

(Abb. 14). Aus diesen Druckabhängigkeiten sind die in Tab. 4 angegebenen mittleren Wirkungsquerschnitte für die Zerstörung der Ausrichtung bestimmt worden.

	$\bar{\sigma}^{(2)}$ (cm ²)	$\bar{\sigma}^{(2)}$ (cm ²) ²⁵	$\bar{\sigma}$ (cm ²) ²⁴
3 ¹ D	6 · 10 ⁻¹⁴		
4 ¹ D	4 · 10 ⁻¹⁴	4 · 10 ⁻¹⁴	
5 ¹ D	7 · 10 ⁻¹⁴		
6 ¹ D			5,7 · 10 ⁻¹⁴
7 ¹ D			8,5 · 10 ⁻¹⁴

Tab. 4.

Diese Wirkungsquerschnitte sind verhältnismäßig groß, aber mit den für höhere n ¹D-Zustände bestimmten Wirkungsquerschnitten $\bar{\sigma}$ für den „desexci-

tation“-Prozeß²⁴ angeregter Zustände durch Stöße mit anderen Atomen in der Größenordnung vergleichbar. Auch hier ist der oben diskutierte Einfluß des Kaskadenüberganges aus dem 4 ¹F-Zustand deutlich erkennbar. Der in Tab. 4 angegebene Wirkungsquerschnitt ist für den 3 ¹D-Zustand als Summe der Wirkungsquerschnitte des 3 ¹D- und 4 ¹F-Zustandes mit verschiedenen Gewichten anzusehen.

Dem Direktor des I. Physikalischen Institutes, Herrn Prof. Dr. W. HANLE, der mir diese Arbeit ermöglichte, möchte ich an dieser Stelle für seine stete Förderung danken. Meinem Kollegen Herrn Dipl.-Phys. K. BUCHHAUPT danke ich für seine Hilfe bei der Durchführung der Messungen.

²⁵ W. JANKE, Universität Gießen, private Mitteilung.

Zufallswege und Reaktionen atomarer Gitterfehler in Modellkristallen

I. Die Simulationsmethode und ihre Anwendung auf die Ausscheidung von Leerstellen *

HELMUT MEHRER

Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart
und Institut für Physik am Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart

(Z. Naturforsch. **24 a**, 358–367 [1969]; eingegangen am 15. November 1968)

A Monte-Carlo method for the simulation of random walks and reactions of point defects in a lattice has been developed. It allows a physically more realistic treatment of point defect annealing than rate equations of diffusion theory. In this paper (I) the simulated annealing of monovacancies at an inexhaustible sink is compared with the results of the diffusion theory. Subsequently the method is applied to the precipitation of mono- and divacancies in an fcc lattice.

Überschüssige atomare Gitterfehler können aus einem Kristallgitter entweder durch gegenseitige Rekombination oder durch Annihilation an einer Senke verschwinden. In jedem Fall spielt für die physikalische Interpretation der zeitliche Verlauf der Reaktion, die sogen. Erholungskinetik, eine entscheidende Rolle. Üblicherweise¹ wird zu ihrer Deutung eine der beiden folgenden Näherungen herangezogen:

(i) *Ratengleichungen*, wie sie sich bei der Untersuchung der Kinetik von Gasreaktionen bewährt haben. Mit ihrer Hilfe ergibt sich beispielsweise für die Ausscheidung von Leerstellen an einer Senke mit unerschöpflicher Kapazität eine Reaktion erster Ordnung und für die Rekombination von Zwischengitteratomen und Leerstellen eine Reaktion zweiter

Ordnung. Die Anwendbarkeit von Ratengleichungen ist an eine ganze Reihe von Voraussetzungen geknüpft, deren Einfluß auf das Endergebnis schwer abzuschätzen ist. In die Ratengleichungen gehen nur räumliche Konzentrationsmittelwerte ein. Es wird also eine homogene Anfangsverteilung vorausgesetzt und es wird angenommen, daß die Verteilung während der Reaktion homogen bleibt. Eine Ortsabhängigkeit der Konzentrationen sowie eine Korrelation des Reaktionsgeschehens bleibt unberücksichtigt. Trotz solch einschneidender Vereinfachungen erhält man nur in wenigen Fällen geschlossene Lösungen.

(ii) Die *Diffusionstheorie* arbeitet mit ortsabhängigen Konzentrationen. HAM² untersucht mit Hilfe der Diffusionsgleichung die Ausscheidung aus einer übersättigten Lösung an Senken. FLYNN³ diskutiert

* Dissertation, Teil I, Universität Stuttgart 1968.

¹ A. C. DAMASK u. G. J. DIENES, *Point Defects in Metals*, Gordon & Breach Sci. Publ., Inc., New York 1963.

² F. S. HAM, *J. Phys. Chem. Solids* **6**, 335 [1958].

³ C. P. FLYNN, *Phys. Rev.* **133**, A 587 [1964].



den Übergang vom diskontinuierlichen Gitter zum Kontinuum für diesen Fall. Er kommt zu dem Schluß, daß die Diffusionsgleichung mit Ausnahme der Umgebung sehr kleiner Senken gültig sein sollte. Die WAITESche Theorie⁴ gibt eine Beschreibung einer diffusionsgehemmten, bimolekularen Reaktion in einem Kontinuum.

Sowohl die Hamsche als auch die Waitesche Theorie sind Kontinuumstheorien. Bei Fehlstellenreaktionen, die sich in atomaren Dimensionen abspielen, kann aber sehr wohl die Kinematik der Sprünge im Gitter von Bedeutung sein. Der Einfluß von Fluktuationen der Defektverteilung wird ebenfalls nicht erfaßt. Hinzu kommt, daß eine Verallgemeinerung auf kompliziertere Fälle, wie z. B. die Berücksichtigung von Doppelleerstellen in den Hamschen Theorie oder derjenigen einer Wechselwirkung der Reaktionspartner in der Waiteschen Theorie, zwar prinzipiell möglich ist, daß sie aber auf sehr unhandliche Gleichungen führt, deren Lösung nur in ganz speziellen Fällen⁵ gelingt.

Eine vorteilhafte Möglichkeit, die skizzierten Schwierigkeiten der „klassischen“ Theorien zu überwinden, bietet die Simulation von Zufallswegen und Reaktionen von Punktfehlern mit Hilfe eines Computers. Das Simulationsverfahren erlaubt eine exakte Beschreibung der Zufallswege in einem Gitter. Fluktuationen der Defektverteilung werden automatisch berücksichtigt. Schließlich ist das Verfahren im Prinzip auf beliebig komplizierte Fälle anwendbar. Seine Grenzen sind allein durch die Rechengeschwindigkeit und Speicherkapazität des verfügbaren Computers bestimmt.

KRISEMENT⁶ hat erstmals mit einer ähnlichen Methode Ausscheidungsvorgänge von Gitterfehlern in zweidimensionalen Gittern von 625 Gitterplätzen verfolgt. Realistische Verhältnisse erhält man aber erst in dreidimensionalen Gittern, da Arbeiten von VINEYARD⁷, MONTROLL⁸ sowie POLYA⁹ zeigen, daß wichtige Eigenschaften des Zufallsweges in einem Gitter von dessen Dimensionalität abhängen. Reaktionen von Gitterlücken in einem dreidimensionalen Gitter von 32 000 Gitterpunkten wurden von SCHOLZ¹⁰ für zwei spezielle Modelle untersucht.

In der vorliegenden Arbeit (Teil I) wird die Ausscheidung leerer Gitterplätze einer Senke behandelt.

Die Rekombination von Zwischengitteratomen und Leerstellen ist Gegenstand der folgenden Arbeit (Teil II) in diesem Heft.

1. Die Simulationmethode

1.1 Symmetrische und asymmetrische Zufallswege

Die Bewegung einer Fehlstelle ist eine Irrfahrt in einem dreidimensionalen Gitter (Brownsche Bewegung); wir werden im folgenden von einem Zufallsweg sprechen. Sein geometrisches Abbild ist ein räumlicher Polygonzug (vgl. Abb. 1). Dieser setzt sich zusammen aus den Sprungvektoren $\mathbf{s}[h_i]$. Im allgemeinen kann ein Gitterfehler nur Sprünge zu den nächsten Nachbarpositionen ausführen. Es exi-

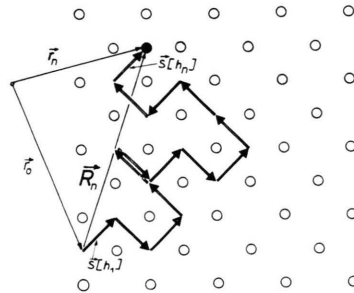


Abb. 1. Zufallsweg eines Zwischengitteratoms in einem zweidimensionalen Gitter.

tiert daher nur eine endliche Anzahl H_0 verschiedener Sprungvektoren. Jedem von ihnen ordnen wir eine ganze Zahl h_i ($h_i = 1, 2, \dots, H_0 - 1, H_0$) zu. Für einige Gitterfehler sind die Sprungvektoren in Tab. 1 für Sprünge auf nächste Nachbarplätze zusammengestellt.

Fehlstelle	h	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	H_0
L ₁ und Z im kfz Gitter	s_x	1	$\bar{1}$	0	0	$\bar{1}$	1	0	0	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	12
	s_y	0	0	1	$\bar{1}$	0	0	$\bar{1}$	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	
	s_z	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	0	0	0	0	0	
L ₁ im kpr Gitter	s_x	2	$\bar{2}$	0	0	0	0							6
	s_y	0	0	2	$\bar{2}$	0	0							
	s_z	0	0	0	0	2	$\bar{2}$							
L ₁ im krz Gitter	s_x	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	1	1	$\bar{1}$					8
	s_y	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	1	1	$\bar{1}$					
	s_z	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	1	1	$\bar{1}$					

Tab. 1. Sprungvektoren für verschiedene Fehlstellen in Einheiten $a/2$ und ihre Zuordnung zu Zufallszahlen.

⁴ T. R. WAITE, Phys. Rev. **107**, 463, 471 [1957]; J. Chem. Phys. **28**, 103 [1958].

⁵ W. FRANK, Diplomarbeit, Universität Stuttgart 1963.

⁶ O. KRISEMENT, Phys. Kondens. Materie **1**, 326 [1963].

⁷ G. H. VINEYARD, J. Math. Phys. **4**, 1141 [1963].

⁸ E. W. MONTROLL, J. Soc. Indust. Appl. Math. **4**, 241 [1956].

⁹ G. POLYA, Math. Ann. **84**, 149 [1921].

¹⁰ A. SCHOLZ, Phys. Status Solidi **14**, 169 [1966].

Somit ist der Weg der Fehlstelle mit Nummer j ($j = 1, 2, \dots, N^0$) durch eine Folge von ganzen Zahlen $\{h_1^{(j)}, h_2^{(j)}, \dots, h_{n_j}^{(j)}\}$ charakterisierbar. Der Verschiebungsvektor $\mathbf{R}_{n_j}^{(j)}$ nach n_j Sprüngen ist gegeben durch

$$\mathbf{R}_{n_j}^{(j)} = \mathbf{r}_{n_j}^{(j)} - \mathbf{r}_0^{(j)} = \sum_{i=1}^{n_j} \mathbf{s} [h_i^{(j)}]. \quad (1.1)$$

Bei einem *symmetrischen* Zufallsweg ist die Folge $\{h_i^{(j)}\}$ eine regellose Folge von Zufallszahlen und die Wahrscheinlichkeit dafür, daß in der Zufallsfolge die Zahl h_i auftritt, ist

$$p(h_i) = 1/H_0. \quad (1.2)$$

Verharrt die Fehlstelle zwischen zwei Sprüngen die Zeit $\tau_i^{(j)}$ auf einem Platz, so ist die mittlere Verweilzeit durch

$$\bar{\tau} = \lim_{n_j \rightarrow \infty} \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} \tau_i^{(j)} = \lim_{N^0 \rightarrow \infty} \frac{1}{N^0} \sum_{j=1}^{N^0} \tau_i^{(j)} \quad (1.3)$$

gegeben.

Der Zufallsweg wird *asymmetrisch*, wenn eine Wechselwirkung zwischen zwei Fehlstellen stattfindet. Sowohl $p(h_i)$ als auch $\bar{\tau}$ hängt dann von der gegenseitigen Lage der Gitterfehler ab. $\{h_i^{(j)}\}$ ist keine regellose Folge mehr. Wir verzichten an dieser Stelle auf die Beschreibung des methodischen Vorgehens für diesen Fall. Sie erfolgt zweckmäßiger beim jeweiligen Modell.

1.2 Pseudozufallszahlen

Folgen von Pseudozufallszahlen, die alle praktisch wichtigen Eigenschaften echter Zufallsfolgen besitzen, können mit Hilfe von Rechenautomaten hergestellt werden. Der einzig wichtige Unterschied zu einer echten Zufallsfolge besteht darin, daß sich die Pseudozufallsfolge nach einer endlichen, wenn auch sehr großen Zahl von Folgegliedern wiederholt. Die Zyklenlänge der in dieser Arbeit ausschließlich benutzten Standardprozedur RANDOM des TR4 beträgt 2^{36} Folgeglieder.

Pseudozufallszahlen wurden u. a. benutzt, um symmetrische Zufallswege gemäß Gl. (1.1) zu simulieren. Um ihre Brauchbarkeit für diesen Zweck zu testen, wurde das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\langle \mathbf{R}_{n_{1L}}^2(N_{1L}^0) \rangle = \frac{1}{N_{1L}^0} \sum_{j=1}^{N_{1L}^0} [\mathbf{R}_{n_{1L}}^{(j)}]^2 \quad (1.4)$$

von N_{1L}^0 Leerstellen im kubisch-flächenzentrierten Gitter nach n_{1L} Sprüngen aus den Verschiebungs-

vektoren der einzelnen Leerstellen ermittelt und mit dem Wert

$$\lim_{N_{1L}^0 \rightarrow \infty} \langle \mathbf{R}_{n_{1L}}^2(N_{1L}^0) \rangle = \frac{1}{2} a^2 n_{1L} \quad (1.5)$$

verglichen, den man für unendlich große Teilchenzahl erhält. Dieser Vergleich ist für $N_{1L}^0 = 100$ in Abb. 2 durchgeführt. Die dabei auftretenden statistischen Schwankungen sind eine Folge der endlichen Teilchenzahl (siehe 1.5).

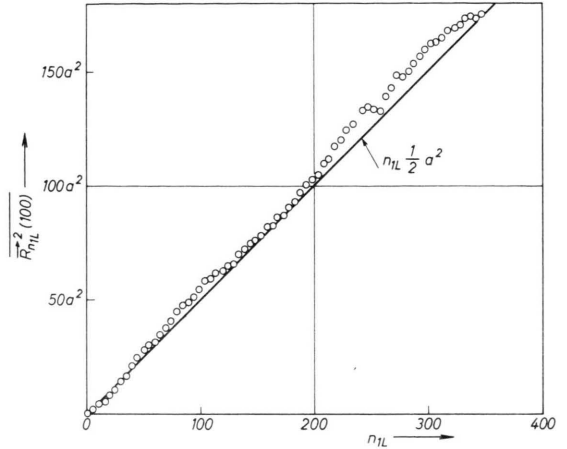


Abb. 2. Mittleres Verschiebungsquadrat $\langle \mathbf{R}_{1L}^2(100) \rangle$ einer Gruppe von 100 Leerstellen im kfz Gitter. Die Zufallswege der Leerstellen wurden mit Pseudozufallszahlen simuliert.

1.3 Modellkristall und Randbedingungen

Grundsätzlich ist es möglich, das Reaktionsgeschehen in einem Makrokristall zu simulieren. Rechenzeit und Speichergröße bedingen aber eine Beschränkung auf Ausschnitte des Kristallgitters. Wir nennen diese Ausschnitte Modellkristalle. In dieser Arbeit werden ausschließlich würfelförmige Modellkristalle betrachtet (Kantenlänge L). Der kleinste Modellkristall enthielt $N_A = 365$, der größte $N_A = 1,135 \cdot 10^5$ Gitterplätze.

Der Modellkristall wird durch Randbedingungen in den Makrokristall eingebettet. Zweierlei Randbedingungen erwiesen sich als praktikabel:

Die von KRISEMENT⁶ vorgeschlagenen *periodischen Randbedingungen* besagen, daß dann, wenn eine Fehlstelle den Modellkristall verlassen würde, ihre Koordinaten modulo L zu reduzieren sind. Gilt also für den Ortsvektor einer Fehlstelle $\mathbf{r}^{(j)} = (x^{(j)}, y^{(j)}, z^{(j)})$ nach einem Sprung beispielsweise

$$|y^{(j)}|, |z^{(j)}| < \frac{1}{2} L; \quad x^{(j)} > \frac{1}{2} L, \quad (1.6)$$

so ist dieser durch $(x^{(j)} - L, y^{(j)}, z^{(j)})$ zu ersetzen.

Ebenfalls leicht zu handhaben sind *reflektierende Wände*. Im Falle der Ungleichungen (1.6) wäre der neue Fehlstellenort durch $(x^{(j)} - a, y^{(j)}, z^{(j)})$ gegeben.

Beiden Randbedingungen ist gemeinsam, daß sich die Teilchenzahl nicht dadurch verringern kann, daß Fehlstellen den Modellkristall verlassen. Sie erweisen sich als gleich brauchbar und führen im Rahmen statistischer Schwankungen zu übereinstimmenden Resultaten. Abb. 3 möge diese Behauptung belegen. Die Abbildung zeigt die in Kapitel 2 ausführlich behandelte Ausscheidung von Leerstellen an einer Senke für die Variante LS₃₀ des Modells LS. Variante LS₃₀ wurde sowohl mit periodischen Randbedingungen als auch mit reflektierenden Wänden durchgespielt.

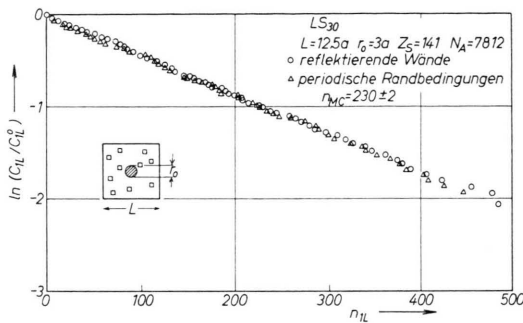


Abb. 3. Vergleich von periodischen Randbedingungen und reflektierenden Wänden für Variante LS₃₀ von Modell LS. $N_A=7812$; $Z_s=141$; Reaktion erster Ordnung.

1.4 Modellexperimente und physikalische Zeitskala

Wir untersuchen in der vorliegenden (Teil I) und in der folgenden Arbeit (Teil II) verschiedene Simulationsmodelle. Jedes Modell wird in einer Anzahl Varianten durchgespielt. Das Durchspielen einer Variante bezeichnen wir als Modellexperiment. In einem Modellexperiment wird stets das Verhalten einer Gruppe von Gitterfehlern untersucht. Hierzu wird durch Markierung der N_F^0 Ausgangsorte $\mathbf{r}_0^{(j,F)}$ [$j=1, 2, \dots, N_F^0$; F =Leerstelle (L_1), Zwischengitteratom Z , Doppelleerstelle (L_2)] eine Anfangskonstellation vorgegeben. In der Regel gehen wir dabei von einer statistischen Anfangsverteilung aus, die mit Hilfe von Pseudozufallszahlen erzeugt werden kann. Gelegentlich werden jedoch auch korrelierte Verteilungen betrachtet (Modell LZK in Teil II).

Sodann werden die Zufallswege und Reaktionen dieser Gruppe verfolgt. Sowohl die Reihenfolge, in

der die Gitterfehler der Sorte F Sprünge ausführen, als auch die Sprungvektoren, mit denen diese Sprünge erfolgen, werden durch Pseudozufallszahlen bestimmt. Sind mehrere Gitterfehler gleichzeitig beweglich, so wird ihre relative Sprunghäufigkeit durch Gewichsfaktoren, die bei den jeweiligen Modellen diskutiert werden, festgelegt. Die Sprungzahl $n_F^{(j)}$ einer jeden Fehlstelle wird registriert und kann zur Ermittlung der gemittelten Sprungzahl

$$n_F = \frac{1}{N'_F} \sum_{j=1}^{N'_F} n_F^{(j)} \quad (1.7)$$

benutzt werden. Gemittelt wird dabei nur über diejenigen N'_F Gitterfehler, die bis zum Zeitpunkt der Mittelung keinerlei Reaktion erfahren haben. Durch dieses Vorgehen wird gewährleistet, daß man mit Hilfe der gemittelten Sprungzahl gemäß

$$t = \Gamma_F n_F \quad (1.8)$$

zu einer physikalischen Zeitskala t übergehen kann. Γ_F ist die Sprunghäufigkeit der Fehlstelle und durch

$$\Gamma_F = Z_F \nu_F^0 \exp(S_F^M/k) \exp(-E_F^M/kT) \quad (1.9)$$

mit der Aktivierungsenergie für die Wanderung E_F^M , der Aktivierungsentropie S_F^M , einem Frequenzfaktor ν_F^0 von der Größenordnung der Debye-Frequenz und einem geometrischen Faktor Z_F ($Z_F=12$ für L_1 im kfz Gitter) verknüpft. T ist die absolute Temperatur und k die Boltzmann-Konstante.

1.5 Statistische Schwankungen

Die mittlere statistische Schwankung δ bezogen auf die Gesamtzahl von N_F Teilchen ist durch

$$\delta/N_F = (N_F)^{-1/2} \quad (1.10)$$

gegeben. Sie wird um so kleiner, je mehr Teilchen man unter gleichen Bedingungen zählt. Die Forderung praktikabler Rechenzeit begrenzt jedoch die Teilchenzahl einer Gruppe nach oben sehr stark. Wir beginnen ein Modellexperiment in der Regel mit $N_F^0=100$ und brechen es ab, wenn $N_F < N_F^0/10$ geworden ist. Um die Schwankungen zu verkleinern, wurde jede Variante eines Modells viermal mit verschiedenen Pseudozufallszahlen durchgespielt. Angegeben werden in den Abbildungen stets Mittelwerte aus sämtlichen Spielen. Im ungünstigsten Falle sind daher die eingezeichneten Punkte Mittelwerte von 40, im günstigsten von 400 Teilchen.

2. Ausscheidung von Leerstellen an Senken unveränderlicher Größe

Die Hamsche Theorie² der Ausscheidung aus einer übersättigten festen Lösung an einer unveränderlichen Senke ist ein Standardbeispiel für die Anwendung der Diffusionstheorie auf Ausscheidungsvorgänge in Festkörpern. Wir vergleichen in diesem Kapitel die Resultate der Modellexperimente mit denjenigen der Diffusionstheorie.

2.1 Modell LS

In kubisch-flächenzentrierten und kubisch-primitiven Modellkristallen wurden die Zufallswege einer Gruppe von Einfachleerstellen (L_1) verfolgt. Hierzu geben wir zu Beginn jedes Modellexperiments eine statistische Anfangsverteilung der L_1 im Kristall vor, indem wir ihre Ortskoordinaten durch je 3 ganze Pseudozufallszahlen markieren.

Die Zufallswege von irgend zwei L_1 werden als voneinander unabhängig behandelt. Dies bedeutet physikalisch, daß von der Bildung von Agglomeraten abgesehen wird. (Der Einfluß der Doppelleerstellen auf die Ausscheidungskinetik ist Gegenstand der Untersuchungen von Modell LDS.) Damit beschränken wir uns in Modell LS auf die Untersuchung von Ausscheidungsvorgängen bei sehr kleinen Konzentrationen.

In der Mitte des Modellkristalls befindet sich eine Senke, bestehend aus Z_s Gitterpunkten. Eine volumengleiche Einfangkugel besitzt den Radius

$$r_0 = \left(\frac{3}{4} \pi Z_s \Omega\right)^{1/3}. \quad (2.1)$$

Dabei bedeutet Ω das Atomvolumen. Gelangt eine L_1 während ihres symmetrischen Zufallsweges auf einen Gitterplatz der Senke, so wird sie ausgeschieden. Eine Wechselwirkung zwischen Senke und L_1 , die sich durch eine Modifizierung der Sprungwahrscheinlichkeiten in der Umgebung der Senke modellmäßig erfassen ließe, lassen wir unberücksichtigt, ebenso wie eine Veränderung der Senke durch die ausgeschiedenen L_1 .

Mit diesem Modell untersuchen wir bei verschiedenen Senkengrößen und in verschiedenen Modellkristallen den Verlauf der Relativkonzentration $C_r = N_{1L}/N_{1L}^0$ als Funktion der gemittelten Sprungzahl n_{1L} .

2.2 Ergebnisse des Modells LS

Die Ausscheidung läßt sich für alle untersuchten Varianten im gesamten Konzentrationsbereich

durch eine Reaktion erster Ordnung beschreiben. Es gilt also für die Relativkonzentration

$$C_r(n_{1L}) = \exp(-n_{1L}/n_{MC}). \quad (2.2)$$

Wir bezeichnen n_{MC} (MC für Monte Carlo) im folgenden als mittlere Sprungzahl¹¹. Eine Abweichung von diesem Verlauf wurde auch im Anfangsstadium der Ausscheidung $n_{1L} \ll n_{MC}$ nicht gefunden. Wir belegen diese Feststellungen durch zwei Diagramme. Abb. 4 zeigt die Reaktion erster Ordnung in einem kubisch-flächenzentrierten Modellkristall von $N_A = 4631$ Atomen für die Varianten LS_{12} , LS_{13} , LS_{14} und LS_5 , die sich durch verschiedene Senkengröße unterscheiden. Denselben Sachverhalt spiegelt Abb. 3 für einen Modellkristall von 7812 Atomen und eine Senke von $Z_s = 141$ Gitterpunkten (in dieser Abbildung ist zudem der bereits besprochene Vergleich

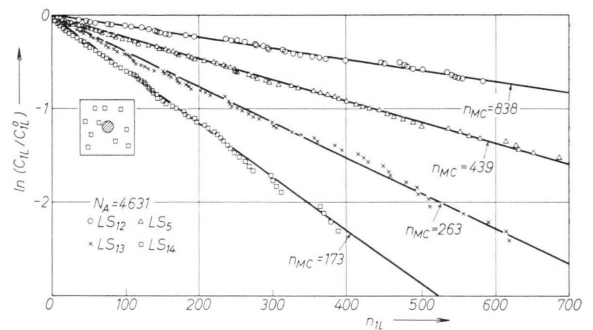


Abb. 4. Ausscheidung von Leerstellen an Senken verschiedener Größe in einem kfz Modellkristall. Reaktion erster Ordnung. $N_A = 4631$.

der Randbedingungen ausgeführt). Somit können wir das Ergebnis eines Modellexperiments durch die mittlere Sprungzahl n_{MC} charakterisieren, wie dies in den Tab. 2, 3 und 4 geschehen ist. Die beiden Tab. 2 und 3 enthalten die Resultate für kubisch-flächenzentrierte Modellkristalle, die vierte diejenigen für das kubisch-primitive Gitter.

2.3 Vergleich mit der Kontinuumstheorie

Die Hamsche Theorie liefert für den zeitlichen Verlauf des Mittelwerts der Konzentration

$$C(t) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \exp(-t/\tau_i), \quad (2.3)$$

wobei $\tau_i \equiv 1/D \lambda_i^2$ (2.4)

¹¹ Eine Verwechslung der mittleren Sprungzahl mit der durch Gl. (1.7) definierten gemittelten Sprungzahl ist wohl nicht zu befürchten.

Variante	$L[a]$	Z_s	N_A	n_{MC}	n_K
LS ₁	4,5	55	365	14,6	30
LS ₂	5,5	55	665	37,5	60,2
LS ₃	6,5	55	1098	72	107
LS ₄	7,5	55	1687	126	172
LS ₅	10,5	55	4631	439	530
LS ₆	15,5	55	14900	1845	1990
LS ₇	20,5	55	34500	4590	4560
LS ₈	30,5	55	113500	17100	17030
LS ₉	5,5	13	665	105,5	117
LS ₁₀	5,5	19	665	79,7	98,7
LS ₁₁	5,5	43	665	45,2	67,5
LS ₁₂	10,5	19	4631	838	825
LS ₁₃	10,5	141	4631	263	349
LS ₁₄	10,5	201	4631	173	296
LS ₁₅	20,5	453	34500	1920	1920
LS ₁₆	20,5	1072	34500	1160	1365
LS ₁₇	20,5	2094	34500	540	960

Tab. 2. Leerstellenausscheidung an Senken in kubisch-flächenzentrierten Modellkristallen verschiedener Größe (Modell LS).

Variante	Z_s	n_{MC}	n_K	n_K/n_{MC}	r_0/R_s
LS ₂₀	1	9400	4380	0,466	0,0502
LS ₂₁	4	3420	2630	0,77	0,0798
LS ₂₂	Tetraeder 6	2740	2270	0,83	0,0915
	Oktaeder				
LS ₂₃	13	1810	1672	0,92	0,1185
LS ₂₄	19	1470	1438	0,98	0,1340
LS ₂₅	38	1125	1092	0,97	0,1686
LS ₂₆	68	850	855	1,01	0,205
LS ₂₇	141	610	626	1,03	0,2615
LS ₂₈	188	510	548	1,07	0,2885
LS ₂₉	266	373	469	1,26	0,323
LS ₃₀	453	230	367	1,59	0,386
LS ₃₁	763	136	291	2,14	0,453

Tab. 3. Ausscheidung von Leerstellen an Senken verschiedener Größe in einem kubisch-flächenzentrierten Modellkristall von $N_A=7812$ Atomen (Modell LS).

Variante	$L[a]$	Z_s	n_{MC}	n_K
LS ₄₀	5	19	6,3	18,4
LS ₄₁	7	19	35,5	58,6
LS ₄₂	9	19	98,7	136,5
LS ₄₃	11	19	224	268
LS ₄₄	13	19	415	462
LS ₄₅	15	19	700	736
LS ₄₆	17	19	1120	1100
LS ₄₇	21	19	2180	2190
LS ₄₈	31	19	7480	7400
LS ₄₉	9	57	40,5	82,6
LS ₅₀	11	57	119	164
LS ₅₁	13	57	237	287
LS ₅₂	15	57	424	463
LS ₅₃	17	57	711	695

Tab. 4. Ausscheidung von Leerstellen an Senken in kubisch-primitiven Modellkristallen (Modell LS).

gilt. D ist die Diffusionskonstante; λ_i sind die Eigenwerte des zugehörigen Eigenwertproblems (Diffu-

sionsgleichung plus Randbedingungen). Die a_i sind durch die Anfangskonzentration festgelegt. Für große Zeiten überwiegt das Glied mit der größten Relaxationszeit τ_0 . Hingegen wird das Anfangsverhalten durch die Anlaufsterme mit kürzeren Relaxationszeiten τ_i mitbestimmt.

Für eine kugelförmige Senke vom Radius r_0 im Zentrum eines ebenfalls kugelförmigen Senkeneinzugsgebiets vom Radius R_s ergibt sich der niedrigste Eigenwert zu

$$\lambda_0^2 = \frac{3 r_0}{R_s^3} \left(1 + \frac{9}{5} \frac{r_0}{R_s} \right). \quad (2.5)$$

Da in den Modellexperimenten keinerlei Anzeichen für Anlaufvorgänge gefunden wurden, ziehen wir zum Vergleich mit der Kontinuumstheorie deren niedrigsten Eigenwert heran. Hierzu identifizieren wir das Volumen des Senkeneinzugsgebietes mit demjenigen des Modellkristalls

$$\frac{4}{3} \pi R_s^3 = N_A \Omega \quad (2.6)$$

und ordnen über die Einsteinsche Beziehung der Relaxationszeit τ_0 eine kontinuumstheoretische mittlere Sprunghzahl

$$n_K = 6/\lambda_0^2 s_0^2 \quad (2.7)$$

zu, die unmittelbar mit n_{MC} vergleichbar ist. s_0 ist der Betrag des Sprungvektors ($s_0 = a \sqrt{2}$ im kfz Gitter). In den Tab. 2 und 4 sind die Werte n_K mit angegeben. Einen Vergleich von n_{MC} und n_K enthalten die Abb. 5 und 6. Abb. 5 gilt für feste Senkengröße ($r_0 = 1,48 a$ beim kfz Modellkristall; $r_0 = 1,655 a$ beim kpr Modellkristall) und variable

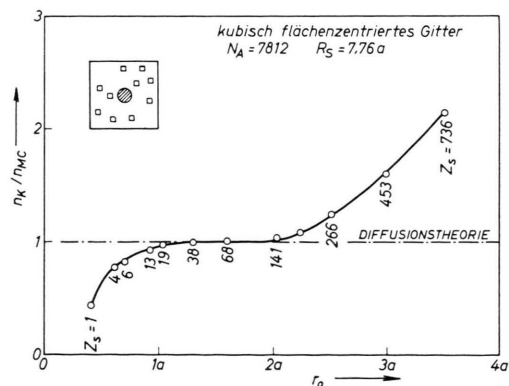


Abb. 5. Vergleich der mittleren Sprunghzahlen, die sich für Leerstellenausscheidung aus Modellexperimenten (n_{MC}) und aus der Kontinuumstheorie (n_K) ergeben. Z_s ist die Zahl der Gitterpunkte in der Senke. Erschwerte Ausscheidung bei kleinen Senken ($Z_s < 19$).

Größe des Modellkristalls. Der Abb. 6 liegt bei variabler Senkengröße ein Modellkristall von $N_A = 7812$ Atomen zugrunde.

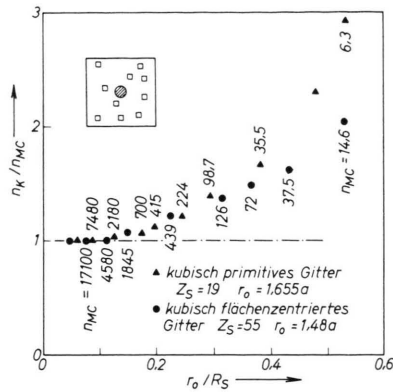


Abb. 6. Beschleunigte Ausscheidung für kleine mittlere Sprungzahlen (Vergleich von n_{MC} und n_K).

Bei quantitativem Vergleich von n_{MC} und n_K lassen sich zwei Fälle unterscheiden:

a) *Erschwerte Ausscheidung bei sehr kleinen Senken*

Bei Senken, welche nur wenige Gitterpunkte enthalten, wird die kontinuumstheoretisch zu erwartende Sprungzahl n_K im Modellexperiment beträchtlich überschritten. Abb. 6 zeigt dieses Verhalten bei Senken von $Z_s = 1, 4, 6, 13$ und 19 Gitterpunkten. Dieses Resultat ist in guter Übereinstimmung mit Modellexperimenten von STREDA¹².

Für den Fall der Punkt Senke ($Z_s = 1$) ist ein direkter Vergleich mit einer analytischen Untersuchung möglich. Nach VINEYARD⁷ ist die Zahl verschiedener Gitterpunkte S_n , die von einem Zufallsweg von n Sprüngen besucht werden, bei großem n durch $S_n = b \cdot n$ gegeben. b ist eine durch die Gitterstruktur bestimmte Konstante ($b = 0,7437$ für kfz Gitter). Damit gilt für die mittlere Sprungzahl zum Erreichen der Punkt Senke

$$n_p = N_A/b. \quad (2.8)$$

Die Diskrepanz zur Kontinuumstheorie $n_K/n_p = 0,418$ stimmt mit derjenigen gut überein, die im Modellexperiment LS₂₀ (Fall der Punkt Senke) beobachtet wird (siehe Tab. 3). Sie ist eine direkte Folge der diskreten Natur des Gitters.

¹² P. STREDA, Jül-Conf 2 (Vol. II) 1968 (S. 659).

¹³ J. R. BEELER, JR., Phys. Rev. **134**, A 1396 [1964].

b) *Beschleunigte Ausscheidung bei kleinen mittleren Sprungzahlen*

Eine weitere Einschränkung der Gültigkeit der Kontinuumstheorie ergibt sich, wenn die Ausscheidung mit kleinen mittleren Sprungzahlen erfolgen kann. Hierbei tritt eine beschleunigte Ausscheidung auf, die für $n_{MC} < 10^3$ an sämtlichen Varianten beobachtet wurde (siehe Abb. 6). Bereits BEELER¹³ hat auf diese Erscheinung hingewiesen. Sie ist nicht, wie man vermuten könnte, durch höhere Eigenwerte der Diffusionstheorie erklärbar, sondern eine direkte Folge statistischer Schwankungen in der Defektverteilung, die von der Diffusionstheorie nicht erfaßt werden.

3. Ausscheidung von Leerstellen und Doppelleerstellen

Schreckt man Metalle von hohen Temperaturen ab, so werden im allgemeinen nicht nur Einfachleerstellen (L_1), sondern auch Doppelleerstellen (L_2) und eventuell höhere Agglomerate von Leerstellen im Gitter eingefroren. Von entscheidender Bedeutung für die Erholungskinetik sind die L_2 , die nach DAMASK, DIENES und WEIZER¹⁴ sowie SCHOTTKY¹⁵ in kfz Metallen als beweglichstes aller Leerstellenagglomerate anzusehen sind.

Die Modelluntersuchungen dieses Kapitels sind dem Einfluß der L_2 auf die Ausscheidungskinetik gewidmet.

3.1 Modell LDS

In einem kubisch-flächenzentrierten Modellkristall ($N_A = 7812$) wird eine statistische Anfangsverteilung von N_{1L}^0 Einfachleerstellen und N_{2L}^0 Doppelleerstellen vorgegeben. Als Randbedingungen wählen wir reflektierende Wände, um Komplikationen zu vermeiden, die bei periodischen Randbedingungen mit der L_2 auftreten würden.

Wir charakterisieren den symmetrischen Zufallsweg der L_1 durch ihre Sprunghäufigkeit

$$I_{1L} = 12 \nu_1^0 \exp(S_1^M/k) \exp(-E_1^M/kT) \quad (3.1)$$

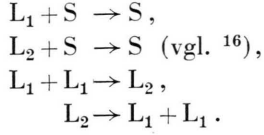
und denjenigen der L_2 durch

$$I_{2L} = 8 \nu_2^0 \exp(S_2^M/k) \exp(-E_2^M/kT), \quad (3.2)$$

¹⁴ A. C. DAMASK, G. J. DIENES u. A. C. WEIZER, Phys. Rev. **113**, 781 [1959].

¹⁵ G. SCHOTTKY, Z. Phys. **160**, 16 [1960].

wobei S_i^M Wanderungsentropien, E_i^M Wanderungsenergien und ν_i^0 Frequenzfaktoren bedeuten. Im Zentrum des Modellkristalls befindet sich eine unveränderliche Senke S ($Z_s = 141$). Folgende Reaktionen werden zugelassen:



Die Zerfallswahrscheinlichkeit der L_2 ist über

$$I_{2L}^{(Z)} = 14 \nu_1' \exp\{- (E_1^M + B_2)/kT\} \quad (3.3)$$

mit ihrer Bindungsenergie B_2 verknüpft. Zerfällt eine L_2 , so wird angenommen, daß sich nach dem Zerfallssprung die Einfachleerstellen sofort frei bewegen. Eine Bindung, die über nächste Nachbarplätze im Gitter hinausreicht, tritt also nicht auf. Fernerhin vernachlässigen wir die Bildung höherer Agglomerate.

Den Zustand des Modellkristalls kennzeichnen wir durch die Zahl N_{1L} und N_{2L} der im jeweiligen Moment vorhandenen L_1 bzw. L_2 . Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein L_1 - bzw. ein L_2 -Sprung erfolgt, ist durch

$$W_{1L, 2L} = \frac{N_{1L, 2L} I_{1L, 2L}}{N_{1L} I_{1L} + N_{2L} I_{2L} + N_{2L} I_{2L}^{(Z)}}, \quad (3.4)$$

diejenige für einen L_2 -Zerfall durch

$$W_{2L}^{(Z)} = \frac{N_{2L} I_{2L}^{(Z)}}{N_{1L} I_{1L} + N_{2L} I_{2L} + N_{2L} I_{2L}^{(Z)}} \quad (3.5)$$

gegeben. Die W_j sind nach jeder Reaktion neu zu berechnen. Eine geeignete Zeitskala der Modellexperimente LDS ist die gemittelte Sprungzahl

$$n_{1L} = \frac{1}{N_{1L}} \sum_{i=1}^{N_{1L}} n_{1L}^{(i)} \quad (3.6)$$

der L_1 , die durch Mittelung über diejenigen $N_{1L}' L_1$, die niemals an ein zweite L_1 gebunden waren, entsteht. Durch dieses Vorgehen wird gewährleistet, daß man mittels Gl. (1.8) sofort zu einer physikalischen Zeitskala übergehen kann. n_{1L} hängt gemäß

$$I_{2L} n_{1L} = I_{1L} n_{2L} \quad (3.7)$$

mit der gemittelten L_2 -Sprungzahl n_{2L} zusammen.

¹⁶ Eine L_2 wird ausgeschieden, sobald eine der beiden L_1 auf einen Gitterplatz von S springt.

3.2 Ergebnisse von Modell LDS

Parameter der Modellexperimente LDS enthält Tab. 5. Sie sind auf die Verhältnisse bei kfz Me-

Variante	$10^3 \cdot C_{1L}^0$	$2 \cdot 10^3 \cdot C_{2L}^0$	I_{1L}	I_{2L}	$I_{2L}^{(Z)}$
LDS ₁	8,72	1,28	1	20	0,05
LDS ₂	8,72	1,28	1	100	0,01
LDS ₃	8,72	1,28	1	500	0,01
LDS ₄	8,84	1,16	1	2000	0,01
LDS ₅	8,84	1,16	1	500	0,2
LDS ₆	8,84	1,16	1	500	1

Tab. 5. Parameter der Varianten von Modell LDS; $N_A = 7812$, $Z_s = 141$, $C_{1L}^0 = C_{1L}^0 + 2 C_{2L}^0 = 10^{-2}$.

tallen zugeschnitten, wo die L_2 wesentlich beweglicher ist als die L_1 (vgl. ¹⁷). Wir messen die Sprunghäufigkeiten I_{1L} , I_{2L} sowie die Zerfallswahrscheinlichkeit $I_{2L}^{(Z)}$ in Einheiten I_{1L} . Die Anfangskonzentration C_{1L}^0 ist diejenige Konzentration von L_2 , die bei Erzeugung einer statistischen Anfangsverteilung von L_1 zufällig entsteht.

Ergebnisse der Varianten LDS₃ bis LDS₆ enthält die Abb. 7. Die Ausscheidung erfolgt nach einer Reaktion zweiter Ordnung, deren Reaktionskonstante K_{LDS} von der Variante abhängt. Komplizierter liegen die Verhältnisse bei LDS₁ und LDS₂, wie die Analyse dies für Variante LDS₂ in Abb. 8 zeigt.

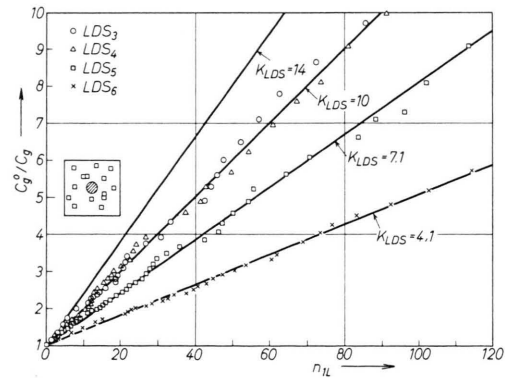


Abb. 7. Ausscheidung von Einfach- und Doppelleerstellen an einer Senke in einem kfz Modellkristall ($N_A = 7812$, $Z_s = 141$). Reaktion zweiter Ordnung.

Weitere Resultate enthält Tab. 6. γ_{1L} ist der Anteil von Gitterlücken, die als L_1 ausgeschieden werden; γ_{2L} derjenige, der in Form von L_2 ausgeschie-

¹⁷ Siehe z. B.: A. SEEGER u. D. SCHUMACHER, Lattice Defects in Quenched Metals, herausgegeben von R. M. J. COTTE-RILL, M. DOYAMA, J. J. JACKSON u. M. MESHII, Academic Press Inc., New York 1965.

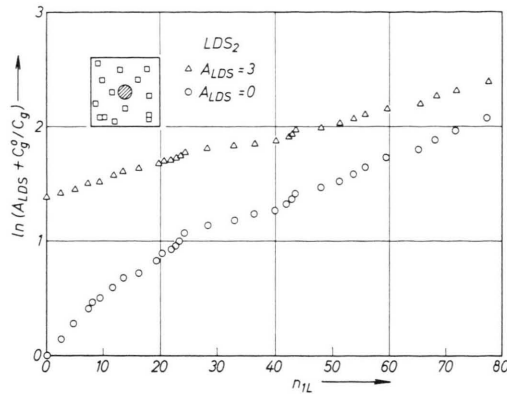


Abb. 8. Ausscheidung von Einfach- und Doppelleerstellen an einer Senke in einem kfz Modellkristall ($N_A = 7812$, $Z_8 = 141$).
Quadratisch plus lineares Zerfallsgesetz.

den wird. In allen Varianten werden über 75% der Gitterlücken als L_2 in die Senke transportiert, obwohl in jedem Zeitpunkt der Ausscheidung $C_{1L} \gg C_{2L}$ gilt. Die Größen γ_{1L} und γ_{2L} können einer reaktionskinetischen Behandlung nicht entnommen werden.

Variante	K	γ_{1L}	γ_{2L}	K_{LDS}
LDS ₁	4,25	0,233	0,767	
LDS ₂	12,75	0,148	0,852	
LDS ₃	13,8	0,127	0,873	10
LDS ₄	13,93	0,091	0,909	10
LDS ₅	10,22	0,197	0,803	7,1
LDS ₆	4,93	0,114	0,866	4,1

Tab. 6. Vergleich von Reaktionskinetik und Modell LDS;
 $K = B/n_{MC, 1L}$.

3.3 Vergleich mit Ratengleichungen

Eine reaktionskinetische Behandlung des beschriebenen Modells haben DAMASK und DIENES¹ versucht. Die Ratengleichungen lassen sich in der folgenden Weise anschreiben:

$$\frac{dC_{1L}}{dn_{1L}} = -14 C_{1L}^2 + \frac{1}{n_{MC, 1L}} C_{1L}, \quad (3.8)$$

$$\frac{dC_{2L}}{dn_{1L}} = 7 C_{1L}^2 - \frac{\Gamma_{2L}^{(Z)}}{\Gamma_{1L}} C_{2L} - \frac{1}{n_{MC, 2L}} \cdot \frac{\Gamma_{2L}}{\Gamma_{1L}} C_{2L}. \quad (3.9)$$

Dabei ist $n_{MC, 1L}$ die mittlere Sprungzahl der L_1 und $n_{MC, 2L}$ diejenige der L_2 . Variante LS₃₀ von Modell LS entnimmt man $n_{MC, 1L} = 230$. Außerdem gilt

$$n_{MC, 2L} = 4 n_{MC, 1L}. \quad (3.10)$$

Die Abnahme der Gesamtkonzentration

$$C_g = C_{1L} + 2 C_{2L} \quad (3.11)$$

ist durch

$$\frac{dC_g}{dn_{1L}} = -\frac{1}{n_{MC, 1L}} C_{1L} - \frac{1}{2 n_{MC, 1L}} \cdot \frac{\Gamma_{2L}}{\Gamma_{1L}} C_{2L} \quad (3.12)$$

gegeben.

Eine geschlossene Lösung dieses nichtlinearen Systems von Differentialgleichungen erster Ordnung ist nicht möglich. Man muß sich mit der Diskussion von Näherungslösungen begnügen. Wir greifen zwei der interessantesten Grenzfälle heraus und vergleichen sie mit Modellexperimenten:

a) Quadratischer plus linearer Zerfall

Einen wichtigen Spezialfall erhält man, wenn man die „steady-state“-Bedingung $dC_{2L}/dn_{1L} = 0$ zugrunde legt. Sie besagt, daß genau so viel L_2 neu gebildet werden wie durch Zerfall und Ausscheidung verloren gehen. Als Reaktionsgleichung ergibt sich für C_g ($C_g \approx C_{1L}$)

$$\frac{dC_g}{dn_{1L}} = -\frac{1}{n_{MC, 1L}} (C_g + B C_g^2) \quad (3.13)$$

mit einem quadratischen und einem linearen Teil mit einem quadratischen und einem linearen Term in C_g , wobei

$$B = 14 \frac{\Gamma_{2L}/4 \Gamma_{1L}}{\Gamma_{2L}^{(Z)}/\Gamma_{1L} + \Gamma_{2L}/4 n_{MC, 1L} \Gamma_{1L}} \quad (3.14)$$

gilt. Die Integration liefert mit $A = B C_g^0$

$$\ln\left(\frac{C_g^0}{C_g} + A\right) \frac{1}{n_{MC, 1L}} n_{1L} + \ln(1 + A). \quad (3.15)$$

Qualitative Übereinstimmung mit Gl. (3.15) zeigt die Kinetik der Varianten LDS₁ und LDS₂. Abb. 8 möge für LDS₂ diese Behauptung belegen. Vergleichsweise geringe Beweglichkeit der L_2 ($100 \Gamma_{1L} > \Gamma_{2L} > \Gamma_{1L}$) ist, man vergleiche Tab. 5, die Bedingung des Zustandekommens eines quadratisch plus linearen Zufallsgesetzes. Ein quantitativer Unterschied zwischen Modellexperiment und Gl. (3.15) zeigt sich darin, daß $A_{LDS} < A$ gilt.

b) Quadratischer Zerfall

Erfolgt die L_2 -Bewegung sehr viel schneller als die Wanderung der L_1 ($\Gamma_{2L} > 100 \Gamma_{1L}$), so läßt sich aus den Gln. (3.8) und (3.9) ein quadratischer Zerfall (Reaktion zweiter Ordnung) der Gitterlückenübersättigung gemäß

$$\frac{dC_g}{dn_{1L}} = -K C_g^2 \quad (3.16)$$

ableiten mit der Reaktionskonstante

$$K = 14 \frac{I_{2L/4} I_{1L} n_{MC, 1L}}{I_{2L}^{(Z)} / I_{1L} + I_{2L/4} I_{1L} n_{MC, 1L}}. \quad (3.17)$$

Die Varianten LDS₃ bis LDS₆ (Abb. 7) sind Beispiele für einen in Modellexperimenten beobachteten quadratischen Zerfall. Die Reaktionskonstante hingegen wird vom reaktionskinetischen Ansatz nicht richtig wiedergegeben. $K_{LDS} = 10$ stellte für sämtliche Varianten eine obere Grenze dar. Obwohl von LSD₃ nach LDS₄ die Beweglichkeit der L₂ vervierfacht wurde (bei Beibehaltung aller übrigen Parameter), ergab sich keine weitere Steigerung von K_{LDS} mehr.

Qualitativ richtig wiedergegeben wird der Einfluß des L₂-Zerfalls durch Gl. (3.17) (s. Tab. 6). Zunehmende Zerfallswahrscheinlichkeit (LDS₃ → LDS₅ → LDS₆) verkleinert K_{LDS} . Jedoch ist in jedem Falle die reaktionskinetisch vorhergesagte Reaktionskonstante größer als diejenige, die sich aus den physikalisch realistischeren Modellexperimenten ergibt ($K_{LDS} < K$). Diese Aussage gilt sowohl für quadratischen als auch für quadratisch plus linearen Zerfall.

Herrn Professor Dr. A. SEEGER danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit sowie für wertvolle Diskussionen herzlich.

Zufallswege und Reaktionen atomarer Gitterfehler in Modellkristallen

II. Rekombination von Zwischengitteratomen und Leerstellen *

HELMUT MEHRER

Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Universität Stuttgart
und Institut für Physik am Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart

(Z. Naturforsch. **24 a**, 367–376 [1969]; eingegangen am 15. November 1968)

Random walks and reactions of point defects in face-centered cubic lattices have been simulated by means of a Monte-Carlo method described in the preceding paper (I). In this paper the method is applied to the recombination of vacancies and interstitials. Equal or different numbers as well as random or correlated initial distribution of vacancies and interstitials are considered. The interaction between the defects is taken into account by a model for the pair volume surrounding a vacancy.

In Teil I¹ wurde ein Monte-Carlo-Verfahren zur Simulation der Erholungskinetik atomarer Gitterfehler beschrieben und auf die Ausscheidung von leeren Gitterplätzen angewendet. Seine Vorzüge gegenüber Ratengleichungen und Diffusionstheorie wurden diskutiert. Beispielsweise gestattet die Methode eine exakte Behandlung der Zufallswege in einem Kristallgitter und berücksichtigt Fluktuations-effekte der Defektverteilung automatisch.

Der vorliegende Teil II ist der Behandlung der Rekombination von Zwischengitteratomen (Z) und Leerstellen (L₁) in kubisch-flächenzentrierten Modellkristallen gewidmet.

Dabei soll generell vorausgesetzt werden, daß die L₁ unbeweglich sind. Diese Annahme bedeutet solange keinen Verlust an Allgemeinheit, wie man unkorrelierte Bewegungen betrachtet, da sich dann die

Einzelbeweglichkeiten einfach addieren würden. Zudem trifft sie auf die Verhältnisse bei Metallen sehr gut zu, wo sich in allen untersuchten Fällen die Wanderungsenergie der Z kleiner als diejenige der L₁ erwies.

Die Umgebung einer L₁ teilen wir in drei Bereiche ein:

1. Bei kleinen Abständen ist das von L₁ und Z gebildete Frenkel-Paar instabil. Spontane Rekombination führt zu seiner Vernichtung. Die Gesamtheit aller instabilen Zwischengitterplätze in der Umgebung einer L₁ bezeichnen wir als *Annihilationsvolumen*. Rechnungen von GIBSON et al.² führten für ein auf Cu zugeschnittenes Modell auf einen Wert von $\alpha_0 = 71$ instabilen Plätzen. Mit einem ähnlichen Modell für Ni fand JOHNSON³ $\alpha_0 = 32$. Die Analyse der Bestrahlungserholung⁴ führte für Cu

* Dissertation, Teil II, Universität Stuttgart 1968.

¹ H. MEHRER, Z. Naturforsch. **24 a**, 358 [1969]; voranstehende Arbeit. Im folgenden mit I bezeichnet. Siehe auch: Jül-Conf 2 (Vol. II) 1968 (S. 643).

² J. G. GIBSON, A. N. GOLAND, M. MILGRAM u. G. H. VINEYARD, Phys. Rev. **120**, 1229 [1960].

³ R. A. JOHNSON, Phys. Rev. **145**, 423 [1966].

⁴ G. BURGER, H. MEISSNER u. W. SCHILLING, Phys. Status Solidi **4**, 281 [1964].