

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

	$\bar{\sigma}(\Omega)$ (cm <sup>2</sup> )	$\bar{\sigma}(\Omega)$ (cm <sup>2</sup> ) <sup>25</sup>	$\bar{\sigma}$ (cm <sup>2</sup> ) <sup>24</sup>
3 <sup>1</sup> D	6 · 10 <sup>-14</sup>		
4 <sup>1</sup> D	4 · 10 <sup>-14</sup>	4 · 10 <sup>-14</sup>	
5 <sup>1</sup> D	7 · 10 <sup>-14</sup>		
6 <sup>1</sup> D			5,7 · 10 <sup>-14</sup>
7 <sup>1</sup> D			8,5 · 10 <sup>-14</sup>

Tab. 4.

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

tation“-Prozeß<sup>24</sup> angeregter Zustände durch Stöße mit anderen Atomen in der Größenordnung vergleichbar. Auch hier ist der oben diskutierte Einfluß des Kaskadenüberganges aus dem 4<sup>1</sup>F-Zustand deutlich erkennbar. Der in Tab. 4 angegebene Wirkungsquerschnitt ist für den 3<sup>1</sup>D-Zustand als Summe der Wirkungsquerschnitte des 3<sup>1</sup>D- und 4<sup>1</sup>F-Zustandes mit verschiedenen Gewichten anzusehen.

Dem Direktor des I. Physikalisches 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.

<sup>25</sup> 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. Üblicherweise<sup>1</sup> 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. HAM<sup>2</sup> untersucht mit Hilfe der Diffusionsgleichung die Ausscheidung aus einer übersättigten Lösung an Senken. FLYNN<sup>3</sup> diskutiert

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 Theorie<sup>4</sup> gibt eine Beschreibung einer diffusionsgehennten, bimolekularen Reaktion in einem Kontinuum.

Sowohl die Hamsche als auch die Waitesche Theorie sind Kontinuums-theorien. 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 Fällen<sup>5</sup> 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.

KRIEMENT<sup>6</sup> 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 VINEYARD<sup>7</sup>, MONTROLL<sup>8</sup> sowie POLYA<sup>9</sup> 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 SCHOLZ<sup>10</sup> 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 Simulationsmethode

#### 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  $s[h_i]$ . Im allgemeinen kann ein Gitterfehler nur Sprünge zu den nächsten Nachbarpositionen ausführen. Es exi-

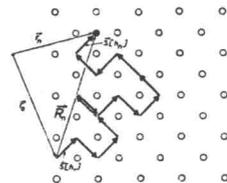


Abb. 1. Zufallsweg eines Zwischengitteratoms in einem zweidimensionalen Gitter.

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	A	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	$H_0$
$L_1$ und Z	$s_x$	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	1	1	1
im kfz	$s_y$	0	0	1	1	0	0	1	1	1	1	1	1	12
Gitter	$s_z$	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	
$L_1$ im	$s_x$	2	2	0	0	0	0							
kpr Gitter	$s_y$	0	0	2	0	0								6
	$s_z$	0	0	0	2									
$L_1$ im	$s_x$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
krz Gitter	$s_y$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	8
	$s_z$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	

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

\* Dissertation, Teil I, Universität Stuttgart 1968.

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

<sup>2</sup> F. S. HAM, J. Phys. Chem. Solids 6, 335 [1958].

<sup>3</sup> C. P. FLYNN, Phys. Rev. 133, A 587 [1964].

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

<sup>5</sup> W. FRANK, Diplomarbeit, Universität Stuttgart 1963.

<sup>6</sup> O. KRIEMENT, Phys. Kondens. Materie 1, 326 [1963].

<sup>7</sup> G. H. VINEYARD, J. Math. Phys. 4, 1141 [1963].

<sup>8</sup> E. W. MONTROLL, J. Soc. Indust. Appl. Math. 4, 241 [1956].

<sup>9</sup> G. POLYA, Math. Ann. 84, 149 [1921].

<sup>10</sup> A. SCHOLZ, Phys. Status Solidi 14, 169 [1966].