



KfK 3628
Dezember 1983

Exakte Lösungen von Ratengleichungen zur Beschreibung der Defektübersättigungen und der Wachstumsraten von Poren

R. Heidenreich
Institut für Material- und Festkörperforschung
Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Material- und Festkörperforschung
Projekt Schneller Brüter

KfK 3628

Exakte Lösungen von Ratengleichungen
zur Beschreibung der Defektübersättigungen
und der Wachstumsraten von Poren

R. Heidenreich

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Exakte Lösungen der Ratengleichungen für verschwindenden und nichtverschwindenden Rekombinationskoeffizienten α werden im Detail studiert.

Es wird ein allgemeiner Existenz- und Eindeutigkeitsbeweis der Lösungen für beliebige Quell- und Senkenstärken für $\alpha \neq 0$ angegeben.

Exact solutions of rate equations for the calculation of supersaturations of defects and growth rates for voids

Abstract

Exact solutions of the rate equations are discussed in detail for vanishing and nonvanishing recombination coefficient α .

The existence and uniqueness of the solutions are shown for arbitrary sources and sinks and for $\alpha \neq 0$.

Inhalt

1.	Einleitung	1
2.	Existenz- und Eindeutigkeitssatz	3
3.	Spezielle Lösungen der Ratengleichungen	8
3.1	Lösungen für $\alpha = 0$:	8
3.1.1	Allgemeine Lösung der parabolischen Differentialgleichung	8
3.1.2	Ortsabhängige Senkenverteilung	11
3.1.3	Freie Oberflächen	14
3.1.4	\vec{x} , t-abhängige Defekterzeugungsrate t-abhängige Senkenverteilung	16
3.1.5	x-abhängiger Diffusionskoeffizient	18
3.2	Lösungen für $\alpha \neq 0$:	19
3.2.1	Reine Rekombination	19
3.2.2	Das stationäre Problem	21
3.2.3	Proportionalität zwischen c_v und c_i	22
4.	Ergebnisse	23
	Anhang A: Parameter der Theorie	24
	Referenzen	27
	Abbildungen	30

1. Einleitung

Die Bestrahlung von Metallen mit energiereichen Teilchen führt zur Erzeugung von Zwischengitteratomen und Leerstellen, die im Festkörper diffundieren können. Dieser Diffusionsprozeß ist ein Materietransport innerhalb des Metalls und ist u.a. abhängig von der Temperatur, dem Gittertyp, den Gitterfehlern, der Mikrostruktur (Gefüge) und den außen angelegten mechanischen Spannungen. Nach dem heutigen Stand der Modellbildung ist man noch weit davon entfernt, eine umfassende analytische Beschreibung oder gar Vorhersage der komplizierten Diffusionsvorgänge geben zu können. In den letzten Jahren ist es allerdings gelungen, Teilaspekte der Strahlenschädigung von Metallen genauer zu untersuchen und durch geeignete Modelle zu beschreiben. Einer der erfolgreichsten Wege zum Verständnis des Schwellens von stationär bestrahlten Werkstoffen (z.B. Strukturmaterialien von Kernreaktoren) ist die Ratentheorie, wie sie von Brailsford, Bullough et al. /1,2/ entwickelt wurde:

Die beiden Hypothesen der Theorie lauten:

i) die individuellen Leerstellen- und Zwischengitteratome bestimmen weitgehendst das Diffusionsgeschehen

ii) es gilt der Erhaltungssatz der Masse

Man beschreibt deshalb die primären Gitterfehler (Punktdefekte), d.h. die Leerstellen und Zwischengitteratome, durch Konzentrationen c_v (vacancy) und c_i (interstitial) und erhält auf Grund der Massenbilanz Diffusionsgleichungen. Berücksichtigt man die jeweiligen Quell- und Senkenterme für c_v und c_i , sowie die Wechselwirkung mit einem äußeren Potential $U(\vec{x})$, so ergibt sich das folgende System gekoppelter partieller Differentialgleichungen:

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = \text{div} (D_v \text{grad} c_v + \beta D_v c_v \text{grad} U) + K_v - k_v^2 D_v c_v - \alpha c_i c_v \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \text{div} (D_i \text{grad} c_i + \beta D_i c_i \text{grad} U) + K_i - k_i^2 D_i c_i - \alpha c_i c_v \quad (1.1b)$$

Die Notation ist im Anhang A erläutert. Da im stationären Fall die Verlustrate von Leerstellen gleich der Verlustrate von Zwischengitteratomen an den jeweiligen Senken ist, erhält man für bekannte Quell- und Senkenterme die Schwellrate $\frac{dS}{dt}$ /2/:

$$\frac{dS}{dt} = k_v^{(P)} D_v c_v - k_i^{(P)} D_i c_i - K_v^{(P)} \quad , \quad (1.2)$$

wobei c_v und c_i aus den Ratengleichungen (1.1) zu bestimmen sind.

Experimentelle Vorhersagen mit Hilfe der Ratentheorie sind relativ schwierig, da nicht alle Parameter hinreichend genau bekannt sind (z.B. Senkenstärken).

Eine Erweiterung dieser Theorie zur Beschreibung der Strahlenschäden von nicht stationär bestrahlten Werkstoffen wurde von Ghoniem, Kulcinski et al. /3/ ausgearbeitet, worauf wir hier nicht eingehen können.

Dieser Primärbericht soll zum mathematischen Verständnis der Ratengleichungen (1.1) beitragen. Wir beschränken uns durchweg auf den Fall $U \equiv 0$. In Kap. 2 geben wir zunächst einen allgemeinen Existenz- und Eindeutigkeitsbeweis der Lösungen der Ratengleichungen für orts- und zeitabhängige Quell- und Senkenstärken. In Kap. 3 diskutieren wir sodann spezielle Lösungen für verschwindende und nicht verschwindende Rekombinationskoeffizienten.

2. Existenz- und Eindeutigkeitssatz

In diesem Kapitel geben wir einen allgemeinen Beweis, daß die Ratengleichungen (1.1) unter den folgenden Annahmen eine eindeutige Lösung besitzen:

- i) das äußere Potential $U(\vec{x})$ ist identisch null
- ii) die Diffusionskoeffizienten D_v und D_i sind örtlich und zeitlich konstant
- iii) es werden nur Frenkelpaare erzeugt, $K_v = K_i = K(\vec{x}, t)$
- iv) die Senkenterme sind orts- und zeitabhängig, $k^2 = k^2(\vec{x}, t)$

Die Gln (1.1) lauten somit

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = D_v \Delta c_v + K - k_v^2 D_v c_v - \alpha c_i c_v \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \Delta c_i + K - k_i^2 D_i c_i - \alpha c_i c_v \quad (2.1b)$$

Wir benutzen nun Standardmethoden aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen, um die Existenz und Eindeutigkeit der Lösungen von (2.1) zu zeigen /4,5/. Insbesondere verallgemeinern wir einen Beweis, der in /6/ für einfachere Systeme gegeben ist.

Wir diskutieren die Gln (2.1) in d Raumdimensionen, $d = 1, 2, 3$. Zunächst fassen wir $c_v(\vec{x}, t)$ und $c_i(\vec{x}, t)$ in eine vektorwertige Funktion zusammen:

$$\vec{u}(\vec{x}, t) \equiv \begin{pmatrix} u_1(\vec{x}, t) \\ u_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} c_v(\vec{x}, t) \\ c_i(\vec{x}, t) \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

und schreiben die Gln (2.1) in der folgenden Form:

$$\left[\mathbb{1} \frac{\partial}{\partial t} - \begin{pmatrix} D_v & 0 \\ 0 & D_i \end{pmatrix} \Delta \right] \vec{u} = \vec{F}(\vec{u}) \quad (2.3)$$

Hierbei bezeichnet $\mathbb{1}$ die 2x2 Einheitsmatrix, und $\vec{F}(\vec{u})$ ist durch (2.1) definiert als

$$\vec{F}(\vec{u}) := \begin{pmatrix} K - k_v^2 D_v u_1 - \alpha u_1 u_2 \\ K - k_i^2 D_i u_2 - \alpha u_1 u_2 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Seien $\vec{u}^{(1)}$ und $\vec{u}^{(2)}$ zwei beliebige vektorwertige Funktionen, so erfüllt \vec{F} die Lipschitzbedingung

$$\| \vec{F}(\vec{u}^{(1)}) - \vec{F}(\vec{u}^{(2)}) \| < \lambda \| \vec{u}^{(1)} - \vec{u}^{(2)} \| \quad (2.5)$$

Zum Beweis beginnen wir mit der linken Seite von (2.5) und erhalten durch verschiedene Abschätzungen

$$\begin{aligned}
 & \| \vec{F}(\vec{u}^{(1)}) - \vec{F}(\vec{u}^{(2)}) \| \\
 & \leq \sup_{\vec{x}, t} (k_v^2, k_i^2) \| \vec{u}^{(2)} - \vec{u}^{(1)} \| + 2\alpha \| u_1^{(2)} u_2^{(2)} - u_1^{(1)} u_2^{(1)} \| \\
 & = \sup_{\vec{x}, t} (k_v^2, k_i^2) \| \vec{u}^{(2)} - \vec{u}^{(1)} \| + 2\alpha \| u_2^{(2)} (u_1^{(2)} - u_1^{(1)}) - u_1^{(1)} (u_2^{(2)} - u_2^{(1)}) \| \\
 & \leq (4\alpha + \sup_{\vec{x}, t} (k_v^2, k_i^2)) \| \vec{u}^{(2)} - \vec{u}^{(1)} \| \quad , \tag{2.6}
 \end{aligned}$$

wobei wir benutzt haben, daß

$$0 \leq c_v \leq 1 \tag{2.7a}$$

und

$$0 \leq c_i \leq 1 \tag{2.7b}$$

gilt.

Die Abschätzungskonstante λ aus (2.5) ergibt sich somit zu

$$\lambda = 4\alpha + \sup_{\vec{x}, t} (k_v^2, k_i^2) \quad . \tag{2.8}$$

Zur Zeit $t = 0$ sei die Anfangsbedingung für \vec{u} vorgegeben:

$$\vec{u}(\vec{x}, 0) = \vec{f}(\vec{x}) \quad , \tag{2.9}$$

wobei $\vec{f}(\vec{x})$ eine beschränkte Funktion in \mathbb{R}^d ist. Für die Anwendung ist $\vec{f}(\vec{x})$ i.a. durch

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} c_v^{\text{th}} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

gegeben.

Wir suchen nun die Fundamentallösungen von (2.3). Dazu führen wir den folgenden linearen Differentialoperator L ein,

$$L := \mathbb{1} \frac{\partial}{\partial t} - \begin{pmatrix} D_v & 0 \\ 0 & D_i \end{pmatrix} \Delta \tag{2.11}$$

und definieren zwei Funktionen $G_{v,i}^{(d)}(\vec{x}, t)$:

$$G_{v,i}^{(d)}(\vec{x}, t) := \left(\frac{1}{2\sqrt{D_{v,i}} \sqrt{\pi t}} \right)^d \exp\left(-\frac{\vec{x}^2}{4D_{v,i}t}\right) \theta(t). \quad (2.12)$$

$\theta(t)$ bezeichnet wie üblich die Stufenfunktion. Für $t \geq 0$ gilt die Normierung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^d x G_{v,i}^{(d)}(\vec{x}, t) = 1. \quad (2.13)$$

Schreiben wir $G_{v,i}^{(d)}(\vec{x}, t)$ in der folgenden Matrixform,

$$G^{(d)}(\vec{x}, t) := \begin{pmatrix} G_v^{(d)}(\vec{x}, t) & 0 \\ 0 & G_i^{(d)}(\vec{x}, t) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

so ist $G^{(d)}(\vec{x}, t)$ die Fundamentallösung von (2.3) in d Raumdimensionen, d.h. es gilt

$$i) \quad \mathcal{L} G^{(d)}(\vec{x}, t) = \delta(\vec{x}, t) \mathbb{1} \quad (2.15)$$

$$ii) \quad G^{(d)}(\vec{x}, t) = \delta(\vec{x}) \mathbb{1} \quad \text{für } t \rightarrow 0_+. \quad (2.16)$$

Die Lösung des linearen Problems

$$\mathcal{L} \vec{u}^{(0)}(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.17)$$

$$\text{mit} \quad \vec{u}^{(0)}(\vec{x}, 0) = \vec{f}(\vec{x}) \quad (2.18)$$

läßt sich mit Hilfe der Fundamentallösung als Faltungsintegral schreiben:

$$\vec{u}^{(0)}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^d \xi G^{(d)}(\vec{x} - \vec{\xi}, t) \vec{f}(\vec{\xi}). \quad (2.19)$$

Wir haben nun alle Hilfsmittel bereitgestellt, um eine Folge $\{\vec{u}^{(i)}\}_{i \in \mathbb{N}_0}$ definieren zu können, die gegen die exakte Lösung der Ratengleichungen (2.1) konvergiert:

$$\vec{u}^{(i+1)}(\vec{x}, t) = \vec{u}^{(0)}(\vec{x}, t) + \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d^d \xi G^{(d)}(\vec{x} - \vec{\xi}, t - \tau) \vec{F}[\vec{u}^{(i)}(\vec{\xi}, \tau)]$$

$$i = 0, 1, 2, \dots$$

(2.20)

Es gilt:

$$i) \quad L \vec{u}^{(i+1)} = L \vec{u}^{(0)} + \vec{F}[\vec{u}^{(i)}] - \vec{F}[\vec{u}^{(i)}] \quad (2.21a)$$

$$ii) \quad \vec{u}^{(i+1)}(\vec{x}, 0) = \vec{f}(\vec{x}) \quad (2.21b)$$

Somit erfüllt $\vec{u}^{(i+1)}$ für alle $i \in \mathbb{N}_0$ die Ratengleichungen (2.1) und die Anfangsbedingung (2.9).

Wir zeigen nun die Konvergenz der Folge. Dazu beweisen wir, daß die "maximale" Differenz zwischen zwei aufeinanderfolgenden Elementen der Folge für große i gegen Null strebt. Wir definieren

$$M^{(i+1)}(t) := \limsup_{\tau \leq t} \|\vec{u}^{(i+1)}(\vec{x}, \tau) - \vec{u}^{(i)}(\vec{x}, \tau)\| \quad (2.22)$$

$i = 0, 1, 2, \dots$

und erhalten mit Hilfe der Lipschitzbedingung (2.5)

$$M^{(i+1)}(t) \leq \lambda \int_0^t M^{(i)}(\tau) \, d\tau \quad (2.23)$$

Benutzt man die Cauchy-Schwarz'sche Ungleichung und erneut die Lipschitzbedingung (2.5), so kann man jedes $M^{(i)}$ nach oben abschätzen:

$$M^{(i)}(t) \leq \frac{(\lambda t)^i}{i!} M, \quad (2.24)$$

wobei wir M durch

$$M := \limsup_{\tau \leq t} (\|\vec{F}[\vec{u}^{(0)}(\vec{x}, \tau)]\|, \|\vec{f}(\vec{x})\|) \quad (2.25)$$

definiert haben. Im Limes $i \rightarrow \infty$ erhalten wir aus (2.24)

$$M^{(i)}(t) \leq \frac{(\lambda t)^i}{i!} M \rightarrow 0, \quad (2.26)$$

d.h. die Folge (2.20) konvergiert gegen einen Grenzwert $\vec{u}(\vec{x}, t)$, der die Ratengleichungen exakt erfüllt:

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{u}^{(0)}(\vec{x}, t) + \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} d^d \xi G^{(d)}(\vec{x} - \vec{\xi}, t - \tau) \vec{F}[\vec{u}(\vec{\xi}, \tau)] \, d\tau \quad (2.27)$$

Zum Schluß beweisen wir, daß der Limes eindeutig ist. Seien \vec{u} und \vec{v} zwei verschiedene Lösungen von (2.27), dann gilt

$$\begin{aligned} & \vec{u}(\vec{x}, t) - \vec{v}(\vec{x}, t) \\ &= \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d^d \xi G^{(d)}(\vec{x} - \vec{\xi}, t - \tau) \cdot \left\{ \vec{F}[\vec{u}(\vec{x}, t)] - \vec{F}[\vec{v}(\vec{x}, t)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Führt man die "maximale" Differenz zwischen $\vec{u}(\vec{x}, t)$ und $\vec{v}(\vec{x}, t)$ ein,

$$N(t) := \limsup_{\tau \leq t} \|\vec{u}(\vec{x}, \tau) - \vec{v}(\vec{x}, \tau)\|, \quad (2.29)$$

so erhält man mit Hilfe der Lipschitzbedingung (2.5)

$$N(t) \leq \lambda \int_0^t d\tau N(\tau). \quad (2.30)$$

Hieraus folgt sofort

$$N(t) \equiv 0. \quad (2.31)$$

Somit gilt

$$\vec{u}(\vec{x}, t) \equiv \vec{v}(\vec{x}, t), \quad (2.32)$$

d.h. die Lösung der Ratengleichungen ist eindeutig.

Insgesamt haben wir damit gezeigt, daß die Ratengleichungen (2.1) eine eindeutige Lösung besitzen, die durch den Grenzwert der Folge (2.20) gegeben ist.

In Kap. 3 diskutieren wir spezielle Lösungen der Ratengleichungen, die man entweder auf direktem Weg durch Lösen der Differentialgleichungen oder durch Ausführen des Limes der Folge (2.20) erhalten kann.

3. Spezielle Lösungen der Ratengleichungen

3.1 Lösungen für $\alpha = 0$

3.1.1 Allgemeine Lösung der parabolischen Differentialgleichung

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Ratengleichungen (1.1) für verschwindendes äußeres Potential $U(\vec{x})$ und vernachlässigen den Rekombinationskoeffizienten α . Für viele Anwendungen ist die Approximation

$$\alpha \approx 0 \quad (3.1)$$

im Hochtemperaturbereich zulässig. In diesem Fall entkoppeln die beiden Differentialgleichungen (1.1) und wir erhalten die folgende partielle Differentialgleichung vom parabolischen Typ:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D \text{grad } c) + K - k^2 c, \quad (3.2)$$

mit $\vec{x} \in G$. Wir bezeichnen mit G stets ein beschränktes Gebiet im \mathbb{R}^d , $d = 1, 2, 3$ und mit S dessen Rand, der eine stückweise glatte Fläche darstellen soll. Zur Vervollständigung von (3.2) benötigen wir die dazugehörigen Rand- und Anfangswerte, die durch die folgenden Gleichungen vorgegeben sind:

i) Randwerte für $t > 0$:

$$(a_1 c + a_2 \text{grad } c)|_S = 0 \quad (3.3)$$

ii) Anfangswerte:

$$c(\vec{x}, t)|_{t=0_+} = f(\vec{x}), \quad (3.4)$$

mit $\vec{x} \in G$.

Wir setzen stets "hinreichend schöne Eigenschaften" voraus, d.h. es soll gelten

i) $D \in C^1(\bar{G})$, $K \in C(\bar{G})$,

ii) $D(\vec{x}) > 0$ und $K(\vec{x}) \geq 0$ für $\vec{x} \in G$

$$a_1 \in C(S), \quad a_2 \in C(S), \quad (3.5)$$

$a_1(\vec{x}) \geq 0$, $a_2(\vec{x}) \geq 0$ mit

$a_1(\vec{x}) + a_2(\vec{x}) > 0$ für $\vec{x} \in S$.

Im folgenden diskutieren wir Lösungen von (3.2) mit den Rand- und Anfangswerten (3.3) und (3.4), die man durch Separation der Variablen (Fourier'sche Methode) erhält. Diese Standardmethode ist aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen bekannt /5/. In diesem Abschnitt folgen wir insbesondere dem Buch von Wladimirow /7/.

Zunächst definiert man den folgenden linearen Differentialoperator L ,

$$L := -\operatorname{div} \mathbb{D} \operatorname{grad} + k^2 \mathbb{D}, \quad (3.6)$$

wodurch sich die Gl. (3.2) auf die folgende Form reduziert:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -Lc + K. \quad (3.7)$$

L ist ein hermitescher, positiver Operator, dessen diskretes Eigenwertspektrum mit Hilfe der Randbedingung (3.3) berechnet werden kann:

$$L \psi_\ell(\vec{x}) = \lambda_\ell \psi_\ell(\vec{x}), \quad (3.8)$$
$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

Hierbei bezeichnen $\{\psi_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ die orthonormierten Eigenfunktionen von L und $\{\lambda_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ die dazugehörigen Eigenwerte. Für die gesuchte Konzentration $c(\vec{x}, t)$ macht man nun den folgenden Separationsansatz:

$$c(\vec{x}, t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} T_\ell(t) \psi_\ell(\vec{x}). \quad (3.9)$$

Die zunächst unbekanntesten Funktionen $\{T_\ell(t)\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ ergeben sich aus dem Cauchy Anfangswertproblem (3.4). Löst man dazu die Gl. (3.9) nach $T_\ell(t)$ auf, so erhält man unter Benutzung der Orthonormalität der $\{\psi_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$

$$T_\ell(t) = \int_G d^d x \, c(\vec{x}, t) \psi_\ell(\vec{x}), \quad (3.10)$$
$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

Für $t \rightarrow 0_+$ kann $T_\ell(t)$ mit Hilfe der Anfangsbedingung (3.4) berechnet werden:

$$T_\ell(0) = \int_G d^d x \, c(\vec{x}, 0) \psi_\ell(\vec{x}) \quad (3.11)$$
$$= \int_G d^d x \, f(\vec{x}) \psi_\ell(\vec{x})$$
$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

Zur Vereinfachung der folgenden Formeln definieren wir

$$a_\ell(t) := T_\ell(0) \quad (3.12)$$

und

$$b_\ell(t) := \int_G d^d x K(\vec{x}, t) \psi_\ell(\vec{x}) \quad (3.13)$$

$\ell = 0, 1, 2, \dots$

Bei vorgegebenen $f(\vec{x})$ und $K(\vec{x}, t)$ sind $\{a_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ und $\{b_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ bekannten Größen. Man setzt nun den Produktansatz (3.9) unter Berücksichtigung der Definitionen (3.12) und (3.13) in die ursprüngliche Differentialgleichung (3.2) ein und erhält

$$T'_\ell(t) + \lambda_\ell T_\ell(t) = b_\ell(t) \quad (3.14)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

Die Integration dieser gewöhnlichen Differentialgleichung liefert schließlich die gesuchten Funktionen $T_\ell(t)$:

$$T_\ell(t) = a_\ell e^{-\lambda_\ell t} + \int_0^t d\tau b_\ell(\tau) e^{-\lambda_\ell(t-\tau)} \quad (3.15)$$

Setzt man nun $\{T_\ell(t)\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ aus (3.15) in den Separationsansatz (3.9) ein, so erhält man die allgemeine Lösung der Differentialgleichung (3.2), die den Rand- und Anfangswerten (3.3) und (3.4) genügt:

$$c(\vec{x}, t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ a_\ell e^{-\lambda_\ell t} + \int_0^t d\tau b_\ell(\tau) e^{-\lambda_\ell(t-\tau)} \right\} \psi_\ell(\vec{x}) \quad (3.16)$$

Die Schwierigkeit dieser Methode besteht i. a. im Lösen des Eigenwertproblems (3.8). In einigen Fällen ist es jedoch möglich, die Eigenwertgleichung (3.8) direkt zu lösen oder aber auf eine bekannte Differentialgleichung zurückzuführen. Im folgenden Abschnitt geben wir dazu Beispiele an.

3.1.2 Ortsabhängige Senkenverteilung

In diesem Abschnitt diskutieren wir eine Anwendung der allgemeinen Lösung (3.16) für den folgenden Spezialfall:

- i) eine Raumdimension, $d = 1$
- ii) K und D sind konstant (3.17)
- iii) $k^2 = k_{IL}^2 + k_{Dis}^2 \{ 1 - \cosh^{-2}(\gamma(x-x_0)) \}$.

Die Ortsabhängigkeit der Senkenstärke in (3.17) ist in Abb. 1 dargestellt und tritt im Zusammenhang mit der Diskussion des Schwellens von martensitischen Werkstoffen unter Neutronenbestrahlung auf /8/. Unter Berücksichtigung der speziellen Senkenverteilung (3.17) nimmt die Differentialgleichung (3.2) die folgende Form an:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K - k_{IL}^2 D c - k_{Dis}^2 D c \{ 1 - \cosh^{-2}(\gamma(x-x_0)) \} \quad (3.18)$$

Formuliert man getreu dem obigen Schema das dazugehörige Eigenwertproblem, so erhält man

$$\frac{d^2 \psi_l}{dx^2} + \{ E_l + k_{Dis}^2 \cosh^{-2}(\gamma(x-x_0)) \} \psi_l = 0 \quad (3.19)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$

Hierbei haben wir die folgende Notation verwendet:

$$E_l := \frac{\lambda_l}{D} - k_{IL}^2 - k_{Dis}^2 < 0 \quad (3.20)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$

Zur Vereinfachung der Differentialgleichung (3.19) führen wir die Transformation

$$\xi := \tanh(\gamma(x-x_0)) \quad (3.21)$$

durch. Benutzt man ferner die Definitionen

$$s(s+1) := \frac{k_{Dis}^2}{\gamma} \quad (3.22)$$

und

$$\mu_l := \frac{1}{\gamma} \sqrt{-E_l} \quad , \quad (3.23)$$

so läßt sich (3.19) auf die Standardform der zugeordneten Legendre Differentialgleichung zurückführen:

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1-\xi^2) \frac{d\psi_\ell}{d\xi} \right] + \left[s(s+1) - \frac{\mu_\ell^2}{1-\xi^2} \right] \psi_\ell = 0 \quad (3.24)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind bekannt und nur unter der Bedingung

$$s - \mu = \ell, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (3.25)$$

für $|x| \rightarrow \infty$ endlich /9/. Wir fordern deshalb, daß μ eine natürliche Zahl ist, was keine wesentliche Einschränkung unseres physikalischen Problems darstellt. (Die Form der Senkenverteilung wird unwesentlich verändert).

Zu vorgegebenen ℓ gibt es auf Grund der Bedingung (3.25) nur endlich viele Eigenwerte E_ℓ ,

$$E_\ell = -\gamma^2 (s-\ell)^2, \quad (3.26)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, \ell_{\max}$$

Die dazugehörigen Eigenfunktionen sind die zugeordneten Legendre Funktionen, die sich durch die Kugelflächenfunktionen ψ_{nm} ausdrücken lassen:

$$\psi_\ell(\xi) = Y_{s, s-\ell}(\mathcal{N}, 0), \quad (3.27)$$

mit

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, \ell_{\max}$$

$$\cos \mathcal{N} := \xi \quad (3.28)$$

und $s \in \mathbb{N}$.

Wir haben z.B. $s = 3$ gewählt und erhalten mit der Anfangsbedingung $c(x,0) = c_{th}$ das folgende Ergebnis:

$$c(x,t) = \sum_{\ell=0}^2 \left\{ a_\ell e^{-\lambda_\ell t} + \frac{b_\ell}{\lambda_\ell} (1 - e^{-\lambda_\ell t}) \right\} \psi_\ell(\tanh(\gamma(x-x_0))) \quad (3.29)$$

Die Größen $\{a_\ell\}_{\ell=0}^2$, $\{b_\ell\}_{\ell=0}^2$, $\{\lambda_\ell\}_{\ell=0}^2$ ergeben sich aus (3.12), (3.13) und (3.20) zu

$$a_0 = -\frac{3\pi}{32} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} c_{th}$$

$$a_1 = 0$$

$$a_2 = -\frac{\pi}{32} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} c_{th} \quad (3.30)$$

$$b_0 = -\frac{3\pi}{32} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} K$$

$$b_1 = 0 \quad (3.31)$$

$$b_2 = -\frac{\pi}{32} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} K$$

$$\lambda_0 = D \{ k_{Dis}^2 + k_{IL}^2 - 9\gamma^2 \}$$

$$\lambda_1 = D \{ k_{Dis}^2 + k_{IL}^2 - 4\gamma^2 \} \quad (3.32)$$

$$\lambda_2 = D \{ k_{Dis}^2 + k_{IL}^2 - \gamma^2 \}, \quad (3.33)$$

mit $\gamma := \sqrt{\frac{1}{12} k_{Dis}^2}$.

Die Eigenfunktionen $\{\psi_\ell\}_{\ell=0}^2$ sind die Kugelflächenfunktionen Y_{31}, Y_{32}, Y_{33} und lauten explizit:

$$\psi_0(\xi) = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} \cdot (1 - \xi^2)$$

$$\psi_1(\xi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot (1 - \xi^2) \xi$$

$$\psi_2(\xi) = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \cdot (1 - \xi^2) (5\xi^2 - 1), \quad (3.34)$$

mit $\xi := \tanh\{\gamma(x-x_0)\} = \cos \mathcal{V}. \quad (3.35)$

Will man die Lösung (3.29) numerisch auswerten, so muß man wegen der grossen Absolutbeträge von k_{Dis}^2 und k_{IL}^2 die Differentialgleichung (3.19) vorher geeignet skalieren. In Abb. 2 haben wir eine auf 1 normierte Lösungskurve c_v wiedergegeben. Man beobachtet minimale Werte von c_v , wo die Senkenstärke am höchsten ist. Ein ähnliches Verhalten erhält man für c_i , was im Einklang mit anderen Rechnungen steht /10/. Zur Diskussion dieser Ergebnisse verweisen wir auf /8/.

Im folgenden Abschnitt geben wir eine zweite, einfachere Anwendung der allgemeinen Lösung (3.16).

3.1.3 Freie Oberflächen

Zur weiteren Diskussion der allgemeinen Lösung (3.16) untersuchen wir nun den Fall, daß

- i) $d = 1$ ist (nur eine Raumdimension)
- ii) die Senkenstärke und die Defekterzeugungsrate ortsunabhängig sind
- iii) bei $x = 0$ und $x = x_0$ eine freie Oberfläche vorliegt.

Zur Erläuterung verweisen wir auf die Abb. 3. Die Differentialgleichung (3.2) hat nun die einfache Form

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K - k^2 D c \quad (3.36)$$

Die Randbedingung (3.3) sei

$$c(x, t) \Big|_{\substack{x=0 \\ x=x_0}} = 0, \quad (3.37)$$

und die Anfangsbedingung (3.4) sei durch

$$c(x, 0) = c_{th} \quad (3.38)$$

gegeben. Die beiden Oberflächen werden hierbei wie absolute Senken betrachtet. Die Eigenwertgleichung (3.8) lautet

$$L \psi_\ell(x) = \lambda_\ell \psi_\ell(x), \quad (3.39)$$

$\ell = 0, 1, 2, \dots$

wobei L in diesem Beispiel durch

$$L := -D \frac{d^2}{dx^2} + k^2 D \quad (3.40)$$

definiert ist. Die Differentialgleichung (3.39) läßt sich durch den Ansatz

$$\psi_\ell(x) = A_\ell \sin(\gamma_\ell x + \delta_\ell), \quad (3.41)$$

$\ell = 0, 1, 2, \dots$

leicht integrieren. Man erhält

$$\psi_\ell(x) = \sqrt{\frac{2}{x_0}} \sin\left(\frac{\pi \ell}{x_0} x\right) \quad (3.42)$$

und

$$\lambda_\ell = D \left\{ k^2 + \frac{\pi^2 \ell^2}{x_0^2} \right\}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (3.43)$$

Die Bestimmung der Größen $\{a_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ und $\{b_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}_0}$ nach (3.11), (3.12) und (3.13) liefert

$$a_\ell = \begin{cases} 0 & \text{für } \ell \text{ gerade} \\ c_{th} \frac{2}{\pi \ell} \sqrt{2x_0} & \text{für } \ell \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.44)$$

bzw.

$$b_\ell = \begin{cases} 0 & \text{für } \ell \text{ gerade} \\ K \frac{2}{\pi \ell} \sqrt{2x_0} & \text{für } \ell \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.45)$$

Die gesamte Lösung (3.16), die den Rand- und Anfangswerten (3.37) und (3.38) genügt, läßt sich somit schreiben als

$$c(x,t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ \frac{b_{2\ell+1}}{\lambda_{2\ell+1}} + \left(a_{2\ell+1} - \frac{b_{2\ell+1}}{\lambda_{2\ell+1}} \right) e^{-\lambda_{2\ell+1} t} \right\} \cdot \sqrt{\frac{2}{x_0}} \sin\left(\frac{\pi(2\ell+1)}{x_0} \cdot x \right) \quad (3.46)$$

mit

$$\begin{aligned} a_{2\ell+1} &:= c_{th} \frac{1}{\pi} 2 \sqrt{2x_0} \frac{1}{2\ell+1} \\ b_{2\ell+1} &:= K \frac{1}{\pi} 2 \sqrt{2x_0} \frac{1}{2\ell+1} \\ \lambda_{2\ell+1} &:= D \left\{ k^2 + \frac{\pi^2}{a^2} (2\ell+1)^2 \right\} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Bei der numerischen Auswertung von (3.46) muß die Reihe bei einem endlichen Wert ℓ_{\max} abgebrochen werden. In den Abb. 4-6 haben wir einige Beispiele für verschiedene ℓ_{\max} zusammengestellt. In diesem Fall ergeben sich erst für $\ell_{\max} \approx 200$ physikalisch sinnvolle Lösungen.

Die folgenden Abschnitte sind speziellen Lösungen der Differentialgleichung (3.2) gewidmet, die man durch verschiedene Orts- und/oder Zeitabhängigkeiten der Parameter erhält.

3.1.4 \vec{x}, t -abhängige Defekterzeugungsrate
 t -abhängige Senkenverteilung

In diesem Abschnitt betrachten wir die Differentialgleichung (3.2) mit den folgenden Bedingungen:

- i) der Diffusionskoeffizient D ist konstant
- ii) die Defekterzeugungsrate ist eine Funktion von \vec{x} und t ,
 $K = K(\vec{x}, t)$
- iii) die Senkenstärke ist t -abhängig,
 $k^2 = k^2(t)$ (3.48)

Die Differentialgleichung (3.2) lautet somit

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \Delta c + K - k^2 D c . \quad (3.49)$$

Als Anfangsbedingung für c wählen wir

$$c(\vec{x}, 0) = c_{th} = \text{konst.} \quad (3.50)$$

In diesem Fall läßt sich die in Kap. 2 geschilderte Vorgehensweise erheblich verkürzen und man erhält die allgemeine Lösung von (3.49) als Faltungsintegral über die Greensfunktion (2.12): Zum Beweis transformieren wir zunächst $c(\vec{x}, t)$:

$$c(\vec{x}, t) = c_{th} + \tilde{c}(\vec{x}, t) \exp\left(-\int_0^t d\tau k^2(\tau) D\right) . \quad (3.51)$$

Die Differentialgleichung (3.49) reduziert sich dadurch auf die Form

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = D \Delta \tilde{c} + (K - k^2 D c_{th}) \exp\left(+\int_0^t d\tau k^2(\tau) D\right) . \quad (3.52)$$

Völlig analog zu den Ausführungen im Kap. 2 kann man nun zuerst die Fundamentallösung $G(\vec{x}, t, d)$ suchen und dann die Folge (2.20) konstruieren. Da die Funktion F unabhängig von \tilde{c} ist, sind alle Elemente der Folge (2.20) identisch und man erhält

$$\begin{aligned} \tilde{c}(\vec{x}, t) = & \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d^d \xi \{ K(\vec{\xi}, \tau) - k^2(\tau) D c_{th} \} \cdot \\ & \cdot \exp\left(\int_0^\tau d\eta k^2(\eta) D\right) \cdot G(\vec{x} - \vec{\xi}, t - \tau, d) . \end{aligned} \quad (3.53)$$

Die Greensfunktion $G(\vec{x}, t, d)$ in d Raumdimensionen lautet nach (2.12)

$$G(\vec{x}, t, d) = \left(\frac{1}{2\sqrt{D\pi t}} \right)^d \exp\left(-\frac{\vec{x}^2}{4Dt}\right) \theta(t) \quad (3.54)$$

Berücksichtigt man schließlich (3.51), so schreibt sich die gesuchte Konzentration $c(\vec{x}, t)$ als

$$c(\vec{x}, t) = c_{th} + \exp\left(-\int_0^t d\tau' k^2(\tau') D\right) \cdot \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d^d \xi \left\{ K(\vec{\xi}, \tau) - k^2(\tau) D c_{th} \right\} \cdot \exp\left(\int_0^\tau d\eta k^2(\eta) D\right) \cdot G(\vec{x} - \vec{\xi}, t - \tau, d) \quad (3.55)$$

Für $t \rightarrow 0_+$ geht $c(\vec{x}, t)$ in die geforderte Anfangsbedingung (3.50) über. Die Lösung $c(\vec{x}, t)$ gehört zu einer Klasse von Funktionen, die für $t < 0$ verschwinden und in allen Zeitstreifen $0 \leq t \leq t_0$ beschränkt sind. Wie aus der Theorie der Wärmeleitungsgleichung bekannt ist [7, 11], gilt

$$|c(\vec{x}, t)| \leq c_{th} + t \cdot \sup_{\substack{\vec{\xi} \\ 0 \leq \tau \leq t}} \left\{ \left| K(\vec{\xi}, \tau) - k^2(\tau) D c_{th} \right| \cdot \exp\left(\int_0^\tau d\eta k^2(\eta) D\right) \right\} \quad (3.56)$$

für $t > 0$.

Die Auswertung der Formel (3.55) für konstante Defekterzeugungsrate und konstante Senkenstärke ergibt die zeitabhängige Lösung

$$c(t) = \frac{K}{k^2 D} - \left\{ \frac{K - k^2 D c_{th}}{k^2 D} \right\} \exp(-k^2 D t) \quad (3.57)$$

für $t \geq 0$. In Abb. 7 geben wir den schematischen Kurvenverlauf wieder. Insbesondere erhält man für $t \rightarrow 0_+$

$$c(t \rightarrow 0_+) = c_{th} \quad (3.58)$$

und für $t \rightarrow \infty$

$$c(t \rightarrow \infty) = \frac{K}{k^2 D} \quad (3.59)$$

3.1.5 x-abhängiger Diffusionskoeffizient

Als letztes Beispiel im Kap. 3.1 betrachten wir den Fall, daß der Diffusionskoeffizient ortsabhängig ist. Die allgemeine Lösung ergibt sich nach dem im Abschnitt 3.1.1 geschilderten Verfahren. Hier untersuchen wir nur den stationären Fall in einer Raumdimension mit konstanter Defekterzeugungsrate und mit konstanter Senkenstärke, d.h.

- i) $d = 1$ (eine Raumdimension)
- ii) $D = D(x)$ wird als bekannt vorausgesetzt
- iii) K und k^2 sind konstant. (3.60)

Die so vereinfachte Differentialgleichung (3.2) lautet somit

$$0 = \frac{d}{dx} \left(D \frac{dc}{dx} \right) + K - k^2 D c . \quad (3.61)$$

Eine Anfangsbedingung muß diesmal nicht berücksichtigt werden, wohl aber eine Randbedingung. Hierzu fordern wir

$$i) \quad c(x=0) = c_{th} \quad (3.62)$$

$$ii) \quad \left. \frac{dc}{dx} \right|_{x=x_0} = 0 . \quad (3.63)$$

Physikalisch gesehen geben wir bei $x = 0$ eine freie Oberfläche vor, während wir bei $x = x_0$ verlangen, daß sich die Konzentration c nicht mehr (wesentlich) ändern soll. Die Integration von (3.61) ist sehr einfach und man erhält nach kurzer Rechnung

$$c(x) = \frac{K}{k^2 D} - \frac{\left\{ c_{th} - \frac{K}{k^2 D} \right\} \lambda_2 e^{\lambda_1 x + \lambda_2 x_0}}{\lambda_1 e^{\lambda_1 x_0} - \lambda_2 e^{\lambda_2 x_0}} + \frac{\left\{ c_{th} - \frac{K}{k^2 D} \right\} \lambda_1 e^{\lambda_1 x_0 + \lambda_2 x}}{\lambda_1 e^{\lambda_1 x_0} - \lambda_2 e^{\lambda_2 x_0}} \quad (3.64)$$

$$\text{mit} \quad \lambda_{1/2} := -\frac{1}{2} \frac{D'}{D} \pm \sqrt{\left(\frac{D'}{2D} \right)^2 + k^2} . \quad (3.65)$$

Wie üblich bezeichnet D' die Ableitung von $D(x)$.

Im folgenden Kapitel untersuchen wir einfache analytische Lösungen der Ratengleichungen (1.1), die den Rekombinationskoeffizienten α enthalten.

3.2 Lösungen für $\alpha \neq 0$

Die exakte Lösung der Ratengleichungen (1.1) für beliebige Quell- und Senkenterme und für nichtverschwindenden Rekombinationskoeffizienten α ist durch die Folge (2.20) gegeben. Leider ist es bisher in nur geringem Umfang gelungen, auch "geschlossene Lösungen" von (1.1) zu finden. Wir geben nachstehend drei Beispiele.

3.2.1 Reine Rekombination

Wir betrachten zunächst den einfachen Fall, daß sich die Ratengleichungen auf das folgende System gewöhnlicher Differentialgleichungen reduzieren:

$$\frac{dc_v}{dt} = K - \alpha c_i c_v \quad (3.66)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = K - \alpha c_i c_v \quad (3.67)$$

Die Defekterzeugungsrate K ist dabei für Leerstellen und Zwischengitteratome gleich, lediglich die Anfangsbedingungen sollen sich unterscheiden:

$$i) \quad c_v(t=0) = c_v^{th} \quad (3.68)$$

$$ii) \quad c_i(t=0) = 0 \quad (3.69)$$

Dieses Beispiel beschreibt die Situation, daß Leerstellen und Zwischengitteratome in gleicher Anzahl erzeugt werden und nur durch Rekombination dem System verloren gehen. Bildet man nun die Differenz der Gl'n (3.66) und (3.67), so erhält man unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen (3.68) und (3.69)

$$c_v = c_v^{th} + c_i \quad (3.70)$$

Dies in Gl. (3.66) eingesetzt, führt auf eine Riccati-Differentialgleichung, die gelöst werden kann. Wir erhalten

$$c_i(t) = c_p + \frac{1}{A e^{\alpha(2c_p + c_v^{th})t} + \frac{1}{2c_p + c_v^{th}}} \quad (3.71)$$

mit
$$c_p := -\frac{c_v^{th}}{2} + \sqrt{\left(\frac{c_v^{th}}{2}\right)^2 + \frac{K}{\alpha}} > 0 \quad (3.72)$$

und
$$A := -\frac{3c_p + c_v^{th}}{c_p(2c_p + c_v^{th})} \quad (3.73)$$

Der Kurvenverlauf von (3.71) ist in Abb. 7 schematisch dargestellt. Insbesondere ergibt sich für $t \rightarrow \infty$

$$c_v(t \rightarrow \infty) = c_v^{th} + c_p \quad (3.74)$$

und
$$c_i(t \rightarrow \infty) = c_p \quad (3.75)$$

3.2.2 Das stationäre Problem

Wir suchen nun nach Lösungen der allgemeinen stationären Ratengleichungen, wobei alle Parameter als konstant angesehen werden. Führt man für die Leerstellen und Zwischengitteratome verschiedene Defekterzeugungsraten ein, K_V bzw. K_i , so erhält man das folgende nichtlineare Gleichungssystem:

$$0 = K_V - k_V^2 D_V c_V - \alpha c_i c_V \quad (3.76)$$

$$0 = K_i - k_i^2 D_i c_i - \alpha c_i c_V \quad (3.77)$$

Löst man (3.77) nach c_V auf und setzt dies in (3.76) ein, so ergibt sich eine quadratische Gleichung für c_i . Entsprechendes erhält man für c_V . Daraus erhält man die asymptotischen Werte von c_V und c_i im Limes $t \rightarrow \infty$:

$$c_V = -\frac{P_V}{2} + \sqrt{\left(\frac{P_V}{2}\right)^2 + q_V} \quad (3.78)$$

$$c_i = -\frac{P_i}{2} + \sqrt{\left(\frac{P_i}{2}\right)^2 + q_i} \quad (3.79)$$

Zur Vereinfachung der Formeln haben wir die folgenden Abkürzungen benutzt:

$$P_V := \frac{\alpha \{K_i - K_V\} + k_i^2 D_i k_V^2 D_V}{\alpha k_V^2 D_V} \quad (3.80)$$

$$q_V := \frac{k_i^2 D_i K_V}{k_V^2 D_V \alpha} \quad (3.81)$$

$$P_i := P_V (V \longleftrightarrow i) \quad (3.82)$$

$$q_i := q_V (V \longleftrightarrow i) \quad (3.83)$$

Zum Abschluß dieses Berichtes geben wir im folgenden Abschnitt eine Lösung der Ratengleichungen für den Fall an, daß man

$$c_V \sim c_i \quad (3.84)$$

setzen kann. Dies ist physikalisch sicher nur in Ausnahmefällen gerechtfertigt.

3.2.3 Proportionalität zwischen c_v und c_i

Wir betrachten den Spezialfall, daß c_v und c_i proportional zueinander sind. Vernachlässigt man sämtliche Ortsabhängigkeiten, so erhält man für konstante Parameter die folgende Differentialgleichung vom Typ Riccati:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = K - k^2 D c - \alpha \lambda c^2 \quad (3.85)$$

Hierbei bezeichnet λ die Proportionalitätskonstante zwischen c_v und c_i . Unter Beachtung der Anfangsbedingung

$$c(t=0) = c_{th} \quad (3.86)$$

kann die Riccati-Dgl nach den üblichen Verfahren /12/ gelöst werden, und man erhält nach etwas längerer Rechnung

$$c(t) = u + v(t)$$

mit

$$u := -\frac{p}{2q} + \sqrt{\left(\frac{p}{2q}\right)^2 + \frac{K}{q}}$$

$$v(t) := \frac{(p+2uq)(c_{th}-u)}{\{p+2uq+q(c_{th}-u)\}e^{(p+2uq)t} - q(c_{th}-u)}$$

und

$$p := k^2 D$$

$$q := \alpha \lambda$$

(3.87)

Für $t \rightarrow 0_+$ ist die Anfangsbedingung (3.86) erfüllt, während $c(t)$ für $t \rightarrow \infty$ gegen den asymptotischen Wert

$$c(t \rightarrow \infty) = u \quad (3.88)$$

strebt. Den prinzipiellen Kurvenverlauf kann man aus Abb. 7 ablesen.

4. Ergebnisse

In diesem Bericht haben wir gezeigt, daß die Ratengleichungen wie sie von Bullough et al. für stationäre Bestrahlungsphänomene aufgestellt wurden, eine eindeutige Lösung besitzen, die durch den Grenzwert einer Folge gegeben ist. Wir haben einen konstruktiven Beweis vorgeführt.

Vernachlässigt man den Rekombinationsterm, so entkoppeln die beiden Ratengleichungen und man erhält zwei partielle Differentialgleichungen vom parabolischen Typ. Die allgemeine Lösungsmethode dieser Differentialgleichungen wurde erläutert und an mehreren Beispielen demonstriert.

Zum Schluß haben wir einige "geschlossene Lösungen" der Ratengleichungen aufgelistet.

Anhang A: Parameter der Theorie

Im folgenden geben wir eine kurze Zusammenstellung der wichtigsten Standarddefinitionen und Formeln /13/:

Bezeichnungen:

Indices für vacancies, interstitials:	v, i	
Diffusionskoeffizienten:	$D_{v, i}$	$[cm^2/s]$
Defekterzeugungsrate:	$K_{v, i}$	$[dpa/s]$
Defekterzeugungsrate von vacancies durch Emission aus den Poren:	$K_v^{(p)}$	$[dpa/s]$
Senkenstärke:	$k_{v, i}^2$	$[1/cm^2]$
Rekombinationskoeffizient:	α	$[1/s]$
Wanderungsenergie:	$E_m^{v, i}$	$[eV]$
Bildungsenergie:	$E_f^{v, i}$	$[eV]$
Temperatur:	T	$[K]$
Radius der Interstitial Loops:	R_{IL}	$[cm]$
Dichte der Interstitial Loops:	ρ_{IL}	$[1/cm^3]$
Dichte der Versetzungen:	ρ_{Dis}	$[cm/cm^3]$
Biasfaktoren:	$Z_{v, i}$	$[1]$
Kürzeste Gitterkonstante:	a	$[cm]$
Atomradius:	r_{Ω}	$[cm]$
Atomvolumen:	Ω	$[cm^3]$
Relative Atommasse:	a_{rel}	$[1]$
Rekombinationsradius:	r_o	$[cm]$
Debye-Temperatur:	θ	$[K]$
Sprungfrequenz:	$\nu_{v, i}$	$[1/s]$
Kaskadenfaktor:	ϵ	$[1]$
Burger's Vektor:	b	$[cm]$
Thermische Gleichgewichtskonzentrationen:	$c_{v, i}^{th}$	$[1]$

Universelle Konstanten:

Planck'sches Wirkungsquantum:	\hbar	[erg s]
Boltzmannkonstante:	k_B	[erg/K]
Atomare Masseneinheit:	AME	[g]

Zusammenstellung der Formeln:

1) $\beta := \frac{1}{k_B T}$ (A.1)

2) Atommasse:
 $M = a_{rel} \cdot AME$ (A.2)

3) Diffusionskoeffizienten:
 $D_{V,i} = D_{V,i}^0 \exp(-\beta E_m^{V,i})$ (A.3)

$D_{V,i}^0 := g_{V,i} v_{V,i} a^2 \exp(S_m^{V,i})$ (A.4)

$g_{V,i}$: Geometriefaktor

Für bcc-, fcc-Gitter und kubische Kristalle ist

$g_{V,i} = 1$ (A.5)

4) Sprungfrequenzen:

i) Seeger-Mehrer Modell:

$$v_{V,i} = \begin{cases} \frac{1}{a} \sqrt{\frac{E_m^{V,i}}{M}} & \text{fcc-Gitter} & \text{(A.6)} \\ \frac{1}{a} \sqrt{\frac{2 E_m^{V,i}}{3M}} & \text{bcc-Gitter} & \text{(A.7)} \end{cases}$$

ii) Debye-Modell:

$v_V = v_i = \frac{k_B \theta}{2\pi \hbar}$ (A.8)

5) Defekterzeugungsrate (vacancies):

$K_V = (1-\epsilon) K_i$ (A.9)

6) Senkenstärken:

$k_{V,i}^2 = \sum_{\ell=1}^N k_{V,i}^{2(\ell)}$ (A.10)

Die Summe läuft dabei über alle im Metall betrachteten Senken, z.B. Poren $k_{V,i}^{2(p)}$, Interstitial Loops $k_{V,i}^{2(IL)}$, Vacancy Loops $k_{V,i}^{2(VL)}$, Versetzungsnetzwerke $k_{V,i}^{2(N)}$, Korngrenzen $k_{V,i}^{2(GB)}$, etc. Die wichtigsten Senken neben den Poren sind die Versetzungen und die Interstitial Loops:

i) Versetzungen (Dislocations):

$$k_{V,i}^{2(Dis)} = Z_{V,i} \cdot \rho_{Dis} \quad (A.11)$$

ii) Interstitial Loops:

$$k_{V,i}^{2(IL)} = Z_{V,i} \cdot 2\pi R_{IL} \rho_{IL} \quad (A.12)$$

7) Rekombinationskoeffizient:

Hierbei werden i.a. zwei Modelle für das Rekombinationsvolumen betrachtet:

$$i) \alpha = (D_i + D_V) \frac{4\pi r_0}{\Omega} \quad (A.13)$$

$$\text{mit } \frac{4\pi}{3} r_0^3 \approx 100\Omega \quad (A.14)$$

$$\text{und } \Omega = \frac{4\pi}{3} r_\Omega^3 \quad (A.15)$$

$$ii) \alpha = (D_i + D_V) \left(\frac{1}{b}\right)^2 \quad (A.16)$$

8) Thermische Gleichgewichtskonzentrationen:

$$c_V^{th} = \exp(S_f^V/k_B) \exp(-\beta E_f^V) \quad (A.17)$$

$$c_i^{th} \approx 0 \quad (A.18)$$

Referenzen:

- /1/ A.D. Brailsford, R. Bullough
J. Nucl. Mater. 44 (1972) 121
H. Wiedersich
Radiation Effects 12 (1972) 111
A.D. Brailsford, R. Bullough
J. Nucl. Mater. 48 (1973) 87
R. Bullough, M.R. Hayns
J. Nucl. Mater. 55 (1975) 237
A.D. Brailsford, R. Bullough, M.R. Hayns
J. Nucl. Mater. 60 (1976) 246
R. Bullough, M.R. Hayns
J. Nucl. Mater. 68 (1977) 286
R. Sitzmann
J. Nucl. Mater. 69 & 70 (1978) 386
F.A. Nichols
J. Nucl. Mater. 75 (1978) 32
- /2/ A.D. Brailsford, R. Bullough
J. Nucl. Mater. 69 & 70 (1978) 434
- /3/ N.M. Ghoniem, G.L. Kulcinski
Radiation Effects 39 (1978) 47
N.M. Ghoniem, G.L. Kulcinski
J. Nucl. Mater. 69/70 (1978) 816
N.M. Ghoniem, G.L. Kulcinski
Radiation Effects 41 (1979) 81
N.M. Ghoniem, G.L. Kulcinski
J. Nucl. Mater. 82 (1979) 392
N.M. Ghoniem, G.L. Kulcinski
85/86 (1979) 547
- /4/ F. Constantinescu
Distributionen und ihre Anwendung in der Physik
Teubner Studienbücher 1974

M. Reed, B. Simon
Methods of Modern Mathematical Physics I-IV
Academic Press

- /5/ L. Hörmander
Linear partial differential operators
Springer-Verlag 1964
- F. John
Partial differential Equations
Springer-Verlag 1978
- J.L. Lions, E. Magenes
Non-Homogeneous Boundary Value Problems and Applications I, II
Springer-Verlag 1972
- /6/ J.D. Murray
Lectures on Nonlinear-Differential-Equation Models in Biology
Clarendon Press 1977
- /7/ W.S. Wladimirow
Gleichungen der mathematischen Physik
Deutscher Verlag der Wissenschaften 1972
- /8/ K. Ehrlich, R. Heidenreich
in Vorbereitung
- /9/ L.D. Landau, E.M. Lifschitz
Lehrbuch der theoretischen Physik III
Akademie-Verlag 1974
- I.N. Sneddon
Spezielle Funktionen der mathematischen Physik
BI-Hochschultaschenbücher 1961
- /10/ R. Heidenreich
Primärbericht, in Vorbereitung
- /11/ D.V. Widder
The Heat Equation
Academic Press 1975

- /12/ L. Bieberbach
Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen
Springer-Verlag 1965
- A. Peyerimhoff
Gewöhnliche Differentialgleichungen
Akademische Verlagsgesellschaft 1970
- /13/ A. Cottrell
An Introduction to Metallurgy
Edward Arnold
The Pitman Press, Great Britain, 1975
- Peter Haasen
Physikalische Metallkunde
Springer-Verlag 1974
- Proceedings of the International Conference held at
Jülich, Germany, 1968
Vacancies and Interstitials in Metals
edited by A. Seeger, D. Schumacher, W. Schilling, J. Diehl
North-Holland Publishing Company - Amsterdam 1970

Abbildungen:

Abb. 1: Ortsabhängige Senkenstärke der Form

$$k^2(x) = A \left[1 - \frac{1}{\cosh^2 \gamma (x-x_0)} \right] + B$$

Abb. 2: Analytische Lösung für ortsabhängige Senkenstärke (normierte Funktionen).

$$\text{Kurve 1: } c_v \quad ; \quad \text{Kurve 2: } k^2$$

Abb. 3: System mit zwei freien Oberflächen (hier bei $x = 0$ und $x_0 = 0.8$) und mit konstanter Senkenstärke ($k^2 = 0.3$) (in willkürlichen Einheiten)

Abb. 4: Analytische Lösung für c_v (normiert)

$$l_{\max} = 30 \quad , \quad t = 1s$$

Abb. 5: Analytische Lösung für c_v (normiert)

$$l_{\max} = 100 \quad , \quad t = 1s$$

Abb. 6: Analytische Lösung für c_v (normiert)

$$l_{\max} = 200 \quad , \quad t = 1s$$

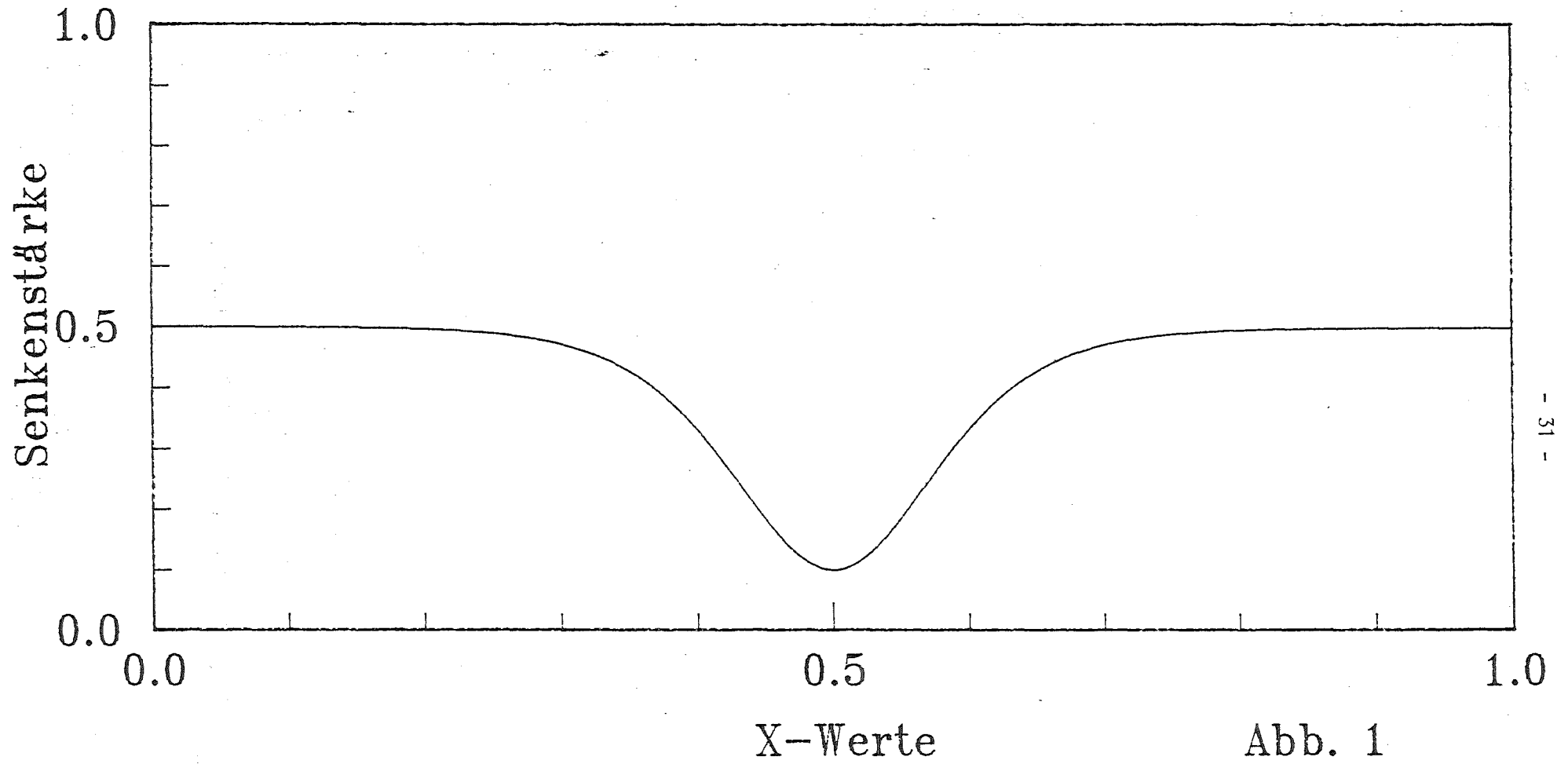
Abb. 7: Analytische Lösungen der Form

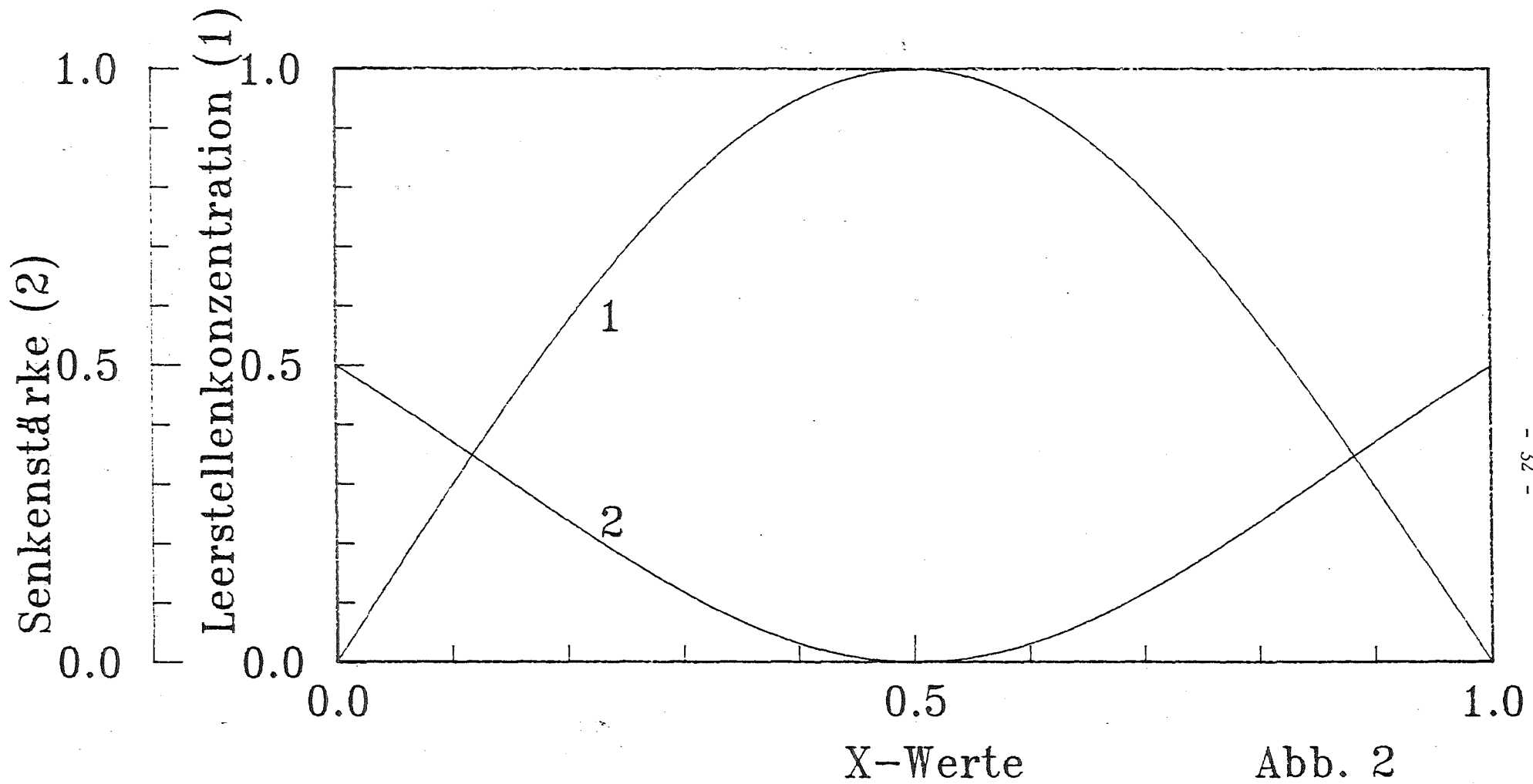
$$c(t) = A - [A-B] e^{-\gamma t}$$

bzw.

$$c(t) = A + \frac{1}{B e^{\gamma t} + E}$$

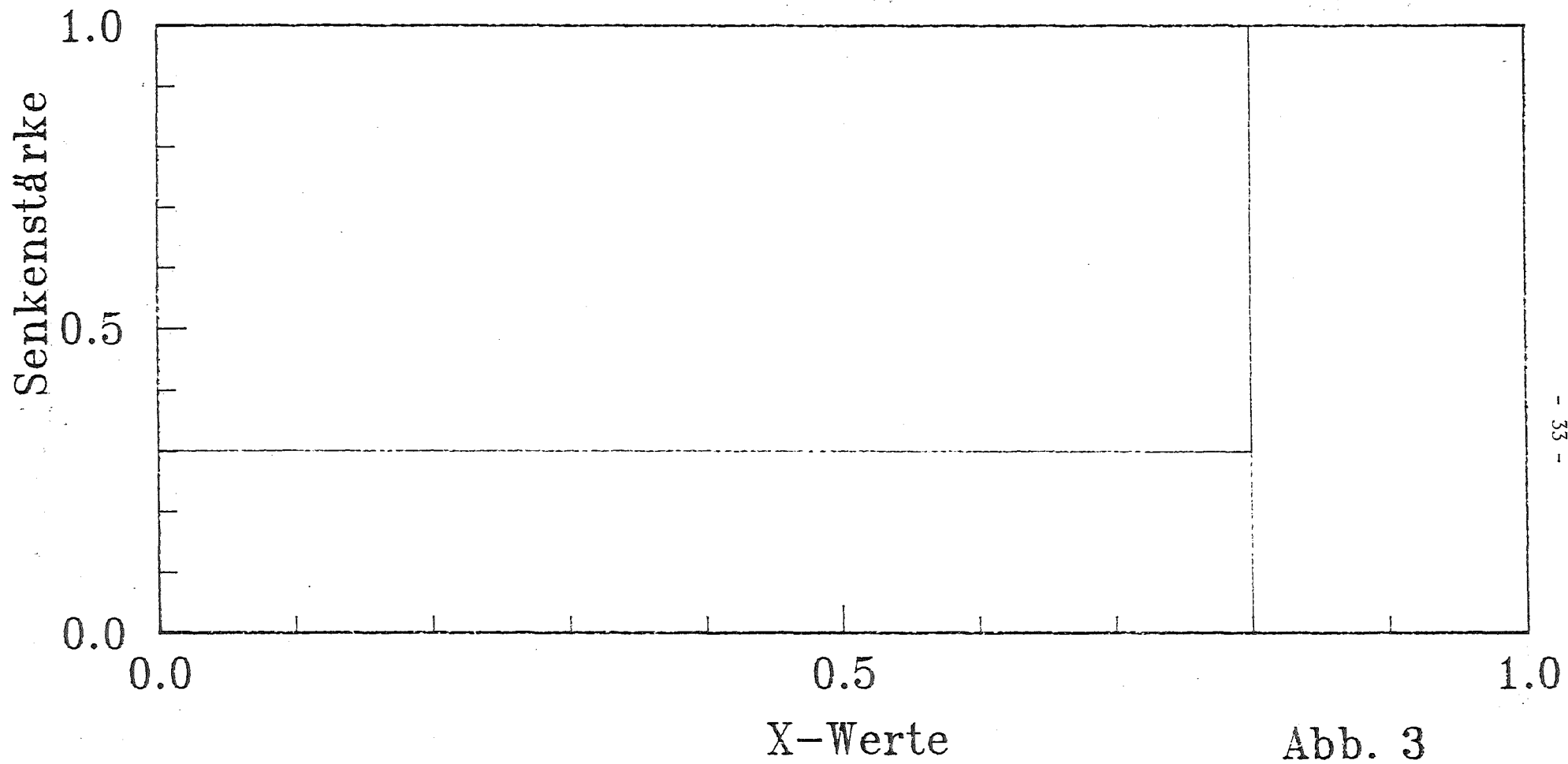
(schematischer Kurvenverlauf für $c(\infty) > c(0)$)

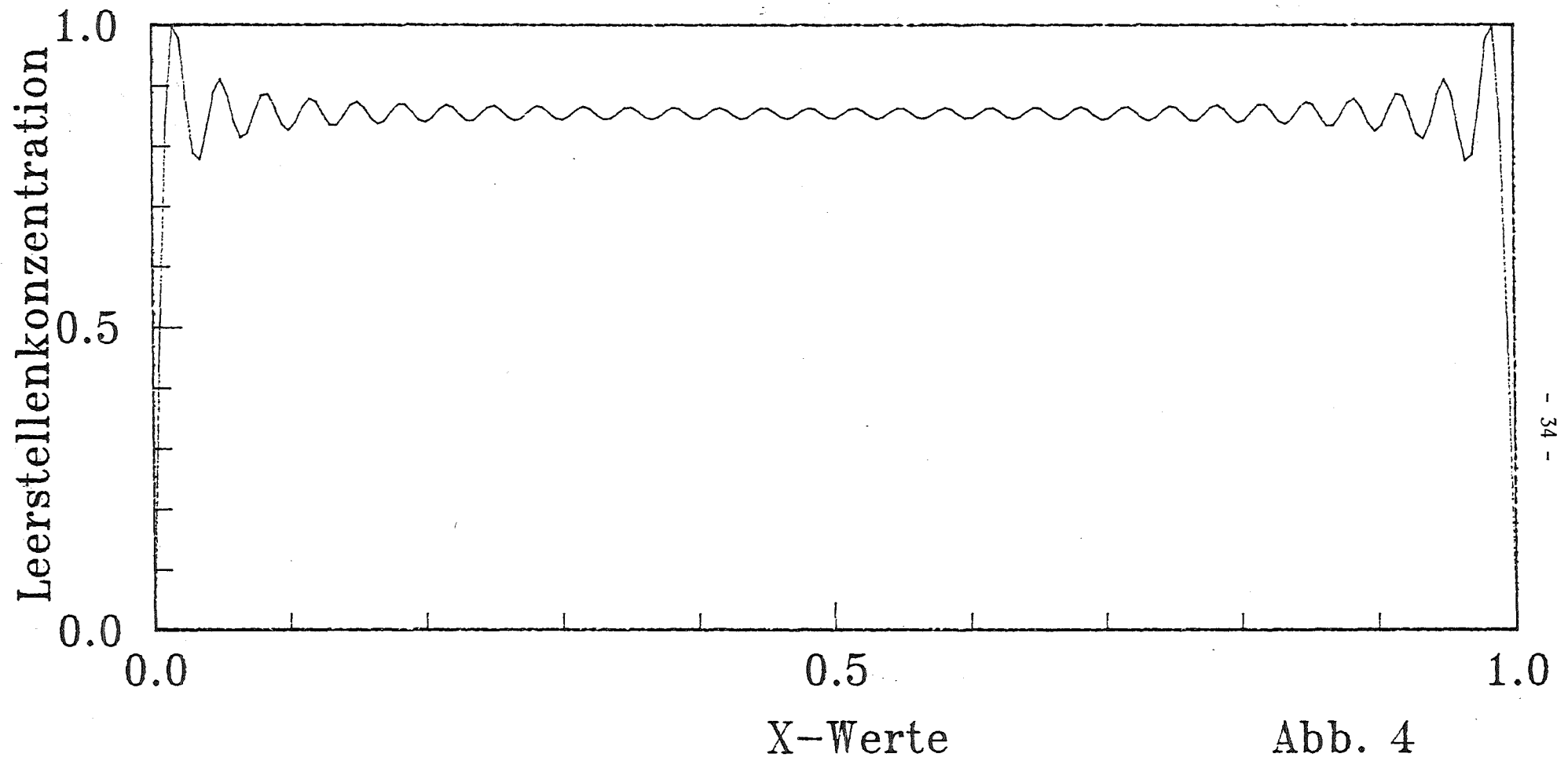


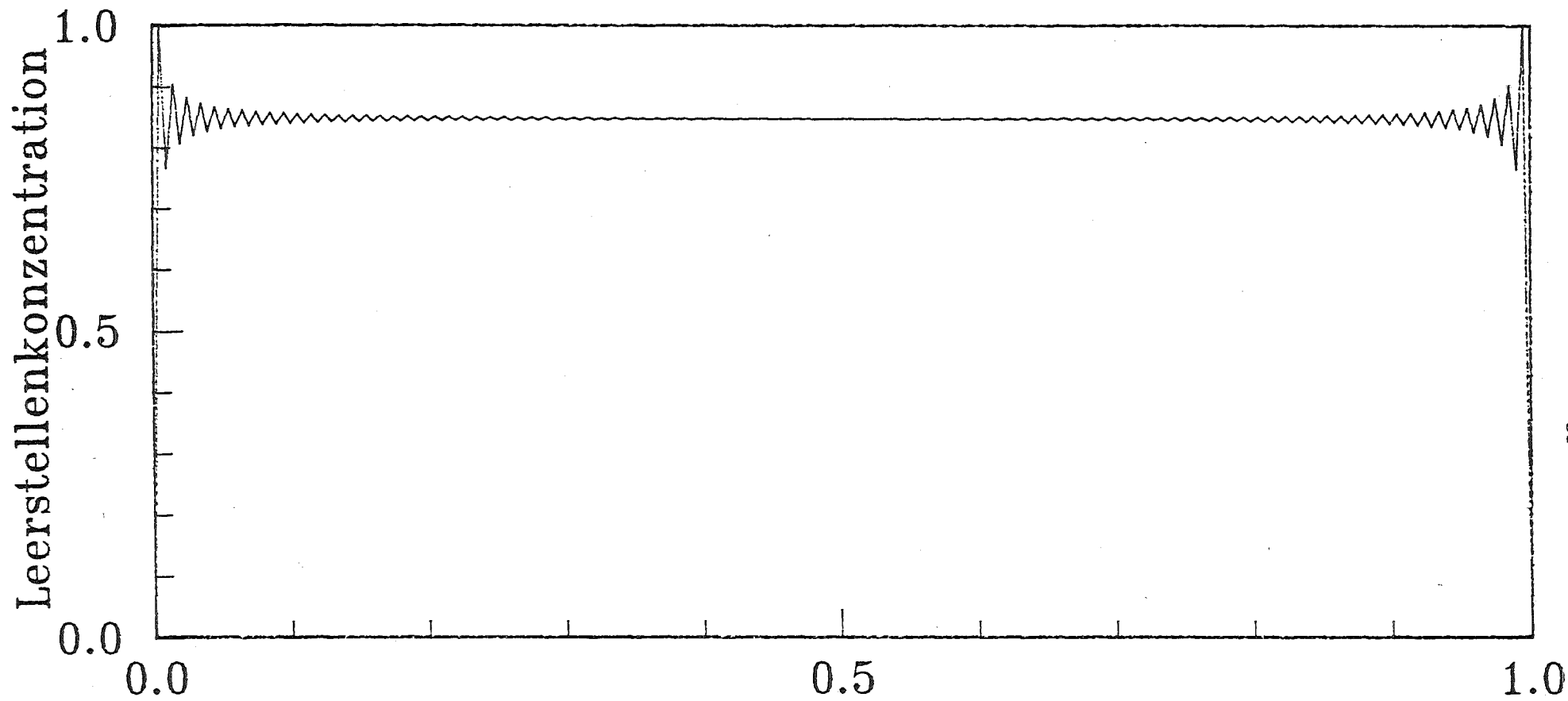


X-Werte

Abb. 2

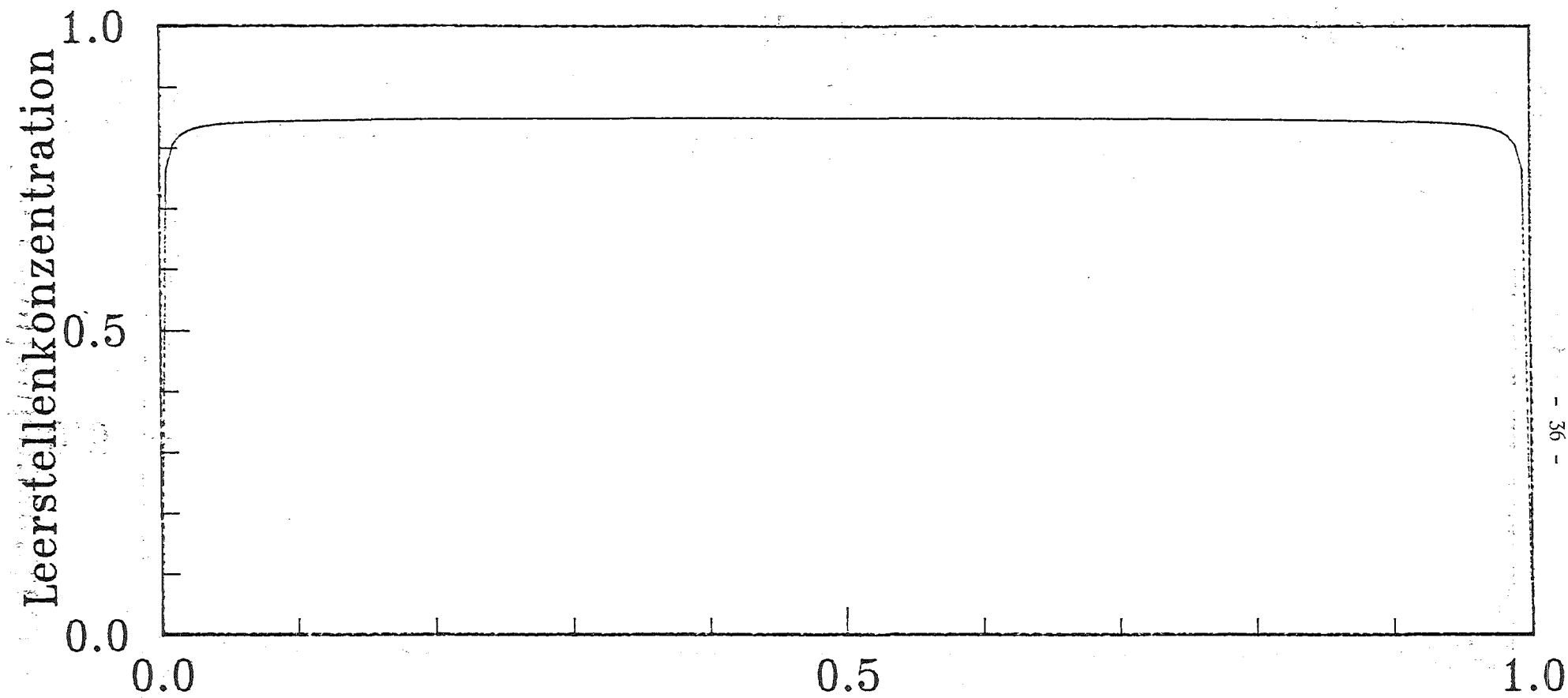






X-Werte

Abb. 5



X-Werte

Abb. 6

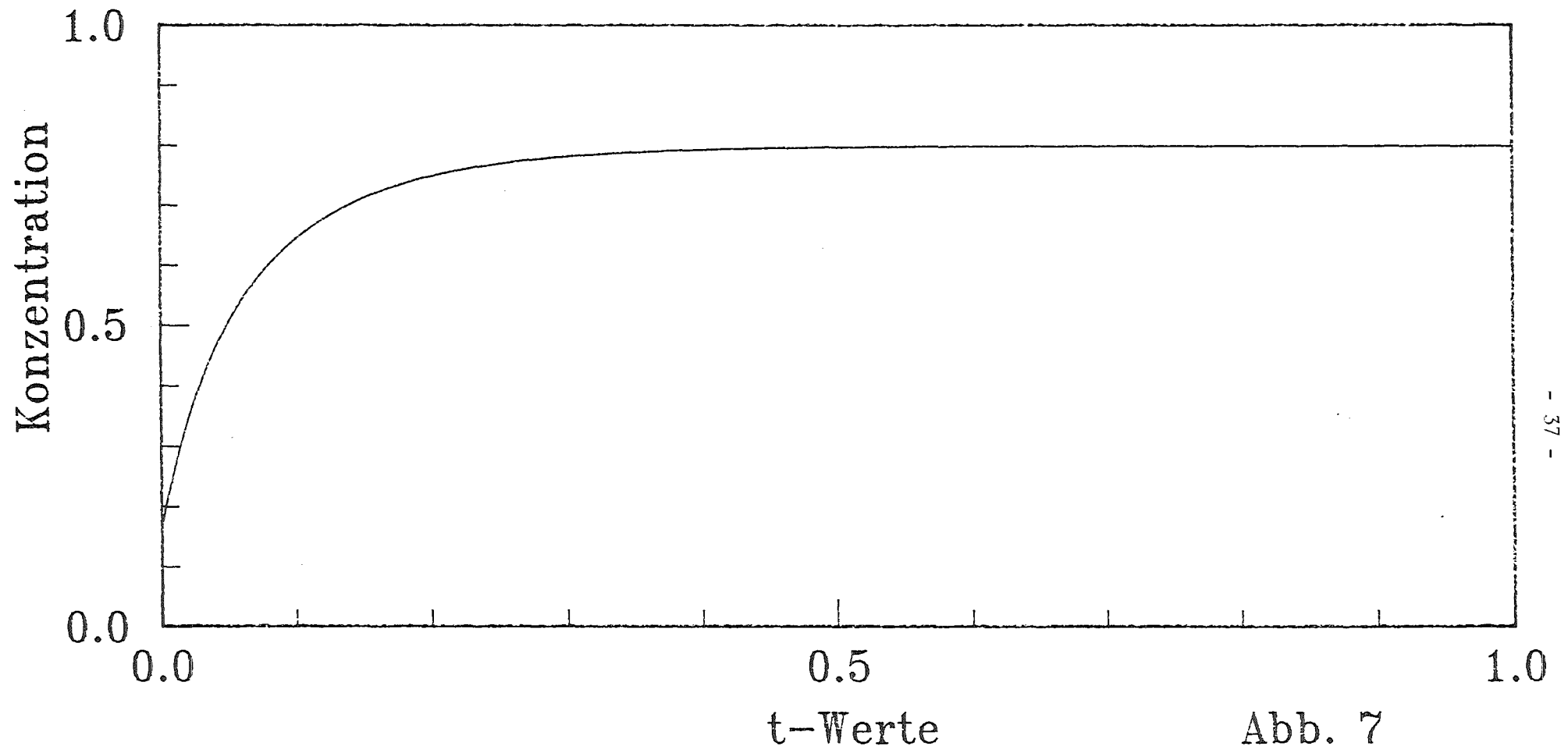


Abb. 7