Eigenbewegungen in Kristallen II

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**, 246—247 [1953]; eingegangen am 29. Januar 1953)

Es werden Lösungen des sog. Frenkelschen Versetzungsmodells angegeben, die *stehende* Schwingungen darstellen. Damit ist nachgewiesen, daß es bei nichtlinearen Kraftgesetzen nicht nur, wie schon früher gezeigt, fortschreitende Eigenbewegungen, sondern auch stehende Eigenbewegungen geben kann.

In einer vorangehenden Mitteilung[1] wurde die Frage untersucht, ob es in elastischen Medien, in denen nichtlineare Kraftgesetze gelten, ein Analogon gibt zu den Eigenschwingungen von Körpern, welche dem Hookeschen Gesetz gehorchen. Es wurden zwei aus der Theorie der Versetzungen bekannte Modelle für nichtlineare Kraftansätze betrachtet und es konnte gezeigt werden, daß bei ihnen tatsächlich fortschreitende Wellen möglich sind, die ihren Charakter der Nichtlinearität verdanken und als Erweiterungen der harmonischen Wellen mit der Bezeichnung ,,oszillatorische Eigenbewegungen" versehen wurden.

Für die lineare Elastizitätstheorie von Kristallen bedeutet es keinen prinzipiellen Unterschied, ob man die Eigenschwingungen für die jeweiligen Randbedingungen aus laufenden Wellen aufbaut, wie dies z. B. bei Wierzejewski[2] geschehen ist, oder ob man, der üblichen Darstellungsweise folgend, stehende Wellen zugrunde legt. Die beiden Verfahren sind mathematisch in diesem Falle vollkommen äquivalent. Anders dagegen liegen die Dinge bei nichtlinearen Grundgleichungen. Die Lösungen sind nicht mehr superponierbar, und man kann deshalb auch nicht durch Bildung von Summe und Differenz laufender Wellen die entsprechenden stehenden Wellen erhalten.

Diese Verhältnisse werfen im Hinblick auf die in Tl. I für das Frenkelsche und für das Peierlssche Versetzungsmodell gefundenen Resultate die beiden folgenden Fragen auf:

1. Gibt es auch bei den dort besprochenen nichtlinearen Modellen *stehende* Eigenbewegungen?

2. Ist es möglich, diese in analytischer Form anzugeben?

Wir werden beide Fragen für das Frenkelsche Modell durch direkte Integration der Grundgl. (2a) positiv beantworten. Für das Peierlssche Modell sind in dieser Richtung noch keine Untersuchungen angestellt worden, doch werden die Verhältnisse bezüglich der ersten Frage gleich wie beim Frenkelschen Modell liegen.

Um mit den Bezeichnungen in einer andern Arbeit[3] in Einklang zu kommen, führen wir statt der Variabeln x, t, u von Tl. I (hier mit x_{I}, t, u_{I} bezeichnet) neue Variabeln x (Ortskoordinate), y (Zeitkoordinate) und $u = 2\vartheta$ (Verschiebung) ein, die mit den alten Koordinaten folgendermaßen zusammenhängen:

$$x = x_{\mathrm{I}}/L_0, \quad y = v_s t/L_0, \qquad (1)$$
$$u = 2\pi\, u_{\mathrm{I}}/a = 2\vartheta .$$

Damit lautet die Grundgleichung des Frenkelschen Modells

$$u_{xx} - u_{yy} = \sin u \qquad (2\mathrm{a})$$

oder

$$\vartheta_{xx} - \vartheta_{yy} = \sin\vartheta \cdot \cos\vartheta . \qquad (2\mathrm{b})$$

Wie in der in[3] angegebenen Arbeit näher ausgeführt wurde, kann u interpretiert werden als Winkel zwischen den Asymptotenlinien pseudosphärischer Flächen, vorausgesetzt, daß als Koordinatennetz $x = \mathrm{const}$ und $y = \mathrm{const}$ die Krümmungslinien auf der pseudosphärischen Fläche benützt werden. Diese differentialgeometrische Deutung legt es nahe, nach Lösungen von Gl. (2) zu suchen, die sich in geometrischer Hinsicht besonders einfach verhalten. Wir werden solche Lösungen näher betrachten, deren Krümmungslinien ebene Kurven sind. Sie sind zwar als Spezialfälle in der von Dobriner[4] gefundenen Lösung für sphärische Krümmungs-

[1] A. Seeger, Z. Naturforschg. **8a**, 47—55 [1953]; (im folgenden als I bezeichnet).

[2] H. Wierzejewski, Z. Kristallogr., Mineralog. petrogr., Abt. A. **101**, 94 [1939].

[3] A. Seeger, H. Donth u. A. Kochendörfer, Z. Physik **134**, 173 [1953].

[4] H. Dobriner, Acta mathematica **9**, 73 [1887].

linien enthalten, doch sind die von ihm angegebenen Formeln so kompliziert, daß man den von Darboux[5] eingeschlagenen Weg, die Gl. (2) direkt zu integrieren, vorziehen wird.

Darboux zeigt, daß im Falle ebener Krümmungslinien die Gleichungen

$$\partial\vartheta/\partial x = -z_1(x)\sin\vartheta, \tag{3a}$$

$$\partial\vartheta/\partial y = -z_2(y)\sin\vartheta \tag{3b}$$

erfüllt sein müssen, wobei $z_1(x)$ und $z_2(y)$ den Gleichungen

$$(\mathrm{d}z_1/\mathrm{d}x)^2 = z_1^4 + a z_1^2 + 2h, \tag{4a}$$

$$(\mathrm{d}z_2/\mathrm{d}y)^2 = (z_2^2+1)^2 + a(z_2^2+1) + 2h \tag{4b}$$

zu genügen haben und a und h frei verfügbare Konstante sind. ϑ selbst erhält man aus der Gleichung

$$\cos\vartheta = \frac{z_1' - z_2'}{z_1^2 - z_2^2 - 1}. \tag{5}$$

Die Integration von (4) führt auf elliptische Funktionen[6] mit den Moduln k_1 und k_2, in denen sich die Konstanten a und h folgendermaßen ausdrücken:

$$a = \frac{k_2^2(1+k_1'^2)}{k_1^2 - k_2^2}, \quad h = \frac{k_2^4 k_1'^2}{2(k_1^2-k_2^2)^2}. \tag{6}$$

Die Integration der Gl. (4) gibt

$$z_1 = m_1 \frac{\mathrm{cn}(m_1(x-x_0), k_1)}{\mathrm{sn}(m_1(x-x_0), k_1)}; \quad m_1 = k_2^2/(k_1^2-k_2^2), \tag{7a}$$

$$z_2 = m_2 \frac{\mathrm{cn}(m_2(y-y_0), k_2)}{\mathrm{sn}(m_2(y-y_0), k_2)}; \quad m_2 = k_1^2/(k_1^2-k_2^2). \tag{7b}$$

Durch Umformung von Gl. (5) erhält man

$$u = 4\,\mathrm{arctg}\cdot\left\{\frac{1-\mathrm{dn}(m_1(x-x_0), k_1)}{k_1\,\mathrm{sn}(m_1(x-x_0), k_1)} \cdot \frac{1-\mathrm{dn}(m_2(y-y_0), k_2)}{k_2\,\mathrm{sn}(m_2(y-y_0), k_2)}\right\}. \tag{8}$$

In dieser Form erkennt man sofort, daß die gefundene Lösung stehende Wellen mit der Amplitude

$$\hat{u} = \mathrm{arctg}\left\{\frac{1-k_1'}{k_1} \cdot \frac{1-k_2'}{k_2}\right\} \tag{9}$$

darstellt. Die Wellenlänge ist gegeben durch

$$\lambda = \frac{4\,\boldsymbol{K}(k_1)}{m_1}, \tag{10a}$$

die Frequenz durch

$$\nu = \frac{m_2}{4\,\boldsymbol{K}(k_2)}, \tag{10b}$$

die Phasengeschwindigkeit also durch

$$v = k_1\,\boldsymbol{K}(k_1)/k_2\,\boldsymbol{K}(k_2). \tag{11}$$

Es sind somit zwei Kenngrößen, z. B. $\hat{u}$ und v, frei verfügbar.

Gl. (8) gilt nur für $0 < k_2^2 < k_1^2 < 1$[7]. Der Verlauf dieser Lösung ist für $y=0$ den in Tl. I, Abb. 2, wiedergegebenen Kurven ziemlich ähnlich.

Die über eine Wellenlänge gemittelte Energiedichte ergibt sich zu

$$\mathfrak{H} = H/\lambda = \frac{1}{\lambda}\int_{-\lambda/2}^{+\lambda/2} (1 - \cos u + u_x{}^2/2 + u_y{}^2/2)\,\mathrm{d}x$$
$$= 4\left\{1 - [\boldsymbol{E}(k_1)/\boldsymbol{K}(k_1)] - k_1^2/2\right\}. \tag{12}$$

H bedeutet dabei die Energie pro Wellenlänge und ist so normiert, daß die Energie einer einzelnen Versetzung $[u = 4\,\mathrm{arctg}\,(\exp x)]$ $H = 8$ ist.

Für $k_1, k_2 \ll 1$, also kleine $\hat{u}$, reduziert sich Gl. (8) auf

$$u = u_0 \cdot \sin[(v^2-1)^{-1/2}(x-x_0)] \cdot \sin[(v^2-1)^{-1/2}\cdot v\cdot(y-y_0)], \tag{13}$$

wobei auch hier Amplitude u_0 und Phasengeschwindigkeit v willkürlich sind. Gl. (8) ist also in der Tat eine Erweiterung der harmonischen stehenden Wellen Gl. (13). Zwischen den stehenden Wellen endlicher Amplitude und den harmonischen Wellen besteht der in Tl. I für die entsprechenden laufenden Wellen dargelegte Zusammenhang.

Es zeigt sich also in dem Beispiel des Frenkelschen Modells, daß auch bei nichtlinearen Grundgleichungen, bei denen man Eigenschwingungen nicht mehr wie üblich durch Separation der Variabeln erhalten kann, *stehende* „oszillatorische Eigenbewegungen"[3] möglich sind. Für die physikalische Bedeutung dieser Schwingungsformen für Vorgänge in Kristallen gilt das in Tl. I, § 3, anläßlich der Besprechung der fortschreitenden Wellen Gesagte.

[5] G. Darboux, Leçons sur la théorie général des surfaces et les applications géometriques du calcul infinitésimal, III. Teil, p. 457, Gauthier-Villars, Paris 1894.

[6] Wegen der Bezeichnungen sei auf Tl. I, Anhang 1, verwiesen.

[7] Gl. (8) liefert für alle reellen Werte von k_1 und k_2 ein reelles Ergebnis, doch haben die Lösungen aus anderen Bereichen als dem oben angegebenen keinen oszillatorischen Charakter, so daß wir sie hier nicht weiter untersuchen.