

tungsprozesse auf, die dann die Verdampfung der Spaltprodukte zur Folge haben. Zwar träfe in diesen Energiebereichen die Formel (6) gerade am besten zu, wenn eine reguläre Verdampfung stattfände, jedoch wird in zunehmendem Maße die Verdampfung durch Spaltung abgelöst. Dieses Problem wurde von Süßmann<sup>3</sup> kürzlich behandelt. Faßt man Spaltung und

Verdampfung als gesondert zu betrachtende Probleme auf, so kann Gl. (6) auf ihrem Kompetenzgebiet bei Kernverdampfung durch Höhenstrahlung unbedenklich angewandt werden.

Herrn Dr. G. Süßmann danke ich für manche Diskussion.

Anm. b. d. Korrr.: Erst jetzt wird mir die Arbeit von L. Wolfenstein, Phys. Rev. **82**, 690 [1951] bekannt, in der speziellere Fragen behandelt werden.

<sup>3</sup> G. Süßmann, Z. Naturforsch. **8a**, 404 [1953].

## NOTIZEN

### Ortskorrelation der Elektronen in einigen tetragonal verzerrten A1-Strukturen\*

Von Konrad Schubert

Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart  
(Z. Naturforsch. **9a**, 261–262 [1954]; eingeg. am 22. Dezember 1953)

Für eine Familie von tetragonal verzerrten A1-Strukturen, die dem NiZn (Raumtemperatur-Modifikation) verwandt sind, wurde ein Strukturargument aus dem Bandmodell der Elektronentheorie gegeben, wonach die Fermi-Kugel der Valenzelektronen die Brillouin-Ebenen {111} der unverzerrten vieratomig aufgestellten A1-Struktur tangiert<sup>1</sup>. Aus diesem Strukturargument ergab sich eine Voraussage für die Änderung des Achsverhältnisses in Abhängigkeit von der Konzentration des an Valenzelektronen reicheren Legierungspartners. Die Nachprüfung zeigte, daß es Phasen gibt, die die Voraussage erfüllen und solche, die ihr widersprechen. Es ist daraus zu entnehmen, daß noch ein anderes Strukturargument von Bedeutung für diese Strukturfamilie sein muß. Als solches wurden Wirkungen angesehen, die mit den d-Schalen der Atome zusammenhängen. Nun hatte sich bei der Diskussion der CuAl<sub>2</sub>-Strukturfamilie gezeigt, daß die d-Elektronen des einen Partners mit den Valenzelektronen beider Partner einer Verbindung in Ortskorrelation treten können (Durchdringungskorrelation), was sich alsdann in der Kristallstruktur bemerkbar macht. – Ein Atom ist besonders geneigt zu einer Durchdringungskorrelation, wenn die Dichte der d-Elektronen an der Atomoberfläche groß ist und nicht von Valenzelektronen abgeschirmt wird. Es liegt daher nahe anzunehmen, daß beispielsweise im NiZn die zehn d-Elektronen des Nickelatoms mit den zwei Valenzelektronen des Zn-Atoms in Ortskorrelation stehen. Zu einem plausiblen Vorschlag gelangt man wie folgt: Man unterteile eine kubische Zelle durch Halbieren der Kanten in 8 Würfel und lege in die Mitte der Hälfte dieser Würfel ein Atom, so daß man eine A1-Struktur erhält. Man lege nun auf die Kantenmitten jedes zentrierten Würfels einen Elektronenplatz und gelangt so

zu einer Elektronenanordnung mit 24 Plätzen je A1-Zelle. Diese Ortskorrelation würde zu dem Aufbau der Verbindungen NiZn, AuCu, CuTi<sub>3</sub>, ZrH<sub>2</sub> usw. passen. Es gibt (in der ausführlichen Mitteilung zu erörternde) Gründe dafür, daß diese an sich kubische Ortskorrelation bestrebt ist, das Atomgitter tetragonal so zu verzerren, daß die c-Achse kürzer als die a-Achse wird. Bei den Verbindungen der Art NiMn, PdMn usw. wird man annehmen dürfen, daß fünf d-Elektronen des Mn nicht in die Ortskorrelation eintreten, d. h. von ihr statistisch unabhängig bleiben. Nun läßt sich aus dem Erfahrungsmaterial entnehmen, daß die Konzentration einer Phase der Art NiZn sich bis zu 25 At% gegen die Seite des Komplexbildners (Ni, Pd, usw.) verschieben kann. Ergänzt man die oben genannte Ortskorrelation durch Zentrierung der Kubooktaeder zu einer kubisch flächenzentrierten Ortskorrelation, so können maximal 32 Elektronen je Zelle, also 8 je Atom untergebracht werden. Zu dieser Zahl passen die Verbindungen NaBi, MgIn, TiAg, Mo<sub>3</sub>N usw. und die Phasen der Art NiZn, welche mehr als 50 At% des Komplexbildners enthalten, wie z. B. Ni<sub>2</sub>Ga.

Wird die Zahl 32 überschritten wie bei Au<sub>3</sub>Zn oder Ni<sub>3</sub>V und PbO oder InBi, so wird jedenfalls die zum NiZn gehörige Ortskorrelation unmöglich. Man kann ihren offenbar energetisch vorteilhaften Einfluß erhalten, wenn man senkrecht zur c-Achse des Atomgitters eine weitere Elektronenebene einschiebt. Man käme dann zu maximal 40 Elektronenplätzen, d. h. bei der Annahme, daß jeder Atomrumpf im Mittel einen Platz zudeckt, zu 36 zu besetzenden Stellen. Zu dieser Zahl passen Au<sub>3</sub>Zn, Ni<sub>3</sub>V usw. und gemäß obiger Annahme auch die Abschreckmodifikation von Au<sub>3</sub>Mn. Da bei einer zusätzlich eingeschobenen Elektronenebene die Lagenfolge der Elektronenebenen nicht mehr periodisch mit der Zelle ist, paßt obige Annahme auch zu der Beobachtung, daß Au<sub>3</sub>Zn bzw. Ni<sub>3</sub>V eine gegenüber der Unterstruktur verdoppelte c-Achse haben. Schiebt man zwei Elektronenschichten je c-Achse ein und kontrahiert das Elektronengitter längs der c-Achse, so gelangt man zu plausiblen Ortskorrelationen für PbO (B 10) und InBi, die insbesondere die Parameter des schweren Atoms zu verstehen gestatten.

\* Eine ausführliche Mitteilung erscheint in der Z. Metallkunde.

<sup>1</sup> K. Schubert, Z. Metallkunde **43**, 1 [1952].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Ähnliche Verhältnisse liegen vor bei den Strukturen von  $\text{TiAl}_3$ ,  $\text{NbAl}_3$  und  $\text{ZrAl}_3$ . – Besetzt man in der A1-Struktur des Al die Oktaeder- und Tetraederlücken alle mit einem Elektron, so hat man gerade drei Elektronen je Atom untergebracht. Die Ortskorrelation ist vom A2-Typ mit „vertriebenen“ Elektronen. Ersetzt man ein Al je Zelle durch ein Ti, so daß sich also die Verbindung  $\text{TiAl}_3$  ergibt, so kann diese Ortskorrelation nicht mehr vorliegen, wenn man Durchdringungskorrelation annimmt, d.h. das Ti vier Elektronen in die Ortskorrelation beisteuern läßt. Durch Einschieben einer zusätzlichen Elektronenebene, in diesem Fall einer Ebene senkrecht zur  $c$ -Achse mit zwei Elektronen je Kristallgittermasche erhält man eine Ortskorrelation, die nicht nur die besonderen Atomlagen zu verstehen gestattet, sondern auch die beobachtete Dehnung des Achsverhältnisses.

Bei  $\text{NbAl}_3$  hätte man anzunehmen, daß eine Elektronenebene mit vier Plätzen je Kristallgittermasche eingeschoben wird. Bei  $\text{ZrAl}_3$  und  $\text{Ti}_3\text{Al}_4$  wird man ähnliche Annahmen machen dürfen. Auch in diesem Falle verknüpft also die Ortskorrelationsannahme die Besonderheiten der Struktur mit einer Bedingung für ihr Auftreten.

<sup>2</sup> K. Schubert, Z. Metallkunde, erscheint demnächst.

<sup>3</sup> C. H. Johansson u. J. O. Linde, Ann. Phys., Lpz. 25, 1 [1936].

Eine ähnliche Deutung wie bei den oben genannten Strukturen läßt sich auch beim  $\text{CdHg}$  bzw.  $\text{TiCu}$  (Hochtemperaturphase) geben: Man unterteile die Diagonalen der vieratomigen Zelle in vier und die  $c$ -Achse in zwei Teile und zentriere die so gegebenen Würfel. Man hat dann 32 Plätze je Zelle, d. h. 16 je Verbindungsge-  
wicht in guter Übereinstimmung mit den beiden bekannten Beispielen.

Durch die Ortskorrelation des  $\text{NiZn}$  wird die Beobachtung erklärt, daß das Achsverhältnis in Abhängigkeit von der Konzentration bei 50 At% (falls dieser Wert im Homogenitätsbereich der Phase liegt) einen Extremwert aufweist<sup>1,2</sup>, ferner, daß die unter (über) etwa 0,85 liegenden Achsverhältnisse i. allg. mit zunehmender Annäherung an 50 At% steigen (fallen)<sup>2</sup>. Weiterhin ergibt das Ortskorrelationsargument eine Möglichkeit, die orthorhombischen Varianten (z. B.  $\text{CuAu II}^3$ ) zu verstehen. Es wird auch die Tatsache verständlich, daß das Achsverhältnis mit steigender Temperatur gegen den für eine A2-Struktur gültigen Wert 0,71 fällt<sup>1</sup>, bzw. gegen den für eine A1-Struktur gültigen Wert 1,00 steigt<sup>4</sup> und daß dieser Anstieg proportional dem Ordnungsgrad der Struktur ist<sup>5</sup>.

<sup>4</sup> K. Ohshima u. G. Sachs, Z. Phys. 63, 210 [1930]; U. Dehlinger u. L. Graf, ebd. 64, 359 [1930].

<sup>5</sup> N. N. Buinow, J. exp. theoret. Physik 17, 41 [1947].

## Sprünge in Versetzungslinien

Von Alfred Seeger und Hubert Blank

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

(Z. Naturforsch. 9a, 262–263 [1954]; eingeg. am 9. Febr. 1954)

In der angelsächsischen Literatur wird als „*dislocation jog*“ eine Stelle in einer Versetzungslinie bezeichnet, an der eine Versetzung von ihrer Gleitebene  $E_1$  in eine dazu parallele Gleitebene  $E_1'$  überspringt. Wir bezeichnen einen solchen Übergang als Versetzungssprung. Ein Versetzungssprung entsteht im allgemeinen dann, wenn eine Versetzungslinie 1 mit Burgers-Vektor  $b_1$  und Gleitebene  $E_1$  von einer nicht in  $E_1$  gelegenen Versetzungslinie 2 mit Burgers-Vektor  $b_2$  geschnitten wird. Man faßt den Sprung oft zweckmäßigerweise als ein kurzes Stück der Versetzungslinie 1 auf, das wegen der Konstanz des Burgers-Vektors längs einer unverzweigten Versetzungslinie ebenfalls den Burgers-Vektor  $b_1$  hat.

In der Literatur finden sich Angaben über die Gleitebene  $E_{sp}$  und die Richtung des als Versetzung aufgefaßten Sprunges nur für extreme Spezialfälle. Eine als allgemeingültig bezeichnete Aussage in einem soeben erschienenen Buch<sup>1</sup> ist unrichtig. Es erscheint deshalb zweckmäßig, auf den Sachverhalt kurz einzugehen.

Allgemeine, d. h. von den Einzelheiten der Atomordnung unabhängige Aussagen kann man dann machen, wenn die Länge der ins Spiel kommenden Burgers-Vektoren groß gegen den Abstand nächster Nachbarn ist, d. h. also höchstens in Gittern mit Basis. Wir behandeln zunächst diesen Fall und geben dann am Schluß dieser Mitteilung die Resultate für das zur Zeit interessanteste Beispiel eines Translationsgitters, nämlich das flächenzentriert-kubische Gitter.

Die Gleitebene des Sprunges kann im Fall „großer“ Burgers-Vektoren aus der Definition des Burgers-Vektors abgeleitet werden. Diese besagt, daß zwei unmittelbar benachbarte Punkte P und Q, zwischen denen eine Versetzung mit Burgers-Vektor  $b_2$  hindurchwandert, eine zusätzliche Verschiebung relativ zueinander um  $b_2$  erleiden<sup>2</sup> (Abb. 1). Das zusätzliche Versetzungs-

<sup>1</sup> W. T. Read, Jr., Dislocations in Crystals, McGraw-Hill, New York 1953, p. 84 f. Es wird hier behauptet, daß die Sprungebene senkrecht auf der Gleitebene  $E_1$  stünde.

<sup>2</sup> Auf den Unterschied zwischen  $b$  und  $b'$  (lokaler

Burgers-Vektor, siehe F. C. Frank, Phil. Mag. 42, 809 [1951]) sowie auf die Definition des Vorzeichens des Burgers-Vektors (siehe B. A. Bilby, Research 4, 387 [1951]) gehen wir hier nicht ein. Beides läßt sich leicht berücksichtigen.