohe Anfangs- und Übertragungsenergien mit korrespondierender Weitwinkelstreuung dürfte der Gittereffekt ausgeschmiert werden, ein Effekt, der sich bei polykristallinem Targetmaterial verstärken sollte, da die Wahrscheinlichkeit, daß die Einschuß- und Fortpflanzungsrichtung mit einer niedrigindizierten kristallographischen Richtung zusammenfällt, unter 0,02 liegt. Die Differenz zwischen beiden Modellen sollte somit nicht allzu groß sein. Für den hier interessierenden Fall hoher Schädigung des Festkörpers infolge hoher Teilchenflüsse und Energien wird demzufolge das statistische Modell bevorzugt. Wobei an dieser Stelle betont sein soll, daß es sich um ein makroskopisches Modell handelt und daß es Quanteneffekte ausschließt. Die Anwendbarkeit dieses Modells ist innerhalb des untersuchten Energieintervalls von 25 eV bis 100 MeV für die hier speziell interessierenden Systeme $(Z_1, Z_2) = (1, 28); (2, 28); (6, 28); (28, 28)$ gegeben. Die untere Cut-off Energie entspricht der Verlagerungsenergie im Ni, dh. der Energie, die nötig ist, um ein Ni-Targetatom aus seiner stabilen Gitterlage herauszuheben / 15 /. Die obere Energiegrenze E_0 ist eine Funktion der Kernladungszahl Z_1 des eingeschossenen Teilchens und entspricht einer maximalen Teilchengeschwindigkeit von $v_1 = e^2/h \cdot Z_1^{2/3}$, wobei e^2/h die Umlaufgeschwindigkeit des Wasserstoffelektrons im Bohrschen Modell ist. Diese obere Energiegrenze wurde aus drei Gründen gewählt: (1) Unterhalb E_0 treten keine Kernumwandlungsprozesse auf (Teilchenzahlerhaltung); (2) bei Berücksichtigung inelastischer Prozesse, dh. Ionisationsprozesse, werden diese unterhalb E_0 durch einen relativ einfachen Formalismus beschrieben und (3) oberhalb E_0 sind die experimentellen und theoretischen Ergebnisse in relativ guter Übereinstimmung und werden bereits durch den Bethe-Formalismus beschrieben, dh. der elastische

Anteil der totalen Wechselwirkung zwischen beiden Partnern ist unter 1%, so daß der inelastische Anteil dominiert.

2.2. Das statistische Modell

Im statistischen Modell ist die Defekterzeugungsrate K für strahlungsinduzierte Frenkel-Paare als Zahl N der pro Zeiteinheit erzeugten Defektpaare definiert:

$$K \equiv \frac{dN}{dt} = \frac{dn(t)}{dt} \cdot \sigma_D \quad [s^{-1}], \quad (3)$$

wenn $n(t)$ die Zahl der eingeschossenen Teilchen pro cm^2 , bzw. $\frac{dn(t)}{dt}$ der Fluß $\phi(t)$ [$cm^{-2} s^{-1}$] und σ_D [cm^2] der Verlagerungsquerschnitt ist. Wählt man anstelle des Flusses die Dosis $\phi \cdot t$, so erhält man die zeitunabhängige und dimensionslose Defekterzeugungsrate $K \cdot t$, die die Zahl der Verlagerungen pro Atom angibt.

Der Verlagerungsquerschnitt σ_D ist der scheinbare Stoßquerschnitt, den das Targetatom dem stoßenden Teilchen darbietet, um aus seiner stabilen Gitterlage irreversibel herausgestoßen zu werden, dh. verlagert zu werden. Ohne Berücksichtigung der im weiteren Verlauf durch das stoßende und gestoßene Teilchen erneut erzeugten Verlagerungsstöße (Kaskadenfaktor) berechnet sich der einfache Verlagerungsquerschnitt σ_D^+ zu

$$\sigma_D^+ = \int_{E_D}^{T_{\max}} d\sigma(E, T) \quad (4)$$

wenn $d\sigma(E, T)$ der differentielle Wirkungsquerschnitt, E_D die nötige Verlagerungsenergie und

$$T_{\max} = \gamma E_0 = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2},$$

die bei einer anfänglichen Teilchenenergie E_0 maximal übertragene Energie des stoßenden Teilchens der Masse M_1 auf das gestoßene Teilchen der Masse M_2 ist. Der vollständige Verlagerungsquerschnitt unter Einschluß der Kaskadenprodukte (im Sekundär-, Tertiär-Prozeß erzeugten Frenkelpaare) lautet

$$\sigma_D = \int_{E_D}^{T_{\max}} v(T) d\sigma(E, T) \quad (5)$$

wobei $v(T)$ den Kaskadenfaktor bezeichnet.

Der Teilchenfluß ist eine, wenngleich auch nicht ganz unproblematisch, unmittelbar zu bestimmende Größe; der Verlagerungsquerschnitt bzw. der Kaskadenfaktor entziehen sich jedoch einer direkten experimentellen Bestimmung und sind nur indirekt aus Widerstandsmessungen, Dichtemessungen, elektronenmikroskopischen und feldionmikroskopischen Messungen zu erhalten, da bei diesen Messungen die Kinetik des Gesamtsystems bekannt sein muß. Insofern kommt der theoretischen Abschätzung des Verlagerungsquerschnitts eine besondere Rolle zu.

2.3. Das atomare Wechselwirkungs-Potential

Der Verlagerungsquerschnitt ist eine Funktion des Streuwinkels δ im Schwerpunktsystem und des Stoßparameters p , der als der Abstand definiert ist, in dem das Teilchen am Stoßzentrum vorbeifliegen würde, wenn kein Streufeld vorhanden wäre. Der Streuwinkel ist wiederum eine Funktion des Stoßparameters und des Wechselwirkungspotentials zwischen beiden Stoßparametern. Der analytische Zusammenhang dieser Größen ist der klassischen Streutheorie wohlbekannt, und bei Kenntnis des Wechselwirkungspotentials kann der Verlagerungsquerschnitt prinzipiell berechnet werden. Die kritische Größe ist somit das Streupotential, das Art und Größe der Streuung determiniert.

2.4. Die Harte-Kugel Näherung für Neutronenstreuung

Für die elastische Wechselwirkung zwischen einem neutralen Teilchen und einem geladenen Teilchen, z.B. Neutron-Targetatom, kann in erster Näherung im Primärstoß mit der Harte-Kugel Näherung gerechnet werden, die den Targetatomen einem wohldefinierten Radius r_0 zuordnet. Das Streufeld ist dann

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r > r_0 \\ \infty & \text{für } r < r_0 \end{cases} \quad (6)$$

und die Streuung erfolgt im Schwerpunktsystem isotrop, was für $d\sigma$ auf einen einfachen Ausdruck führt:

$$d\sigma = \frac{\pi r_0^2}{T_{\max}} dT \quad (7)$$

Nach Kinchin und Pease / 16 / läßt sich der Kaskadenfaktor für die Harte-Kugel Approximation leicht zu

$$\nu(T) = \begin{cases} 0 & T < E_D \\ 1 & E_D \leq T < 2 E_D \\ T/2 E_D & \text{für } 2 E_D \leq T < E_I \\ E_I/2 E_D & T \geq E_I \end{cases} \quad (8)$$

berechnen, wenn E_I die Ionisationsenergie des Targetmaterials ist, die für Metalle herkömmlich entweder durch

$$E_I \approx M_2 \quad [\text{keV}] \quad (9)$$

oder genauer durch

$$E_I = \frac{1}{16} \frac{M_1}{m_e} E_F \quad (10)$$

(m_e = Elektronenmasse, E_F = Fermi-Energie) gegeben ist. Die Ionisationsenergie soll der Tatsache Rechnung tragen, daß oberhalb von ihr die inelastische Wechselwirkung überwiegt. Das ist sicherlich ein vereinfachtes Bild.

Der Neutronenfluß $\phi(E)$ wurde für verschiedene Reaktorspektren nach dem 26-Gruppensatz von Abagjan / 17 / dargestellt, so daß für jede Gruppe eine differentielle Erzeugungsrate definiert ist:

$$dK = \sigma_D(E) \phi(E) dE \quad (11)$$

Die Addition der spezifischen Gruppendifektrate liefert dann die für jeden Reaktor typische integrale Schädigungsrate K . In der Abb. 3 sind einige Reaktorspektren (DFR, EBR II, FR 2, SNR und BR 2) bezüglich ihrer $\phi = \phi(E)$ Abhängigkeit dargestellt. Die Tabelle 1 gibt die für diese Reaktorspektren berechneten mittleren Verlagerungsquerschnitte und die integrale Defekterzeugungsrate K wieder. Als Targetmaterial wurde jeweils reines Nickel gewählt / 18 /.

2.5. Die erweiterte Impulsnäherung für Stoßprozesse mit geladenen Teilchen

Für geladene Teilchen ist das Potential $V(r)$ eine mit dem Wechselwirkungsabstand r monoton fallende Funktion, die bei rein repulsivem Charakter des Streufeldes gegen Null geht. Die Berücksichtigung der verschiedenen Bindungsverhältnisse im Festkörpergitter führt zu attraktiven Anteilen, die der Beschreibung der Gitterdynamik dienen. Die Energiebeträge liegen jedoch hier unter einigen Elektronenvolt, so daß sie für Verlagerungsprozesse irrelevant sind.

Die Form des Wechselwirkungspotentials wird für verschiedene Wechselwirkungsbereiche der Stoßpartner durch unterschiedliche semi-empirische Potentialtypen dargestellt:

$$\begin{aligned} r_1 &\leq 0,05 & V_C(r) &= \frac{Z_1 Z_2 1^2}{r} \\ 0,05 &\leq r_1 \leq 0,8 & V_B(r) &= Z_1 Z_2 1^2 / r \quad f(r/a_B) \end{aligned} \quad (12)$$

$$0,8 \leq r_1 \leq 1,35$$

$$r_1 = 1,35$$

$$V_{BM}(r)^2 = A_{BM} \exp(-r/a_{BM})$$

$$V_{Mo}(r) = A_{Mo} \exp(-r/a_{Mo}) - A'_{Mo} \exp(-r/a_{Mo})$$

mit $r_1 = \frac{r}{D} \cdot \sqrt{3}$, D als dichtesten Abstand zweier Nachbarn und $f(r/a_B)$ einer Abschirmfunktion, die hier gleich $\exp(-r/a_B)$ gewählt wurde. Die Abschirmlängen a_B , a_{BM} berücksichtigen den Einfluß der Elektronenabschirmung auf das Kernpotential für ein am Atom vorbeifliegendes Teilchen; sie sind ein Maß für die effektive Kernladung. Die Abkürzungen C, B, BM und Mo beziehen sich auf die Coulomb-, Bohr-, Born-Mayer- und Morse-Potentialtypen. Die Darstellung des gesamten Potentials durch verschiedene Potentialtypen ist jedoch durch mehrere Nachteile gekennzeichnet. / 1 /

Die Abschirmlänge a_B ist bisher experimentell nicht vermessen worden, so daß lediglich theoretische Abschätzungen vorliegen. Für den mittleren Energiebereich liegen somit keine genau bekannten Wechselwirkungsenergien vor. Die Born-Mayer Konstanten lassen sich innerhalb eines Faktors 2 semiempirisch ermitteln. Für Ni als Targetmaterial wurden von uns nach einer modifizierten Huntington-Seitz Prozedur aus korrigierten elastischen Konstanten ein Born-Mayer Potential der Form

$$V_{BM}(r) = 24,4 \exp(-r/0,23 \text{ \AA}) \quad [\text{keV}] \quad (13)$$

gewonnen / 19 /. Die Genauigkeit sollte einen Faktor $<(-1,2; +2)$ betragen. Die Schwierigkeit liegt in der Tatsache, daß Ni als Übergangsmaterial mit nicht abgeschlossener 3d-Elektronenschale und $4s^2$ -Konfiguration nicht mehr durch Ein-Elektronenmodelle beschrieben werden kann.

Analytisch kann das Born-Mayer Potential durch den Brinkmannschen Ansatz dargestellt werden

$$V(r) = \frac{Z_2 e^2}{2C \cdot a_{BM}} \exp(-r/a_{BM}) \quad (14)$$

(C = Korrekturparameter der Größenordnung 1). Bei ungleichem Z der Stoßpartner im Born-Mayer Bereich wurde a_{BM} in Ermangelung genauerer Daten durch den simplen Ansatz

$$a_{BM}(Z_1 \neq Z_2) = \kappa a_H (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \quad (15)$$

repräsentiert, wobei a_H dem Bohrschen Wasserstoffradius entspricht und κ so gewählt wurde, daß für $Z_1 \rightarrow Z_2$ $a_{BM}(Z_1 \rightarrow Z_2)$ in die experimentelle Abschirmlänge $a_{BM}(Z_1 = Z_2) = 0,23 \text{ \AA}$ übergeht.

Mit Ausnahme des Coulomb Potentials liefern die anderen Streupotentiale keine algebraischen Relationen in θ und p , die für eine geschlossene analytische Darstellung von $d\sigma$ erforderlich sind. Die Born- und Born-Mayer-Potentiale führen bereits in der Impuls-Näherung in 1. Ordnung (eine exakte Lösung ist nur numerisch durchführbar) für θ auf modifizierte Hankel-Funktion mit dem Argument (p/a) . Eine ausführliche Diskussion darüber findet man z.B. bei G. Leibfried / 32 /.

Um diesen Nachteilen zu entgehen, wurde von uns ein Potential eingeführt / 19 /, das in der Literatur unter dem Namen "Invers-Potential" bekannt ist:

$$V_{\text{inv}}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{sr} \left(\frac{a_{\text{inv}}}{r} \right)^{s-1} \quad 1 \leq s < \infty \quad (16)$$

Dieses von Lindhard, Scharff und Schiøtt / 20 / gut untersuchte Potential unterscheidet sich allerdings von den bisherigen Potentialen mit begrenztem Gültigkeitsbereich nicht, wenn man mit konstantem und frei verfügbarem Exponenten s und konstanter Abschirmlänge

$$a_{\text{inv}} \left[= (9\pi^2)^{1/3} 2^{-7/3} a_H (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \right]$$

für gegebenes Z_1, Z_2 arbeitet.

Eine Verallgemeinerung dieses Potentials läßt sich jedoch erreichen, wenn man jedem diskreten r -Wert eindeutig einen s - und a_{inv} -Wert zuordnet. Das so definierte Inverspotential mit gleitendem s - und a_{inv} -Parameter erlaubt eine identische Repräsentation eines beliebigen abgeschirmten, stetig differenzierbaren Coulomb-Potentials, wobei der funktionelle Zusammenhang von s und r bzw. von a_{inv} und r aus der Forderung der Gleichheit der beiden Potentiale sowie der Gleichheit ihrer Radialableitungen bestimmt wird. Durch dieses Verfahren lassen sich z.B. den Potentialen (12 b) und (12 c) entsprechende Inverspotentiale zuordnen: $V_{\text{inv}}^{\text{B}}$ bzw. $V_{\text{inv}}^{\text{BM}}$. Der Grundsatz der klassischen Physik "natura non facit saltus" fordert den stetigen Anschluß der Potentiale und ihrer Ableitungen in den Anschlußpunkten. Der gegenseitige Anschluß der Potentiale liefert ein für alle r gültiges Inverspotential, das zwar aus den einzelnen Potentialen zusammengesetzt ist, $V_{\text{inv}}(r) = \{ V_{\text{inv}}^{\text{Mo}}, V_{\text{inv}}^{\text{BM}}, \dots \}$, aber keine einfache oder gewichtete Superposition der Einzelpotentiale darstellt. Aus der Anschlußbedingung folgt, daß die Vorgabe eines einzigen inversen Teilpotentials ausreicht, um damit die Potentialkonstanten des Anschlußpotentials und die Koordinaten des Anschlußpunktes eindeutig festzulegen.

Mit anderen Worten: Die Konstruktion des Gesamtpotentials lässt sich durch die oben gewählten Randbedingungen prinzipiell auf die Vergabe eines einzigen Teilpotentials reduzieren.

In den Abbildungen 4a und 4b sind für eine α -Ni und Ni-Ni Wechselwirkung die verschiedenen Einzelpotentiale nach Gleichung (12) dargestellt. Für das Morse-Potential wurden die Potentialkonstanten nach Girifalco und Weiger / 21 / benutzt, V_{BM} basiert auf Gl. (13) und (15) und V_B auf Gl. (12b) mit $a_B = a_H (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$. $V_{inv} = V_{inv}^{BM} + V_{inv}^B$ wurde nach dem oben beschriebenen Formalismus berechnet.

2.6. Verlagerungsquerschnitte und Defekterzeugungsraten

Aus der Kenntnis des Wechselwirkungspotentials lässt sich der exakte Streuquerschnitt herleiten. Für das gegebene Invers-Potential ist jedoch eine analytische Lösung nur für rationales s möglich, für reelles s ist eine numerische Prozedur erforderlich / 21 /. Beschränkt man sich aber auf kleine Streuwinkel $\delta \approx \sqrt{\frac{T}{E}} \ll 1$, dh. ist die übertragene Energie T klein gegen die Einschussenergie E , so lässt sich über die Impulsnäherung ein geschlossener Ausdruck für den s -abhängigen differentiellen Wirkungsquerschnitt gewinnen / 20,22 /

$$d\sigma(E, T, s) = (\pi \alpha \frac{2}{inv/s}) (T_{max}/T)^{1+1/s} dT/T_{max}$$

$$a_{inv} = \left[\frac{1}{2} \sqrt{\pi} L_{inv} \Gamma\left(\frac{1}{2}s + \frac{1}{2}\right) / E_{rel} \Gamma\left(\frac{1}{2}s\right) \right]^{1/s} \quad (17)$$

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

$$a_{inv} = f(a_{BM})$$

Die Berechnung von $d\sigma$ erfolgt über die Berechnung des Streuwinkels θ (im Schwerpunktsystem).

$$\theta = - \frac{2p}{E_{rel}} \int_p^\infty \frac{dV}{dr} \frac{dr}{\sqrt{r^2 - p^2}} \quad (18.1)$$

woraus $p = p(\theta)$ folgt und wegen

$$T/T_{max} = \sin^2 \theta / 2 = \theta^2 / 4 \quad (18.2)$$

$p = p(T)$ und daraus $d\sigma(p) \rightarrow d\sigma(p(T)) \rightarrow d\sigma(T)$.

Eine mögliche Bestimmung des s -Parameters liegt neben semi-empirischen Verfahren in der Vorgabe eines $s_0 = s(r_0)$, wenn der r_0 der dichteste Abstand beim Zentralstoß bedeutet:

$$V_{\text{inv}}(r_{01}) = E_{\text{rel}} \quad \text{für} \quad s = s_{01} \quad (18.3)$$

wobei s_0 über $s_0 = n + r_0/a$ mit r_0 zusammenhängt (für das BM-Potential ist $n = 0$ und für das B-Potential ist $n = 1$); r_{01} und s_{01} sind ein einer bestimmten Relativenergie E_{rel} zugeordnetes Wertepaar aus der Menge $\{r_0, s_0\}$. Die Wahl eines solchen $s = s_0$ Parameters führt jedoch zu einer Überschätzung der Stoßdaten, da s_0 infolge seiner Energieabhängigkeit über r_0 Zentralstöße bevorzugt; bei hoher E_0 werden aber geringe Energieüberträge bevorzugt (Impuls-Näherung!). Die Berücksichtigung nichtzentraler Stöße läßt sich generell durch ein $s > s_0$ erreichen, das als effektives s , s_{eff} genannt, formal durch die Integration von Gl. (17) über alle s_0 eingeführt wird, wobei die untere Integrationsgrenze gleich s_{01} gesetzt ist, die obere grundsätzlich bei $s_{02} = 10$ abgeschnitten wird, was in allen Untersuchungen ausreichend erscheint.

Zur Berechnung des Verlagerungsquerschnittes wird anstelle des herkömmlichen Kinchin-Pease Ansatzes für $\nu(T)$, Gl. (8), der auf der Harte-Kugel Näherung beruht, der Lindhard-Faktor $\nu(s)$ für das Inverspotential mitgenommen. Für $s > 4$ bricht allerdings der Lindhard-Ansatz zusammen, da für $T = 2E_D$ der Grenzwert ($T = 2E_D$, $s_{E_D} > 4$) $\equiv 1$ nicht erreicht wird. Die Abb. 5 zeigt den Verlauf von $\nu(s)$ und $\nu(T)$ als Funktion von s . Der Stufencharakter der Kaskadenfunktion $\nu(T)$ wird nur im oberen Energiebereich stetig angepaßt, indem in erster Näherung die Sprungenergie E_I durch eine effektive Ionisierungsenergie ersetzt wird, die vom Quotienten aus elastischem und inelastischem Energieverlust abhängt.

Die Abb. 6 zeigt die berechneten Verlagerungsquerschnitte σ_D für Neutronen und verschiedene Ionen in Nickel als Funktion der Einschußenergie. Mit wachsendem Z_1 verschieben sich Betrag und Lage des Kurvenminimums zu höheren Querschnitten und Einschußenergien. Ein Vergleich der Wirksamkeit der verschiedenen Bestrahlungsquellen bezüglich ihrer singulären Defektpaarererzeugung ist damit durch Abb. 6 gegeben, wenn generell ein experimentell realisierbarer Fluß von gleicher Teilchenzahl pro Sekunde angenommen wird. Der Quotient aus zwei K-Werten ist zugleich ein Maß für die relative Bestrahlungsdauer bei zwei verschiedenen Quellen, wenn ein gleiches K gefordert wird.

Eine experimentelle Verifikation dieser berechneten Werte ist jedoch nur bedingt möglich. Eine direkte elektronen- oder feldionemikroskopische Beobachtung des

Festkörpers zeigt stets den dynamischen Zustand des Systems, wie er z.B. durch Gl. (2) wiedergegeben wird. Die Defekterzeugungsrate in der Definition von Gl. (3) ist stets ein reiner, dh. unkorrigierter Quellterm für Frenkelpaare. Selbst einfache Senkprozesse wie die gegenseitige Rekombination oder Ersetzungsstöße / 24,25 / werden nicht erfaßt.

Eine indirekte empirische Kontrolle dieses Modells läßt sich über die Berechnung und Messung integraler Größen vornehmen, die gleichfalls empfindlich von der Form des Wechselwirkungspotentials abhängen. Eine dieser Größen ist die Reichweite des eingeschossenen Teilchens in einem Target, die sich nach Kenntnis des totalen Energieverlustes

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{tot}} = \left(- \frac{dE}{dx} \right)_{\text{elastisch}} + \left(- \frac{dE}{dx} \right)_{\text{inelastisch}} \quad (19)$$

in üblicher Form zu

$$R(E) = \int_{E_{\text{min}}}^E \left(- \frac{dE}{dx} \right)_{\text{tot}}^{-1} dE \quad (20)$$

berechnet. Der elastische Energieverlust ist dabei durch

$$\left(- \frac{dE}{dx} \right)_{\text{elastisch}} = n \int_T T d\sigma(E, T, s) ds \quad (21)$$

gegeben. Der inelastische Energieverlust beträgt für Ionengeschwindigkeiten, die nicht wesentlich größer als die Bohrschen Umlaufgeschwindigkeit des Elektrons um den Wasserstoffkern sind,

$$\left(- \frac{dE}{dx} \right)_{\text{inelastisch}} = k_1 E^{1/2} \quad (22)$$

wobei hier die bewährte $E^{1/2}$ Proportionalität des Lindhard, Scharff, Schiøtt Modells (20) beibehalten wird. Der Proportionalitätsfaktor k_1 ist eine modifizierte Lindhard, Scharff, Schiøtt Konstante (26). Die untere Grenze E_{min} in der E-Integration Gl. (20) korrespondiert mit der unteren Grenze T_{min} in der T-Integration der Gl. (21). Beide Energien liegen abhängig von den Stoßbedingungen zwischen 10^{-2} und 4×10^1 eV. Die Wahl einer unteren Cut-off Energie ist grundsätzlich wegen der klassisch-physikalischen Modellstruktur und der angenommenen Zwei-Körper Wechselwirkung erforderlich.

Die Abb. 7 vergleicht für einige Stoßsysteme die berechneten Reichweitenwerte nach dem vorliegenden Formalismus mit experimentellen Reichweitendaten für Rückstoß-Atome nach Lint und Wyatt / 27 /. Die ausgezeichnete Übereinstimmung der theoretischen und experimentellen Ergebnisse legt um das benutzte Wechselwirkungsmodell ein breites Vertrauensband.

3. Spike-Phänomene

3.1. Verlagerungszonen

Eine der erwähnten Grenzen des bisherigen Kaskadenmodell ist die Annahme einer isolierten Zwei-Körper Wechselwirkung mit isolierten Stößen, denen eine Frenkelpaarzeugung folgt. Die Grenze zwischen Einzel- und Kollektivphänomenen wurde 1954 von J.A. Brinkmann mit dem Konzept der displacement spikes näher untersucht / 4 /. Die Frage nach der Unabhängigkeit zweier aufeinanderfolgender Stoßereignisse beantwortete Brinkmann mit der Einführung einer mittleren freien Verlagerungsweglänge

$$\lambda_D = 1 / (n \cdot \sigma_D^+) \quad (23)$$

die ein Maß für den mittleren freien Abstand zweier Verlagerungsstöße darstellt; n bedeutet die Targetatomdichte und σ_D^+ nach Gl. (4) den einfachen Verlagerungsquerschnitt. Der Vergleich von λ_D mit Gittergrößen wie dem dichtesten Abstand D zweier Nachbarn liefert in erster Näherung eine Aussage über die räumliche Separierung von Stoßereignissen. Liegt der Quotient aus λ_D und D in der Nähe von 1, so ist mit Sicherheit eine isolierte Stoßfolge nicht mehr zu erwarten. In der Tab. 3 sind für einige Teilchen mit repräsentativen Energien die Verlagerungslängen nach Gl. (23) angegeben (n = Dichte von Nickel) Für die Neutronen wurde der totale Wirkungsquerschnitt in Nickel nach I. Langner, J.J. Schmidt und D. Woll / 28 / benutzt. Nimmt man der Einfachheit halber isotrope Streuung an, so ist der Verlagerungsquerschnitt

$$\sigma_D^+ = \sigma_{\text{tot}} \frac{T_{\text{max}} - E_D}{T_{\text{max}}} \quad (24)$$

bei $T_{\text{max}} \gg E_D$ nahezu identisch mit σ_{tot} . Betrachtet man ausschließlich λ_D/D in Tab. 3 so findet man für alle Stoßsysteme isolierte oder fast isolierte Primärstöße. Die Unabhängigkeit dieser Ereignisse ist jedoch nicht gewährleistet, da die Primärteilchen mit mittleren Energien um $\langle T \rangle > E_D$ ihrerseits wiederum Verlagerungsprozesse einleiten und somit Primärzonen aufbauen. Die räumliche Ausdehnung dieser Zonen ist im wesentlichen der Reichweite R ($\langle T \rangle$)

der Primärteilchen proportional, so daß als "wahre" Unabhängigkeitsgröße der Quotient $\lambda_D/R \langle T \rangle$ (25) zu bilden ist. Für die in Tabelle 3 beschriebenen Wechselwirkungen folgt, daß im wesentlichen nur die Neutronen und die leichten Ionen ($Z_1 < 10$) unabhängige Primärereignisse erzeugen, dh. Verlagerungsstöße, deren mittlerer Abstand groß gegen die räumliche Ausdehnung der Primärzonen ist.

Die Ergebnisse in Tabelle 4 zeigen die Grenzenergien, bei denen die Verlagerungslänge gleich dem dichtesten Nachbarabstand in Ni werden. Diese Energien liegen beträchtlich hoch verglichen mit der Energie von ca. 30 keV, bei der in Nickel mit Nickelionen die maximale Defektrate für Frenkelpaare auftritt. Nach dem Brinkmannschen Modell würde demnach für Ni-Ionenenergien von ca. 100 keV die Defektrate $K = 0$ werden. Dieses scheint jedoch dem experimentellen und theoretischen Befund zu widersprechen, nach dem ein zwar geringer, aber merklicher Überschuß an freien Leerstellen gegenüber der thermischen Gleichgewichtskonzentration vorhanden sein muß, um ein Porenwachstum zu erlauben / 8 /. Eine mögliche Erklärung wäre ein spike-induzierter Leerstellenmechanismus, bei dem infolge des Kollabierens instabiler Verlagerungszonen zu nicht notwendig kristallinem Ausgangsgitter Leerstellen und Zwischenigitteratome zurückbleiben. Abb. 1c zeigt beispielsweise Poren, die mit 50 keV-Nickelionen ($\lambda_D/D = 0,73$) in Ni (Reichweite $\approx 190 \text{ \AA}$) erzeugt werden. Die Defektrate lag bei 210 d/a, dh. 210 Verlagerungen pro Gitteratom. Das beobachtete Schwellen beträgt etwa $\leq 0,5\%$, was bei Annahmen harter Kugeln zu einem effektiven K , K_{eff} , von 5×10^{-3} d/a führt. Von 4×10^4 Verlagerungsstößen führt damit einer zu einer "Poren-Leerstelle". Nimmt man zusätzlich die Energie pro Spike-Atom mit ≈ 1 eV an / 4 /, so liegt die mittlere Zahl der Atome in der Verlagerungszone bei 5×10^4 , was zu einer sphärischen Verlagerungszone von $\leq 150 \text{ \AA}$ Durchmesser führt. Der minimale Porendurchmesser der Abb. 1c beträgt $\leq 150 \text{ \AA}$. Da für Verlagerungszonen nur Ereignisse mit relativ hohen übertragenen Energien T von Bedeutung sind, kann man nach dem Bruchteil einer physikalischen Änderung π durch Primärteilchen unterhalb T fragen:

$$\int_{E_D}^T \pi(T) K(E,T) / \int_{E_D}^{T_{\text{max}}} \pi(t) K(E,T) \quad (26)$$

wenn $K(E,T) = d\sigma(E,T) / \sigma_D^+$ ist.

Unter der Annahme, daß π proportional zu T ist, werden 50% der physikalischen Änderung, die hier der Bildung einer Verlagerungszone entspricht, durch Primäratome oberhalb von $T_{1/2} = 4890$ eV hervorgerufen. Die dieser Energie zugeordnete Verlagerungszone besitzt einen Durchmesser von 34 \AA ; er stellt etwa eine untere Grenze für die Bildung von Verlagerungszonen dar. Der Wert von $T_{1/2}$ beträgt etwa

das 8-fache der im Mittel übertragenen Energie $\langle T \rangle = 620$ eV. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß noch Energien $> T_{1/2}$ im Primärereignis übertragen werden, beträgt

$$P(T > T_{1/2}) = 1 - \int_{E_D}^{T_{1/2}} K(E, T) \quad (27)$$

und in unserem Beispiel 3,2%. Die Wahrscheinlichkeit für die Bildung von Verlagerungszonen mit Durchmesser $> 30 \text{ \AA}$ liegt zwar um den Faktor ≤ 10 höher als die experimentell beobachtete Porenkonzentration, aber das Verhältnis der Volumina aller Poren und aller Spikes ($> 30 \text{ \AA}$) fällt um

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\text{Void}} &= 7,67 \times 10^{-17} \text{ cm}^3 \\ 10 \langle V \rangle_{\text{Spike}} &= 7,05 \times 10^5 \times 10^{-24} \times 10 = 2,05 \times 10^{-18} \end{aligned}$$

den Faktor $= 10$ zugunsten der Poren aus, so daß die Frage nach der Bedeutung der Verlagerungszonen für die Porenkeimbildung (unabhängig vom homogenen oder inhomogenen Charakter) nur im Sinne beantwortet werden kann, daß Verlagerungszonen wohl hinreichend für die Porenbildung sind. Ihre Notwendigkeit läßt sich mit diesem geschilderten Experiment jedoch nicht nachweisen. D.I.R. Norris / 30 / schließt aufgrund seiner Experimente mit 1 MeV-Elektronen die Notwendigkeit von Verlagerungszonen für die Porenbildung aus, da die 1 MeV Elektronen im Ni nur Einzel- oder Doppelleerstellen erzeugen können. Eine solche Aussage, die letztlich auch die Unabhängigkeit der Primärereignisse beinhaltet, kann nicht allein nach den Kriterien Gl. (25) gefällt werden, sondern jetzt zusätzlich eine Defekterzeugungsrate $K \ll 1$ [d/a] voraus, da eine mehrfache Verlagerung eines jeden Gitteratoms die Unabhängigkeit der Ereignisse im Bestrahlungsprozeß infrage stellt. Voids sind jedoch bei diesen Dosen ($K \ll 1$) bisher nicht beobachtet worden. Die Grenzenergien in Tab. 4 sollten jedoch insofern nicht allzu ernst genommen werden, da das Konzept einer mittleren freien Verlagerungsweglänge bei atomaren Größenordnungen nicht mehr verwendbar ist.

Die Abb. 6a zeigt die Brinkmannsche Vorstellung von einer Verlagerungszone und die Abb. 6b das verfeinerte Seegersche Konzept einer verdünnten Zone, in der spezifische Gittereffekte wie Fokussierungsstöße, Kanalisierungsereignisse etc. die Interstitiellen vom leerstellenreichen Kern entfernen, so daß die Bedingungen für ein Zusammenfallen des Leerstellenhohlraums und für eine Neuordnung entfallen.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß weder das Zonenkonzept noch die einfache Kaskadentheorie singulärer Defekterzeugung sich als einzige Defektmechanismen

etablieren. Es ist sehr wahrscheinlich, daß beide gleichzeitig auftreten.

3.2 Thermische Zonen

Die elastischen Wechselwirkungen sind nach unten durch die Verlagerungsenergie E_D begrenzt, die ein Gitteratom im Stoßprozeß notwendig übertragen bekommen muß, um seine Gitterposition verlassen zu können. Der nächste Schritt der Untersuchung, wie sich die in der Primärzone enthaltene Energie am Ende der Stoßkaskade eines Primärteilchens ins Gitter ausbreitet, gehört nicht mehr unmittelbar zum Thema der Arbeit; er schließt jedoch eng an das spike-Phänomen an, so daß er kurz behandelt werden soll. Die Energieausbreitung kann versuchsweise durch eine Temperaturverteilung beschrieben werden, wobei die "Temperatur eines Atoms" durch seine kinetische Energie definierbar ist

$$E_{\text{Atom}} \approx \frac{3}{2} kT \quad (28)$$

und k die Boltzmannkonstante bedeutet ($1 \text{ eV} = 7,7 \cdot 10^3 \text{ K}$). Der Energieübertragung von einigen eV definiert bereits erhebliche Atomtemperaturen, deren Ausbreitung mit den Mitteln der normalen Wärmeleitungstheorie nur bedingt untersucht werden kann, da diese für kinetische Energien kleiner als etwa 0,1 eV Verwendung findet.

Nach der Wärmeleitungstheorie erfolgt die Ausbreitung im isotropen Medium nach der Gleichung

$$\nabla^2 T = (D) \left(\frac{\delta T}{\delta t} \right) \quad (29)$$

wenn der D der Wärmediffusionskoeffizient ist, der mit der Wärmeleitfähigkeit C , dem Atomvolumen v_{at} und k durch die Beziehung

$$D = Cv_{\text{at}}/k$$

zusammenhängt. Die einfachste Lösung der Gl. (29) ist

$$T(\vec{r}, t) = \frac{Qv_{\text{at}}}{3k} \frac{e^{-r^2/4Dt}}{\{4\pi Dt\}^{3/2}} \quad t > 0 \quad (30)$$

Das entspricht einem Vorgang, bei dem zur Zeit $t = 0$ an der Stelle $r = 0$ eine Wärmemenge $Q = \int 3 kT/v_{\text{at}} d\vec{r}$ erzeugt wurde. Zur Vermeidung der Singularität für $t = 0$, betrachtet man die durch Gl. (30) beschriebene Wärmeausbreitung $T(\vec{r}, t)$ nach einem Startpunkt $t_0 = r_s^2 / 4 D$, wobei r_s den mittleren Atomradius nach

$$\frac{4\pi}{3} r_s^3 = \frac{1}{n}$$

bedeutet. Der Wert von t_0 entspricht etwa der Vibrationsperiode eines Gitteratoms (10^{-13} s). Die Existenzdauer einer solchen theoretischen Zone liegt bei $<10^2 t_0$ und die erreichten Temperaturen liegen zwischen $10^4 - 10^5$ Kelvin.

An diesem Modell sind viele Verfeinerungen angebracht worden, insbesondere ist ein Kopplungsfaktor q eingeführt worden, der zur Relaxationszeit, als Maß für die Transferrate, reziprok ist und die Kopplung zwischen Gitter- und Elektronentemperatur beschreibt. Die grundsätzliche Schwäche des Wärmeleitungsmodells, das es nur für $T \ll T_S$ (T_S Schmelztemperatur in Kelvin) angewandt werden darf, ist jedoch damit nicht behoben.

Ein anderes, vermutlich besser zutreffendes Modell, geht von der direkten Energieübertragung im Gitter durch Stöße zwischen nächsten Nachbarn (N.N.), die so schwach sind ($E_{\text{atom}} = 5-8$ eV), so daß Stöße mit übernächsten Nachbarn nicht wesentlich sind. Die Stöße sollen dabei in einer Zeit $\tau = D/v$ stattfinden, wenn D der Abstand zum N.N. und v die Atomgeschwindigkeit bedeuten. Als Energiebilanz erhält man dann für ein k.f.z. Gitter (mit 12 N.N.) die Gleichung

$$\dot{E}_{\text{atom}} = - \frac{E_{\text{Atom}}}{\tau} + \frac{1}{12} \sum_{\text{N.N.}} \left(\frac{E_{\text{Atom}}}{\tau} \right)_{\text{N.N.}} \quad (31)$$

Die Gültigkeit von Gl. (28) wird auch hier wieder angenommen. Ohne diese Gleichung näher diskutieren zu wollen, zeigen die Abb. 9a-c die Resultate von Maschinenrechnungen an einem Modell für Cu. Die Beziehung zwischen E_{Atom} und der Temperatur ist $E_{\text{Atom}} = kT$, da die Bewegung der Atome nur in der Ebene erfolgt. Das Zentrum liegt nicht am Anfangspunkt, sondern ist in der Richtung der Anfangsgeschwindigkeit verschoben. Eine regelmäßige Wärmeausbreitung im Sinne der Wärmeleitungstheorie ist nicht zu sehen.

Literaturverzeichnis

- / 1 / N. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 10 (1948)
- / 2 / J.R. Beeler Jr., Phys. Rev. 150, 470 (1966)
- / 3 / P. Sigmund, Bull. Am. Phys. Soc. 13, 464 (1968)
- / 4 / J.A. Brinkmann, J. Appl. Phys. 25, 961 (1954)
- / 5 / R. Bullough, R.C. Perrin, IAEA-Konferenz, Wien 1969, S. 233
- / 6 / J.P. Hirth, J. Lothe, Theory of Dislocations, New York, 1968, S. 144
- / 7 / D. Kaletta, unveröffentlichte Ergebnisse zur Simulation von Strahlenschäden mit schweren Ionen
- / 8 / R. Bullough, B.L. Eyre, R.C. Perrin, Nucl. Appl. + Techn. 9 (1970) 346
H.W. Wiedersich, On void formation during irradiation, 2nd Internat. Conf. on the Strength of Metals and Alloys, Pacific Grove, Calif. Aug./Sept. 1970
- / 9 / J.A. Davies, P. Jespersgaard, Can. J. Phys. 44, 1613 (1968)
- / 10 / P. Petroff, D.N. Seidmann, Appl. Phys. Lett. 18, 518 (1971)
- / 11 / F. Seitz, J.S. Köhler, Progr. in Sol. State Phys., Vol. 2, Acad. Press Inc., New York, 1957, p. 30
- / 12 / V.M. Gusev, Yu. Martynenko, K.V. Starinin, Sov. Phys. Cryst. 14, 908 (1970)
- / 13 / R. Kelly, H.M. Naguib, in: Atomic Collision Phenomena in Solids, ed. by D.W. Palmer et al., North-Holland Publ. Comp. Amsterdam 1970, p. 172 ff
- / 14 / R.S. Nelson, Phil. Mag. 11, 291 (1965)
- / 15 / A. Bourret, Phys. Stat. Sol. (a) 4, (1971) 831
- / 16 / G.H. Kinchin, R.S. Pease, Rep. on Progress in Physics, Vol. 18 (1955), The Physical Society, London
- / 17 / L.P. Abagdan et al., KFK-Tr.-144
- / 18 / K. Ehrlich, D. Kaletta, W. Schneider, KFK-1438 (1971)
- / 19 / D. Kaletta, The interaction potential of Ni. B.N.E.S. Proc. of Void Conference, Reading 1971, ed. by Pugh et al. A.E.R.E. Harwell
- / 20 / J. Lindhard, N. Scharff, H. Schiøtt, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 (1963) N^o 14

- / 21 / M.T. Robinson, in: Atomic Collision Phenomena in Solids, ed. by D.W. Palmer et al., Amsterdam 1970, p. 66
- / 22 / L.D. Landau, E.M. Lifschitz, Lehrbuch d. Theoretischen Physik, Bd. 1, Berlin 1963, S. 65
- / 23 / G. Leibfried, in: Vacancies and Interstitials in Metals, Hrsg. A. Seeger, W. Schilling und J. Diehl, Amsterdam 1970, S. 817
- / 24 / G.H. Kinchin, R.S. Pease, J. Nucl. Energy 1 (1955) 200
- / 25 / W.S. Snyder, J.S. Neufeld, Phys. Rev. 99 (1955) 1326
- / 26 / D. Kaletta, W. Schneider, Range and Stopping Power Tables for Heavy Ions, Nucl. Data Tables, to be published
- / 27 / V.A.J. van Lint, M.E. Wyatt jr., Range of Recoil Atoms, Aeronautical Research Labs Report, ARL-62-389 (1962)
- / 28 / I. Langner, J.J. Schmidt, D. Woll, KFK-750 (1968)
- / 29 / G.L. Kulcinski, J.J. Laidler, D.G. Doran, Radiat. Eff. 7 (1971) 195
- / 30 / D.I.R Norris, Phil. Mag. 23 (1971) 135
- / 31 / G.H. Vinyard, Disc. Farad. Soc. 31 (1961) 7
- / 32 / G. Leibfried, Bestrahlungseffekte in Festkörpern, Stuttgart 1965

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

Reaktor	Integraler Fluß [n/cm ² s]	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

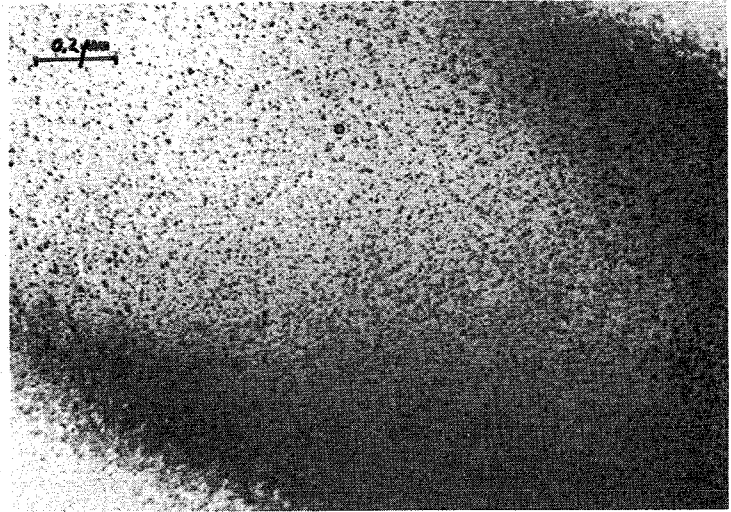
Tabelle 3 Mittlere freie Verlagerungslängen λ_D und Primärzonenausdehnungen für verschiedene Teilchen der Energie E_0 in Nickel als Targetmaterial

	E_0 (MeV)	λ_D (cm)	λ_D/D $D_{Ni-Ni}=2,61 \text{ \AA}$	$\langle T \rangle_{Ni}$ (keV)	$R^{Ni}(\langle T \rangle)$ (cm)	λ_D/D
n	1	3,8	$1,5 \cdot 10^8$	33,7	$1,5 \cdot 10^{-6}$	$2,5 \cdot 10^6$
n	10	3,4	$1,3 \cdot 10^8$	337,5	$8,9 \cdot 10^{-6}$	$3,8 \cdot 10^5$
α	10	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$7,5 \cdot 10^4$	0,2	$3,0 \cdot 10^{-7}$	$6,3 \cdot 10^3$
C^+	10	$7,6 \cdot 10^{-5}$	$2,9 \cdot 10^3$	0,24	$3,1 \cdot 10^{-7}$	$2,5 \cdot 10^2$
Ni^+	10	$6,5 \cdot 10^{-7}$	$2,5 \cdot 10^1$	0,38	$3,7 \cdot 10^{-7}$	1,7
Ni^+	1	$9,3 \cdot 10^{-8}$	3,6	0,43	$3,8 \cdot 10^{-7}$	0,24
Ni^+	0,1	$3,1 \cdot 10^{-8}$	1,2	0,63	$4,3 \cdot 10^{-7}$	0,07

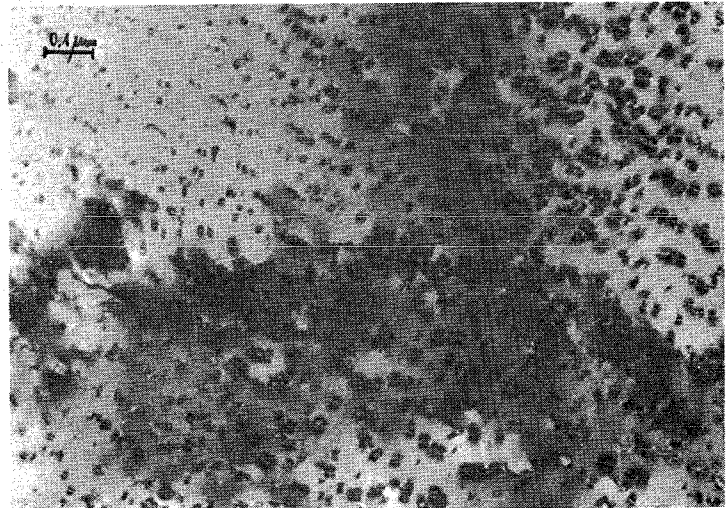
Tabelle 4 Grenzenergie, bei der die mittlere freie Verlagerungsweglänge gleich dem dichtesten Abstand zweier Nickelatome ist

Energie [keV]	Literatur
23	Brinkmann / 4 /
$\geq 100^+)$	Kulcinski et al. / 29 /
130	diese Arbeit

$^+)$ vom Verfasser aus / 29 /-Daten geschätzter Wert

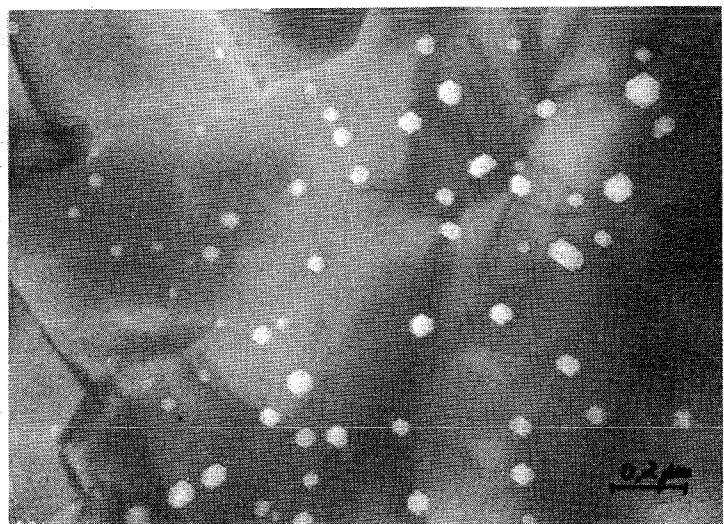


a) Defektcluster nach 60 keV Ni⁺ in Nickel

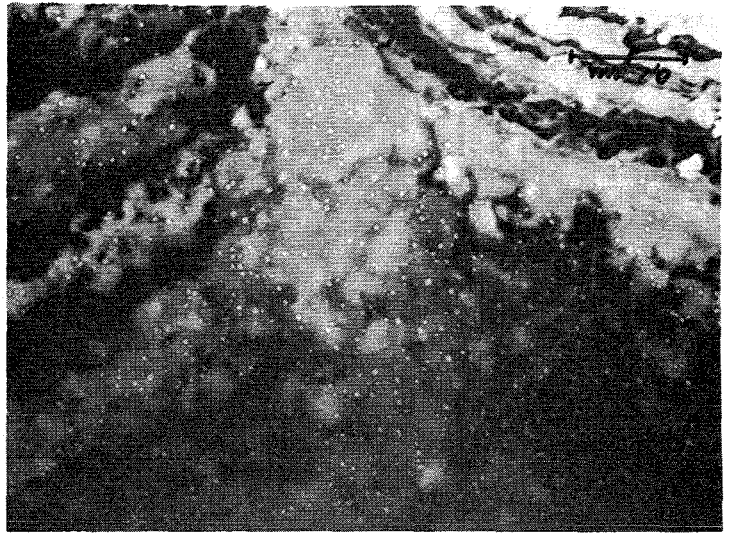


b) Versetzungsloops nach 80 keV He⁺ in Nickel

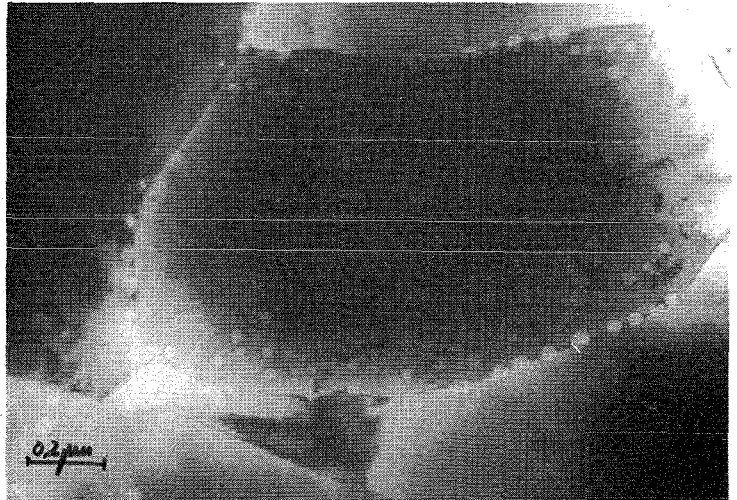
Abb. 1: Verschiedene Defekttypen in Metall nach niederenergetischer Bestrahlung mit Ionen



c) Poren nach 50 keV Ni⁺ in Nickel

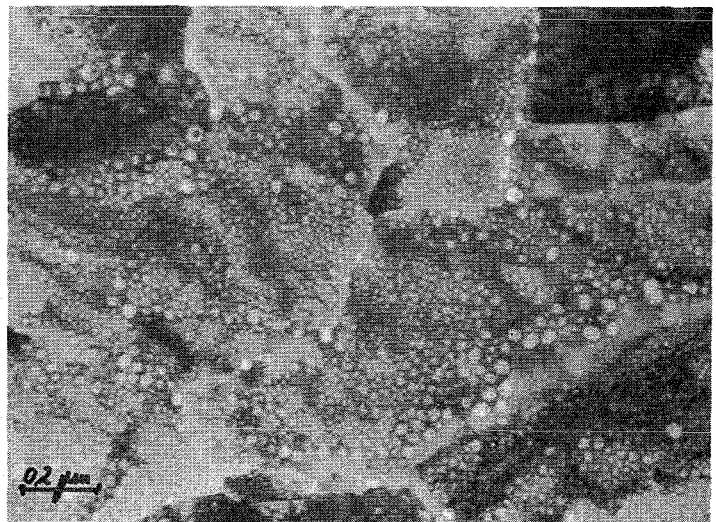


a) 60 keV He⁺ in Nickel



b) 80 keV N₂⁺ in Nickel

Abb. 2: Niederenergetische Gasimplan-
tation in Reinst-Nickel mit Dosen
 $\approx 10^{16}$ Ionen/cm²



c) 50 keV Ar⁺ in Nickel

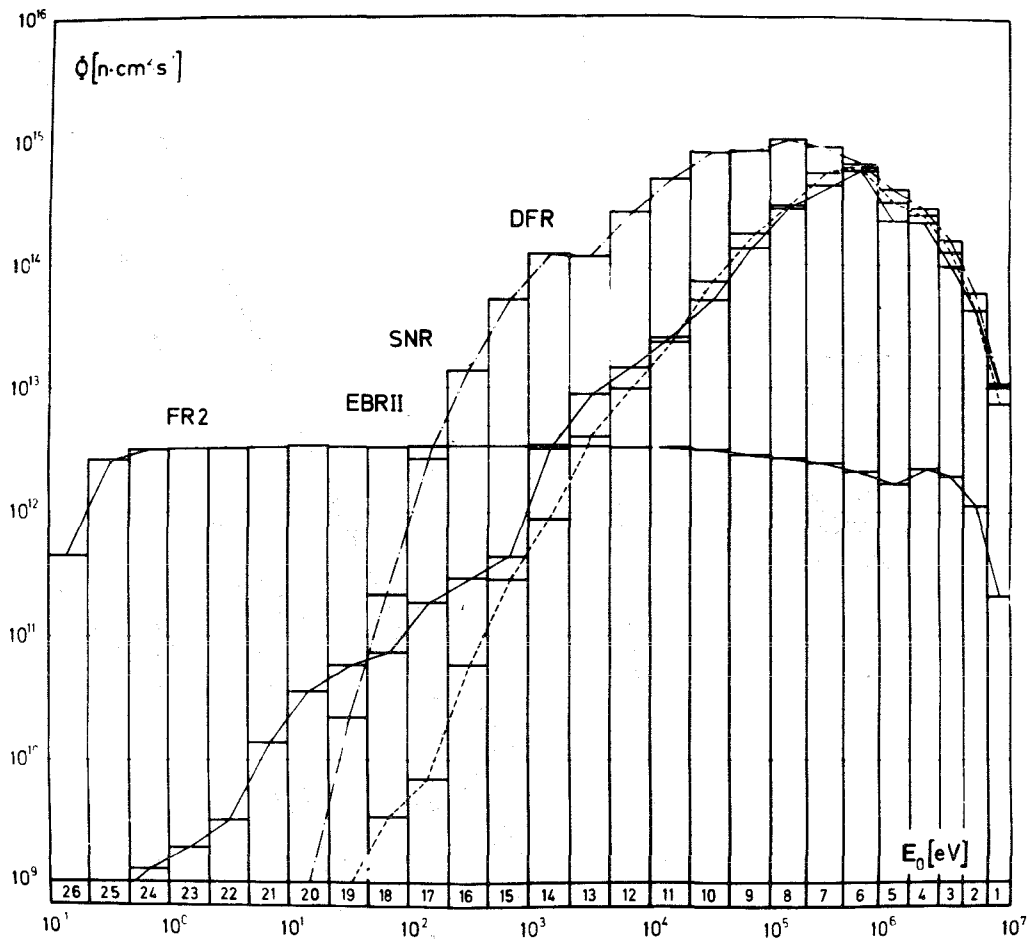


Abb. 3: Verschiedene Reaktorspektren in der 26-Gruppen-satz-Darstellung

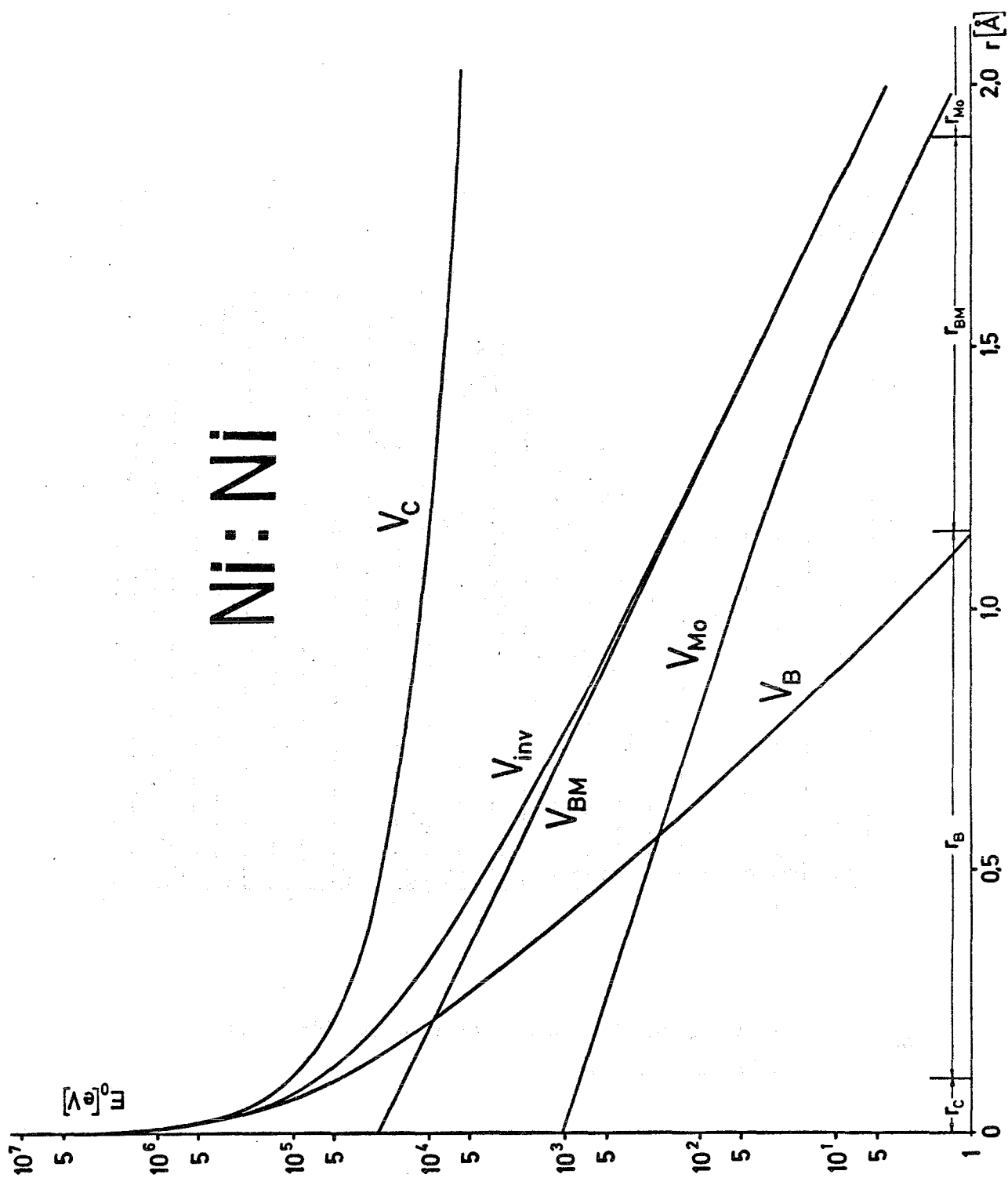


Abb. 4: Darstellung der nach Gl (12) und (16) benutzten Potentiale

Abb. 5: Darstellung des Lindhard-Faktors $\nu(s)$ in Abhängigkeit von s

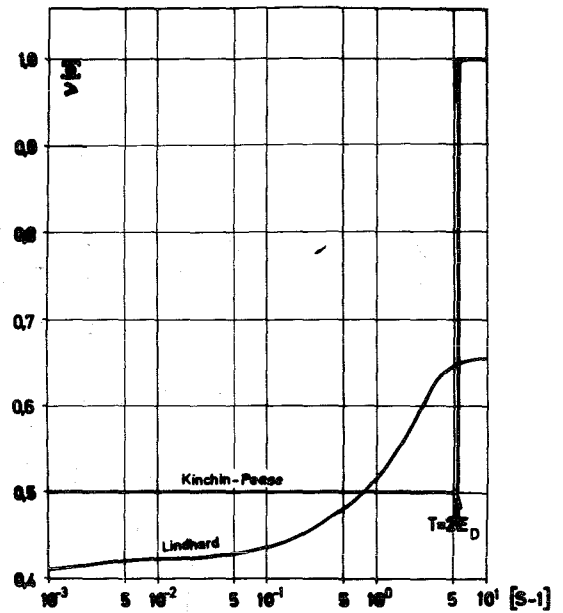
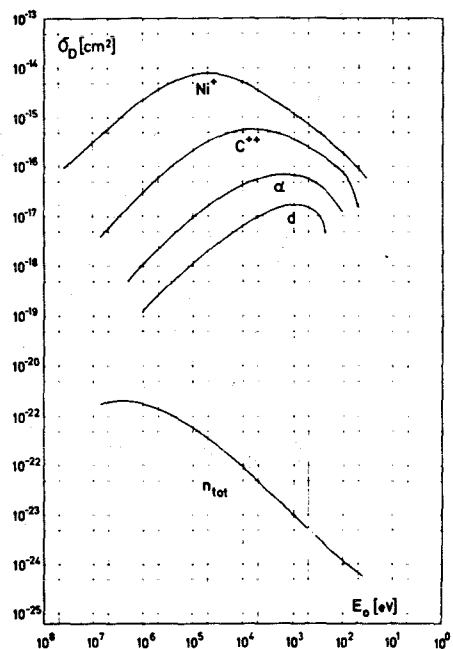


Abb. 6: Verlagerungsquerschnitte σ_D für verschiedene Einschussteilchen in Nickel in Abhängigkeit von der Einschußenergie E_0



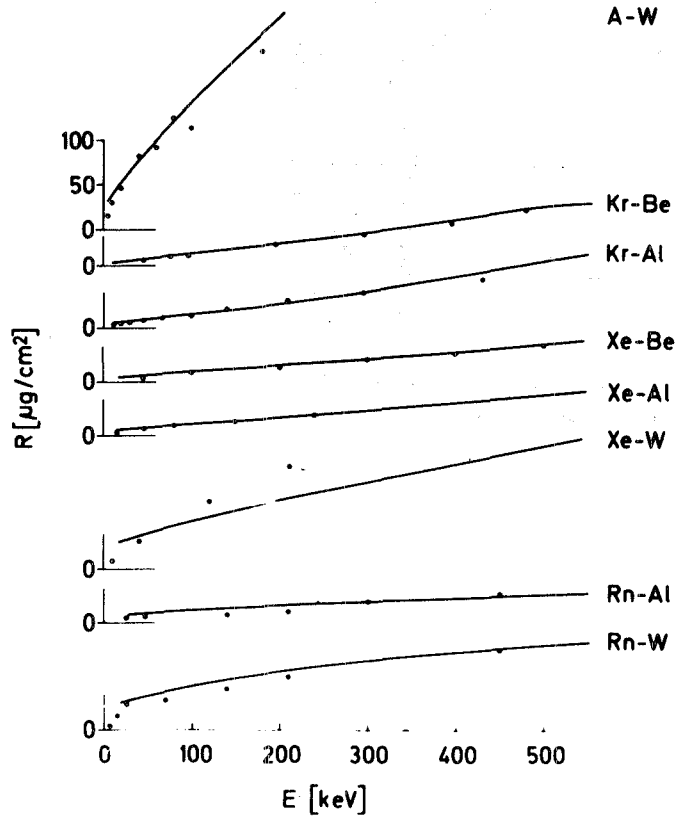
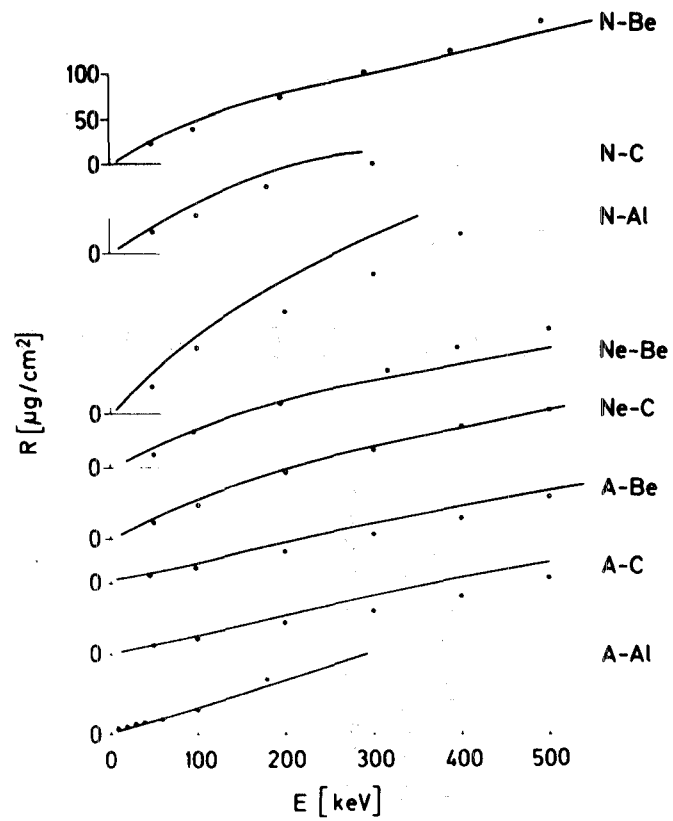


Abb. 7: Vergleich von berechneten Reichweiten (ausgezogene Linie) mit experimentellen Daten

Abb. 8a: Schematische Darstellung der Verlagerungszone nach J.A. Brinkmann

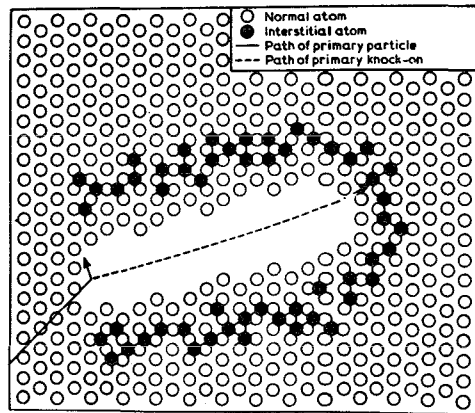
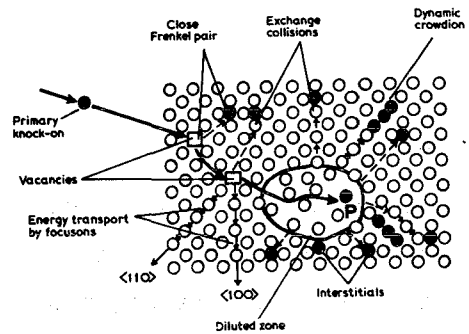
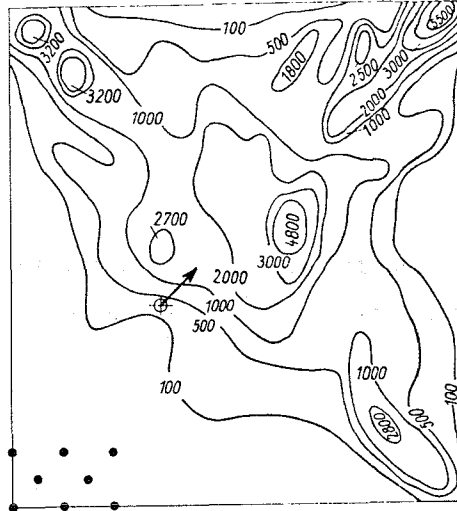
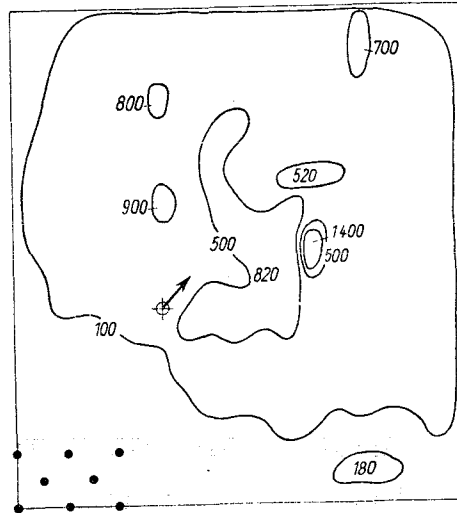


Abb. 8b: Schematische Darstellung der "verdünnten Zone" nach A. Seeger

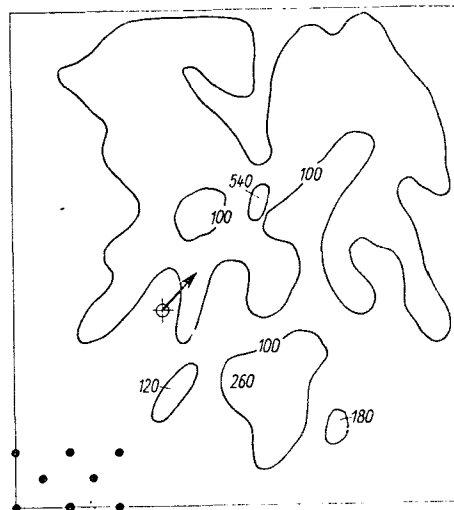




a) nach $3,3 \times 10^{-13}$ s



b) nach $9,9 \times 10^{-13}$ s



c) nach $16,5 \times 10^{-13}$ s

Abb. 9: Temperatur-Verteilung in einer (100) Ebene von Cu nach Rechnungen von G.H. Vineyard et al. nach einer Energieübertragung von 100 eV auf ein Atom (+) in der angegebenen Richtung

Theorie der Porenbildung

von W. Schneider

INHALT

1. Einleitung
2. Grundlagen
 - 2.1 Konzentrationen der Gitterfehler
 - 2.2 Keimbildung
 - 2.3 Porenwachstum
3. Computersimulation
4. Literaturverzeichnis

Theorie der Porenbildung

W. Schneider

1. Einleitung

Im Jahre 1967 berichteten Cawthorne und Fulton (1) über sorgfältige mikroskopische Untersuchungen von bestrahltem Hüllmaterial aus dem DFR, das eine Dosis von etwa $10^{22} \text{ n} \cdot \text{cm}^{-2}$ erhalten hatte. Sie fanden, daß der Stahl eine große Anzahl von kleinen Hohlräumen aufwies, die einen Durchmesser von etwa 100 Atombühmesser hatten. Sie konnten zeigen, daß diese Hohlräume zum größten Teil leer sein mußten, da der Gasgehalt des Materials sehr viel niedriger lag, als der Hohlraumfüllung entsprach. Sie nannten die Hohlräume deshalb voids. Im folgenden wird das Wort Pore für leere Hohlräume verwendet, im Gegensatz zu gasgefüllten Blasen. Daß die Poren zum größten Teil leer sein müssen, zeigt auch, daß geringe thermische Behandlung (bei Stahl etwa bei 800°C) die Löcher völlig zum Verschwinden bringt, was bei Blasen nicht so einfach ist.

Die Bildung von Hohlräumen erfordert, daß sich die äußeren Maße des Materials ändern müssen, um den Betrag, der dem eingeschlossenen Volumen der Poren entspricht. Nachdem nun die Dimension des Hüllmaterials nachgemessen und die Vergrößerung der Maße bestätigt war, erwachte sofort wegen der auftretenden Auslegungsfragen ein großes technologisches Interesse an diesem void-swelling bekannt werdenden Effekt.

Abb. 1 zeigt, wie man sich eine solche Pore im Gitter vorzustellen hat. Im Gegensatz zu anderen Störungen des Gitters wie Leerstellenloops oder Interstitiellenloops wird die Verspannung des Gitters durch eine Pore gering sein, während die Versetzungsringe sich gerade durch diese Spannungen im elektronenmikroskopischen Bild bemerkbar machen. Die Tatsache, daß Poren leer sind und weitgehend spannungsfrei im Gitter liegen, fordert, daß das Wachstum der Pore durch diffusionsgesteuerte Aufnahme von Leerstellen erfolgen muß, was wiederum das Vorhandensein einer gewissen Leerstellenübersättigung der Matrix erfordert. Die wichtigste Voraussetzung für das Porenwachstum ist also eine Leerstellenübersättigung.

Da es gleichgültig sein dürfte, wie diese Übersättigung hervorgerufen wird, können wir erwarten, daß auch in anderen Versuchsführungen, die Leerstellenübersättigungen liefern, eine Porenbildung zu erwarten ist.

Solche Versuche sind schon seit längerer Zeit bekannt. Ein typischer Leerstellenübersättigung liefernder Mechanismus ist der Kirkendahl-Effekt (3). Zwei Metalle mit verschiedenen Diffusionskoeffizienten erhalten die Möglichkeit ineinander zu diffundieren. Weil das Material des einen Partners schneller durch die Kontaktfläche wandert als das andere Material, muß es Leerstellen hinterlassen und diese können zu größeren Aggregaten koagulieren, bis wirkliche Hohlräume gebildet werden. Dieser Effekt wurde schon für viele Diffusionssysteme beobachtet. Weitere Leerstellen erzeugende Mechanismen, bei denen man Porenwachstum beobachtet hat, sind das schnelle Abschrecken stark erhitzter Proben, in denen dadurch die hohe thermische Leerstellengleichgewichtskonzentration eingefroren wird und so bei tieferen Temperaturen eine Leerstellenübersättigung liefert. Solange die Abschrecktemperaturen noch hoch genug sind, daß die Leerstellen beweglich bleiben, können auch hier Poren wachsen. Beispiele für Pt(4), Al(5), Ag, Cu Au (6), Ni und austenitischem Stahl sind berichtet. Weitere Beispiele für Porenwachstum findet man in Versuchen zur thermischen und elektrischen Überführung, d.h. beim Materialtransport durch Mitnahme von Material im Phononen- oder Elektronenstrom (7,8).

2. Grundlagen

In den folgenden Betrachtungen wird die klassische Keimbildungs- und Wachstumstheorie benutzt, wie sie für die Kristallbildung oder das Entstehen von Ausscheidungen entwickelt wurde. Demgemäß werden die Effekte aufgeteilt in Keimbildungsprozesse und Wachstumsratenberechnungen. Die wichtigste Voraussetzung für diese Prozesse ist das Vorhandensein in einer Übersättigung des Systems an der Phase, die wachsen soll: In unserem Fall also an Leerstellen.

Da Porenwachstum beobachtet wird, müssen wir annehmen, daß in einem Werkstoff unter Bestrahlung eine Leerstellenübersättigung vorhanden ist. Um also über Keimbildung und Porenwachstum Aussagen machen zu können, müssen Berechnungen angestellt werden, welche Konzentrationen an Leerstellen und Zwischengitteratomen in unter Strahlung stehenden Materialien zu erwarten sind.

2.1 Konzentrationen der Gitterfehler

Anknüpfend an den Bericht von Kaletta (9) wird hier die Erzeugungsrate an Frenkeldefektpaaren K eingeführt, die für normale Reaktoren in der Größenordnung von 10^{-6} sec^{-1} liegt. Das bedeutet, daß pro Sekunde jedes millionste Atom aus seinem Platz geschossen wird und an einer anderen Stelle als Zwischengitteratom zur Ruhe kommt, wobei es an seinem ursprünglichen Platz eine Leerstelle hinterläßt. Würden diese erzeugten Frenkelpaare nicht zum allergrößten Anteil wieder ausheilen, so würden im Laufe von zwei Jahren, was der Einsatzzeit für normales Reaktormaterial entspricht, pro enthaltendem Atom etwa 30-40 Leerstellen und Zwischengitteratome vorliegen. Da die Materialien nach Ausbau durchaus noch ihre alte Form haben und ihre ursprünglichen Eigenschaften zumindest noch erahnen lassen, ist klar, daß der überwiegende Teil dieser Strahlenschäden wieder ausheilt und das normale Metallgitter wiederhergestellt wird. Welcher Art sind nun die Ausheilvorgänge? Wenn sich ein ZGA (Zwischengitteratom) und eine LS (Leerstelle) nahe kommen, so rekombinieren sie spontan. Diese spontane Rekombination wird bestimmt durch die Sprungfrequenz eines ZGA ν ; und der Reichweite eines solchen Sprunges, nämlich der Anzahl der denkbaren Plätze, die ein solches ZGA erreichen kann. Wenn einer dieser Plätze durch eine Fehlstelle besetzt ist, löschen sich diese beiden Punktdefekte gegenseitig aus. Bullough, Eyre und Perrin (10), über deren Ansatz im folgenden berichtet wird, nehmen an, daß die Anzahl z der Plätze, die durch einen Sprung erreichbar sind, bei 100 liegt, und die Sprungfrequenz für Interstitielle ν_i bei 10^{14} sec^{-1} , so daß sie einen Rekombinationsfaktor α von 10^{16} erhalten. Multipliziert mit den Konzentrationen an LS und ZGA, c_r bzw. c_i , ergibt der Faktor die jeweils gültige Rekombinationsrate

$$R = z \cdot \nu_i (c_i \cdot c_v)$$

$$\alpha = 10^{16}$$

Weiterhin werden die im Material vorhandenen Versetzungen als Senken für Punktdefekte wirken. Versetzungen haben um sich ein Spannungsfeld und dieses wird mit der durch die Punktdefekte hervorgerufenen Gitterdilatation in einer Anziehung resultieren. Man erhält so eine gerichtete Diffusion der LS und ZGA auf die Versetzungen hin, wo sie sich bevorzugt gegenseitig vernichten werden oder in die Versetzung eingehen, woraus eine Bewegung der Versetzungslinie sich ergibt. Als weitere Senken gelten Korngrenzen und inkohärente Ausscheidungen. Wenn wir jetzt die Anteile der Annihila-

tion der Punktdefekte an den verschiedenen Senken und der zum Aufbau von Poren und auch der interstitiellen Versetzungsringe addieren, so wird sich nach einer gewissen Einstellungszeit ein Gleichgewicht zwischen der Produktion von Punktdefekten und ihrer Vernichtung einstellen. Diese Einstellungszeit beträgt bei dem hier interessierenden Bereich von K bei 300°C ungefähr 10 sec, während sie bei 600°C nur noch etwa $\frac{1}{10}$ sec lang ist. Diese Zeiten sind sehr kurz im Vergleich zu den Bestrahlungszeiten; man kann also immer mit Gleichgewichtsbedingungen rechnen. Problematischer wäre die Sachlage bei anderen Strahlenquellen, z.B. wenn hochenergetische Ionenstrahlen mit hohem Fluß innerhalb kurzer Zeiten einwirken, ist es durchaus möglich, daß die Gleichgewichte nicht erreicht werden.

Um jetzt zu einer Abschätzung für die Konzentrationswerte an Punktdefekten zu kommen, benutzen Bullough, Eyre und Perrin (10) ein stark vereinfachtes Modell, für das sie 4 Hypothesen aufstellen:

- 1) Als einzige Senke für Punktdefekte werden die Versetzungen angesehen, sowohl die primären als auch die sekundär gebildeten (eventuell gebildete LS- oder Interstitiellenloops).
- 2) Die LS und ZGA können sich frei durch das jeweilige Kristallkorn durch Diffusion bewegen und zwar in Raten, die durch die jeweilige Diffusionskonstante bestimmt werden, bis sie zu einer Senke gelangen. Diese These kann in Frage gestellt werden durch interstitielle Verunreinigungen, die Senken darstellen können. Bei ihnen ist es möglich, daß sie als heterogene Keime für Punktdefektcluster dienen können und so zur Senkenkonzentration beitragen. Das Modell verzichtet aber auf ihre Berücksichtigung.
- 3) Die Interstitiellen unterliegen einer signifikanten aber geringen Wechselwirkung mit den Versetzungen aufgrund ihres Gitterdilatationseffektes, die LS aber nicht, oder zumindest nicht im dem Maße. Es ist bekannt, daß interstitielle Verunreinigungen über größere Distanzen hin Wechselwirkungen mit Versetzungen ausüben, da die im Vergleich zu den LS ungleich größere Gitterdilatation zu weitreichenden Spannungsfeldern führt.
- 4) Der Verlust von Leerstellen an Poren ist klein gegen den Verlust an Versetzungen und durch Rekombination. Diese Hypothese ist sicher richtig am Anfang der Bestrahlung, solange noch kleine und sehr wenige Poren vorliegen. Später jedoch kann ein Wettbewerb um die Punktdefekte zwischen Poren und Versetzungen einsetzen. Diese Rechnungen gehen jedoch weit über das

angesetzte Modell hinaus und dürften nicht leicht zu behandeln sein. Wegen der sehr geringen Verspannungen des Gitters durch die Poren wird deren Einfluß jedoch nicht weitreichend sein.

Als weitere Vereinfachung des Modells für die Berechnung von c_i und c_v müssen wir außerdem noch die statistische Verteilung der Versetzungen durch eine geometrisch idealisierte ersetzen, indem angenommen wird, daß alle Versetzungen gerade und zu einander parallel sind, so daß wir jeder Versetzung einen zylindrischen Bereich mit dem Radius $R = \frac{l}{\sqrt{\pi \rho}}$ zuordnen können (Abb. 2). (ρ = Dichte der Versetzungen). Wir können erwarten, daß wir an Stelle $r = \sigma$ (dem Versetzungsradius) die niedrigste und an den Stellen $r = R$ die höchste Konzentration an Punktdefekten erhalten. Diese Stellen zwischen zwei Versetzungen sind die wahrscheinlichsten Plätze für die Entstehung von Poren.

Die Gleichgewichtskonzentrationen innerhalb des zylindrischen Bereichs um die Versetzung werden durch folgende simultane Differentialgleichungen beschrieben.

$$\frac{d^2 c_v}{d r^2} + \frac{1}{r} \frac{d c_v}{d r} + \frac{K}{D_m^v} - \frac{\alpha}{D_m^v} \cdot c_v \cdot c_i = 0$$

$$\frac{d^2 c_i}{d r^2} + \frac{1}{r} \frac{d c_i}{d r} + \frac{K}{D_m^i} - \frac{\alpha}{D_m^i} c_v \cdot c_i + \frac{L}{r^2} \frac{d c_i}{d r} - \frac{L}{r^3} c_i = 0$$

Die zwei ersten Terme sind aus der 2. Fickschen Gleichung als Beschreibung des Diffusionsstromes zur Versetzung hin bekannt. K = Frenkelpaarerzeugungsrate ($8 \cdot 10^{-6} \text{ sec}^{-1}$), D_m^v und D_m^i sind die Diffusionskonstanten für die Wanderung der beiden verschiedenen Punktdefekte und α die schon erwähnte Rekombinationskonstante $\approx 10^{16}$.

Die zwei letzten Terme der zweiten Gleichung berücksichtigen den Drifteffekt der ZGA, der zu einem verstärkten Diffusionsstrom der Interstitiellen zur Versetzung hin führt. Im Parameter L stecken der Schubmodul, die Größe des Burgersvektor der Versetzung, der Raum, den ein ZGA beansprucht, und eine effektive Gitterdilatation, die aus Analogbetrachtungen bei anderen Materialien gewonnen wurde. Wir haben nun noch 2 Randbedingungen für unser System. Bei $r = \sigma$, dem Versetzungskernradius, sollte c_i und $c_v = 0$ sein, denn dort erwarten wir ja die Annihilation der Punktdefekte. Genau zwischen den Versetzungen bei $r = R$, im

erwarteten Konzentrationsmaximum, sollten die Konzentrationskurven horizontal verlaufen, $\frac{dc}{dr} = 0$.

Durch geschickte Umformung läßt sich ein System von vier simultanen nichtlinearen Differentialgleichungen 1. Ordnung entwickeln, das per Computer numerisch, wenn auch nur interaktiv gelöst werden kann.

Die erhaltenen Konzentrationskurven für verschiedene ρ - und α -Werte in Stahl in Abhängigkeit von der Temperatur zeigt Abb. 3. Für andere Metalle sind die Kurven ähnlich, nur bezüglich der Temperatur verschieden.

Folgende Ergebnisse werden aufgezeigt:

- 1) Wird für die Vernichtung der Punktdefekte nur der Rekombinationsmechanismus angenommen, also $\rho = 0$, so sind die Kurven c_i und c_v natürlich identisch. Wir erhalten einen horizontalen Verlauf mit der Temperatur, da unser Rekombinationsterm athermisch angesetzt wurde.
- 2) Bei endlicher Senkendichte zeigen alle c_v -Kurven mit steigender Temperatur abnehmende Tendenz. Bei hohen Senkendichten ist dieser Abfall steiler, denn durch die höhere Mobilität der LS ist der Anteil der an den Senken ankommenden Leerstellen größer.
- 3) Bei kleinen Senkendichten ($\rho = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$) ist der Effekt der Rekombination bis zu hohen Temperaturen groß, bei großen ρ ab 400°C aber unbedeutend. Von da ab ist einzig bedeutend für die Vernichtung der LS die Annihilation an Versetzungen.
- 4) Die Konzentration an ZGA, die viel tiefer liegt als die LS-Konzentration steigt bei kleinen ρ leicht an mit der Temperatur und nimmt bei großen Versetzungsdichten leicht ab. Der Einfluß der Rekombination auf die Interstitialen ist natürlich ähnlich wie bei den Leerstellen.
- 5) Ab 600°C haben wir keine großen Poreneffekte mehr zu erwarten, da bei höheren Temperaturen die thermische Leerstellenkonzentration größer wird als die durch Bestrahlung induzierte.

Zur Verdeutlichung des Einflusses der Senkendichte zeigt Abb. 4 noch eine Auftragung der Konzentrationen gegen ρ . Der starke Abfall der Konzentrationen mit der Senkendichte ist deutlich.

2.2 Keimbildung

Nachdem nun ein Bild der durch Bestrahlung entstehenden Konzentrationen an LS und ZGA gezeichnet wurde, soll der Keimbildungsprozeß betrachtet werden. Die Keimbildungsrate sollte proportional der Anzahl an Keimen, die die kritische Größe erreichen, multipliziert mit der Wachstumsrate dieser Keime sein.

$$I = c_c \cdot \beta$$

Die Wachstumsrate β bestimmt den Anteil an kritischen Keimen, der weiter wachsen kann, da der kritische Keim mit gleicher Wahrscheinlichkeit wächst oder schrumpft. Zur Festlegung des kritischen Keimradius benutzt man die bekannte Formel für die aufzuwendende Arbeit bei der Keimbildung

$$\Delta F_r = \frac{4}{3} \pi r^3 \cdot \Delta F_v + 4 \pi r^2 \gamma$$

ΔF_r setzt sich zusammen aus dem Energieinhalt des neugeschaffenen Volumens und der Energie der neuen Oberfläche. Da ΔF_v , die Differenz der spezifischen freien Energien der Phasen vor und nach der Keimbildung oder Umwandlung, ein negativer Term ist, muß man den Punkt feststellen, an dem die differentielle Oberflächenenergie kleiner wird als die differentielle Volumenenergie.

An dieser Stelle r_c hat ein zufällig gebildeter Keim die gleiche Wahrscheinlichkeit weiter zu wachsen, wie sich aufzulösen. Durch Differentiation der Funktion und Bestimmung der 0-Stelle der Ableitung erhält man die Werte für r_c und ΔF_{rc} zu

$$r_c = - \frac{2 \gamma}{\Delta F_v} \quad \dots \quad \Delta F_{rc} = \frac{16 \pi \gamma^3}{3 (\Delta F_v)^2}$$

Bei der Abschätzung der Größe von ΔF_v muß versucht werden, darüber Aufschluß zu erhalten, wie ein solcher Keim aussieht, ob ein statistisches sich Zusammenfinden von Leerstellen ausreicht, einen solchen Keim über seinen kritischen Radius bringen oder ob stabilisierende Mechanismen eingeführt werden müssen, die die Lebensdauer eines gebildeten unterkritischen Keimes soweit verlängert, daß er Zeit zum ausreichenden Wachstum enthält. Man kann sich noch gut vorstellen, wie man eine gewisse Anzahl von LS auf einem eng begrenzten Raum erzeugen kann. Wenn ein Neutron auf seinem Weg durch das Metall ein Metallatom anstößt, so erhält dieses primär angestoßene Atom eine relativ hohe Energie, die dazu führt, daß es aus seiner Lage geschleudert wird und weitere Atome anstößt. Da-

durch wird seine Bewegungsenergie laufend verringert. Der Abstand zwischen zwei Stoßprozessen wird aber mit Abnehmen der Energie immer kleiner, so daß kurz vor dem endgültigen Zurruhekommen des Atoms eine große Anzahl von Stoßprozessen auf engem Raum stattfinden. Beeler (11) hat in einer Computersimulation das Bild einer solchen Kaskade, bzw. eines Spikes entworfen. Abb. 5 zeigt seine Ergebnisse und ein Bild der Punktdefekte, die nach einer sofortigen Annihilation benachbarter Punktdefekte übrigbleibt.

Man sieht, daß ein solches Spike eine sehr LS-reiche Kernzone hat, die umgeben wird von einer Region, die reich an Interstitiellen ist. Diese räumliche Trennung der verschiedenen Punktdefekte begünstigt eine statistische Clusterbildung der Defekte.

Sollen nun aus einer solchen statistischen Anhäufung von Defekten sphärische Porenkeime entstehen, so begegnet man folgender Schwierigkeit: Wie eine Berechnung von Kuhlmann-Willsdorf (12) zeigt, gibt es für die verschiedenen Möglichkeiten LS zu koagulieren verschiedene Werte für die Defektenergie pro LS. Abb.6 zeigt die Berechnungen für austenitischen Stahl. Voids, also Hohlräume, benötigen zu ihrer Bildung eine größere Energie als zum Beispiel prismatische Versetzungsringe (parallel (100)) oder Frankloops (111)) oder gar Stapelfehler-tetraeder. Es werden also hauptsächlich nichtsphärische Defektaggregate erhalten, und zufällig gebildete Voidkeime sind instabil gegenüber anderen Formen und würden innerhalb kurzer Zeit in andere Konfigurationen umklappen. Da nun aber Voids beobachtet werden, braucht man einen Stabilisierungsmechanismus der spezifisch für sphärische Keime ist. Es bietet sich die Stabilisierung durch Aufnahme von Gasatomen aus der Matrix an, vorzugsweise durch He, das aus (n,α)-Reaktionen im Stahl stammt. Diese durch Gasatome stabilisierten Keime haben eine längere Lebensdauer und benötigen so eine geringere Wachstumsrate β , um überleben zu können. Es sollte auch möglich sein, durch drastische Fluß- und damit Erzeugungsraten (K)-Erhöhung die Wachstumsrate β so zu erhöhen, daß der Gasstabilisierungseffekt weniger wichtig wird. Leider hat man bei Reaktoren die Flußvariation nicht in dem Maße in der Hand. Doch ist dieses Bild der nahezu reinen homogenen Keimbildung bei Bestrahlung mit anderen Strahlenquellen nicht von vornherein von der Hand zu weisen.

Ein weiterer die Keimbildung beeinflussender Wert ist die Stapelfehlerenergie, die beim austenitischen Stahl besonders niedrig liegt. Wird diese Stapelfehlerenergie größer, wie bei reinen Metallen, so werden die Kuhlmann-Willsdorf-Kurven

für die verschiedenen Defektaggregate enger zusammenliegen, so daß die Wahrscheinlichkeit für Voidkeime größer wird, und die geforderte Gasstabilisierung unwichtiger. So findet man im austenitischen Stahl erst Poren bei einer Dosis von etwa 10^{22} Neutronen $\times \text{cm}^{-2}$, während in reinem Nickel schon ab 10^{19} Neutronen $\times \text{cm}^{-2}$ Poren beobachtet werden, was darauf schließen läßt, daß bei höherer Stapelfehlerenergie der Gasgehalt des Materials geringer sein kann. Ein weiterer Hinweis auf die Stabilisierung der Voidkeime durch Gas bietet eine Rechnung von Harkness und Che-Yu Li (13,14), mit deren Modellansätzen wir uns im folgenden beschäftigen wollen. Sie nehmen rechnerisch homogene Keimbildung an aus Gründen der mathematischen Überschaubarkeit dieses Mechanismus. Eine Anpassung an experimentelle Daten erreichen sie nur dadurch, daß sie eine spezifische Oberflächenenergie von etwa 500 erg cm^{-2} einsetzen, ein Wert, der nur einen Bruchteil der normalerweise benutzten Energie von $1100-1500 \text{ erg cm}^{-2}$ darstellt. Es scheint also klar zu sein, daß Effekte im Spiel sein müssen, die einen Teil dieser Oberflächenenergie neutralisieren. Harkness und Che Yu Li nehmen als wahrscheinlichsten Mechanismus für die Porenbildung im Stahl an, daß im Inneren von Spikes sich Keime bilden, die durch einen gewissen Gasgehalt der Matrix stabilisiert sind. Es muß aber darauf hingewiesen werden, daß Versuche gezeigt haben, daß das Vorhandensein von Spikes keine notwendige Voraussetzung für das Porenwachstum darstellt.

Eine Betrachtung der Bildungsenergie für Hohlräume muß also den Einfluß eines gewissen Gasdruckes berücksichtigen. Der Ausdruck für F_v setzt sich nun zusammen aus der Änderung des chemischen Potentials, dem Gasdruck und eventuell der hydrostatischen Komponente einer angelegten Zugspannung. Den Ausdruck für die Änderung des chemischen Potentials hat Greenwood (15) abgeleitet als $\frac{\rho}{M} RT \ln \frac{c_v}{c_{v0}}$ wobei c_{v0} die Leerstellenkonzentration im thermischen Gleichgewicht darstellt.

$$\Delta F_v = \frac{\rho}{M} RT \ln \frac{c_v}{c_{v0}} + \rho + \sigma$$

Wir kennen nun den Ausdruck für die Schwellenergie eines kritischen Keimes und wissen, daß die Anzahl der Keime proportional zum Neutronenfluß sein wird.

$$I \sim \phi \exp \left[- \frac{F_A}{RT} \right]$$

wobei ΔF_A die Wanderungsenergie der LS ist. Der Anteil der Keime, die den kritischen Radius erreichen, wird durch das Wahrscheinlichkeitsglied

$\exp\left[-\frac{16\gamma^3}{3RT(\Delta F_v)^2}\right]$ angegeben. Multipliziert man die erhaltenen Glieder noch mit der Wachstumsrate für kritische Keime, so erhält man folgenden Ausdruck

$$I = k \cdot \phi \cdot \exp\left[-\frac{16\gamma^3}{3RT(\Delta F_v)^2} - \frac{\Delta F_A}{RT}\right] \left(D_m^v \cdot c_v - D_m^i c_i\right) \cdot 4\pi r_c$$

Die letzte Klammer mit den folgenden Faktoren beschreibt den Diffusionsstrom von Punktdefekten zum kritischen Keim hin. Bei Einsetzen vernünftiger Werte erhält Harkness die in Abb. 7 gezeigte Kurve für die Keimbildungsraten in Abhängigkeit von der Temperatur. Man sieht, daß die Keimbildungsrate ein Maximum bei etwa 400°C hat und daß jenseits von 600°C keine Keime zu erwarten sind, da die ΔF_v bestimmende Leerstellenübersättigung nicht mehr vorhanden ist. Es hat sich übrigens bei all diesen Berechnungen gezeigt, daß der ausschlaggebende Anteil der Formel besonders der Schwellenergie die LS-Übersättigung darstellt, während der Term für die angelegte Zugspannung zu vernachlässigen ist. Er ist bei nicht zu hohen Temperaturen um einige Größenordnungen kleiner als der LS-Übersättigungsterm in den in Frage kommenden Bereichen. Eine Formel für die Keimbildung interstitieller Versetzungsringe läßt sich ganz ähnlich ableiten. Die Schwellenergie wird hier hauptsächlich durch die Stapelfehlerenergie kontrolliert.

2.3 Porenwachstum

Für das Wachstum vorhandener Poren hat Bullough folgendes Modell angesetzt. Die Innenseite einer kugelförmigen Pore enthält eine relativ große und ziemlich konstante Anzahl an Oberflächenstufen. Wachstum und Schrumpfung der Pore werden als Bewegung einer solchen Stufe gedeutet. Absorption einer LS oder Emission eines ZGA läßt die Abb. 8 gezeigte Stufe nach links wandern, die Pore wird größer. Absorption eines ZGA oder Emission einer LS bedeutet ein Schritt nach rechts und Verkleinerung der Pore. Dieses Modell ist in enger Anlehnung an das Jogmodell nach Friedel (16) gewählt, um leichter überschaubare mathematische Grundbedingungen zu erhalten. Die Kombination der Wahrscheinlichkeiten für Aufnahme und Abgabe von LS und ZGA erlaubt nun, unter der Annahme, daß die Konzentration der Oberflächenstufen konstant bleibt, die Wachstumsrate einer kugelförmigen Pore (beim Radius r und der Zeit t) zu formulieren als

$$\frac{dr}{dt} = \frac{1}{4b} \left(D_m^v c_v - D_m^i c_i\right) - \frac{D_s^v}{4b} \exp\left(\frac{F_m \cdot b^3}{kT}\right)$$

Das Glied in der ersten Klammer bezeichnet den ankommenden Diffusionsstrom an der Pore, der abhängig ist von den Diffusionskonstanten und den früher berechneten Konzentrationen der Punktdefekte. Das zweite Glied berücksichtigt den Anteil von Leerstellen, der von einer Pore emittiert wird. Hier ist D_s^V die Selbstdiffusionskonstante für LS und F_m die mechanische Kraft, die auf die Oberflächeneinheit der Pore wirkt

$$F_m = \sigma + \frac{2\gamma}{r_v} - \frac{3NkT}{4\pi r_v^2}$$

mit σ dem hydrostatischen Druck und N der Anzahl der in der Pore enthaltenen Gasatome.

Ein Term für die Abspaltung von Interstitiellen würde die hohe Bildungsenergie für ZGA enthalten und ist somit zu vernachlässigen. Für Poren, die größer als 35 \AA sind, wird der Faktor $F_m = 0$ und so kann bei der Berechnung der ganze zweite Ausdruck durch $\frac{D_s^V}{4b}$ ersetzt werden.

Die Ergebnisse zeigt Abb. 9. Man sieht, es gibt ein Maximum der Wachstumsrate bei konstant gehaltener Versetzungsdichte ρ und konstantem Rekombinationsfaktor α . Wie der Vergleich verschiedener α -Werte zeigt, wird die Tieftemperaturseite hauptsächlich von der Rekombination beherrscht. Setzt man die Rekombinationsrate auf 0, behauptet also, daß die LS-Konzentration nur durch Diffusion zu den Versetzungen kontrolliert wird, so stellt sich heraus, daß $\frac{dr}{dt}$ über die Temperatur konstant bleibt. Der scharfe Abfall zur Hochtemperaturseite hin entspricht dem Anteil des Selbstdiffusionsterms, d.h. das System benötigt mehr Leerstellen zur Erhaltung des Gleichgewichts, als durch Bestrahlung hervorgerufen wird, und in der Nachbarschaft von Poren findet eine Emission von LS statt, so daß kein weiteres Wachstum auftreten kann. Schrumpfungen von Voids werden wahrscheinlich. Experimente bestätigen, daß vorhandene Poren durch eine Wärmebehandlung bei ca. 800°C völlig zum Verschwinden gebracht werden können, was ein wichtiges Unterscheidungsmerkmal zu gasgefüllten Blasen darstellt. Für hohe Versetzungsdichten findet man deutlich niedrigere Wachstumsraten als für niedrigere ρ , verursacht durch die geringere Konzentration an LS.

Da die Gleichung für die Wachstumsraten keine r-Abhängigkeit zeigt, müßte sich r linear zur Zeit vergrößern, das Volumen also eine t^3 -Funktion darstellen.

Nun stecken aber im Modell die Annahmen, daß die Versetzungsdichte und die Anzahl der Poren konstant sind und daß in der Nachbarschaft der Poren kein Kon-

zentrationsgefälle der Leerstellen durch die Eindiffusion auftritt. Diese Annahmen treffen aber nur dann zu, wenn die Versetzungsdichte von Anfang an sehr groß war. Bei kleinen ρ ist zu beachten, daß sowohl die Versetzungsdichte durch Neubildung von Versetzungsloops zunehmen wird, als auch der sphärische Diffusionsstrom der LS in die Pore den t -Exponenten in die Gegend von 1.5 drücken wird.

Der Einsatz kaltverformten Materials, auf das dieses Modell besser paßt, bringt aufgrund der hohen Versetzungsdichte eine geringere Wachstumsrate, doch ist es nach dem Modell sehr gut möglich, daß durch die steilere Zeitabhängigkeit dieser Effekt später zu ähnlichen Schwellraten führt, so daß nur eine zeitliche und damit dosisbezügliche Verschiebung des Schwellverhaltens auftritt.

Das Modell gibt für Temperaturen um 300°C noch durchaus merkliche Wachstumsraten an. Es werden aber unterhalb dieser Temperatur keine Poren beobachtet. Offenbar spielen hier nicht berücksichtigte Effekte noch eine die Wachstumsrate drückende Rolle.

3. Computersimulation

Zum Schluß sollen noch einige Ergebnisse eines Computerprogramms von Harkness und Che-Yu Li (13,14) betrachtet werden. Dieses Programm simuliert das zeitliche Verhalten eines Reaktormaterials, indem es die Berechnungen zusammenfaßt für Keimbildung von Poren und Versetzungsloops, Gleichgewichtskonzentrationen für Punktdefekte, verursacht durch eine Erzeugungsrate K und gesteuert durch Vernichtung der Defekte der Versetzungen, Korngrenzen und inkohärenten Ausscheidungen und den daraus resultierenden Wachstumsraten. Das zeitliche Zusammenspiel aller dieser Effekte, z.B. die Senkung der Konzentrationen an Punktdefekten mit der Vergrößerung der Senkendichte bei Bestrahlung, wird dadurch angenähert, daß innerhalb eines kleinen Zeitinkrementes diese Effekte als unabhängig von einander angesehen werden, und zu Beginn jedes neuen Zeitabschnittes neue Größen für die Gleichgewichtskonzentrationen, Poren- und Loopanzahlen und Wachstumsraten berechnet werden, bis die Summe der Zeitinkremente der Bestrahlungszeit entspricht. Man hat so die Möglichkeit, ohne analytische Ausdrücke für die Koppelung der Effekte zu kennen, Voraussagen über die Wirkung einzelner Parameter zu machen.

Die in Abb. 7 gezeigten Ergebnisse für Keimbildungs- und Wachstumsraten der Poren in Abhängigkeit von der Temperatur läßt folgenden Schluß für Porengröße und Porenkonzentration nach Bestrahlung zu. Bei niederen Temperaturen werden durch

die günstige Keimbildungs- aber geringere Wachstumsrate höhere Konzentrationen relativ kleiner Poren erwartet, während bei höheren Temperaturen durch die stark gestiegene Wachstumsrate aber stark zurückgegangene Keimbildung nur wenig große Poren zu erhalten sind. Die Abbildungen 10 und 11 zeigen die Computerkurven für mittlere Porengröße und Porenkonzentrationen in guter Übereinstimmung mit den beobachteten Werten aus Bestrahlungsexperimenten. Aus Konzentration und Porenvolumen läßt sich auch der Verlauf des Volumenschwellens berechnen. Abb. 12 enthält diese Kurve mit ihrem typischen Maximum bei etwa 500°C.

Zum Einfluß des Neutronenflusses auf die Porenbildung kann folgendes vorausgesagt werden. Solange die durch Erzeugung und Anihilation von Gitterfehlern sich einstellende Leerstellenkonzentration bei Bestrahlung ohnehin mehrere Größenordnungen höher als die thermische Leerstellenkonzentration ist, wird eine Änderung des Flusses und damit der Leerstellenerzeugungsrate K nur wenig Einfluß auf die Porenbildung haben. Anders ist das bei höheren Temperaturen, bei denen die thermische Leerstellenkonzentration in die Gegend der durch Bestrahlung erreichbaren kommt und somit Änderungen des Flusses den Wert der Leerstellenübersättigung stark beeinflussen kann.

Abbildung 13 zeigt diese Ergebnisse.

Zum Abschluß zeigt Abb. 14 die errechneten Leerstellenkonzentrationen in Abhängigkeit von der Temperatur nach dem Erreichen von verschiedenen Bestrahlungsdosen. Da sich während der Bestrahlung die Konzentration an Senken für die Gitterfehlstellen stetig erhöht hat, muß die Leerstellenkonzentration trotz gleicher Erzeugungsrate kleiner werden und damit auch die Übersättigung an Leerstellen. Es ist also zu erwarten, daß nicht beliebig hohe Schwellraten erreicht werden, sondern sich ein Sättigungswert einstellen wird.

4. Literaturverzeichnis

1. C. Cawthorne und I. Fulton; Nature 216 (1967) 576
2. R. S. Nelson; New Scientist 49 (1971) 664
3. W. Seith; Acta Met. 1 (1953) 355
4. E. Ruedl, P. Delavignette und S. Amelinckx; J.Nucl.Mat. 6 (1962)46
5. M. Kiritani; J.Phys.Soc. Jap. 19 (1964)618
6. S.Yoshida, M.Kiritani, Y.Shimomura u. A.Yoshimaka;
J.Phys.Soc.Jap. 20 (1965)628
7. P.S. Ho und H.B. Huntington; J.Phys.Chem. Soc. 27 (1966)1319
8. J.Kumar und O.N.Srivastava; Phil.Mag. 20 (1969) 1281
9. D. Kaletta; ds. Bericht I
10. R. Bullough, B.L. Eyre and R.C. Perrin; Nucl.Appl. & Technology 9 (1970)346
11. J.R.Beeler; IAEA-Symposium on Radiation Damage in Reactor Materials,
Wien 1969, paper SM-120/E-1
12. J.A. Sigler und D.Kuhlmann-Wilsdorf; Phys.Stat. Sol. 21 (1967)545
13. S.D. Harkness, J.A. Tesk und Che-Yu-Li; Nuclear Application & Techno-
logy 9 (1970)24
14. S.D. Harkness und Che-Yu Li; IAEA-Symposium on Radiation Damage in
Reactor Materials, Wien 1969, paper SM 120-F 4
15. G.W. Greenwood, A.J.E. Foreman und D.E.Rimmer; Nucl. Mat. 4(1959)305
16. J. Friedel; Les Dislocations, Gauthiers-Villars, Paris (1959)

- Abb. 1 Gitterverzerrungen in der Umgebung verschiedener Gitterfehler, a - Leerstellenloop, b - Interstitiellenloop, c - Pore (nach Nelson)
- Abb. 2 Zur Berechnung von c_i und c_v . σ = Versetzungskernradius, R = halber mittlerer Versetzungsabstand (nach Bullough, Eyre und Perrin)
- Abb. 3 Konzentration c_i , c_v in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Versetzungsdichten ρ und verschiedene Rekombinationskonstanten α (nach Bullough, Eyre und Perrin)
- Abb. 4 Konzentration c_i , c_v in Abhängigkeit von der Versetzungsdichte ρ
- Abb. 5 Schematische Darstellung der Primärstöße eines Neutrons mit Stoßkaskade. Darunter Computerdarstellung der Gitterfehler in einer Stoßkaskade entlang zweier Gitterebenen vor und nach der spontanen Rekombination. Quadrate = Leerstellen, Kreise = Zwischengitteratome (nach Beeler)
- Abb. 6 Bildungsenergie verschiedener Gitterfehler in Stahl bei 500°C (nach Sigler und Kuhlmann-Wilsdorf)
- Abb. 7 Temperaturabhängigkeit von Keimbildungs- und Wachstumsraten von Poren in Stahl (nach Harkness und Che-Yu Li)
- Abb. 8 Skizze eines Teiles der Porenoberfläche (nach Bullough, Eyre u. Perrin)
- Abb. 9 Wachstumsraten von Poren in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Versetzungsdichten und Rekombinationskonstanten (nach Bullough, Eyre und Perrin)
- Abb. 10 Mittlerer Porenradius gegen Temperatur (nach Harkness und Che-Yu Li)
- Abb. 11 Porendichte gegen Temperatur (nach Harkness und Che-Yu Li)
- Abb. 12 Volumenschwellen gegen Temperatur (nach Harkness und Che-Yu Li)
- Abb. 13 Zum Einfluß des Neutronenflusses. Porenvolumen gegen Dosis bei verschiedenen Neutronenflüssen (nach Harkness und Che-Yu Li)
- Abb. 14 Leerstellenkonzentration gegen Temperatur nach Erreichen verschiedener Dosiswerte (nach Harkness und Che-Yu Li)

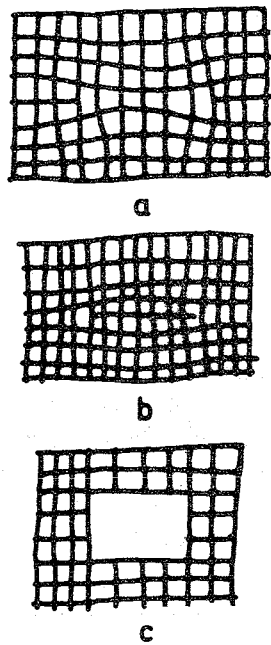


Abb. 1

Gitterverzerrungen in der Umgebung verschiedener Gitterfehler,

- a) Leerstellenloop
- b) Interstitiellenloop
- c) Pore (nach Nelson)

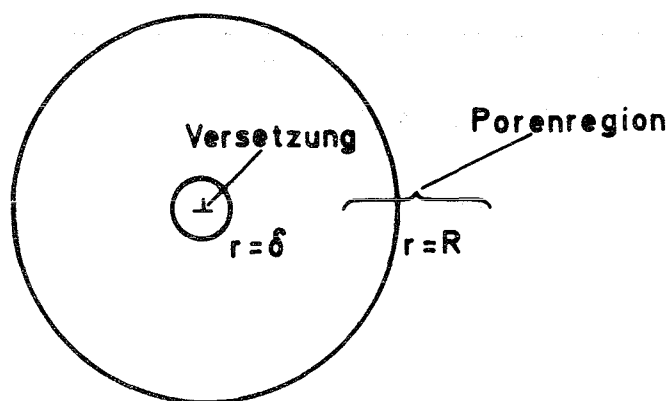
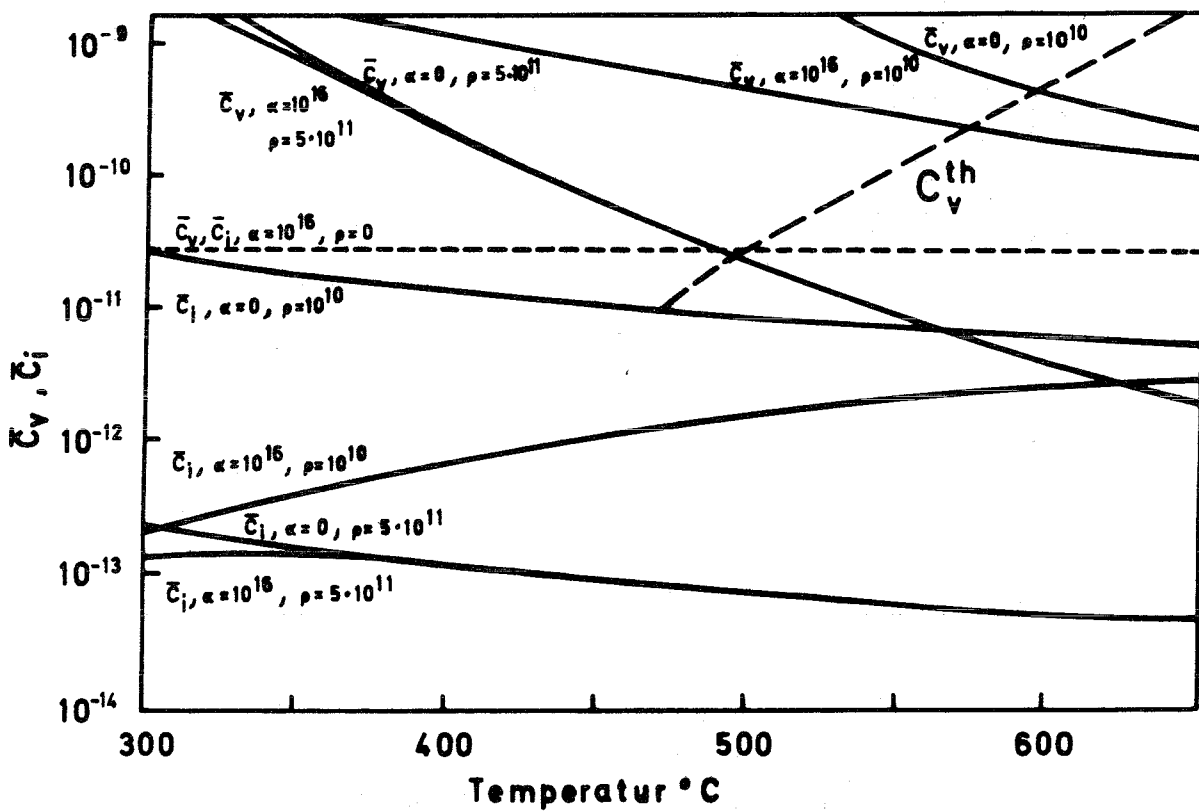


Abb. 2 Zur Berechnung von c_i und c_v . σ = Versetzungskernradius, R = halber mittlerer Versetzungsabstand (nach Bullough, Eyre und Perrin)

Abb. 3 Konzentration c_i , c_v in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Versetzungsdichten ρ und verschiedene Rekombinationskonstanten α (nach Bullough, Eyre und Perrin)



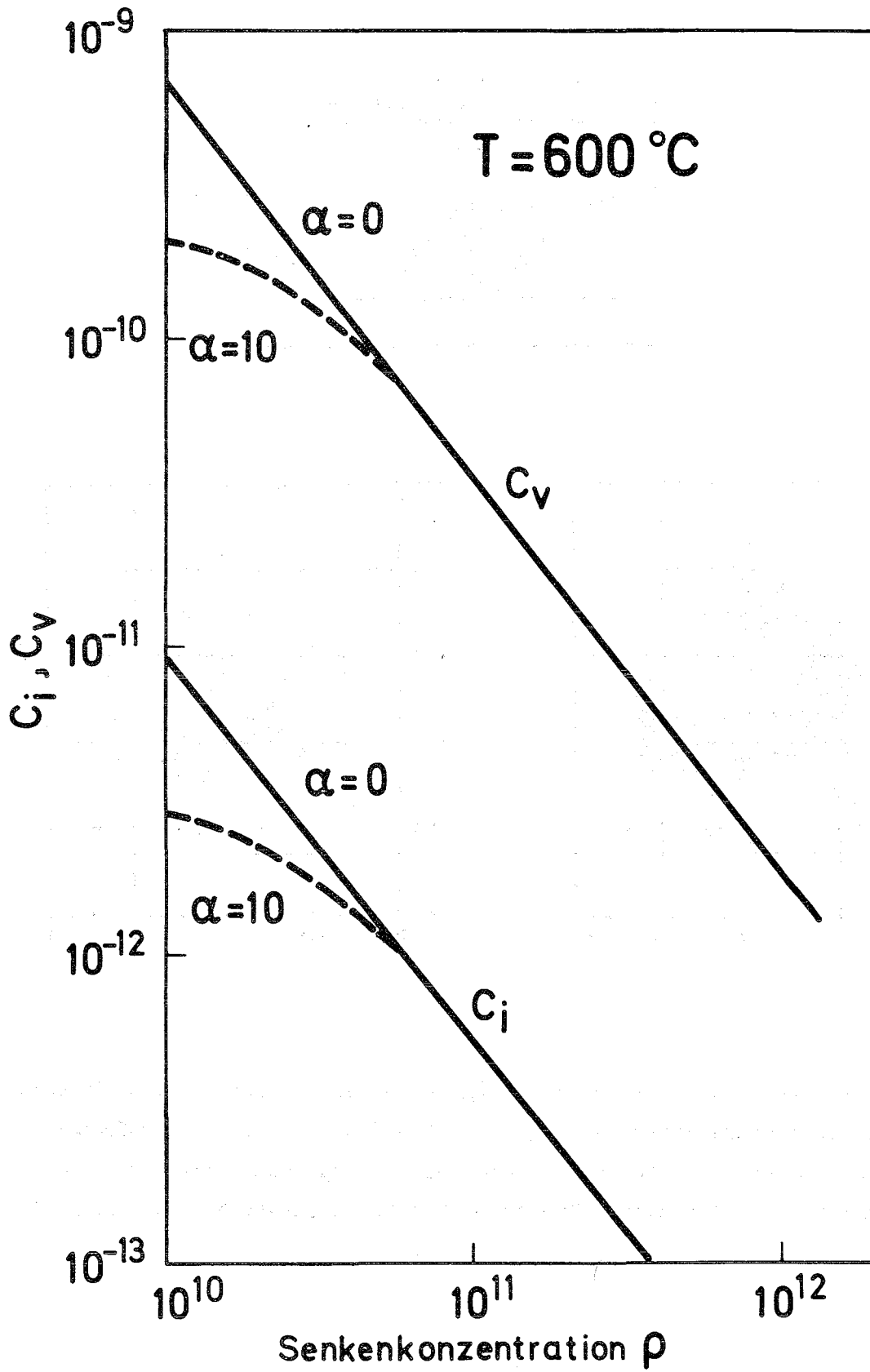


Abb. 4 Konzentration c_i , c_v in Abhängigkeit von der Versetzungsdichte ρ

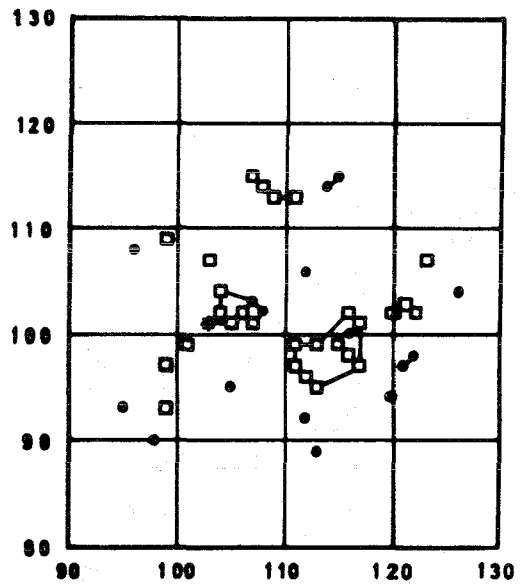
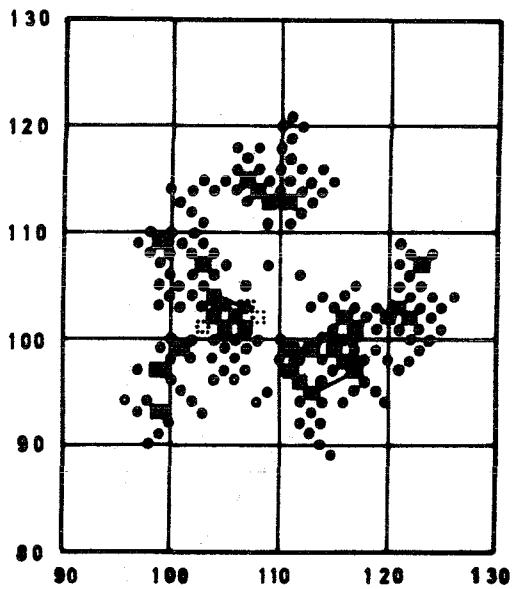
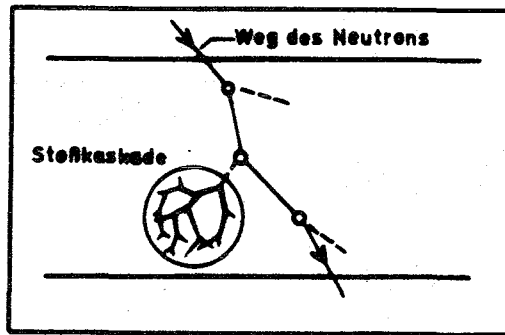


Abb. 5 Schematische Darstellung der Primärstöße eines Neutrons mit Stoßkaskade. Darunter Computerdarstellung der Gitterfehler in einer Stoßkaskade entlang zweier Gitterebenen vor und nach der spontanen Rekombination. Quadrate = Leerstellen, Kreise = Zwischengitteratome (nach Beeler)

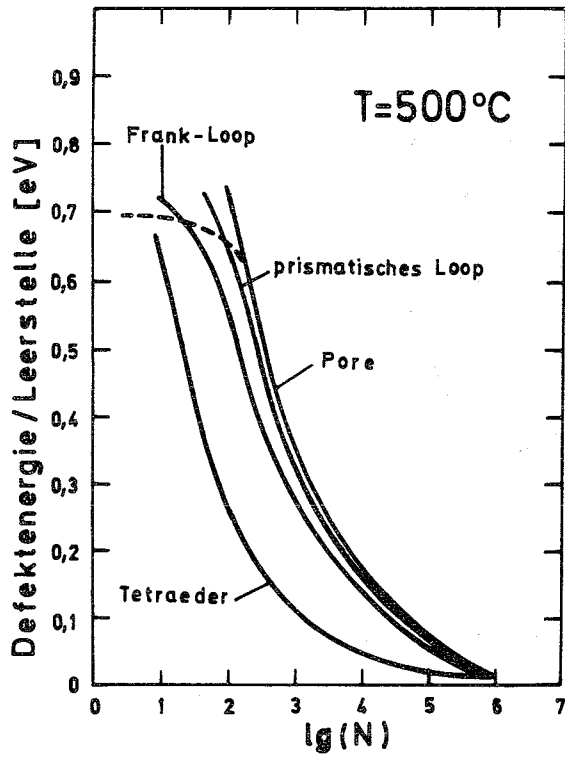


Abb. 6

Bildungsenergie verschiedener Gitterfehler in Stahl bei 500°C (nach Sigler und Kuhlmann-Wilsdorf)

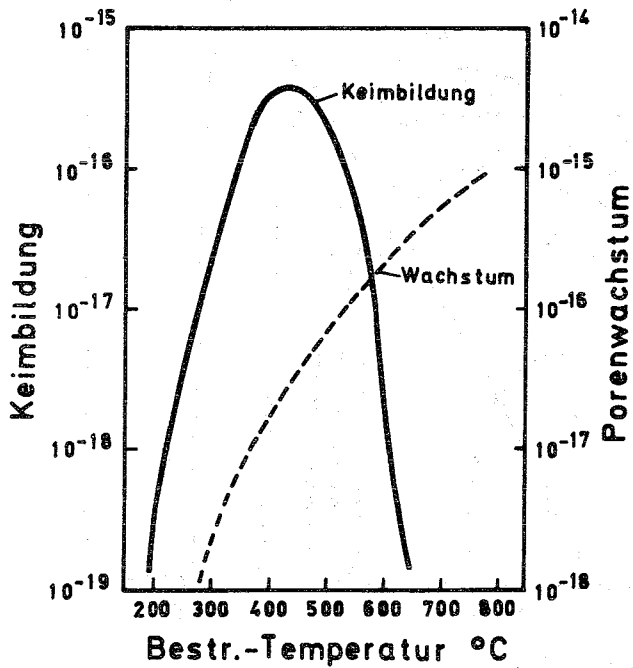


Abb. 7

Temperaturabhängigkeit von Keimbildungs- und Wachstumsraten von Poren in Stahl (nach Harkness und Che-Yu-Li)

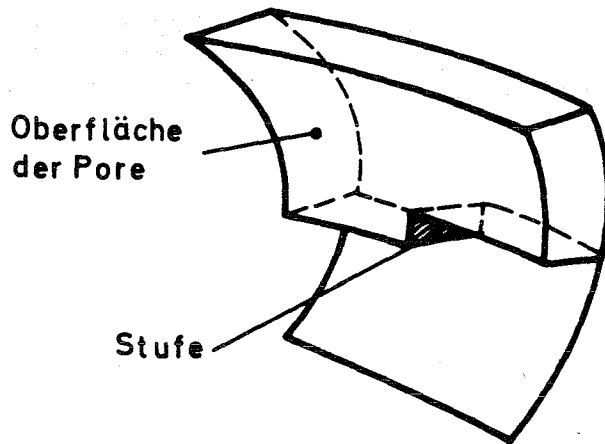


Abb. 8 Skizze eines Teiles der Porenoberfläche (nach Bullough, Eyre u. Perrin)

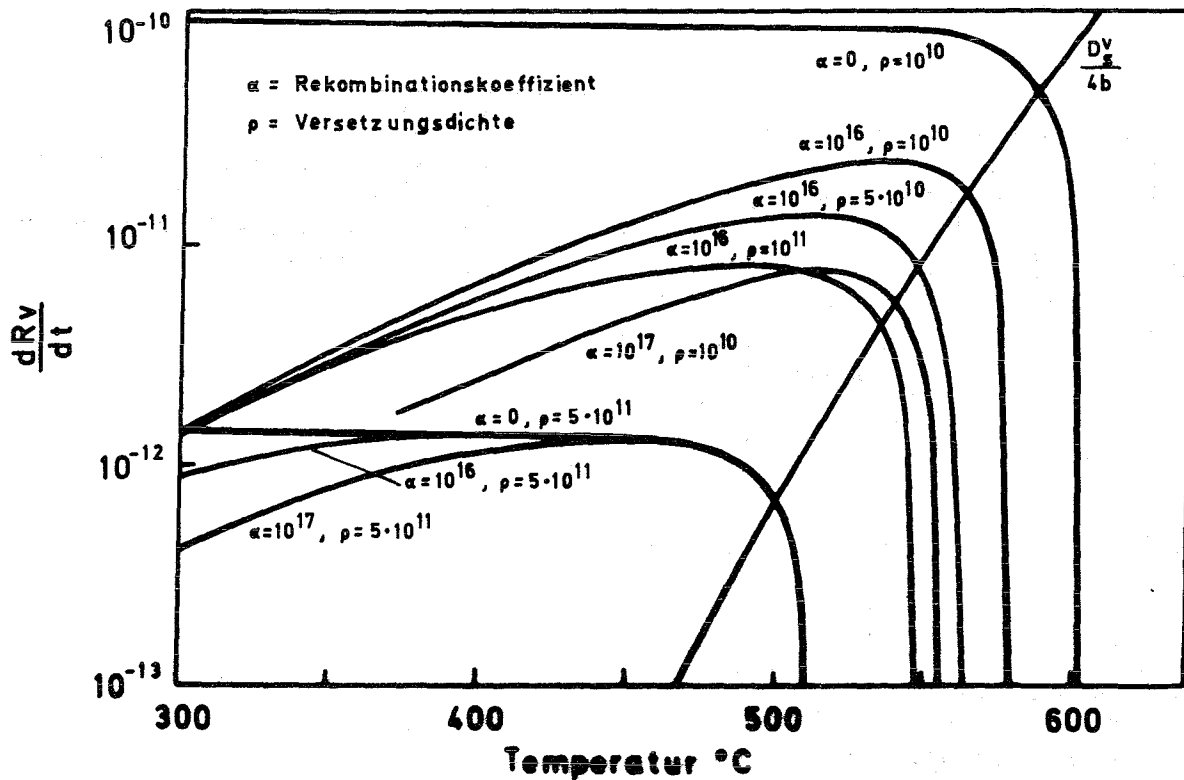


Abb. 9 Wachstumsraten von Poren in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Versetzungsdichten und Rekombinationskonstanten (nach Bullough, Eyre und Perrin)

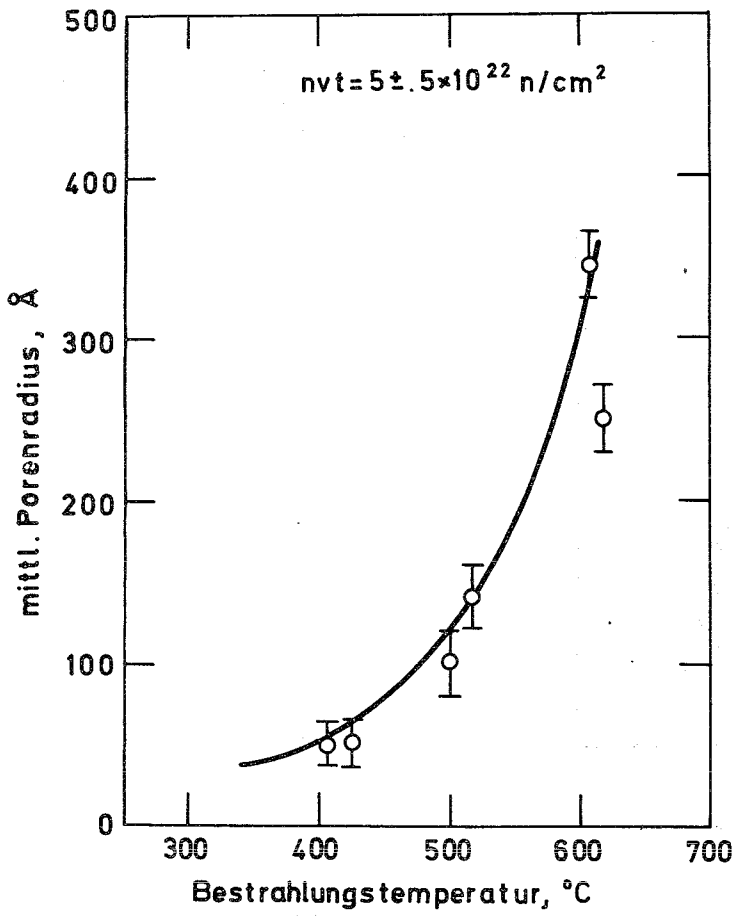
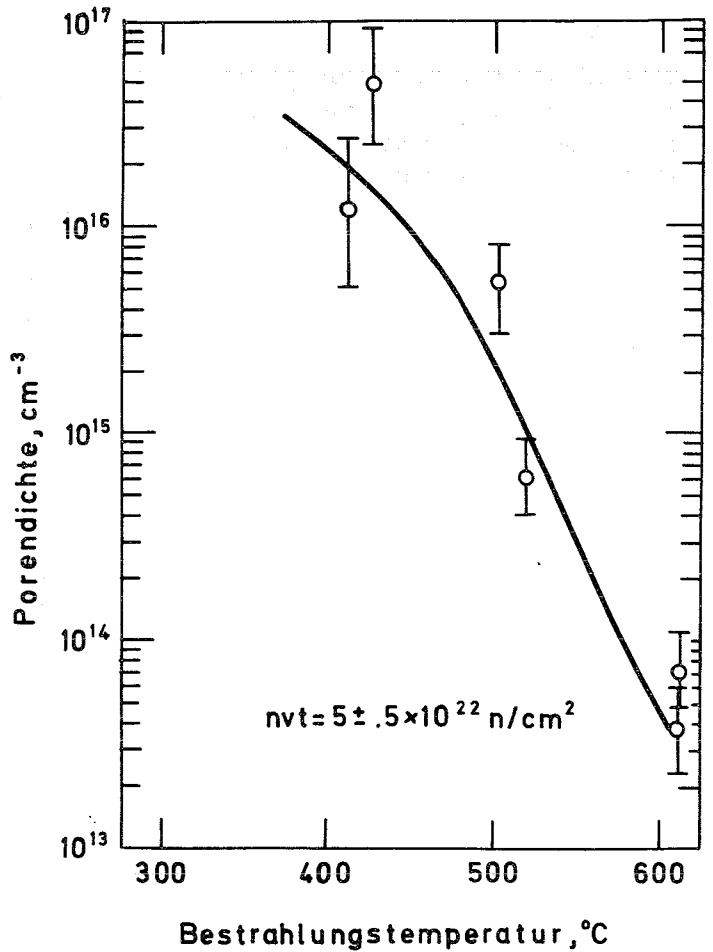


Abb. 10

Mittlerer Porenradius gegen Temperatur (nach Harkness und Che-Yu Li)

Abb. 11

Porendichte gegen Temperatur (nach Harkness und Che-Yu Li)



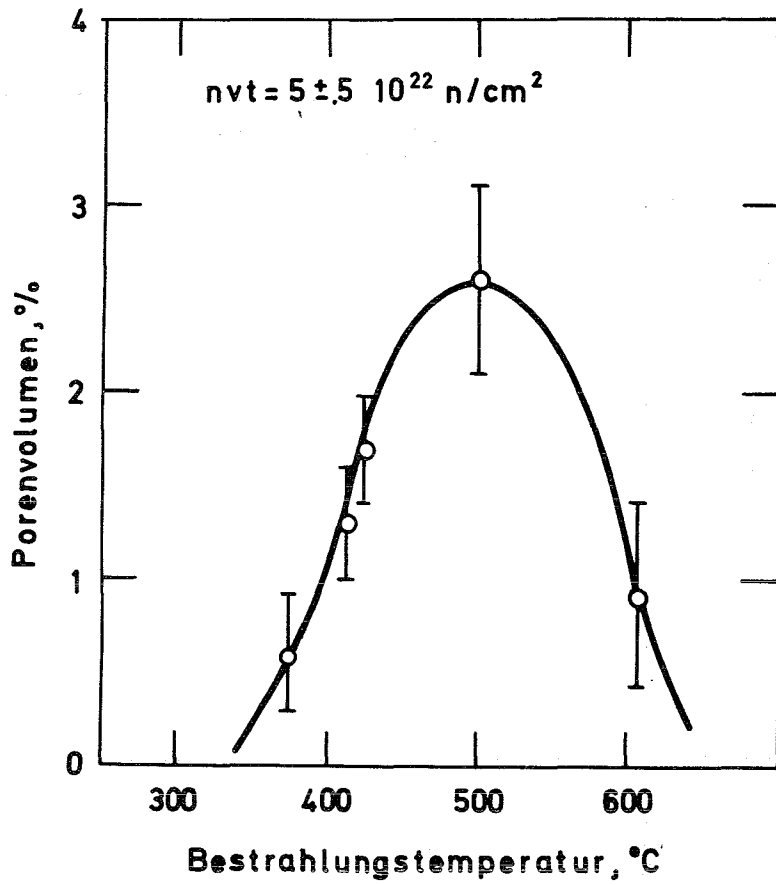
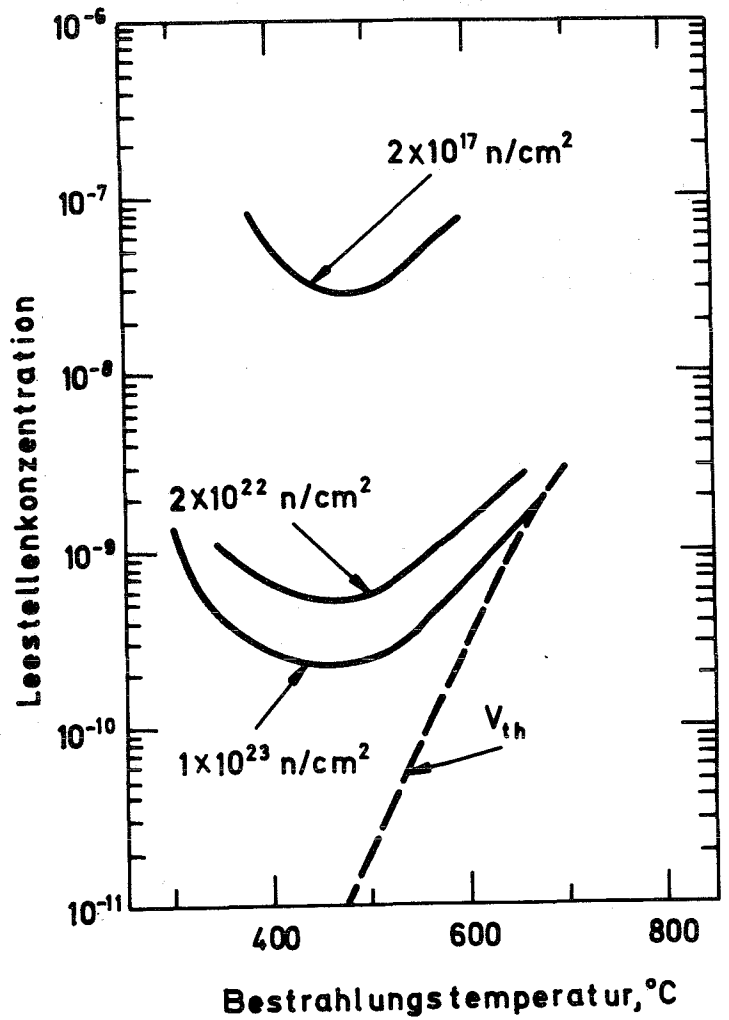


Abb. 12

Volumenschwellen gegen Temperatur (nach Harkness und Che-Yu Li)

Abb. 14

Leerstellenkonzentration gegen Temperatur nach Erreichen verschiedener Dosiswerte (nach Harkness und Che-Yu Li)



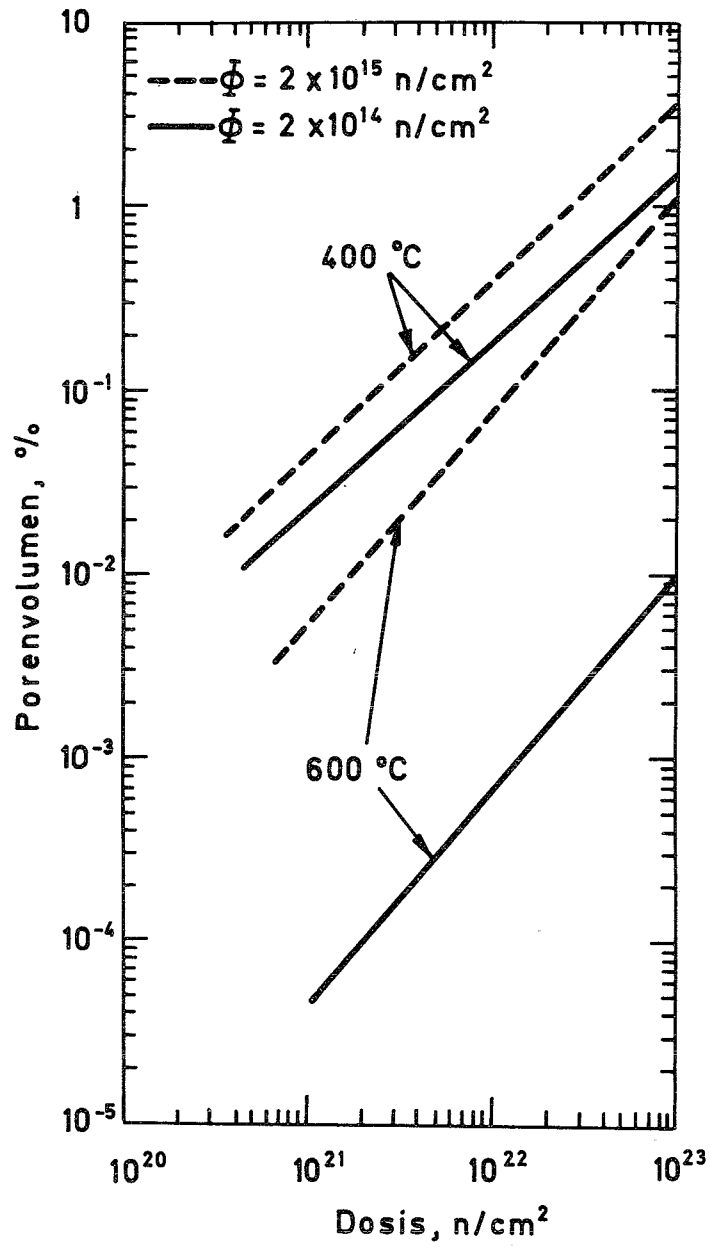


Abb. 13 Zum Einfluß des Neutronenflusses. Porenvolumen gegen Dosis bei verschiedenen Neutronenflüssen (nach Harkness und Che-Yu Li)



Figure 10.10: The percentage of the population aged 65 and over in various countries, 1950-2050. The graph shows that the percentage of the population aged 65 and over is increasing for all countries shown, with the most significant increases occurring in the United States, Canada, and the United Kingdom.