

Klassische nichtlineare Gitterstatik gestörter Kristallstrukturen

Von E. FUES und H. STUMPF

Aus dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart
(Z. Naturforschg. 10a, 136—145 [1955]; eingegangen am 10. Januar 1955)

Zur Bestimmung der Gleichgewichtszustände von Gittern, die durch Atome auf Zwischengitterplätzen, Versetzungen usw. gestört sind, wird im klassisch mechanischen Punktmodell eine Lösungsmethode entwickelt. In Hinblick auf die Gitterdynamik sind die in der Störstelle auftretenden Bindungskräfte von Interesse, die von jenen der übrigen Gitterumgebung abweichen. Ein einfaches Beispiel, bei dem ein Atom auf einem Zwischengitterplatz in dichtester Kugelpackung eingelagert wird, zeigt, daß für physikalisch sinnvolle Teilchenpotentiale die bei Ausschwingung auftretenden rücktreibenden Kräfte am Störatom auf das 40- bis 50fache der Werte in der ungestörten Gitterumgebung ansteigen. Die Gleichgewichtsfigur und ihre Abhängigkeit vom gewählten Potential wird ausführlich beschrieben.

Von den Verfassern wurde früher¹ eine Untersuchung über die Schwingungsspektren gestörter Kristallgitter veröffentlicht. Sie gingen dabei von der Annahme aus, daß im Gitter Störsysteme enthalten sind, deren innere auf gleiche Massen reduzierten Bindungskräfte von jenen der Gitterumgebung wesentlich verschieden sind. Das Schwingungsspektrum enthielt dann bis auf Glieder des Verhältnisses der reduzierten Bindungskräfte der Umgebung zu jenen des Störsystems die Eigenfrequenzen der beiden getrennten Teilsysteme.

Diese rein mathematische Untersuchung gewinnt aber erst dann eine physikalische Bedeutung, wenn nachgewiesen werden kann, daß die vorkommenden Störungen auch tatsächlich einer solchen Annahme entsprechende Verhältnisse liefern. Nun zeigen schon Rechnungen der elastischen Kontinuumstheorie, angewendet auf Störatome und Versetzungen, daß die erwähnten Hypothesen eine physikalische Berechtigung besitzen müssen. Allein die Kontinuumsrechnungen lassen in der nächsten Umgebung der Störstelle nur qualitative Schlüsse zu, die mit den bekannten Schwierigkeiten des Abschneideradius usw. behaftet sind. Eine Rechenmethode, die das statische Analogon zur atomistischen Gitterdynamik darstellt, existiert nicht. Die Verfasser haben daher in Fortsetzung ihrer Arbeit Gleichgewichtszustände von Gittern im atomistischen Modell nach einem allgemeinen Prinzip behandelt, welches sich zur Berechnung der Gleichgewichtsfigu-

ren beliebiger Störungen anwenden läßt. In einem einfachsten Beispiel, das ein Atom auf einem Zwischengitterplatz im dichtest gepackten Gitter bildet, wird durch spezielle Rechnung gezeigt, wie ein Störsystem mit hohen inneren Bindungskräften entsteht und die dem Gleichgewichtszustand überlagerten Eigenschwingungen daher nach den Annahmen der zitierten Arbeit bestimmt werden können.

Die Untersuchung wurde im Zusammenhang mit anderen Problemen durchgeführt. Wir veröffentlichen dieses Teilergebnis, um eine Anwendung der Methode auf spezielle Fälle zu ermöglichen, und weil die Ergebnisse eine notwendige Ergänzung der vorangehenden Arbeit sind, die beide zusammen eine quantitativ begründete Aussage über die Schwingungsspektren von Realkristallen liefern können.

§ 1. Gleichgewichtszustände gestörter Gitter

Wir beginnen nun mit der Berechnung der Gleichgewichtszustände von Kristallgittern unter dem Einfluß von Störungen, die durch Atome auf Zwischengitterplätzen oder Versetzungen verursacht werden. Das Gitter wird durch ein klassisch mechanisches Modell beschrieben. Die Untersuchung zerlegen wir in mehrere Schritte. In diesem § behandeln wir das statische Verhalten bei Einwirkung beliebiger Störkräfte auf die Gitterteilchen, ohne auf die speziellen Fälle der Störungen einzugehen, und führen die Lösung der strengen statischen Gittergleichungen auf jene von Systemen linearer Gleichungen zurück. Dabei gehen wir vom ungestörten Zustand aus. Wir verwenden einen Kristall, der sich bis ins Unendliche

¹ E. Fues u. H. Stumpf, Z. Naturforschg. 9a, 897 [1954]; im folgenden als I zitiert.



ausdehnt, ordnen jedem Freiheitsgrad der im Gitter enthaltenen Teilchen die Amplitude ξ_i zu², und indizieren diese einfach durch.

Den Kristall im ungestörten Zustand denken wir uns durch Zusammenwirken der Potentiale der Einzelteilchen entstanden, und die gesamte Energie (bzw. beim unendlichen Kristall die Energiedichte) ist eine Funktion der Lage und Impulskoordinaten dieser Teilchen. Für die Gleichgewichtslage im ungestörten Gitter wird sie ein Minimum, und wir können durch Entwicklung in eine Taylor-Reihe um die Gleichgewichtslage bei sämtlichen Freiheitsgraden Aufschluß über die Reaktionen des Systems unter dem Einfluß von Störkräften gewinnen, wenn wir die zugehörigen kanonischen Gleichungen integrieren.

Während wir in der Dynamik nur die linearen Glieder der Taylor-Entwicklung in den kanonischen Gleichungen berücksichtigt hatten, ziehen wir für die Berechnung der statischen Gleichgewichtszustände auch die nichtlinearen Glieder heran.

Die Koeffizienten der Taylor-Entwicklung lassen sich im linearen Fall aus den elastischen Konstanten und anderen experimentellen Daten bestimmen, und damit erübrigt sich ein genaues Studium der Teilchenpotentiale. Im nichtlinearen Fall müssen die Potentiale der Teilchen für die klassische Behandlung korrespondenzmäßig aus der Quantentheorie übernommen werden, und ihre spezielle Gestalt ist, abgesehen von der Forderung, daß sie überhaupt stabile Konfigurationen zulassen müssen, von großem Einfluß auf die Ergebnisse der Rechnung. Diese Potentiale setzen wir im folgenden als bereits bekannt voraus. Dann lautet die Entwicklung um die Gleichgewichtslage³

$$a_k^i \xi_k + a_{kj}^i \xi_k \xi_j + a_{kjl}^i \xi_k \xi_j \xi_l + \dots = k^i, \quad (1)$$

wo k^i die Komponenten der Störkräfte sind und wir die Impulskoordinaten bereits gleich Null gesetzt haben, weil wir nur den statischen Fall betrachten wollen. Das Glied nullter Ordnung in (1) verschwindet, denn es charakterisiert die Gleichgewichtslage, und die Koeffizientenmatrizen a_{kjl}^i sind so beschaffen, daß für ein fest gewähltes i jeweils nur jene Matrixglieder $\neq 0$ werden, die die Wechselwirkung des Freiheitsgrades ξ_i mit den Verschiebungen der Teilchen seiner Umgebung bedingen.

² Im Gegensatz zu den Eigenvektoren x_{ik} in I.

In der mathematischen Behandlung von (1) beginnen wir mit den linearen Gittergleichungen

$$a_k^i \xi_k = k^i \quad (2)$$

und vernachlässigen die nichtlinearen Glieder. Um auch sie in die Rechnung einzuführen, betrachten wir die nichtlinearen Glieder zunächst als kleine Störung, die wir in die linearen Gleichungen einführen:

$$a_k^i \xi_k + \varepsilon (a_{kj}^i \xi_k \xi_j + \dots) = k^i; \quad (3)$$

danach lassen wir ε gegen 1 gehen.

Es sei jetzt ε noch beliebig, dann wird ξ_i eine Funktion von ε :

$$\xi_i = \xi_i^{(0)} + \varepsilon \xi_i^{(1)} + \varepsilon^2 \xi_i^{(2)} + \dots \quad (4)$$

Die Potenzreihe muß auch für $\varepsilon=1$ noch konvergieren, da die Natur selbst, wenn wir sie im Rahmen dieses Modells interpretieren, auch die nichtlinearen Anteile enthält und für die betrachteten Störungen tatsächlich Gleichgewichtszustände existieren, d. h. also auch die nichtlineare Rechnung konvergiert. Das Argument bezieht sich auf den Konvergenzkreis von ε . Die Verwendung einer Taylor-Entwicklung in bezug auf die Gleichgewichtslage bringt aber weitere Einschränkungen. Bei Zentralkräften mit einer Singularität im Teilchenschwerpunkt darf z. B. der Betrag der Relativverschiebung eines Teilchens gegenüber seinen nächsten Nachbarn nicht den Teilchenabstand im ungestörten Gitter überschreiten, weil die Entwicklung sonst die Konvergenzgrenze überschreiten würde. In jedem Fall ist daher eine besondere Konvergenzuntersuchung der Taylor-Entwicklung notwendig. Wir nehmen an, daß ihre Bedingungen erfüllt sind.

Unter dieser Voraussetzung wird mit (3) und (4)

$$a_k^i (\xi_k^{(0)} + \varepsilon \xi_k^{(1)} + \dots) + \varepsilon [a_{kj}^i (\xi_k^{(0)} + \varepsilon \xi_k^{(1)} + \dots) (\xi_j^{(0)} + \varepsilon \xi_j^{(1)} + \dots) + \dots] = k^i, \quad (5)$$

was für $\varepsilon \rightarrow 1$ in (1) übergeht. Für konstante k^i kann ein Koeffizientenvergleich durchgeführt werden, der nach Konstruktion in der nullten Näherung die lineare Theorie (2) ergibt. Damit sind die nichtlinearen Anteile bei konstanten Störkräften berücksichtigt. Oftmals sind jedoch die k^i selbst Funktionen des Ortes und damit der ξ_j . Bei Wechselwirkungskräften können die k^i auch im hochdimensionalen Raum der Freiheitsgrade definiert sein, und wir schreiben daher allgemein

$$k^i = \varphi^i (\xi_k \dots \xi_l). \quad (6)$$

Vorausgesetzt, daß die so definierten k^i einen Gleichgewichtszustand überhaupt gestatten, werden auch hier wieder bei Anwendung derselben

³ Über doppelte Indizes wird summiert.

Methode die ξ_j Funktionen von ε , und die Gittergleichungen lauten nunmehr

$$\begin{aligned} a_k^i (\xi_k^{(0)} + 2\xi_k^{(1)} + \dots) \\ + \varepsilon [a_{kj}^i (\xi_k^{(0)} + \varepsilon \xi_k^{(1)} + \dots) (\xi_j^{(0)} + \varepsilon \xi_j^{(1)} + \dots) + \dots] \\ = \varphi^i (\xi_k^{(0)} + \varepsilon \xi_k^{(1)} + \dots, \dots, \xi_l^{(0)} + \varepsilon \xi_l^{(1)} + \dots). \end{aligned}$$

Die rechte Seite entwickeln wir nach den $\xi_k^{(0)} \dots \xi_l^{(0)}$:

$$\begin{aligned} \varphi^i (\xi_k^{(0)} + \varepsilon \xi_k^{(1)} + \dots, \dots, \xi_l^{(0)} + \varepsilon \xi_l^{(1)} + \dots) = (7) \\ \varphi^i (\xi_k^{(0)} \dots \xi_l^{(0)}) + \Phi_h^i (\varepsilon \xi_h^{(1)} + \varepsilon^2 \xi_h^{(2)} + \dots) + \dots; \end{aligned}$$

ein Koeffizientenvergleich ergibt

$$\begin{aligned} a_k^i \xi_k^{(0)} &= \varphi^i (\xi_k^{(0)} \dots \xi_l^{(0)}), \\ a_k^i \xi_k^{(1)} &= \Phi_h^i (\xi_k^{(0)} \dots \xi_l^{(0)}) \cdot \xi_h^{(1)} \quad (8) \\ &\quad - a_{kj}^i \xi_k^{(0)} \xi_j^{(0)} - a_{kjm}^i \xi_k^{(0)} \xi_j^{(0)} \xi_m^{(0)} - \dots \end{aligned}$$

und höhere Näherungen.

Aus ihnen lassen sich die $\xi_j^{(\mu)}$ berechnen, $\mu = 1, 2, \dots$. Die rechten Seiten der Gleichungen sind immer vom vorangehenden Schritt her bekannt. Das Problem ist also gelöst, wenn wir imstande sind, lineare Gleichungen der Art

$$a_k^i \xi_k = b^i$$

zu behandeln, wo a_k^i die Matrix der Bornschen Gittergleichungen des gerade betrachteten, ungestörten Gitters ist. Dies wird in § 2 durchgeführt.

§ 2. Lineare Gittergleichungen im statischen Fall

Die Ausführungen in § 1 reduzierten das allgemeine Gitterproblem auf die Lösung von Gleichungssystemen, deren linke Seiten immer mit den linearen Gittergleichungen des gerade betrachteten Gitters übereinstimmen. Ohne uns um die Abhängigkeit der rechten Seiten von den gleichen Unbekannten zunächst zu bemühen, nehmen wir an, daß das Problem

$$a_k^i \xi_k = b^i \quad (9)$$

zur Lösung vorgelegt ist, wobei die b^i vorgegebene Konstante seien. Eine Lösung von (9) läßt sich nun finden, wenn die Lösung für eine normierte Einzelkraft gemäß

$$a_k^i y_k = \delta_{im} \quad (10)$$

bekannt ist. Sie sei

$$y_l = g_l^m, \quad \text{d. h.} \quad a_k^i g_k^m = \delta_{im},$$

dann wird

$$g_l^m b^m \quad (11)$$

⁴ E. Kröner, Z. Phys. 136, 402 [1953].

⁵ Vgl. G. Leibfried u. W. Brenig, Fortschr. Phys. 1, 205 [1953].

eine Lösung von (9), denn

$$a_k^i g_k^m b^m = \delta_{im} b^m = b^i.$$

Das Endergebnis entsteht demnach durch Superposition der Lösungen für Einzelkräfte.

Der Lösungsvektor g_l^m hat eine enge Beziehung zu dem Fundamentalintegral⁴ der elastischen Differentialgleichungen des betrachteten Kristalls.

Die linearen Gl. (10) können nämlich auch als Differenzengleichungen für einen Verschiebungsfunktionsvektor aufgefaßt werden, dessen Komponenten an den Gitterpunkten gerade (10) erfüllen. Bei langsam veränderlichen Lösungen lassen sich die Differenzengleichungen in erster Näherung durch einen Satz partieller Differentialgleichungen ersetzen, und dies sind die elastischen Gleichungen der Kontinuumstheorie⁵. Insbesondere wird also im Fall einer Einzelkraft in weitem Abstand vom Störpunkt, wo die Verschiebungen hinreichend klein und langsam veränderlich sind, die Lösung der elastischen Gleichungen mit jener der Differenzengleichung bzw. der linearen Gl. (10) nahezu übereinstimmen.

Dies legt eine Transformation der Unbekannten y_k auf die Koeffizienten einer Reihenentwicklung nach dem Fundamentalintegral und einem davon unabhängigen Funktionensystem nahe, wobei das Funktionensystem so gewählt wird, daß für immer größer werdenden Abstand vom Störpunkt die Korrekturen, also die dem Fundamentalintegral folgenden Glieder, die den Unterschied zwischen Kontinuumslösung und strenger Lösung von (10) ausmachen, immer weniger ins Gewicht fallen, wogegen in unmittelbarer Nähe des Störpunktes, wo die Kontinuumsnäherung sicher ihre Gültigkeit verliert, auch die übrigen Glieder in der Reihe einen solchen Einfluß ausüben, daß eben die strengen Differenzengleichungen erfüllt werden.

Die weiteren Ausführungen beziehen sich auf eine Einzelkraft δ_{im} , deren Ort und Richtung durch den Index m charakterisiert werde.

Das Funktionensystem sei im Dreidimensionalen durch

$$F_h^{(1)}(x, y, z), F_h^{(2)}(x, y, z), \dots, F_h^{(n)}(x, y, z)$$

gegeben, wo $F_h^{(1)}(x, y, z)$ das auf die Störkraft δ_{im} bezogene Fundamentalintegral darstellt und die $F_h^{(j)}$ ($j > 1$) das davon unabhängige System. Der Index h charakterisiert die Ausschwingrichtung, und x, y, z sind die Ortskoordinaten des Kontinuums⁶.

⁶ Den Index, der die Abhängigkeit des Fundamentalsintegrals vom Störpunkt m charakterisiert, unterdrücken wir hier, da m beliebig, aber für die weitere Betrachtung fest vorgegeben ist.

In der einfach indizierten Schreibweise entspricht dann einem bestimmten Index p ein Quadrupel h_p, x_p, y_p, z_p , wo die unten angehängte Indizierung die umkehrbar eindeutige Zuordnung zwischen den vier Zahlen h_p, x_p, y_p, z_p und p andeutet soll.

Zur Abkürzung setzen wir

$$F^{(j)}_{h_p}(x_p, y_p, z_p) = F^{(j)}(p).$$

Da zumindest das Fundamentalintegral im Störpunkt eine Singularität besitzt, können wir die Transformation nur in der Umgebung definieren, und schreiben also

$$\begin{aligned} y_m &= \alpha_0, \\ y_p &= \alpha_\sigma F^\sigma(p) \quad (p \neq m). \end{aligned} \quad (12)$$

Die Verschiebung des Teilchens, an dem die Kraft δ_{im} angreift, wird demnach nicht mittransformiert.

Je nachdem ein endlicher oder ein unendlicher Bereich gewählt wird, sind endlich oder abzählbar unendlich viele Funktionen notwendig. Die Gln. (10) gehen mit der Transformation (12) über in

$$\alpha_0 a_m^i + \alpha_\sigma F^{(\sigma)}(k) a_k^i = \delta_{im} \quad (\text{siehe }^7), \quad (13)$$

und wir haben ein Gleichungssystem für die α_i erhalten. Es ist klar, daß ein Funktionensystem gewählt werden muß, das in der Größenordnung die Abweichungen von der elastischen Lösung wiedergeben kann. Im Dreidimensionalen bieten sich die mit einer geeigneten Radialfunktion multiplizierten Kugelflächenfunktionen an, deren Ursprung jeweils in die Punktstörung gelegt wird, oder auch direkt die Ableitungen der Fundamentalintegrale.

Unter der Voraussetzung, daß die Transformation (12) eine Determinante $\neq 0$ hat, ist (13) eine äquivalente Darstellung von (10). Ihre eigentliche Bedeutung wird offenbar, wenn man beachtet, daß die $F^{(j)}(p)$ ($j > 1$) nur kleine Korrekturen gegenüber $F^{(1)}(p)$ bewirken sollen und mit wachsender Entfernung vom Störpunkt m , in dem die Einzelkraft δ_{im} wirkt, die Fundamentallösung und die $F^{(j)}(p)$ im dreidimensionalen unendlich ausgedehnten Raum mindestens wie $(r)^{-1}$ vom Störpunkt aus verschwinden, d. h. auf Grund des Ansatzes (12) die neuen Gln. (13) die Tendenz haben, sich selbst zu erfüllen, weil die Koeffizienten einfach gegen Null gehen. Unter diesen Umständen genügt es nämlich, nur eine gewisse Anzahl

$$\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_\mu$$

⁷ Bei der Summation über k wird natürlich $k=m$ ausgelassen!

zu berücksichtigen, und die übrigen zu vernachlässigen. Zu ihrer Berechnung können aus der Gesamtheit der Gln. (13) $(\mu+1)$ ausgewählt werden, deren Koeffizienten am größten geblieben sind, und dies sind die Gleichungen für die Verschiebungskomponenten im Angriffspunkt der Einzelkraft und in der unmittelbaren Umgebung davon.

Solange es aber nicht gelingt, den Fehler anzugeben, der bei der Vernachlässigung der restlichen $\alpha_{\mu+s}$ ($s = 1, 2, \dots$) auftritt, können wir keine strenge Rechtfertigung der Rechnung durchführen. Der zweite Teil dieses § muß sich also mit der Fehlerberechnung beschäftigen. Hier wird sich auch die Notwendigkeit zeigen, unendlich ausgedehnte Kristalle vorauszusetzen.

Es sei $m=0$ und

$$y_l = \bar{g}_l^0, \quad (14)$$

die nach dem beschriebenen Verfahren gewonnene Näherungsweise, d. h. bis zu $F^{(1)}$ geführte Lösung von (10) für die Einzelkraft δ_{00} im Ursprung.

Die tatsächliche Lösung sei

$$y_l = \bar{g}_l^0 + \varepsilon_l^0. \quad (15)$$

Nun wird (15) in (10) eingesetzt:

$$a_k^i (\bar{g}_k^0 + \varepsilon_k^0) = \delta_{i0}$$

oder

$$a_k^i \varepsilon_k^0 = \delta_{i0} - a_k^i \bar{g}_k^0 \equiv k^i. \quad (16)$$

Diese Gleichung für die ε_k^0 , deren rechte Seite den Fehler der Näherungslösung (14) darstellt, lösen wir durch Superposition der Einzelkräfte k^i mit den Funktionen $\bar{g}_i^i + \varepsilon_i^i$. Die Lösung lautet dann

$$\varepsilon_i^0 = k^n (\bar{g}_i^n + \varepsilon_i^n); \quad (17)$$

(17) wird nun diskutierbar, wenn wir einen unendlich ausgedehnten Kristall annehmen. Wegen der Translationsinvarianz geht dann $\bar{g}_i^n + \varepsilon_i^n$ aus (15) durch eine Verschiebung des Ursprungs hervor, die sich im diskreten Fall in einer gewissen Permutation der Indizes ausdrückt. Deshalb geht (17) über in

$$\varepsilon_i^0 = k^n \bar{g}_i^n + \beta_{ik} \varepsilon_k^0. \quad (18)$$

Die β_{ik} sind Summen aus den sehr kleinen k^i und (18) ist ein Gleichungssystem für die ε_i^0 bei dem die Hauptdiagonale gegenüber den anderen Gliedern sehr groß ist. Solche Systeme lassen sich leicht behandeln, wenn eine genauere Rechnung durchgeführt werden soll.

Eine erste Abschätzung läßt sich leicht unter folgenden Annahmen geben: Wir setzen

$$\varepsilon_0^0 = \varepsilon_0^0$$

und

$$\varepsilon_i^0 = \varepsilon_1^0 \cdot f(|\mathbf{r}_i|),$$

wo $f(x)$ eine Funktion ist, deren Betrag zwischen den Grenzen 1 und 0 liegt, und für die

$$f(1) = 1; \lim_{i \rightarrow \infty} f(|\mathbf{r}_i|) = 0$$

gilt. Aus den erwähnten Gründen wird dann

$$\varepsilon_\varrho^0 = \varepsilon_0^0; \quad \varepsilon_i^0 = \varepsilon_1^0 \cdot f(|\mathbf{r}_{i-\varrho}|), \quad \varrho \neq i,$$

wo $f(|\mathbf{r}_{i-\varrho}|)$ die auf den Punkt \mathbf{r}_ϱ als Ursprung bezogene Funktion $f(x)$ bedeutet. Einsetzen in (17) ergibt

$$\varepsilon_0^0 = k^n \bar{g}_0^n + k^n \varepsilon_0^0 + k^n \varepsilon_1^0 f(|\mathbf{r}_n|), \quad n \neq 0, \quad (19)$$

und ebenso läßt sich für ε_1^0 eine weitere Gleichung herleiten. Damit kann eine erste Abschätzung der Größenordnung des Fehlers gewonnen werden.

Am Anfang dieses § haben wir konstante Einzelkräfte angenommen. Der allgemeinere Fall findet aus diesen Betrachtungen ebenfalls eine Lösung. Sind die auftretenden Kräfte noch Funktionen der Unbekannten wie in der nullten Näherung in § 1, so müssen die durch Superposition der Einzelkräfte entstandenen Lösungsvektoren

$$\xi_i = g_i^k \varphi^k (\xi_1 \dots \xi_n) \quad (20)$$

als die durch eine unitäre Transformation veränderten Gln. (10) aufgefaßt und gelöst werden. Bei eingelagerten Störatomen oder bei Versetzungen lassen die so transformierten Gleichungen mit Hilfe von Symmetriebetrachtungen eine einfache Berechnung der ξ_i zu, wie wir an einem Beispiel in den nächsten §§ zeigen werden.

§ 3. Einzelkraft in dichtester Kugelpackung

Da die Methode ohne Rechenaufwand demonstriert werden soll, verwenden wir das einfachste Modell, das ein qualitatives Verständnis der Erscheinungen in Kristallen unter der Einwirkung von Störkräften erwartet läßt.

Die Einfachheit des Modells hängt wesentlich von vier Voraussetzungen ab: Der Gitterstruktur, der Zahl der mit einem herausgegriffenen Teilchen in Wechselwirkung stehenden benachbarten Teilchen, der Dimension und der Freiheitsgrade des Einzelteilchens. Wir setzen Zentralkräfte voraus.

Die Freiheit in den ersten zwei Annahmen wird dann durch die Stabilitätsforderung des Gitters eingeschränkt.

Die dichteste Kugelpackung ist bei Wechselwirkung eines Gitterteilchens mit seinen nächsten Nachbarn das einfachste stabile Gittermodell.

Während die zwei ersten Voraussetzungen mehr die Existenzmöglichkeit des Gitters überhaupt im Modell betreffen, bestimmen die folgenden zwei wesentlich die Reaktionen unter der Einwirkung von Störkräften. Einen Hinweis erhält man durch die Kontinuumstheorie. Hier hat jede Dimension einen charakteristischen Effekt, der durch die Singularitäten der Fundamentallösungen der ein-, zwei- und dreidimensionalen elastischen Gleichungen bewirkt wird.

Korrespondenz zur Natur kann nur ein dreidimensionales Modell aufweisen. Wir rechnen also im Dreidimensionalen, nehmen aber an, daß Verschiebungen der Teilchen nur in x -Richtung möglich seien und Verschiebungen in anderen Richtungen durch Zwangskräfte verhindert werden.

Das analytische Verhalten der Fundamentallösung in ihren Singularitäten wird durch diese Einschränkung nicht beeinflußt, so daß wir mit diesem Modell die tatsächlichen Spannungen und Verschiebungen noch qualitativ richtig werden beschreiben können. Zunächst müssen die linearen Gittergleichungen angeschrieben und ihre Lösungen für Einheitskräfte δ_{im} untersucht werden. Die Grundvektoren lauten in einem rechtwinkeligen System

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= (1, 0, 0), \\ \mathbf{e}_2 &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3}, 0\right), \\ \mathbf{e}_3 &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{6}\sqrt{\frac{2}{3}}\right). \end{aligned}$$

Jede Kombination

$$l \mathbf{e}_1 + m \mathbf{e}_2 + n \mathbf{e}_3$$

mit ganzzahligen l, m, n gibt den Ort eines Teilchens im Gitter.

Für die eigentliche Rechnung gehen wir von der Indizierung mit einem Index der §§ 1 und 2 zu einer Mehrfachindizierung über. $\xi_{l, m, n}$ sei die Verschiebung in x -Richtung jenes Teilchens, dessen Ruhelage durch den Gittervektor $l \mathbf{e}_1 + m \mathbf{e}_2 + n \mathbf{e}_3$ oder durch $(x_{l, m, n}, y_{l, m, n}, z_{l, m, n})$ in kartesischen Koordinaten angegeben wird.

Die Potentialfunktion der Teilchen legen wir noch nicht fest. Wir bezeichnen sie mit $\varphi(x)$. In die linearen Gittergleichungen geht $\varphi'(1)$ und $\varphi''(1)$ ein, wenn wir als Längeneinheit den Teilchenabstand einführen.

Ohne äußere Kräfte gilt von der Gesamtenergie U in der Gleichgewichtslage

$$\frac{\partial U}{\partial \xi_{l, m, n}} = 0;$$

dies ist sicher dann erfüllt, wenn $\varphi'(1) = 0$ wird. Bei Störkräften geht die Gleichgewichtsbedingung über in

$$\frac{\partial U}{\partial \xi_{l, m, n}} = k_{l, m, n}, \quad (21)$$

wenn die Störkräfte, die jetzt nur in x -Richtung wirken sollen, in derselben Weise, wie die Verschiebungen indiziert werden. Um die übrigen Glei-

chungen, die die Zwangskräfte beschreiben, die in der y - und z -Richtung aufgewendet werden müssen, um Verschiebungen in diese Richtungen zu verhindern, kümmern wir uns hier nicht.

Die Gln. (21) lauten dann unter den vorgegebenen Bedingungen^{8,9}

$$\varphi'' [\xi_{l-1, m, n} + \xi_{l+1, m, n} - 2 \xi_{l, m, n} + \frac{1}{4} (\xi_{l, m+1, n} + \xi_{l, m-1, n} + \xi_{l-1, m+1, n} + \xi_{l+1, m-1, n} + \xi_{l-1, m, n+1} + \xi_{l+1, m, n-1} + \xi_{l, m, n+1} + \xi_{l, m, n-1} - 8 \xi_{l, m, n})] = k_{l, m, n}$$

und mit dem Ansatz

$$\xi_{l, m, n} = f(x_{l, m, n}, y_{l, m, n}, z_{l, m, n})$$

entstehen die zugehörigen elastischen Gleichungen¹⁰, für die wir zunächst die allgemeine Kontinuumskraft $k(x, y, z)$ auf der rechten Seite einsetzen:

$$\frac{5}{4} f_{xx} + \frac{5}{12} f_{yy} + \frac{1}{3} f_{zz} = k(x, y, z).$$

Die verschiedenen Faktoren zeigen an, daß die Verschiebung eine Hauptrichtung besitzt und in der y - z -Ebene schneller radial von der Einzelkraft weg abklingt als in x -Richtung.

$$\begin{aligned} \text{Für} \quad k(0, 0, 0) &= 1, \\ k(x, y, z) &= 0 \end{aligned}$$

lautet das Fundamentalintegral

$$f(x, y, z) = \left(\frac{4}{5} x^2 + \frac{12}{5} y^2 + 3 z^2 \right)^{-1/2}.$$

Nun setzen wir nach (12) die Transformation an

$$\xi_{000} = \alpha_0, \quad (22)$$

$$\xi_{l, m, n} = \alpha_1 \left(\frac{4}{5} x_{l, m, n}^2 + \frac{12}{5} y_{l, m, n}^2 + 3 z_{l, m, n}^2 \right)^{-1/2}.$$

Die Reihe (22) haben wir bereits nach dem Fundamentalintegral abgebrochen. Zur Bestimmung von α_0 und α_1 dienen die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \xi_{-100} + \xi_{100} - 2 \xi_{000} + \frac{1}{4} (\xi_{010} + \xi_{-110} + \xi_{0-10} + \xi_{1-10} + \xi_{-101} + \xi_{001} + \xi_{00-1} + \xi_{10-1} - 8 \xi_{000}) &= \frac{1}{\varphi''}, \\ \xi_{000} + \xi_{200} - 2 \xi_{100} + \frac{1}{4} (\xi_{110} + \xi_{010} + \xi_{1-10} + \xi_{2-10} + \xi_{001} + \xi_{101} + \xi_{10-1} + \xi_{20-1} - 8 \xi_{100}) &= 0. \end{aligned}$$

Einsetzen der Formeln (22) unter Berücksichtigung der speziellen Werte liefert

$$-4 \alpha_0 + 3,6 \alpha_1 = \frac{1}{\varphi''},$$

⁸ Eine allgemeine Ableitung s. Handbuch d. Physik Bd. XXIV M. Born u. M. Goepert-Mayer, Kap. 4 S. 628.

$$\alpha_0 - 2,75 \alpha_1 = 0$$

und daraus

$$\xi_{000} = -\frac{0,37}{\varphi''} \quad (23)$$

sowie

$$\xi_{l, m, n} = -\frac{0,135}{\varphi''} \left(\frac{4}{5} x_{l, m, n}^2 + \frac{12}{5} y_{l, m, n}^2 + 3 z_{l, m, n}^2 \right)^{-1/2}.$$

Damit ist für eine Einzelkraft im Ursprung die Fundamentallösung berechnet. Wegen des unendlich ausgedehnten Kristalls geht die Lösung für eine Einheitskraft an der Stelle $(x_{l, m, n}, y_{l, m, n}, z_{l, m, n})$ durch Translation jener für die Einheitskraft im Ursprung hervor.

Es bleibt, den Abbruch der Reihenentwicklung nach dem Fundamentalintegral durch eine Fehlerabschätzung zu rechtfertigen.

Verfahren wir nach der Methode am Schluß des § 2, so ergibt die Rechnung, die wir hier nicht wiedergeben

$$\varepsilon_0^0 \approx \frac{0,08}{\varphi''}, \quad \varepsilon_1^0 \approx \frac{0,03}{\varphi''}$$

bei der Einheitskraft unter der Annahme $f(x) \equiv 1/|r|$. Die Korrektur beträgt ungefähr 20% der in unserer Näherung im Zentrum berechneten Werte. Ihren Einfluß auf das Endergebnis müssen wir in den weiteren §§ verfolgen, da die Einbeziehung nichtlinearer Glieder den prozentualen Anteil des Fehlers zur wahren Lösung gegenüber jenen des Fehlers zur Lösung (23) verändert.

§ 4. Atom auf einem Zwischengitterplatz

Wir betrachten die dichteste Kugelpackung mit einem Freiheitsgrad der Verschiebung pro Atom in x -Richtung, und setzen an der voll gedruckten Stelle ein Störatom S ein. S sei zugleich der Nullpunkt des Koordinatensystems. Für die weiteren Rechnungen verwenden wir wieder die Einfachindizierung der §§ 1 und 2.

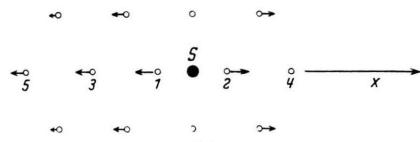


Abb. 1.

Wir ziehen für die Kraftwirkung nur nächste Nachbarn in Betracht. Dies sind gerade die Atome 1 und 2 der in Abb. 1 gezeichneten Netzebene. Alle anderen Nachbarn haben eine größere Entfernung von S und wir vernachlässigen ihre Wechselwir-

⁹ $\varphi'' \equiv \varphi''(1)$.

¹⁰ Siehe S. 138 und Fußnote 5.

kung mit S, weil sie sicher bedeutend kleiner als jene mit den Atomen 1 und 2 ist. Auf die Atome 1 und 2 wirkt dann die Kraft $k_1(\xi_1)$ bzw. $k_2(\xi_2)$, die eine Funktion des Abstandes von der Ruhelage der Atome 1 und 2 ist, wenn man sich S festgehalten denkt. Das zugehörige Gleichungssystem lautet in einfacher Indizierung

$$a_k^i \xi_k = k_1(\xi_1) \delta_1^i - k_1(\xi_2) \delta_2^i, \quad (24)$$

wenn man beachtet, daß aus Symmetriegründen

$$k_1(x) = -k_2(x) \quad \text{sein muß.}$$

Die Lösung entsteht durch Superposition der Lösungen für Einzelkräfte, von denen die erste lautet:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= -\frac{0,37}{\varphi''} k_1(\xi_1), & (i=1) \\ \xi_i &= -\frac{0,135}{\varphi''} k_1(\xi_1) \left[\frac{4}{5} \left(x_i + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{12}{5} y_i^2 + 3 z_i^2 \right]^{-1/2}, \end{aligned}$$

die zweite:

$$\begin{aligned} \xi_2 &= \frac{0,37}{\varphi''} k_1(\xi_2), & (i=2) \\ \xi_i &= \frac{0,135}{\varphi''} k_1(\xi_2) \left[\frac{4}{5} \left(x_i - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{12}{5} y_i^2 + 3 z_i^2 \right]^{-1/2}. \end{aligned}$$

Superposition liefert

$$\begin{aligned} \xi_1 &= -\frac{0,37}{\varphi''} k_1(\xi_1) + \frac{0,135}{\varphi''} \sqrt{\frac{5}{4}} k_1(\xi_2), & (25) \\ \xi_2 &= \frac{0,37}{\varphi''} k_1(\xi_2) - \frac{0,135}{\varphi''} \sqrt{\frac{4}{5}} k_1(\xi_1), \\ (i &\neq 1,2) \\ \xi_i &= \frac{0,135}{\varphi''} \left\{ -k_1(\xi_1) \left[\frac{4}{5} \left(x_i + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{12}{5} y_i^2 + 3 z_i^2 \right]^{-1/2} \right. \\ &\quad \left. + k_2(\xi_2) \left[\frac{4}{5} \left(x_i - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{12}{5} y_i^2 + 3 z_i^2 \right]^{-1/2} \right\}. \end{aligned}$$

Damit haben wir das Verschiebungsfeld um S in Abhängigkeit von den Störkräften $k_1(\xi_1)$ und $-k_1(\xi_2)$ dargestellt. Da die Störkräfte selbst Funktionen von ξ_1 und ξ_2 sind, müssen die Verschiebungen (25) im Sinne von (20) als das durch eine unitäre Transformation umgeformte Gleichungssystem (24) aufgefaßt und gelöst werden. Zufolge der Symmetrie wird $|\xi_1| = |\xi_2|$, und die Lösung von (25) reduziert sich auf eine einzige Gleichung, nämlich jene für ξ_1 . Die übrigen Verschiebungen enthalten ξ_1 nur als Parameter.

Wir setzen nun dasselbe Potential für S wie für die Atome des ungestörten Gitters an. Die Kraft ist dann $\varphi'(x) e_1$.

Damit sind wir mit der Rechnung dort angelangt, wo wir spezielle Voraussetzungen über das Potential der Einzelteilchen einführen müssen. Seine Bestimmung ist eine schwierige theoretische Aufgabe, die eine

Untersuchung der Elektronenzustände in Abhängigkeit von den Kernparametern notwendig macht und im allgemeinen sämtliche Kernkoordinaten einbeziehen wird, d. h. das Wechselwirkungspotential ist von der Gesamtconfiguration abhängig. Dies kann streng nur durch eine Lösung der Schrödinger-Gleichung des Gesamtsystems der Kerne und Elektronen geschehen. Wir wollen uns hier nicht damit beschäftigen, sondern suchen aus experimentellen Daten einen ersten Hinweis über die Gestalt des Potentials zu gewinnen. Bekanntlich lassen sich die Konstanten der linearen Gittergleichungen aus den elastischen und optischen Konstanten berechnen und damit auch die zweiten Ableitungen des Potentials. Auch die dritten Ableitungen ließen sich noch aus dem thermischen Verhalten der Stoffe herleiten. Da S nur auf Druck beansprucht wird in einem Bereich kleiner als der Gleichgewichtsabstand, wo der Potentialanstieg sehr steil ist, können wir uns bei den Kräften nicht auf die lineare Näherung beschränken, sondern brauchen für unsere Rechnungen das gesamte Potential, d. h. sämtliche Ableitungen an einer Stelle, also weit mehr als die Konstantenrelationen leisten. Damit wird offenbar, daß wir den ganzen Potentialverlauf hypothetisch einführen müssen, wenn wir auf die Quantentheorie verzichten.

Ein einfaches Potential, das die gewünschte Stabilität gewährleistet, ist

$$-\frac{a}{|\mathbf{r}|^q} + \frac{b}{|\mathbf{r}|^p} \quad (26)$$

bei dem $a q = b p$ wegen $\varphi'(0) = 0$ sein muß. Physikalisch sinnvolle Werte für q und p lassen sich in einer ersten Abschätzung z. B. aus der Mie-Grüneisen'schen Zustandsgleichung für feste Körper gewinnen¹¹. Aus ihr folgt unter der Annahme von (26) als Wechselwirkungspotential für Kristalle mit primitiven Gittern

$$q = 3, \quad p = 12$$

durch Vergleich mit der Sublimationswärme am absoluten Nullpunkt. Wir setzen $a = q^{-1}$ und $b = p^{-1}$. Der gemeinsame Proportionalitätsfaktor hebt sich bei der Variation heraus. Dann wird

$$\varphi(x) = -\frac{1}{3} \frac{1}{x^3} + \frac{1}{12} \frac{1}{x^{12}}$$

und

$$k_1(x) = -\frac{1}{x^4} + \frac{1}{x^{13}},$$

wenn man beachtet, daß das Störpotential mit einem Minuszeichen versehen auf der anderen Seite steht. Es ist $\varphi''(1) = q$ und nach

$$\xi_1 = -\frac{1}{9} \cdot 0,22 \left(-\left| -\frac{1}{2} + \xi_1 \right|^{-4} + \left| -\frac{1}{2} + \xi_1 \right|^{-13} \right).$$

¹¹ Handbuch d. Physik, Bd. XXIV. Born-Goeppert-Maier, Kap. 4, S. 677–681.

Die Lösung dieser Gleichung finden wir durch Einsetzen und Vergleichen der Werte. Sie ist

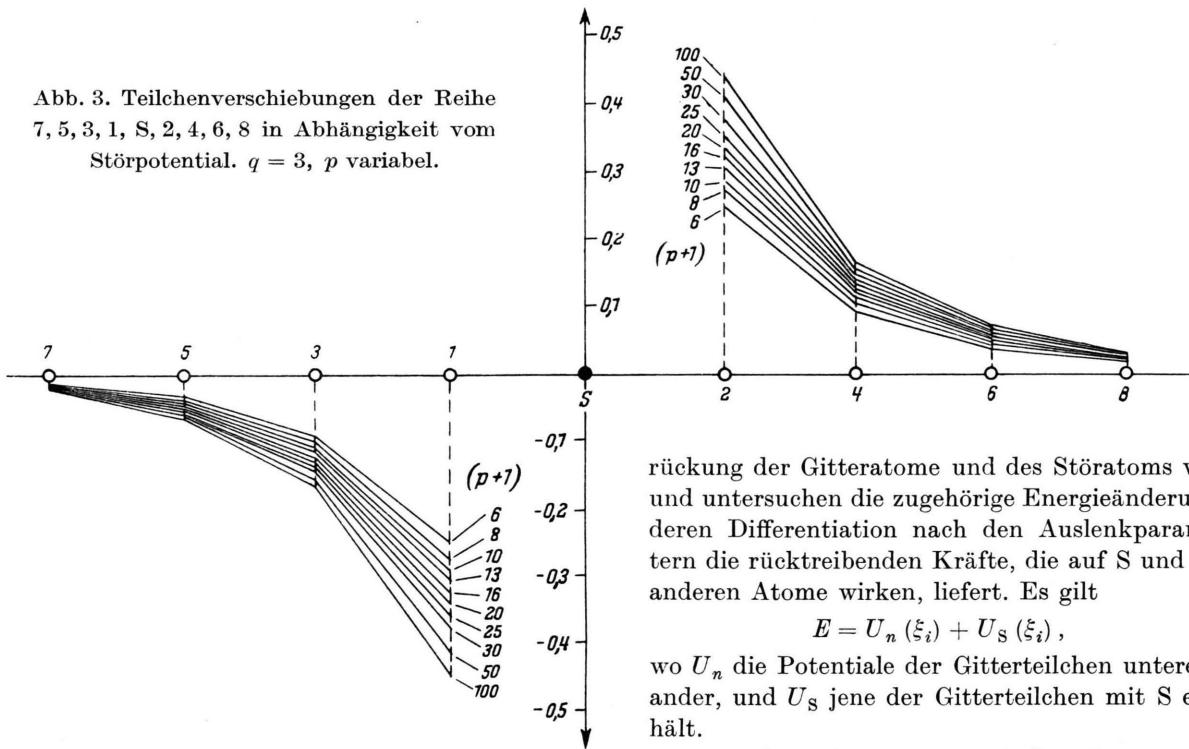
$$\xi_1 = -0,31.$$

Bei Anbringung der maximalen 20-proz. Korrektur wird daraus

$$\xi_1^* = -0,30.$$

Also unterscheiden sich ξ_1 und ξ_1^* um 3 %. Diese Verschiebung des Fehlerprozentsatzes wird durch die Nichtlinearität der Gleichung für ξ_1 bedingt, in die der Fehler als Koeffizient eingeht. Damit ist der Wert von $k_1(\xi_1)$ bestimmt, und die übrigen Verschiebungen können nun leicht in Abhängigkeit von $k_1(\xi_1)$ berechnet werden. Es zeigt sich, daß nennenswerte Verschiebungen nur in der Kette $\dots, 5, 3, 1, S, 2, 4, \dots$ auftreten.

Abb. 3. Teilchenverschiebungen der Reihe 7, 5, 3, 1, S, 2, 4, 6, 8 in Abhängigkeit vom Störpotential. $q = 3$, p variabel.



Geht man dazu über, den Koeffizienten p bei festgehaltenem q zu variieren, so entstehen folgende Verschiebungen (Abb. 2 u. 3):

Je höher p wird, um so größer wird ξ_1 und die Nachbarverschiebungen, und um so notwendiger wird es, die nichtlinearen Näherungen heranzuziehen. Wir werden im nächsten § ein einfaches Kriterium finden, von welchem p -Wert man sicher weitere Näherungsschritte durchführen muß.

§ 5. Spannungen um die Störstelle

Durch das Einsetzen des Störatoms wird ein neuer Gleichgewichtszustand bewirkt. Wir denken uns nun das Gitter in diesen, in den vorangegangenen §§ beschriebenen Zustand versetzt, und fragen nach den um die Störstelle auftretenden Spannungen. Dazu nehmen wir eine virtuelle Ver-

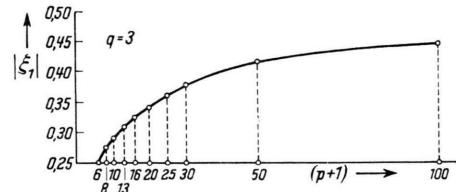


Abb. 2. Abhängigkeit des Betrages der Verschiebung der beiden S benachbarten Teilchen vom gewählten Potential, $q = \text{const}$, $p = \text{variabel}$.

rückung der Gitteratome und des Störatoms vor, und untersuchen die zugehörige Energieänderung, deren Differentiation nach den Auslenkparametern die rücktreibenden Kräfte, die auf S und die anderen Atome wirken, liefert. Es gilt

$$E = U_n(\xi_i) + U_S(\xi_i),$$

wo U_n die Potentiale der Gitterteilchen untereinander, und U_S jene der Gitterteilchen mit S enthält.

Bei um ξ_1 aus der Gleichgewichtslage des ungestörten Gitters verschobenen Teilchen hat die Gesamtenergie mit Störsystem ihr Minimum. Daher wird

$$(j = 1, 2, \dots) \quad \left(\frac{\partial U_n(\xi_i)}{\partial \eta_j} + \frac{\partial U_S(\xi_i)}{\partial \eta_j} \right) + \sum_h \left(\frac{\partial U_n(\xi_i)}{\partial \eta_j \partial \eta_h} + \frac{\partial U_S(\xi_i)}{\partial \eta_j \partial \eta_h} \right) \eta_h \dots = 0$$

für $\eta_1 \dots \eta_l = 0$, d. h.

$$\frac{\partial U_n(\xi_i)}{\partial \eta_j} + \frac{\partial U_S(\xi_i)}{\partial \eta_j} = 0. \quad (j = 1, 2, \dots).$$

Daß dies erfüllt ist, sieht man, wenn der Ausdruck noch einmal nach den Ruhelagen des ungestörten Gitters entwickelt wird. Man erhält wegen $\partial U / \partial \eta_i = \partial U / \partial \xi_i$ gerade die Gittergl. (1).

Die Gittergleichungen für die virtuellen Verrückungen y_h oder die dem Störzustand überlagerter Wärmeschwingungen lauten demnach in linearer Näherung

$$\sum_h \left(\frac{\partial U_n(\xi_i)}{\partial \eta_j \partial \eta_h} + \frac{\partial U_s(\xi_i)}{\partial \eta_j \partial \eta_h} \right) y_h = \ddot{y}_j \cdot \text{const} \quad (27) \quad (j = 1, 2, \dots)$$

Da merkliche Verschiebungen nur in der Reihe 5, 3, 1, S, 2, 4, ... auftreten, werden wir nur dort eine bedeutende Änderung der rücktreibenden Kräfte finden. Die rücktreibenden Kräfte der Reihe in x -Richtung werden durch den Zähler von (27a) bestimmt, wie man leicht einsieht, indem man die linke Seite von (27) explizit anschreibt. Das Verhältnis

$$\frac{\varphi''(|x_i + \xi_i - (x_k + \xi_k)|)}{\varphi''(1)} \quad (27 \text{ a})$$

gibt die Erhöhung der rücktreibenden Kräfte gegenüber der ungestörten Gitterumgebung an. In Abb. 4 ist es zwischen je zwei Nachbarn für verschiedene p eingezeichnet.

Abb. 4 ergibt sogleich ein Kriterium für die Anwendbarkeit der linearen Näherung. Die Spannungen zwischen 1–3 dürfen nicht größer sein, als zwischen 1–S. Da aber mit Ausnahme von S, das wegen der allseitigen Druckbeanspruchung sein vollständiges Potential bereits in der ersten Näherung erhält, alle Potentiale in dieser Näherung leichter deformierbare Teilchen vortäuschen, als es wirklich der Fall ist, so werden für steigende p die Abstände 1–3, 3–5 usw. kleiner werden, als es das vollständige Potential eigentlich erlaubte, und nur bei S die tatsächlich möglichen Werte annehmen. Die Spannungen zwischen 1–3 werden dann größer als zwischen 1–S und zeigen, daß die Grenze der linearen Näherung überschritten ist.

Abb. 4 zeigt ferner, daß für $p=12$ ein solcher Zustand erreicht ist. Ausführung einer ersten Korrektur, die wir hier nicht wiedergeben, stellt Spannungsverhältnisse her, die mit 13 korrig. in Abb. 4 eingezeichnet ist.

Wegen des raschen Spannungsabfalls kann die Kette 3, 1, S, 2, 4 als Störsystem mit hohen inneren Spannungen im Sinne der Arbeit I aufgefaßt werden. Die Frequenzen der Eigenschwingungen

sind der Wurzel aus den Direktionskräften proportional. Daraus folgt unter der Annahme gleicher Masse von S und der Gitterteilchen, daß Eigenfrequenzen auftreten, die das

$$\left[\frac{\varphi''(|x_i + \xi_i - (x_k + \xi_k)|)}{\varphi''(1)} \right]^{1/2} \text{-fache gegenüber den}$$

maximalen Eigenfrequenzen des ungestörten Gitters betragen; für $p=12$ also etwa das $6\frac{1}{2}$ -fache. Die Verhältnisse steigen mit wachsendem p . Die Notwendigkeit, dabei höhere Näherungen zu verwenden, zwingt uns noch zu einer Bemerkung über die Rechenmethode mit Taylor-Entwicklungen. Das geschieht in § 6.

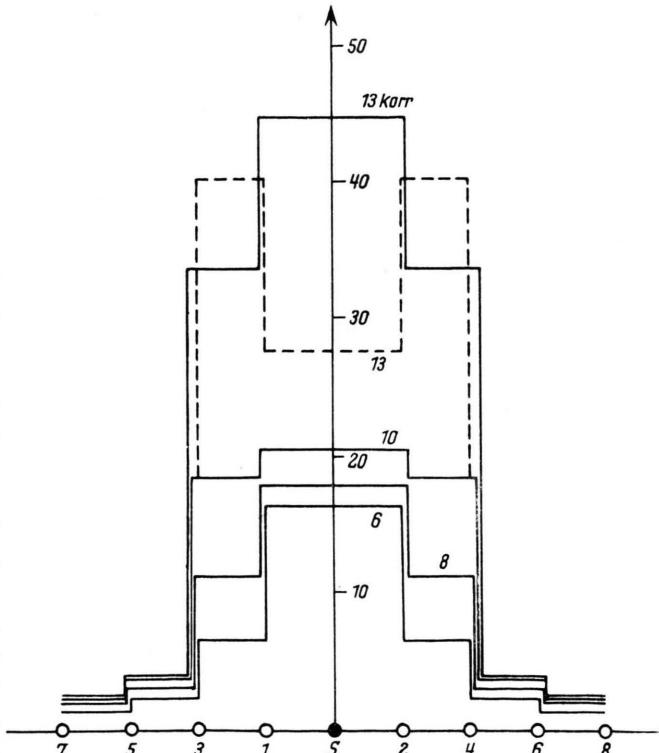


Abb. 4. Verhältnis der rücktreibenden Kräfte in der Kette 7, 5, 3, 1, S, 2, 4, 6, 8 zu jenen der ungestörten Gitterumgebung in Abhängigkeit vom Potential $(p+1) = 6, 8, 10, 13$. Kurve 13 korrig. in nichtlinearer Näherung berechnet.

§ 6. Die Gittergleichungen bei Versetzungen

Wie Abb. 2 zeigt, geht $|\xi_1|$ für wachsende p gegen $1/2$. In die Taylor-Entwicklung der nichtlinearen Näherung sind Wechselwirkungen zwischen den Teilchen 1 und 2 aufgenommen. Da die Entwicklung vom Potential an der Stelle 1 (Teilchenabstand als Einheit) ausgeht, und zwischen

den Teilchen 1 und 2 ein Potential $\varphi(1 + |\xi_1| + |\xi_2|)$ wirksam ist, so gelangt für größere p die Entwicklung bedenklich nahe an den Konvergenzradius, wenn $\varphi(x)$ in 0 eine Singularität besitzt. Die nichtlinearen Näherungen konvergieren dann schlecht. Das gleiche tritt ein, wenn ein begrenztes Flächenstück von Störatomen, Abb. 5, das in der Zeichnung

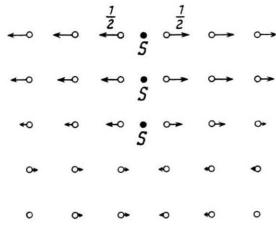


Abb. 5.

als schwarze Reihe erscheint und aus der Zeichen-ebene heraus fortgesetzt gedacht werden muß, in das Gitter eingesetzt wird, um eine Versetzung zu erzeugen. Die Berechnung der ersten Näherung geschieht durch Superposition der Einzelkräfte und Symmetriebetrachtung wie beim einzelnen Störatom. Aber die von den Rändern weit entfernten und an das Zentrum der Störfläche grenzenden Atome werden Verschiebungen von nahezu 1/2 erleiden, weil dort sich die ungestörte Gitterstruktur mit Normalabständen herstellt. Wie beim Störatom befinden sich aber auch Glieder in der Taylor-Entwicklung (und können nicht ausgelassen werden), die die Wechselwirkung eines Atoms auf der einen Seite mit dem gegenüberliegenden

auf der anderen Seite betreffen. Auch hier ist die Konvergenz in den höheren Näherungen gefährdet. Um diese Schwierigkeit zu beseitigen, bedenken wir, daß sich die nichtlinearen Glieder auch durch Differenzbildung von

$$\frac{\partial U_n}{\partial \xi_i} - a_k^i \xi_k$$

beschreiben lassen. Einsetzen in (3) liefert unter Verwendung von (6)

$$a_k^i \xi_k + \varepsilon \left(\frac{\partial U_n}{\partial \xi_i} - a_k^i \xi_k \right) = \varphi^i(\xi_k \dots \xi_l) ;$$

mit $\xi_i = \xi_i^{(0)} + \varepsilon \xi_i^{(1)} + \varepsilon^2 \xi_i^{(2)} + \dots$

erhält man durch Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} a_k^i \xi_k^{(0)} &= \varphi^i(\xi_k^{(0)} \dots \xi_l^{(0)}), \\ a_k^i \xi_k^{(1)} &= \Phi_h^i(\xi_k^{(0)} \dots \xi_l^{(0)}) \cdot \xi_h^{(1)} \\ &\quad - \frac{\partial U_n(\xi_j^{(0)})}{\partial \xi_i} + a_k^i \xi_k^{(0)}, \\ &\quad \vdots \quad \vdots \quad . \end{aligned} \quad (28)$$

Dabei tritt eine Taylor-Entwicklung der Gesamtenergie an der Stelle $\xi_1^{(0)} \dots \xi_N^{(0)}$ auf, die sicher gut in den weiteren Näherungen konvergiert. Denn z. B. bei der Wechselwirkung zweier auf verschiedenen Seiten der Störfläche befindlichen regulären Gitterteilchen wird um den Wert 2 eine Entwicklung vorgenommen, was für die zu erwartenden Korrekturen sicher nicht über den Konvergenzradius führt.

Der eine von uns möchte Herrn Dr. Seeger für interessante und instruktive Gespräche zum Themenkreis, dem diese Arbeit angehört, herzlich danken.