

Eigenbewegungen in Kristallen

Von ALFRED SEEGER

Aus dem Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart, und dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart

(Z. Naturforschg. **8a**, 47–55 [1953]; eingegangen am 3. September 1952)

Herrn Professor Erwin Fues zum 60. Geburtstag

Es wird gezeigt, daß das üblicherweise für das Studium von Schraubenversetzungen in kubisch primitiven Gittern benutzte Peierls'sche Modell auch Schwingungsvorgänge unter seinen Lösungen enthält, die sich als Überlagerung unendlich vieler harmonischer laufender Wellen darstellen lassen, und die die besondere Eigenschaft haben, daß sie in einer „Gleitebene“ (in der die Nichtlinearität der Kraftgesetze geeignet berücksichtigt wird) sehr große Verzerrungen aufweisen können. Die größte mögliche gegenseitige Verschiebung zweier Nachbaratome in nebeneinander liegenden Netzebenen ist die Hälfte der Gitterkonstanten. Der Zusammenhang mit entsprechenden Lösungen des Frenkel-Kontorovaschen Versetzungsmodells sowie ihr Auftreten bei Umklappumwandlungen und ihre Bedeutung für die Entstehung von Versetzungspaaren unter Mithilfe thermischer Schwankungen wird besprochen.

Während der letzten Jahre wurde der Begriff der Versetzungen mit wachsendem Erfolg bei der Diskussion verschiedener Probleme der Kristallphysik verwendet. Es gibt heute im wesentlichen zwei Hauptgruppen von Beweisen für die Existenz der Versetzungen in Kristallen. Einen direkten Beweis stellen die Arbeiten über das Kristallwachstum aus Lösungen dar, über das Frank¹ zusammenfassend berichtet hat. Diese Untersuchungen gestatten, einzelne Schraubenversetzungen zu sehen. Eine indirekte, für den Außenstehenden vielleicht nicht ganz so überzeugende Bestätigung für das Vorhandensein von Versetzungen liefert die Gesamtheit der theoretischen und experimentellen Untersuchungen über die Plastizität von Kristallen und damit zusammenhängende Gebiete.

Wäre die potentielle Energie eines Kristalls in Strenge eine quadratische Funktion der Verrückungen der Gitterbausteine, so würde es keine Versetzungen geben. Bei Verrückungen, die nicht mehr klein gegen die Gitterkonstante sind, treten jedoch Abweichungen von der Linearität der Kraftgesetze auf, die weitere Gleichgewichtslagen neben der trivialen des Idealkristalles und damit die Existenz von Versetzungen möglich machen. Indem man diese Nichtlinearitäten geeignet berücksichtigt, erhält man Lösungen der elastischen Gleichungen,

die auch in kontinuierlichen Medien Versetzungen darstellen (siehe hierüber den zusammenfassenden Bericht von Nabarro²).

Das Vorhandensein von Versetzungen legt eine Frage nahe, die bisher noch wenig Beachtung gefunden hat: Gibt es neben den Versetzungen auch noch andere Bewegungsformen, welche in ähnlicher Weise den Nichtlinearitäten in den Kraftgesetzen zwischen den Gitterbausteinen ihre Existenz verdanken?

Wir werden in dieser Mitteilung zeigen, daß diese Frage zu bejahen ist, und wir werden einige Eigenschaften dieser Bewegungsformen an speziellen Modellen studieren. Sie haben vor allem dort physikalische Bedeutung, wo Verrückungen von der Größenordnung der Gitterkonstanten auftreten, z. B. bei der Entstehung von Versetzungspaaren in Gebieten hoher Spannungskonzentration oder bei den sog. Umklappprozessen. Wir werden auf diese Fragen in § 3 kurz eingehen.

§ 1. Eigenbewegungen im Frenkelschen Modell

Nichtlineare Kraftgesetze in der Theorie der Versetzungen wurden bis jetzt in zwei Modellen mathematisch behandelt, dem Frenkel-Kontorovaschen und dem Peierls'schen Versetzungsmodell.

¹ F. C. Frank, Advances in Physics **1**, 91 [1952].

² F. R. N. Nabarro, Advances in Physics **1**, 269 [1952].



Das Frenkelsche Versetzungsmodell³ ist eigentlich ein atomistisches Modell; seine Grundgleichungen wurden jedoch bis jetzt für die Zwecke der praktischen Rechnung stets so vereinfacht, wie es dem Ersatz einer Atomkette durch ein eindimensionales Kontinuum entspricht. Für die Verschiebung $u(x, t)$ der „Atome“ in dieser Kette gegenüber einer festgehaltenen Parallelreihe gilt dann die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{a}{2\pi} \frac{1}{L_0^2} \sin \frac{2\pi u(x, t)}{a}. \quad (1)$$

In Gl. (1) bedeutet v_s die Schallgeschwindigkeit und a die Gitterkonstante. L_0 wird als Versetzungslänge bezeichnet (vgl. Gl. 4); $1/L_0^2$ ist proportional der Amplitude des sinusförmigen Potentials, das von der Parallelreihe auf die Atome ausgeübt wird, deren Verschiebung $u(x, t)$ als Funktion von Ort x und Zeit t betrachtet wird.

Die Frage nach den gleichförmig bewegten Lösungszuständen der Gl. (1) ist leicht zu beantworten, da diese Gleichung dann direkte Integration durch Quadraturen erlaubt.

Die allgemeine Lösung ist für gleichförmige Bewegung mit Unterschallgeschwindigkeit $v < v_s$ ⁴

$$u = \frac{a}{\pi} \arcsin k \operatorname{sn} \left(\frac{x - vt}{L_0 \sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_s} \right)^2}}, k \right) + \pi \quad (2)$$

und mit Überschallgeschwindigkeit $v > v_s$

$$u = \frac{a}{\pi} \arcsin k \operatorname{sn} \left(\frac{vt - x}{L_0 \sqrt{\left(\frac{v}{v_s} \right)^2 - 1}}, k \right). \quad (3)$$

Die Integrationskonstante k liefert reelle Lösungen in beiden Fällen für $0 \leq k < \infty$. Aus energetischen Gründen hat aber von der Lösungsschar (2) wohl nur der Fall $k = 1$

$$u = \frac{2a}{\pi} \operatorname{arctg} \exp \left(\frac{x - vt}{L_0 \sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_s} \right)^2}} \right), \quad (4)$$

der eine gleichförmig bewegte Einzelversetzung darstellt, physikalische Bedeutung.

³ J. Frenkel u. T. Kontorova, Physik. Z. Sowjetunion **13**, 1 [1938]. J. Physics [Moskau] **1**, 137 [1939]; F. C. Frank u. J. H. van der Merwe, Proc. Roy. Soc. [London], Sect. A **198**, 205, 216 [1948]; **200**, 125 [1949]; **201**, 261 [1950]; A. Kochendörfer u. A. Seeger, Z.

Ebenfalls aus energetischen Gründen interessieren wir uns bei Gl. (3) nur für den Fall $0 < k < 1$. Er stellt laufende Wellen dar mit der Wellenlänge

$$\lambda = 4 \mathbf{K}(k) \cdot L_0 \sqrt{\left(\frac{v}{v_s} \right)^2 - 1}, \quad (5)$$

der Frequenz

$$v = \frac{r}{4 \mathbf{K}(k) L_0 \sqrt{\left(\frac{v}{v_s} \right)^2 - 1}} \quad (6)$$

und der Amplitude

$$u_0 = (a/\pi) \arcsin k < a/2. \quad (7)$$

Elimination von v aus Gl. (5) und (6) gibt die Beziehung

$$r = \frac{v_s}{\lambda} \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{4 \mathbf{K} L_0} \right)^2}. \quad (8)$$

Im Grenzfall unendlich großer Wellenlänge (und Phasengeschwindigkeit) schwingt die eine Gitterreihe gegen die andere mit der Grenzfrequenz $v_0 = v_s/4 \mathbf{K} L_0$. In der Bornschen Gittertheorie würde man eine solche Schwingungsform als optische Grenzschwingung bezeichnen. Mit kleiner werdender Wellenlänge steigt aber r nach Gl. (8) stark an, während die optischen Zweige der Gittertheorie eine schwach abnehmende Frequenz besitzen. Dieser Unterschied zeigt, daß wir in Gl. (3) einen Schwingungstyp vor uns haben, der in der linearen Gittertheorie nicht unter den einfachen Wellentypen auftritt.

Für gegebene Amplitude u_0 besteht zwischen Phasengeschwindigkeit v und Gruppengeschwindigkeit $V = \partial v / \partial (1/\lambda)$ die Beziehung

$$V \cdot v = v_s^2. \quad (9)$$

Es mag zunächst zweifelhaft erscheinen, ob es einen Sinn hat, im vorliegenden (nichtlinearen) Fall, in dem ja das Superpositionsprinzip nicht gilt, eine Gruppengeschwindigkeit zu betrachten. Es konnte jedoch gezeigt werden⁵, daß sich die Wellengruppen, die die Relation (9) erfüllen, als Lösungen von Gl. (1) explizit angeben lassen.

In der eben zitierten Arbeit wird auf Grund gewisser Ähnlichkeiten der Lösungen (3) und (4) mit den Eigenschwingungen der Elastizitätstheorie und

Physik **127**, 533 [1950]; A. Seeger u. A. Kochendörfer, Z. Physik **130**, 321 [1951].

⁴ Wegen der Definition der elliptischen Funktionen und Integrale vergleiche man den Anhang.

⁵ A. Seeger, H. Donth u. A. Kochendörfer, Z. Physik, erscheint demnächst.

der linearen Gittertheorie vorgeschlagen, Versetzungen als translatorische Eigenbewegungen und die Lösungen (3) als oszillatorische Eigenbewegungen zu bezeichnen. Die oszillatorischen Eigenbewegungen stellen ein Beispiel für die durch die Nichtlinearität der Kraftgesetze bewirkten Bewegungsformen dar, von denen wir am Ende des einleitenden Abschnitts gesprochen haben.

§ 2. Oszillatorische Eigenbewegungen im Peierls'schen Modell

Das Frenkel-Kontorovasche Versetzungsmodell, das wir im vorstehenden behandelt haben, ist gegenüber der Wirklichkeit so stark vereinfacht, daß man nicht ohne weiteres sagen kann, ob die erhaltenen Ergebnisse allgemeinere Bedeutung haben. Insbesondere erkennt man den physikalischen Zusammenhang der Lösung (3) mit den harmonischen Gitterwellen nicht, obwohl für $u_0 \ll a$ die Nichtlinearität, die in Gl. (1) sich in dem Sinusglied auswirkt, keine Rolle spielen und deshalb keine physikalisch neuen Resultate liefern kann.

Wir betrachten das sog. Peierls'sche Versetzungsmodell⁶, das die geeignete Verbindung von nichtlinearem Kraftgesetz in einer „Gleitebene“ mit der Elastizitätstheorie darstellt und es gestattet, den Zusammenhang zwischen oszillatorischen Eigenbewegungen (die wir auch hier auffinden werden) und elastischen Wellen zu untersuchen.

Dabei benutzen wir einige auch in der Versetzungstheorie übliche Vereinfachungen. Das Problem wird als eben behandelt, Verschiebungen und Spannungen sollen nur von den x - und y -Koordinaten, nicht von der z -Koordinate abhängen. Wir betrachten den bei den Versetzungen der Schraubenversetzung entsprechenden Fall⁷, daß nur eine Verschiebungskomponente in z -Richtung auftritt (mit w bezeichnet). Wird das elastische Medium als isotrop vorausgesetzt (Schubmodul G , Dichte ρ), so sind die einzigen von Null verschiedenen Spannungskomponenten

$$\tau_{zx} = G \frac{\partial w}{\partial x}, \quad \tau_{zy} = G \frac{\partial w}{\partial y}. \quad (10)$$

Die elastischen Grundgleichungen reduzieren sich auf

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}; \quad (11)$$

$c = (G/\rho)^{1/2}$ ist die Schallgeschwindigkeit für Scherungswellen.

Im Peierls'schen Modell wird der Kristall durch einen Schnitt längs der Ebene $y = 0$ in zwei Hälften zerlegt. Da diese Trennebene (bzw. das unmittelbar darüber oder darunter gelegene Netzebenenpaar $y = \pm \frac{1}{2} a$) eine ähnliche Rolle spielt wie die Gleitebene in der Theorie der Versetzungen, nennen wir sie auch hier die Gleitebene. Für $y > y_0$ und $y < -y_0$ wird die Kontinuumstheorie angewandt, dabei wird $w(x, y, t) = -w(x, -y, t)$ angenommen. Als nichtlineare Erweiterung des Hookeschen Gesetzes soll in der Ebene $y = y_0 = \frac{1}{2} a$ die Bedingung

$$\begin{aligned} \tau_{zy}(x, y_0, t) &= \frac{G}{2\pi} \sin \frac{2\pi}{a} [w(x, y_0, t) - w(x, -y_0, t)] \\ &= \frac{G}{2\pi} \sin \frac{4\pi}{a} w(x, y_0, t) \end{aligned} \quad (12)$$

gelten. Gl. (12) stellt die einfachste Relation dar, die ein periodisches Potential für gegenseitige Verschiebungen der Ebenen $y = \pm y_0$ liefert und kann als brauchbare Approximation für den Fall eines kubisch primitiven Gitters angesehen werden. Von der Trägheitswirkung der Masse, die sich zwischen den Ebenen $y = \pm y_0$ befindet, sehen wir ab.

Unsere Aufgabe ist nun mehr, Lösungen der Schwingungsgleichung (11) und der Randbedingungen (12) zu finden, die sich in der Gleitebene wie Gl. (3) verhalten. Eine systematische Lösung macht Gebrauch von dem an anderer Stelle⁸ erwähnten Zusammenhang zwischen dem Peierls'schen und dem Frenkelschen Modell. Wir geben hier der Kürze halber das Resultat an. Es ist

$$w(x, y, t) = \frac{a}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos \left[(2n+1)\pi \frac{(y-d)}{a\alpha} \right] \cdot \sin \left[(2n+1)\pi \frac{(vt-x)}{\alpha a} \left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{-1/2} \right]}{(2n+1) \operatorname{Cof} \left(\frac{2n+1}{2} \pi \frac{\mathbf{K}'}{\mathbf{K}} \right)}. \quad (13)$$

⁶ R. Peierls, Proc. phys. Soc. **52**, 34 [1940]; F. R. N. Nabarro, Proc. phys. Soc. **59**, 256 [1947].

⁷ G. Leibfried u. H.-D. Dietze, Z. Physik **126**, 790 [1949].

⁸ A. Seeger u. A. Kochendörfer, Z. Physik **130**, 321 [1951], Abschn. 6.

$\mathbf{K} = \mathbf{K}(k)$ und $\mathbf{K}' = \mathbf{K}(k')$ sind vollständige elliptische Integrale 1. Gattung. Der Zusammenhang ihres Moduls k mit der Größe d wird später angegeben werden. Man sieht sofort, daß jedes Glied der Summe (13) die Gl. (11) erfüllt; somit ist auch die unendliche Reihe eine Lösung dieser Gleichung. Wir werden nun zeigen, daß durch geeignete Wahl der Konstanten in Gl. (13) auch die Gl. (12) erfüllt werden kann.

Durch Differenzieren findet man

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial y} &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin[(2n+1)(y-d)\pi/\alpha a] \cdot \sin \left[(2n+1)\pi(vt-x)/\alpha a \left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2} \right]}{\alpha \operatorname{Co} \left[(2n+1)\pi \mathbf{K}'/2 \mathbf{K} \right]} \\ &= - \frac{1}{2\alpha} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos \left[\frac{(2n+1)\pi}{\alpha a} \left(\frac{vt-x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} - y + d \right) \right]}{\operatorname{Co} \left[(2n+1)\pi \mathbf{K}'/2 \mathbf{K} \right]} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos \left[\frac{(2n+1)\pi}{\alpha a} \left(\frac{vt-x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} + y - d \right) \right]}{\operatorname{Co} \left[(2n+1)\pi \mathbf{K}'/2 \mathbf{K} \right]} \right\} \end{aligned} \quad (14)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial x} &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos[(2n+1)(y-d)\pi/\alpha a] \cdot \cos \left[(2n+1)\pi(vt-x)/\alpha a \left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2} \right]}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2} \alpha \cdot \operatorname{Co} \left[(2n+1)\pi \mathbf{K}'/2 \mathbf{K} \right]} \\ &= - \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{-1/2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos \left[\frac{(2n+1)\pi}{\alpha a} \left\{ (vt-x) \left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{-1/2} - y + d \right\} \right]}{\operatorname{Co} \left[(2n+1)\pi \mathbf{K}'/2 \mathbf{K} \right]} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos \left[\frac{(2n+1)\pi}{\alpha a} \left\{ (vt-x) \left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{-1/2} + y - d \right\} \right]}{\operatorname{Co} \left[(2n+1)\pi \mathbf{K}'/2 \mathbf{K} \right]} \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Mit Hilfe von Gl. (A) des Anhangs kann man die vorstehenden unendlichen Reihen aufsummieren. Man erhält

$$\frac{\partial w}{\partial y} = - \frac{\mathbf{K} k}{2\pi\alpha} \left\{ \operatorname{en} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left[\frac{vt-x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} - y + d \right], k \right) - \operatorname{en} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left[\frac{vt-x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} + y - d \right], k \right) \right\}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial w}{\partial x} = - \frac{\mathbf{K} k}{2\pi\alpha} \left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{-1/2} \left\{ \operatorname{en} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left[\frac{vt-x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} - y + d \right], k \right) + \operatorname{en} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left[\frac{vt-x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} + y - d \right], k \right) \right\} \quad (17)$$

und durch Integration

$$w = \frac{a}{4\pi} \left[\arcsin k \operatorname{sn} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left[\frac{vt-x}{\sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}} - y + d \right], k \right) + \arcsin k \operatorname{sn} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left[\frac{vt-x}{\sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}} + y - d \right], k \right) \right]. \quad (18)$$

Trigonometrische Umformungen ergeben

$$\sin \frac{4\pi w}{a} = - \frac{k \operatorname{en} \left[\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} (y-d), k \right]}{\operatorname{sn} \left[\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} (y-d), k \right] \operatorname{dn} \left[\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} (y-d), k \right]} \left\{ \begin{aligned} &\operatorname{en} \left[\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left(\frac{vt-x}{\sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}} + y - d \right), k \right] \\ &- \operatorname{en} \left[\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \left(\frac{vt-x}{\sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}} - y + d \right), k \right] \end{aligned} \right\}. \quad (19)$$

Durch Vergleich mit Gl. (17) findet man, daß die Bedingung Gl. (12) dann erfüllt ist, wenn

$$\frac{\operatorname{cn}\left(\frac{K}{\alpha a}(d-y_0), k\right)}{\operatorname{sn}\left(\frac{2K}{\alpha a}(d-y_0), k\right) \operatorname{dn}\left(\frac{2K}{\alpha a}(d-y_0), k\right)} = \frac{K}{\alpha} \quad (20)$$

gilt. Dieser Bedingung, die auch

$$\operatorname{cn}\left(\frac{4K}{\alpha a}(d-y_0), k\right) = \frac{(K/\alpha)^2 - 1}{(K/\alpha)^2 + 1} = \frac{1 - (\alpha/K)^2}{1 + (\alpha/K)^2} \quad (20a)$$

geschrieben werden kann, müssen $\delta = (d-y_0)/a$, K und α genügen, so daß von den drei Größen d , k und α nur zwei frei wählbar sind.

Wir beschreiben nunmehr die wichtigsten Eigenschaften der Lösung Gl. (13). Die gegenseitige Verschiebung einander gegenüberstehender Atome in den Ebenen $y = \pm y_0$ ist

$$\begin{aligned} \Delta w(x, t) &= w(x, y_0, t) - w(x, -y_0, t) \\ &= \frac{a}{2\pi} \arcsin \left\{ \frac{kK}{\alpha} \left[\operatorname{cn} \left(\frac{2K}{\alpha a} \left[\sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1} + y_0 - d \right], k \right) - \operatorname{cn} \left(\frac{2K}{\alpha a} \left[\sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1} - y_0 + d \right], k \right) \right] \right\}. \quad (21) \end{aligned}$$

Dies stellt eine mit der Geschwindigkeit $v > v_s$ fortschreitende Welle dar. Ihre Wellenlänge in x -Richtung ist

$$\lambda_x = 2a\alpha \sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1} = \lambda_y \sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}, \quad (22)$$

ihre Frequenz ist

$$v = \frac{v}{2a\alpha \sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}} = \frac{v}{\lambda_y \sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}}, \quad (23)$$

ihre maximale Amplitude (an der Stelle $vt - x = \lambda_x/4$) ist

$$\Delta \hat{w} = \frac{a}{\pi} \arccos \left(k' \operatorname{dn} \left[\frac{2K}{\alpha a}(d-y_0), k \right] \right) < \frac{a}{2} \quad (24)$$

Für $\alpha \ll K$ hat Δw nach Gl. (21) große Ähnlichkeit mit w nach Gl. (3). Dies zeigt, daß diese beiden Lösungen in der Tat verwandt sind. Wir werden hierauf weiter unten noch näher eingehen. Aus den Gleichungen (22) und (23) folgt, daß für die Gruppengeschwindigkeit in x -Richtung fortschreitender Wellen die Gl. (9) ebenfalls erfüllt ist.

Interessant ist, zu sehen, wie Gl. (21) oberhalb und unterhalb der Gleitebene fortgesetzt wird. Gl. (18) und Gl. (16) zeigen, daß dort w aus zwei fortschreitenden ebenen Wellen zusammengesetzt ist, welche zusammen eine stehende Welle in y -Richtung mit der Wellenlänge $\lambda_y = 2\alpha a$ bilden. Die Ebenen

$$y = \pm (d + n \lambda_y/2) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (25)$$

sind Knotenebenen für die Spannungskomponente τ_{zy} , so daß man in diesen Ebenen den Kristall zerschneiden kann, ohne am Spannungszustand etwas zu ändern. Jede der beiden ebenen Wellen ist aus unendlich vielen harmonischen Wellen zusammengesetzt, die sich in der Gleitebene gerade so überlagern, daß die Peierls'sche Bedingung in der gleichen Weise wie für Versetzungen erfüllt ist.

Während man in Gl. (3) nur die Geschwindigkeit v und den Modul k der elliptischen Funktionen, also die Amplitude der Bewegung, frei wählen konnte, tritt hier nun noch als weitere frei wählbare Kenngröße die Wellenlänge in y -Richtung λ_y hinzu. Dies entspricht natürlich dem Umstand, daß im vorliegenden Modell eine weitere wesentliche Dimension, die y -Richtung, berücksichtigt wurde.

Die Gesamtenergie der Lösung Gl. (13) setzt sich aus drei Anteilen zusammen, nämlich der elastischen Energie, der kinetischen Energie und der potentiellen Energie der nichtlinearen Wechselwirkung in der Gleitebene. Die ersten beiden Anteile charakterisieren wir durch die mittleren Energiedichten

$$\varepsilon_{\text{el}} = \frac{1}{2G} \frac{1}{\lambda_x \lambda_y} \int \int (\tau_{zy}^2 + \tau_{zx}^2) dx dy \quad (26)$$

und

$$\varepsilon_{\text{kin}} = \frac{1}{2\varrho} \frac{1}{\lambda_x \lambda_y} \int \int \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)^2 dx dy, \quad (27)$$

wobei die Integration über ein Rechteck mit den Seitenlängen λ_x und λ_y zu erstrecken ist. Die mitt-

lere potentielle Energie zwischen den beiden der Gleitebene benachbarten Netzebenen (pro Flächen-einheit der x - z -Ebene gerechnet) ist

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\text{pot}} &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{Ga}{\lambda_x} \int_{-\frac{1}{2}\lambda_x}^{+\frac{1}{2}\lambda_x} (1 - \cos(2\pi A w/a)) dx \\ &= \frac{1}{2\pi^2} Ga \frac{\mathbf{K}}{\alpha} \text{zn} \left(\frac{(d-y_0)2\mathbf{K}}{\alpha a}, k \right) \quad (28)\end{aligned}$$

(vgl. den Anhang). Die Jacobische Zeta-Funktion $\text{zn} u$ ist bei Jahnke-Emde⁹ graphisch dargestellt.

Bei der Berechnung von ε_{el} und ε_{kin} ist es am zweckmäßigsten, von den Fourier-Reihen Gl. (14) und Gl. (15) sowie von den Orthogonalitätseigenschaften der trigonometrischen Funktionen Gebrauch zu machen. Es ergibt sich dabei

$$\varepsilon_{\text{el}} = \frac{1}{2} G \frac{1}{(2\alpha)^2} \frac{v^2}{v^2 - c^2} S(k^2) \quad (29)$$

und

$$\varepsilon_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \varrho \frac{1}{(2\alpha)^2} \frac{v^2}{\frac{v^2}{c^2} - 1} S(k^2) = \varepsilon_{\text{el}}, \quad (30)$$

wobei (siehe Anhang und Abb. 1)

$$\begin{aligned}S(k^2) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\mathfrak{C}_0 \mathfrak{f}^2 \frac{2n+1}{2} \pi \mathbf{K}'/\mathbf{K}} \\ &= \frac{1}{2 \mathfrak{C}_0 \mathfrak{f}^2 \frac{\pi}{2} \mathbf{K}'/\mathbf{K}} + 2(\mathbf{K}/\pi)^2 (k^2 - \mathbf{E}'/\mathbf{K}) + \mathbf{K}/\pi' \mathbf{K} \quad (31)\end{aligned}$$

ist.

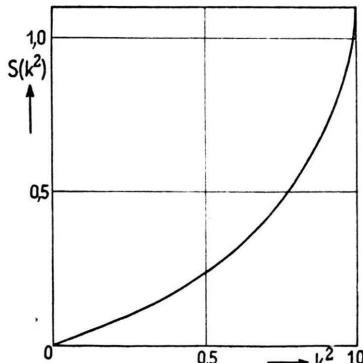


Abb. 1. $S(k^2)$ gemäß Gl. (31). Die Funktion wird für $k^2 = 1$ logarithmisch unendlich.

Die allgemeinen Formeln, insbesondere Gl. (21), vereinfachen sich etwas in den folgenden drei Spezialfällen:

⁹ Jahnke-Emde, Funktionentafeln. 2. Aufl., Leipzig 1933, S. 164.

a) $\mathbf{K} \ll \alpha$, b) $\mathbf{K} = \alpha$, c) $\mathbf{K} \gg \alpha$.

a) Dies ist der Grenzfall großer Wellenlänge und kleiner Amplitude. Hier ist die Nichtlinearität ohne Einfluß. Aus Gl. (20a) folgt $d - y_0 = \alpha a/2$, also ist

$$\Delta w = \frac{a}{\pi} \frac{k\mathbf{K}}{\alpha} \text{cn} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \frac{vt - x}{\sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}} - \mathbf{K}, k \right) \quad (32)$$

und die maximale Amplitude

$$\widehat{\Delta w} = ak\mathbf{K}/\alpha \ll 1. \quad (32a)$$

b) Nach Gl. (20a) ist $d - y_0 = \alpha a/4$, somit gilt

$$\begin{aligned}\Delta w &= \frac{a}{2\pi} \text{arc sin} \left\{ k \left[\text{cn} \left(\frac{2}{a} \frac{vt - x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} - \frac{\mathbf{K}}{2}, k \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \text{cn} \left(\frac{2}{a} \frac{vt - x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}} + \frac{\mathbf{K}}{2}, k \right) \right] \right\} \quad (33)\end{aligned}$$

(s. Abb. 2a). Die Maximalamplitude wird in diesem Falle

$$\widehat{\Delta w} = \frac{a}{\pi} \arccos \sqrt{k'}, \quad (33a)$$

kann also dem Wert $a/2$ beliebig nahe kommen.

c) Im Grenzfall $\alpha \ll \mathbf{K}$ wird $2\mathbf{K}(d - y_0)/a \approx 0$. Gl. (21) reduziert sich auf

$$\Delta w = \frac{a}{\pi} \arcsin k \text{sn} \left(\frac{2\mathbf{K}}{\alpha a} \frac{vt - x}{\left(\frac{v^2}{c^2} - 1 \right)^{1/2}}, k \right) \quad (34)$$

(s. Abb. 2 b). Gl. (34) stimmt vollkommen mit Gl. (3) überein, wenn man $\alpha/2 \mathbf{K} = L_0$ setzt. Ein derartiges Resultat ist sehr plausibel, da der Fall $\alpha \ll \mathbf{K}$ demjenigen einer sehr dünnen, elastischen Platte entspricht (man darf ja in den Ebenen $y = \pm d$ den

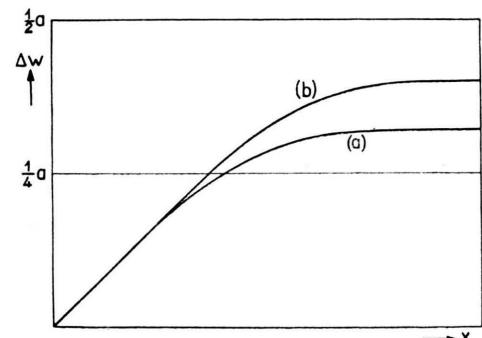


Abb. 2. Schematische Darstellungen einer Viertelperiode der Funktionen Gl. (33), (a), und Gl. (34), (b). Die maximalen Amplituden sind für $k^2 = 0.9$ berechnet.

Kristall abschneiden). Es zeigt sich also an diesem speziellen Beispiel, daß das Frenkelsche Modell die richtigen Resultate für verschwindende Ausdehnung des Kristalls senkrecht zur Gleitebene liefert.

§ 3. Erweiterungen und physikalische Anwendungen

Wir haben uns in § 2 der mathematischen Einheitlichkeit zuliebe auf die Diskussion eines speziellen, weitgehend idealisierten Falles beschränkt. Obwohl es nicht einfach sein wird, die entsprechenden Lösungen anzugeben, kann man prinzipiell die gefundenen Ergebnisse in ähnlicher Weise wie in der Versetzungstheorie ergänzen und erweitern. Zunächst kann man die Beschränkung fallen lassen, daß alle auftretenden Verschiebungen senkrecht zur Fortschreibungsrichtung der Welle erfolgen¹⁰. Eigenbewegungen mit Verschiebungen in der Fortpflanzungsrichtung der Wellen entsprechen den Stufenversetzungen; die zugehörigen elastischen Wellen sind jetzt nicht mehr reine Scherungswellen, sondern enthalten auch einen Anteil, der Volumänderungen zur Folge hat. Eine weitere Möglichkeit, zu allgemeineren Bewegungsformen zu gelangen, besteht darin, die Unabhängigkeit der Lösungen von der z -Koordinate fallen zu lassen. Auf diese Weise entsteht dann das Analogon zu gekrümmten und geschlossenen Versetzungslinien.

Wie bei den Versetzungen wird man damit rechnen müssen, daß die ungenügende Berücksichtigung der atomistischen Struktur der Kristalle, insbesondere in der Nähe der Gleitebene, gewisse Eigenschaften der Lösungen verfälscht. Ebenso, wie die Möglichkeit einer sich im spannungsfreien Kristall gleichförmig bewegenden Versetzung nur eine Folge der mathematischen Approximationen ist, wird man erwarten, daß auch die Phase der Eigenbewegungen nicht gleichförmig fortschreitet, sondern daß kleine Schwankungen auftreten, die von der diskontinuierlichen Struktur der Kristalle herrühren. Diese Schwankungen werden eine gegenüber der stets vorhandenen Dämpfung der elastischen Schwingungen erhöhte Dämpfung zur Folge haben, die jedoch schwer theoretisch abzuschätzen ist.

Wir betrachten jetzt zwei Anwendungsmöglichkeiten der oszillatorischen Eigenbewegungen. Bei

der Untersuchung des zeitlichen Ablaufs von Umklappvorgängen haben Förster und Scheil¹¹ als Folgeerscheinung der Martensitbildung gedämpfte Schwingungen des elektrischen Widerstandes der Probe beobachtet. Die Frequenz betrug zwischen 10^4 Hz und 10^5 Hz. Die Dämpfung der Schwingungen war höher, als man für mechanische Schwingungen dieses Frequenzbereiches erwarten müßte. Bei der Interpretation dieser Schwingungen des elektrischen Widerstandes durch mechanische Schwingungen in der Probe ergibt sich die Schwierigkeit, daß normale hörbare oder ultrasonische Schwingungen des oben angegebenen Frequenzbereiches so große Wellenlängen (von der Größenordnung cm) aufweisen, daß sie den elektrischen Widerstand nicht merklich beeinflussen können. Von Dehlinger und Kochendörfer¹² wurden sie deshalb als stehende Wellen interpretiert, bei denen ganze Netzebenen gegeneinander schwingen. Es erscheint plausibel, daß der in § 3 besprochene Lösungstypus gerade den beobachteten Schwingungen entspricht, wobei die „Gleitebene“ im vorliegenden Fall mit der Gleitebene der Umwandlung¹³ zusammenfallen würde. Die großen Verzerrungen, die, wie die Spezialfälle b) und c) zeigen, in dieser Gleitebene auftreten können, bieten eine Erklärungsmöglichkeit für die beobachteten Änderungen des elektrischen Widerstandes.

Die zweite Anwendung, die wir von den oszillatorischen Eigenbewegungen machen, beruht auf der Dispersionskurve $v = v(\lambda_x)$, nach der zu den betrachteten Schwingungen Wellengruppen gehören, die sich in der Fortschreibungsrichtung mit der Gruppengeschwindigkeit

$$V = v_s^2/v,$$

also mit Unterschallgeschwindigkeit, fortbewegen. Die entsprechenden Wellengruppen lassen sich im Frenkelschen Modell explizit angeben⁵, so daß man annehmen darf, daß sie auch im Peierls'schen Modell existieren, obwohl es noch nicht gelungen ist, die entsprechenden Lösungen aufzufinden. Unter diesen Wellengruppen sind solche enthalten, die sich von einem Paar ungleichnamiger Versetzungen nicht unterscheiden lassen. Wie bei der Betrachtung des Frenkelschen Modells näher ausgeführt

¹⁰ Die Resultate beim Frenkelschen Modell lassen sich sowohl für longitudinale als auch für transversale Verschiebungen interpretieren.

¹¹ F. Förster u. E. Scheil, Z. Metallkunde **32**, 165 [1940].

¹² U. Dehlinger u. A. Kochendörfer, Z. Physik **116**, 576 [1940].

¹³ U. Dehlinger, Chemische Physik der Metalle u. Legierungen, Leipzig 1939, S. 131.

werden soll⁵, ist es in genügend starken Spannungsfeldern möglich, diese beiden in der Wellengruppe enthaltenen Versetzungen voneinander zu trennen, so daß man sagen kann, daß sich die sog. thermische Versetzungsentstehung als Zusammenwirken von interferierenden oszillatorischen Eigenbewegungen und von Schubspannungen auffassen läßt. Beim eigentlichen Gleiten in Metallkristallen spielt dieser Mechanismus bei mäßiger Temperatur nach heutiger Auffassung keine Rolle, da die Versetzungen wohl von Frank-Read-Quellen geliefert werden; doch scheint der erwähnte Mechanismus für das seitliche Ausbreiten von *kink-bands* verantwortlich zu sein¹⁴.

¹⁴ F. C. Frank u. A. Stroh, Proc. physic. Soc. demnächst.

Ich freue mich, diese Arbeit meinem verehrten Lehrer, Herrn Prof. Dr. E. Fues, zum 60. Geburtstag widmen zu können. Die Arbeit entstand während eines Aufenthaltes des Verfassers im H. H. Wills Physical Laboratory, University of Bristol. Für die Möglichkeit, dort zu arbeiten, möchte ich dem Direktor dieses Instituts, Herrn Prof. N. F. Mott, auch auf diesem Wege herzlichen Dank sagen. Dem British Council bin ich für die Gewährung eines Stipendiums zu großem Dank verpflichtet.

Anhang

1. Definitionen und Formeln

Elliptisches Integral 1. Gattung

$$z = F(k, \varphi) = \int_0^{\varphi} (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-1/2} d\psi.$$

Umkehrfunktion $\varphi = \text{am}(z, k)$.

Jacobische elliptische Funktionen

$$\text{sn}(z, k) = \sin \text{am}(z, k),$$

$$\text{en}(z, k) = \cos \text{am}(z, k),$$

$$\text{dn}(z, k) = (1 - k^2 \text{sn}^2(z, k))^{1/2}.$$

Vollständiges elliptisches Integral 1. Gattung

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}(k) = F(k, \pi/2).$$

Komplementärer Modul $k' = (1 - k^2)^{1/2}$, $\mathbf{K}' = \mathbf{K}(k')$.

Fourier-Reihe

$$\mathbf{K} k \text{cn}(2\mathbf{K} u, k) = \pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos(2n+1)\pi u}{\mathfrak{C}_0 \frac{2n+1}{2} \pi \mathbf{K}'/\mathbf{K}}. \quad (\text{A})$$

Integration

$$k \int_0^z \text{cn}(z, k) dz = \arccos \text{dn}(z, k) = \arcsin k \text{sn}(z, k).$$

Elliptisches Integral 2. Gattung

$$E(\varphi, k) = \int_0^{\varphi} (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{1/2} d\psi; \mathbf{E} = \mathbf{E}(k) = E(\pi/2, k).$$

Verdopplung des Arguments

$$\frac{1 - \text{cn} 2u}{1 + \text{cn} 2u} = \frac{\text{sn}^2 u \text{dn}^2 u}{\text{cn}^2 u}.$$

2. Berechnung des Integrals

$$I = \int_{-\frac{1}{2} \lambda x}^{+\frac{1}{2} \lambda x} [1 - \cos(2\pi \text{am} w/a)] dx:$$

Setzt man zur Abkürzung

$$v_1 = \frac{2\mathbf{K}(rt - x)}{\alpha a \sqrt{\frac{v^2}{c^2} - 1}}, \quad v_2 = (d - y_0) \frac{2\mathbf{K}}{\alpha a}$$

und verwendet Gl. (18) sowie das Additionstheorem der elliptischen Funktionen, so erhält man

$$I = \int_{-\frac{1}{2} \lambda x}^{+\frac{1}{2} \lambda x} \frac{2k^2 \text{sn}^2 v_1 \text{cn}^2 v_2}{1 - k^2 \text{sn}^2 v_1 \text{sn}^2 v_2} dx.$$

Mit der Abkürzung

$$II(\varrho, k) = \int_0^1 \frac{d\xi}{(1 + \varrho \xi^2) \sqrt{(1 - \xi^2)(1 - k^2 \xi^2)}} \frac{d\xi}{}$$

gilt

$$\begin{aligned} \int_0^{\mathbf{K}} \frac{\text{sn}^2 v_1}{1 - k^2 \text{sn}^2 v_2 \text{sn}^2 v_1} dv_1 \\ = \frac{1}{k^2 \text{sn}^2 v_2} \left\{ \mathbf{II}(-k^2 \text{sn}^2 v_2, k) - \mathbf{K}(k) \right\}. \end{aligned}$$

Nach Gröbner-Hofreiter¹⁵ ist

$$\begin{aligned} \mathbf{II}(-k^2 \text{sn}^2 v_2, k) - \mathbf{K}(k) \\ = -\frac{\text{sn} v_2}{\text{dn} v_2 \text{cn} v_2} \left\{ \mathbf{E} v_2 - \mathbf{K} \mathbf{E}(\text{am} \varphi, k) \right\}. \end{aligned}$$

Benutzt man die Formel

$$\text{zn}(z, k) = E(\text{am} z, k) - \frac{\mathbf{E}(k)}{\mathbf{K}(k)} z$$

sowie Gl. (20), so erhält man schließlich

$$I = 2 \frac{\lambda x}{\alpha} \mathbf{K}(k) \text{zn}(v_2, k).$$

¹⁵ W. Gröbner u. N. Hofreiter, Integraltafel, Wien 1950 2. Teil, S. 42.