

Klassische nichtlineare Gitterstatik eindimensionaler Gitterstörungen

Von E. FUES, H. STUMPF und F. WAHL

Aus dem Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart
(Z. Naturforschg. 13 a, 962—978 [1958]; eingegangen am 19. Juli 1958)

Im klassisch mechanischen Punktmodell eines Kristalls, in dem die Gitteratome durch Ersatzpotentiale beschrieben werden, wird eine atomistische Theorie zur Berechnung von Gleichgewichtszuständen gegeben, die durch elastisch-plastische Deformation aus dem idealen Gitter hervorgehen. Dazu zählen vornehmlich die Versetzungen. Die Bornschen Gittergleichungen sind natürlich hier nicht mehr anwendbar. Es muß die Gesamtenergie betrachtet werden, ohne sich dabei auf kleine Auslenkungen festzulegen. Mit einer Ausgangsverschiebung, die die Teilchen aus den idealen Ruhelagen angenähert in die plastisch deformierte Position bringt, beginnt der Prozeß. An den Gitterteilchen herrscht im allgemeinen dabei noch kein Gleichgewicht und es greifen an ihnen noch nichtverschwindende Gitterkräfte an. Die Gitterkräfte, die von der Entfernung zur strengen Gleichgewichtsposition abhängen, müssen im Gleichgewichtszustand selbst verschwinden. Zerteilt man die gesamten Kräfte in lineare und nichtlineare Anteile, so kann man das Verschwinden auch als ein Gleichgewicht der linearen Kraftanteile gegenüber den nichtlinearen Kraftanteilen der Gitterwechselwirkung betrachten. Diese Auffassung eröffnet den Weg zur Behandlung mit den Hilfsmitteln der Gitterstatik für kleine Auslenkungen aus den idealen Ruhelagen. Obwohl hier die kleinen Auslenkungen von einem vorverschobenen, also nichtidealen Zustand des Gitters ausgehen, und in die endgültige plastisch deformierte Gleichgewichtslage führen, läßt sich die Bedingung für das Kräftegleichgewicht der linearen und nichtlinearen Kräfte so umformen, daß formal die Gittergleichungen für kleine Auslenkungen aus den idealen Ruhelagen entstehen. Diese kann man mit Hilfe einer Transformation leicht behandeln, wie früher (s. Anm.¹ und § 4) gezeigt wurde. Die nichtlinearen Anteile spielen dabei die Rolle von „Störkräften“, die linearen übernehmen den elastischen Anteil der Gitterreaktion. Besondere Schwierigkeiten bilden die Sprungstellen der Deformation, wie sie aus Versetzungslösungen der elastischen Theorie wohlbekannt sind. Bei ihnen wird der Zusammenhang der Teilchen zerrissen. Daß man trotzdem die idealen Gittergleichungen dafür erhalten kann, bildet den Gegenstand der Modellbetrachtung einer geraden Stufen- und Schrauberversetzung in einem einatomigen Kristall. Dies ist stellvertretend für alle Fälle mit plastischen Deformationen aufzufassen. Die numerischen Ergebnisse werden in weiteren Arbeiten dargestellt.

§ 1. Das Problem eindimensionaler Störungen

Bei der klassischen Berechnung der Ruhelagen eines Realgitters mit verschiedenartigen Störkonfigurationen werden die den Kristall aufbauenden Gitterteilchen in ihrer Wechselwirkung durch klassische Ersatzpotentiale beschrieben, und die Ruhelagen müssen aus jenen Gleichungen berechnet werden, die sich aus der Minimalforderung für die Gesamtenergie des Kristallgitters ergeben. In einer vorangehenden Arbeit¹ wurde hierzu eine Transformation abgeleitet, mit der auf einfache Weise die Verschiebungen der Gitterteilchen aus den idealen Ruhelagen unter dem Einfluß einer angenommenen Störung bestimmt werden können. Es zeigt sich aber, daß eine Erweiterung dieser Transformationsmethode notwendig ist, um die vielfältigen Möglichkeiten von Störungen des Kristallaufbaues zu erfassen. Teilen wir nämlich die Störungen in zwei Klassen ein, solche, die mit rein elastischen Deformationen, und andere, die sowohl mit elastischen als auch mit plastischen Distorsionen verknüpft sind,

¹ E. FUES u. H. STUMPF, Z. Naturforschg. 10 a, 136 [1955]. Im folgenden mit I bezeichnet.

so bedarf der Fall der gemischt elastisch-plastischen Distorsion einer besonderen Betrachtung, die wir im folgenden durchführen wollen.

Die gegebene Einteilung in rein elastische und elastisch-plastische Deformationen entspricht praktisch der Einteilung der Störungen in nulldimensionale und eindimensionale Fälle, wobei der eindimensionale Fall durch die Ausdehnung der Störung längs einer mindestens endlich langen Linie definiert ist, der nulldimensionale aber in keiner Richtung eine Ausdehnung von mehr als atomarer Größenordnung aufweist. Zu den nulldimensionalen Störungen zählen Gitterlücken, Fremdatome, Zwischengitteratome und Assoziationen von derartigen Störungen, dagegen bilden Versetzungslinien typisch eindimensionale Gitterstörungen.

Um zu begründen, daß eindimensionale Störungen eine Erweiterung der in I abgeleiteten Gitterstatik erzwingen, erinnern wir daran, daß die Elastizitätstheoretische Methode zur Erzeugung eindimensionaler Störungen im Anbringen von Schnittflächen im Kristall besteht, längs deren die Stetigkeit der Verschiebungen unterbrochen wird. Das Verschie-



bungsfeld erleidet längs dieser Schnitte einen Sprung, der nach dem Wiederausammenfügen des Gitters erhalten bleibt. Der Bereich starker Störung der idealen Kristallstruktur ist trotzdem im wesentlichen auf einen Kern um die Versetzungslinie beschränkt; in weiter Entfernung von der Störlinie muß daher eine lineare Theorie berechtigt sein. Daraus folgt aber, daß in weiter Entfernung von der Störlinie auch längs der früheren Schnittfläche die Elastizitätstheorie mit der Gitterstatik übereinstimmende Ergebnisse zeitigen muß. In der Gitterstatik nulldimensionaler Störungen sind derartige Unstetigkeiten aber noch nicht aufgetreten. Die gitterstatischen Gleichungen sind also für diese Schnittflächen einer veränderten Auswertung zugänglich zu machen. In diese Frage ist, wie wir weiter sehen werden, das Hauptproblem der Anwendung des in I vorgeschlagenen Verfahrens auf eindimensionale Störungen eingeschlossen.

In den nachfolgenden Erörterungen beschränken wir uns zunächst auf die zwei einfachsten Fälle gerader Schrauben- und Stufenversetzungslinien in einatomigen Kristallen, um erst später auf den allgemeinen Fall gekrümmter, den Kristall von Oberfläche zu Oberfläche durchziehender, oder ganz im Innern desselben verlaufender, in sich geschlossener Versetzungslinien konstanten BURGERS-Vektors einzugehen. Dabei werde der betrachtete Kristallbereich bis ins Unendliche reichend vorgestellt, damit wir von allen Oberflächeneffekten freikommen. Soweit es sich als notwendig erweisen wird, auf die Erzeugung der Gitterstörungen aus einem Idealgitter einzugehen, denken wir uns die Versetzungslinie jeweils längs ihrer Gleitebene in den (zunächst noch endlichen) Gitterblock hineingewandert, wie das die Abb. 1 a und 1 b andeuten.

Als frühere Ursache ihrer Erzeugung kann man sich etwa die schwach angedeuteten äußeren Scherungs- bzw. Kompressionskräfte vorstellen. Der Gitterzustand liege aber jetzt unserer Betrachtung als fertiger, ohne äußere Kräfte stabiler Zustand zugrunde, und in den Rechnungen erscheinen nur die Verschiebungen der Gitterteilchen aus den Ruhezuständen des idealen Gitters in den neuen Gleichgewichtszustand, die selbstverständlich vom Erzeugungsprozeß unabhängig sind.

Die hier an einatomigen Kristallen demonstrierten allgemeinen Verfahrensweisen werden in weiteren Arbeiten numerisch bei Ionenkristallen ausgewertet. Der einatomige Typ erlaubt alle Rechnungen

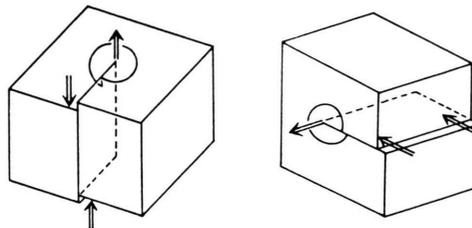


Abb. 1 a, b. In den Kristall eingewanderte Schrauben- bzw. Stufenversetzung.

möglichst einfach zu gestalten. Die Übertragung auf den polaren Kristall macht keine grundsätzlichen Schwierigkeiten.

Da dies den ersten systematischen Versuch zu einer atomistischen Berechnung von eindimensionalen Störungen darstellt, liegt kein theoretisches Vergleichsmaterial vor, außer einer Arbeit von HUNTINGTON², auf die wir am Laufe der Untersuchung noch näher eingehen werden.

§ 2. Wechselwirkungsenergien

Will man, wie vorhin besprochen, auch plastische Deformationen in der Gitterstatik zulassen, so dürfen zu Beginn der Rechnung keinesfalls jene Operationen vorgenommen werden, welche analog zur Ableitung der linearen Elastizitätstheorie im Kontinuum auf lineare atomistische Gleichungen führen. Vielmehr muß der allgemeinst mögliche Fall von Wechselwirkung der Gitterteilchen betrachtet werden, bei dem die Potentiale noch nicht durch Entwicklungen an bestimmte Abstände fixiert sind. Erst danach kann durch eingehende Betrachtung der Wirkungen plastischer Deformationen der Versuch unternommen werden, in gewissen Grenzen wieder eine lineare Theorie zu erhalten. Die lineare Theorie erscheint demnach hier nicht als eine apriori in die Rechnungen gelegte Forderung, sondern bestenfalls – wenn überhaupt – als Ergebnis einer genauen Untersuchung des postulierten Gleichgewichtszustandes des Kristalls. Wir gehen also von den vollständigen Ersatzpotentialen der Teilchen aus.

Um das Problem wohldefiniert zu machen, beschränken wir uns auf einatomige Kristalle und beginnen zunächst mit der Beschreibung des idealen Zustands. In ihm können die Gitterteilchen durch die Indizes i, j, l bzw. m, n, p charakterisiert werden,

² H. B. HUNTINGTON u. J. E. DICKEY, Phys. Rev. **100**, 1117 [1956].

und die Ortsvektoren zu den Ruhelagen des Teilchens mit den Indizes i, j, l lauten

$$\mathfrak{R}_{ijl}^0 = d(i \mathbf{e}_1 + j \mathbf{e}_2 + l \mathbf{e}_3), \quad (1)$$

wenn ein System mit den Basisvektoren $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ verwendet, und als kürzester Teilchenabstand d genommen wird. Beschränken wir uns weiterhin auf Zweiteilchenwechselwirkungen $P(x)$, welche allein vom Abstand der Teilchen abhängen, so muß die Variable x definiert sein durch

$$x = |\mathfrak{R}_{ijl}^0 - \mathfrak{R}_{mnp}^0|, \quad (2)$$

sofern die Teilchen sich auf ihren idealen Gitterplätzen befinden. Läßt man Auslenkungen $\vec{\xi}_{ijl}$ um die Ruhelagen (1) des idealen Gitters zu, so wird

$$x = |\mathfrak{R}_{ijl}^0 + \vec{\xi}_{ijl} - \mathfrak{R}_{mnp}^0 - \vec{\xi}_{mnp}|. \quad (3)$$

Da der Abstand im idealen Gitter konstant ist, und nur die $\vec{\xi}_{ijl}$ zunächst als willkürlich variabel angesehen werden, so können wir auch schreiben

$$P(|\mathfrak{R}_{ijl}^0 + \vec{\xi}_{ijl} - \mathfrak{R}_{mnp}^0 - \vec{\xi}_{mnp}|) \equiv P_{(ijl)(mnp)}(\vec{\xi}_{ijl} - \vec{\xi}_{mnp}), \quad (4)$$

da der geschlossene Ausdruck eine Funktion der Komponenten des Vektors $(\vec{\xi}_{ijl} - \vec{\xi}_{mnp})$ ist. Der Verzicht auf eine Deutung von (4) als TAYLOR-Entwicklung schließt Konvergenzschwierigkeiten aus.

Genau hierin liegt der Vorteil der symbolischen Schreibweise (4). Die in ihr auftretenden willkürlichen Verschiebungen $\vec{\xi}_{ijl}$ unterliegen keiner Begrenzung und können somit derart groß gewählt werden, daß auch plastische Verformungen erreicht werden. Die Indexzählung i, j, l ist also nur ein Hilfsmittel zur Orientierung und Numerierung der Teilchen, indem man vom idealen Zustand ausgeht, aber danach beliebige, durch die $\vec{\xi}_{ijl}$ definierten Deformationen zuläßt. Die Bedeutung dieser Art von Formulierung wird im weiteren klar. Hier geben wir nur noch ein für das Folgende notwendiges Translationstheorem an.

Überschreitet die Verschiebung $\vec{\xi}_{ijl}$ den Teilchenabstand d , so können wir schreiben

$$\vec{\xi}_{ijl} = \vec{\zeta}_{ijl} + d \mathbf{e}_{\alpha\beta\gamma}, \quad (5)$$

wobei $\mathbf{e}_{\alpha\beta\gamma}$ ein Vektor ist, der aus den Basisvektoren beliebig zusammengesetzt wird, aber so, daß der Rest der Verschiebung einen Betrag kleiner als d annimmt. Es gilt

$$\mathbf{e}_{\alpha\beta\gamma} = \alpha \mathbf{e}_1 + \beta \mathbf{e}_2 + \gamma \mathbf{e}_3 \quad (6)$$

mit ganzzahligen α, β, γ . Die Verschiebung wird so in einen Gittervektor und eine Restverschiebung zerlegt.

Setzt man (5) in (3) ein, so entsteht

$$|\mathfrak{R}_{mnp}^0 + \vec{\xi}_{ijl} - \mathfrak{R}_{mnp}^0 - \vec{\xi}_{mnp}| = |\mathfrak{R}_{i+\alpha, j+\beta, l+\gamma}^0 + \vec{\zeta}_{ijl} - \mathfrak{R}_{mnp}^0 - \vec{\xi}_{mnp}|, \quad (7)$$

und daraus folgt mit Hilfe der Definition (4)

$$P_{(ijl)(mnp)}(\vec{\xi}_{ijl} - \vec{\xi}_{mnp}) = P_{(i+\alpha, j+\beta, l+\gamma)(mnp)}(\vec{\zeta}_{ijl} - \vec{\xi}_{mnp}). \quad (8)$$

Davon werden wir in den nächsten Paragraphen Gebrauch machen.

§ 3. Allgemeine Gleichgewichtsbedingungen

In der Einleitung hatten wir bemerkt, daß der Übergang von elastischen zu plastischen Deformationen in seiner mathematischen Beschreibung einer weiteren Fassung bedarf, als der Rahmen der elastischen Theorie zuläßt. Andererseits aber sieht man, daß der plastisch deformierte Kristall zwar unter Eigenspannungen steht, aber letztlich noch ein, wenn auch teilweise gestörtes Gitter besitzt. Daraus folgt, daß zwar eine Erweiterung der Gitterstatik notwendig wird, es zugleich aber wenig sinnvoll wäre, die Erweiterung so weit zu treiben, daß in der Ausgangskonfiguration von der Vorstellung eines Kristalls nichts mehr zu merken ist. Auf diese Weise würde man sich der für die Rechnung außerordentlich wertvollen Vorteile eines geordneten Zustands begeben. Vor dem Problem dieser beiden einander widerstrebenden Forderungen, der Loslösung von der Idealstruktur und der gleichzeitigen Erinnerung an sie, steht man bereits bei der Formulierung der Wechselwirkungsenergien. Den dabei in § 2 geschlossenen Kompromiß können wir so ausdrücken: In der gedanklichen Anordnung der Teilchen sowie ihrer Numerierung geht man von einem idealen Kristall aus, läßt aber dann beliebige, d. h. im Betrag unbegrenzte Verschiebungen aus diesen Ruhelagen zu, so daß auch plastische Prozesse möglich werden. Das Mittel hierfür bieten die nichtentwickelten Ersatzpotentiale. Diese hatten wir in § 2 ausführlich besprochen. Der zugleich abschließende Schritt (wobei selbstverständlich das Problem der plastischen Deformationen noch nicht gelöst ist, sondern nur eine hinreichend weitgespannte Ausgangsbasis erhält) folgt nun in der Ableitung der Gleichgewichtsbedingungen bei beliebigen Verrückungen

aus den Ruhelagen, d. h. bei Verrückungen, die jedenfalls den elastischen Bereich überschreiten. Die Tatsache, daß der Kristall auch unideale Strukturen annehmen kann, ohne sich in seine Bestandteile aufzulösen, d. h. daß es neben dem absoluten Minimum der Energie im idealen Zustand auch noch relative Energieminima gibt, beschäftigt uns hierbei noch gar nicht. Vielmehr sehen wir zunächst nur äußere, d. h. Störkräfte als Ursachen von Deformationen an, die einen solchen Deformationszustand aufrechterhalten. Es ergibt sich in bekannter Weise aus der Minimalbedingung der potentiellen Energie

$$\sum_{mnp} \wp_{(ijl)(mnp)} (\xi_{mnp} - \xi_{ijl}) = \mathfrak{f}_{ijl}; \quad (9)$$

\mathfrak{f}_{ijl} sei dabei eine äußere Kraft, welche auf das Ion mit der Nummer i, j, l wirke, und $\sum \wp_{(ijl)(mnp)}$ die im Gleichgewicht entgegengesetzten Kraftkomponenten der Gitterreaktion, welche aus den Wechselwirkungsenergien (4) durch Ableitung entstehen. Nach wie vor mögen sich die Auslenkungen $\vec{\xi}_{ijl}$ auf die Ruhelagen des idealen Gitters beziehen, und in den Gittergleichungen (9) verstehen wir die linken Seiten als vollständige Reaktionskräfte, d. h. wir setzen sie in unentwickelter und nichtlinearer Form voraus. Gl. (9) gestattet demnach beliebig starke Deformationen in Strenge zu verfolgen.

Für diese Gleichungen gelten ganz analog wie für die Energien die Translationsbeziehungen, die in (8) festgelegt sind. Davon machen wir aber erst bei den Modellfällen der Schrauben- und Stufenversetzung Gebrauch.

§ 4. Transformation der linearen Kopplungsglieder

In diesem Paragraphen unterbrechen wir den allgemeinen Gedankengang und wenden uns zunächst der schon bekannteren Methodik zur Lösung des Problems nulldimensionaler Störungen zu. Sie bildet im weiteren einen Baustein unserer Ableitung, auf dessen genaue Erörterung wir nicht verzichten können.

Für diesen Paragraphen denken wir also nicht an die plastische Deformation, sondern beschränken uns auf rein elastische Deformationen. Dabei nehmen wir aber, um nicht zu speziell zu werden, an, daß sogar die rein elastischen Deformationen noch so stark sind, daß auch die nichtlinearen Reaktionen des Kristalls eine Rolle spielen. Immerhin werden die nichtlinearen Glieder nur als Korrekturen zur linearen Theorie auftreten, und so können wir eine Entwicklung der Art

$$\wp_{(ijl)(mnp)}(\alpha) = \mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)}^0 + \mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)} \cdot \alpha + \bar{\wp}_{(ijl)(mnp)}(\alpha) \quad (10)$$

in den Gliedern der linken Seite von (9) vornehmen.

$\mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)}^0$ ist das konstante Glied der Entwicklung, und für jedes festgewählte Indexsystem (i, j, l) (m, n, p) ein dreidimensionaler Vektor. $\mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)}$ für jedes festgewählte Indexsystem ein dreidimensionaler Tensor zweiter Stufe. $\bar{\wp}_{(ijl)(mnp)}$ bedeutet den nichtlinearen Anteil der TAYLOR-Entwicklung, und α ist zur Abkürzung für die Relativverschiebungen der Gitterteilchen eingesetzt. Der Punkt bedeutet skalare Multiplikation der beiden Größen.

Es ist zu beachten, daß diese Entwicklung stets konvergent gemacht werden kann, wie in I gezeigt wurde.

Setzt man dies in die Gittergleichungen ein, so wird bekanntlich wegen des absoluten Energieminimums der idealen Struktur

$$\sum_{mnp} \mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)}^0 = 0. \quad (11)$$

Bringt man ferner die nichtlinearen Glieder nach rechts, so entsteht

$$\sum_{mnp} \mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl}) = \mathfrak{f}'_{ijl} \quad (12)$$

$$\text{mit } \mathfrak{f}'_{ijl} \equiv \mathfrak{f}_{ijl} - \sum_{mnp} \bar{\wp}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl}). \quad (13)$$

Im allgemeinen werden bei den Anwendungen auch die \mathfrak{f}_{ijl} -Funktionen der Auslenkungen $\vec{\xi}_{rst}$ sein, so daß wir immer schreiben können $\mathfrak{f}'_{ijl} \equiv \mathfrak{f}'_{ijl}(\vec{\xi}_{rst} \dots)$. In den Kräften \mathfrak{f}'_{ijl} sind jetzt neben den äußeren Störkräften auch die nichtlinearen Gitterreaktionen enthalten. Setzen wir

$$-\sum_{mnp} \mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)} \equiv \mathfrak{X}'_{(ijl)(ijl)} \quad (14)$$

und alle anderen $\mathfrak{X}_{(ijl)(mnp)}$ für $m, n, p \neq i, j, l$ gleich den gestrichenen Größen, so können wir Gl. (12) verkürzt schreiben

$$\sum_{mnp} \mathfrak{X}'_{(ijl)(mnp)} \cdot \vec{\xi}_{mnp} = \mathfrak{f}'_{ijl}(\vec{\xi}_{rst}). \quad (15)$$

Durch die TAYLOR-Entwicklung (10) mit (12) (13) hat also die auf den Fall rein elastischer Deformationen spezialisierte Gleichgewichtsbedingung (9) die scheinbare Gestalt einer linearen Theorie angenommen. Tatsächlich ist dies jedoch nicht der Fall, da in den \mathfrak{f}'_{ijl} die gesamte nichtlineare Reaktion des Gitters noch enthalten ist. Dies wird besonders deutlich, wenn wir die Reziproktransformation von (15) vornehmen, und (15) übergeht in

$$\vec{\xi}_{mnp} = \sum_{ijl} \mathfrak{X}'_{(mnp)(ijl)} \cdot \mathfrak{f}'_{ijl}(\vec{\xi}_{rst} \dots). \quad (16)$$

Im linearen Fall werden nämlich die Auslenkungen als klein, die nichtlinearen Glieder als verschwindend und die Kräfte $\mathfrak{f}'_{ijl} = \mathfrak{f}_{ijl}$ als konstant angesehen. Die Lösung für das Verschiebungsfeld lautet

$$\vec{\xi}_{mnp} = \sum_{ijl} \mathfrak{X}'_{(mnp)(ijl)} \cdot \mathfrak{f}_{ijl}. \quad (17)$$

Im nichtlinearen Fall wurde dagegen nur eine Zerteilung der linearen und nichtlinearen Anteile der Gitter-

reaktion $p_{(ijl)(mnp)}$ vorgenommen, und es fragt sich, ob das transformierte System (16) die Verschiebungen besser zu berechnen erlaubt als (15) oder auch (9). Man erkennt jedenfalls, daß im rein linearen Fall die Rechnung mit der Transformation erledigt ist, im nicht-linearen Fall dagegen nur ein transformiertes, aber noch nicht gelöstes Problem vorliegt.

An dieser Stelle können wir auf den Gedankengang der Gitterstatik I eingehen. Dort ist die Möglichkeit der Transformation (16) ein bedeutsamer Fortschritt auf dem Wege zur Lösung des Gesamtproblems der Gitterdeformation unter dem Einfluß einer äußeren Störung, die zunächst als nulldimensional angesehen wird. Es liegt dann nahe, sowohl äußere Störkräfte als auch nichtlineare Gitterreaktionen nur von wenigen $\xi_{uv\sigma}$ abhängig anzusehen, so daß man das System (16) unterteilen kann in

$$\begin{aligned}\vec{\xi}_{uv\sigma} &= \sum_{ijl} \mathcal{R}'_{(uv\sigma)(ijl)} \mathbf{f}'_{ijl}(\vec{\xi}_{\alpha\beta\gamma} \dots), \\ \vec{\xi}_{mnp} &= \sum_{ijl} \mathcal{R}'_{(mnp)(ijl)} \mathbf{f}'_{ijl}(\vec{\xi}_{\alpha\beta\gamma} \dots).\end{aligned}\quad (18)$$

Die griechischen Indizes charakterisieren dabei die wenigen in den Störkräften wirklich vorkommenden Freiheitsgrade, während der Rest mit lateinischen Indizes nicht in den \mathbf{f}'_{ijl} vorkommt. Dann kann man die ersten Gleichungen von (18) durch eine Iteration lösen, während der Rest durch bloßes Einsetzen der nunmehr bekannten $\mathbf{f}'_{ijl}(\vec{\xi}_{\alpha\beta\gamma} \dots)$ berechnet werden kann.

Bekannt sein muß ferner die Reziprokmatrix \mathcal{R}' . Man erhält sie folgendermaßen: Wir setzen

$$\mathbf{f}'_{ijl} \equiv \delta_{(ijl)(fgh)}. \quad (19)$$

Dann ergibt sich als Reaktion auf eine Einzelkraft an der Stelle f, g, h aus (16)

$$\vec{\xi}_{mnp}(f g h) = \mathcal{R}'_{(mnp)(fgh)}, \quad (20)$$

wobei das Argument von $\vec{\xi}_{mnp}$ daran erinnert, daß es sich um das Verschiebungsfeld einer Einzelkraft im Punkt f, g, h handelt. Diese Beziehung kann man auch umkehren zur Definition von \mathcal{R}' . Indem man setzt

$$\mathcal{R}'_{(mnp)(fgh)} \equiv \vec{\xi}_{mnp}(f g h), \quad (21)$$

hat man die Umkehrmatrix gewonnen, wenn man den Index f, g, h wandern läßt.

Man ersieht daraus, daß die Umkehrmatrix vollständig unabhängig vom speziell gewählten Problem irgendeiner Gitterstörung ist. Sie wird durch normierte Einzelkraftlösungen im Gitter berechnet, und ist, wie man sagen könnte, eine gitterkonstante Rechengröße.

In I wird sie durch eine Reihenentwicklung bestimmt. In unserem Zusammenhang ist es nicht wichtig, auf welche Weise man sie berechnen kann; wir gehen deshalb darauf nicht weiter ein.

Von den hier beschriebenen Transformationen werden wir später Gebrauch machen.

Für die Erweiterung auf eindimensionale Störungen betrachten wir schließlich noch die Wirkung von gewissen Kräfteverteilungen. Dazu setzen wir in (13) zunächst die äußeren Kräfte \mathbf{f}_{ijl} sämtlich gleich Null. Läßt man nur kleine Auslenkungen um die idealen Ruhelagen zu, so kann man auf die nichtlinearen Glieder verzichten, und damit nach (13) auch $\mathbf{f}'_{ijl} = 0$ setzen. Eingesetzt in (12) ergibt dies die Gleichgewichtsbedingung für die ideale Struktur. Denn (12) hat für diesen Fall die Lösung $\vec{\xi}_{ijl} = 0$, was bedeutet, daß die Gitterteilchen in den idealen Ruhelagen sitzen. Für die Gleichgewichtslage des idealen Gitters ist demnach charakteristisch, daß in den Gittergl. (12) jedes Gitterteilchen kräftefrei ist, was bedeutet, daß alle \mathbf{f}_{ijl} verschwinden. Im allgemeinen wird es nun so sein, daß zwar die meisten \mathbf{f}'_{ijl} gleich Null sind, aber an einigen Stellen nichtverschwindende Kräfte auftreten. Die unmittelbare Folge davon ist, daß zufolge der elastischen Reaktionen des Kristalls die Wirkungen dieser Störungen sich durch den ganzen Kristall fortpflanzen, und auch dort eine Verschiebung $\vec{\xi}_{ijl} \neq 0$ bewirken, wo $\mathbf{f}'_{ijl} = 0$ ist. Es treten also infolge der Gitterreaktion auch Verschiebungen an Stellen auf, die an sich kräftefrei sind. Dieser Umstand ist durch (16) dargestellt. Das kann jedoch etwas eingeschränkt werden. Man kann nämlich beweisen (was hier nicht explizit durchgeführt werden soll): Sind in einem unendlich ausgedehnten Kristall die Störkräfte nur innerhalb eines Bereiches vom Radius R um den Ursprung von Null verschieden, so gilt

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \vec{\xi}_{ijl} = 0, \quad \text{wobei } r = (i^2 + j^2 + l^2)^{1/2} \text{ sei.}$$

Oder anschaulich: Die Wirkungen von Störkräften, die in einem im Endlichen gelegenen Bereich lokalisiert sind, klingen im Unendlichen auf Null ab, d. h. im Unendlichen ist das Gitter trotz der inneren Störungen ideal. Voraussetzung ist dabei, daß die Störkräfte nur von Teilchenwechselwirkungen, und nicht von äußeren elektrischen Feldern oder dergleichen herrühren³. Nennt man also ein Teilchen, dessen $\mathbf{f}'_{ijl} = 0$ ist, kräftefrei, so gilt: Sind die Teilchen in einem Bereich $R < r < \infty$ kräftefrei, so besitzt der Rand $r \rightarrow \infty$ eine ideale Struktur.

³ Der Beweis verläuft nach ungefähr der folgenden Argumentation: Für eine Einzelkraft im Gitter hat man ein Verschiebungsfeld, das mit $1/r$ vom Angriffspunkt der Kraft aus abklingt. Für zwei entgegengesetzt gleiche Einzelkräfte an benachbarten Teilchen, also einem Kräfte-dipol, klingt das Verschiebungsfeld mit $1/r^2$ ab. Bei Wechselwirkungen zwischen Teilchen, welche als Störungen eingeführt werden, entstehen infolge *actio=reactio* im Gitter nur Kräfte-dipole, und keine Einzelkräfte, wie sie etwa bei einem äußeren Feld auftreten würden. Summiert man über einen kugel-

förmigen Bereich von endlichem Radius Kräfte-dipole auf, so bleibt der Abfall von $1/r^2$ in weiter Entfernung von der Kugel erhalten. Summiert man über einen unendlich langen Zylinder von endlichem Radius die Wirkungen von Kräfte-dipolen auf, so erhält man in senkrechter Entfernung von der Zylinderachse einen Abfall von $1/r$. Damit erkennt man, daß in beiden Fällen bei auf dem Rand verschwindenden Kräften, unter der Voraussetzung von Teilchenwechselwirkungen, die Verschiebungen im Unendlichen verschwinden müssen.

Für eindimensionale Störungen, die von Teilchenwechselwirkungen herrühren, gilt analog: Sind die Teilchen außerhalb eines Zylinders vom Radius R' , dessen Achse der Einfachheit halber hier mit der y -Achse zusammenfalle, kräftefrei, so besitzt der Rand $r' \rightarrow \infty$ mit $r' = (i^2 + l^2)^{1/2}$ eine ideale Struktur. Es möge dabei i in x -Richtung, j in y -Richtung und l in z -Richtung gezählt werden.

Man erkennt also, daß bei Lokalisation der Kräfte auf Kugel- oder Zylinderbereiche Aussagen über die Verschiebungen bzw. die Struktur am Rande des Kristalls gemacht werden können. Dieser Satz wird uns später bei den Versetzungen nützliche Dienste leisten.

§ 5. Die Ausgangskonfiguration

Die mathematischen Vorbereitungen, die in den §§ 1–4 getroffen wurden, erlauben uns nunmehr das allgemeine Problem eines Kristallgitters mit Eigenspannungen zu behandeln. Unter einem solchen Zustand verstehen wir dabei eine Kristallkonfiguration, welche ohne Anwendung äußerer Kräfte, allein auf Grund bloßer Wechselwirkungen der Gitterbausteine untereinander stabil ist, obwohl das Gitter an einzelnen Stellen nicht mehr die ideale Struktur aufweist, d. h. elastisch-plastische Distorsionen erlitten hat. Zur Untersuchung dieser Zustände müssen wir also nach Definition in Gl. (9) die äußeren Kräfte verschwinden lassen, $f_{ijl} = 0$, und erhalten damit aus (9)

$$\sum_{mnp} p_{(ijl)(mnp)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl}) = 0. \tag{22}$$

Da mit dem Verschwinden der äußeren Kräfte nur noch die potentielle Energie der Gitterteilchen vorhanden ist, stellt (22) also die Gleichgewichts-, d. h. Minimalbedingung der Gitterenergie für den statischen Fall dar. Oder die durch elastisch-plastische Distorsion erzeugten stabilen Eigenspannungszustände müssen mit Minimalzuständen der Gitterenergie verknüpft sein. Da weiterhin der Zustand idealer Struktur der Gitterteilchen das absolute Minimum der Gitterenergie darstellt, das durch $\vec{\xi}_{ijl} = 0$ gekennzeichnet ist, muß

$$\sum_{mnp} p_{(ijl)(mnp)}(0) = 0 \tag{23}$$

gelten [s. die äquivalente Gl. (11) in der TAYLOR-Entwicklung], und für die weiteren relativen Minima bleiben nur Verschiebungsvektoren $\vec{\xi}_{ijl}^{(r)} \neq 0$ übrig.

Jedes relative Minimum der Gitterenergie geht also durch Verschiebungen aus der idealen Gitterstruktur hervor. Mathematisch gesprochen, sind neben der trivialen Lösung $\vec{\xi}_{ijl} = 0$ des idealen Zustands die Verschiebungen $\vec{\xi}_{ijl}^{(r)}$, die zu stabilen Eigenspannungszuständen führen, die Wurzeln des hochdimensionalen, nichtlinearen Gleichungssystems (22). Um diese Wurzeln aufzufinden, kann man ein Iterationsverfahren einschlagen, indem man von einer nullten Näherung ausgeht, um sich durch Iteration den wahren Werten zu nähern. Dies soll auch hier geschehen.

Jedoch ist es aussichtslos, ein derart hochdimensionales System direkt einem Iterationsprozeß zu unterwerfen. Daher ist es unser Ziel, durch Verknüpfung der gitterstatistischen Methoden des § 4 mit der Iteration, eine numerisch verhältnismäßig einfache Problemstellung zu erreichen. Der Grund für die Benutzung der Umkehrmatrix ist also, genau wie in I, die Unmöglichkeit, eine Iteration auf direktem Wege durchzuführen. Diese mit Hilfe der Gitterstatik vorgenommenen Vereinfachungen werden wir in den folgenden Paragraphen studieren. Hier beschäftigen wir uns nur noch mit der von Iterationsprozessen bekannten Bedingung: Die nullte Näherung muß der erwarteten Wurzel möglichst gut angepaßt werden, sonst konvergiert der Prozeß nicht.

Anschaulich kann man dies so interpretieren: Zwischen je zwei Minima der Gitterenergie muß aus Gründen der Stabilität ein Maximum liegen. Betrachtet man zunächst den idealen Zustand des Kristalls, so ist dieser vom nächsten stabilen Eigenspannungszustand durch ein Maximum der Gitterenergie, d. h. einen Potentialpaß getrennt. Verzerst man nun den Kristall durch äußere Kräfte in die Lagen v_{ijl} , und schaltet dann die äußeren Kräfte ab, so wird, je nachdem, ob der Potentialpaß überwunden ist oder nicht, das Gitter in den alten Gleichgewichtszustand zurückschnappen, oder sich in das neue Minimum der Energie begeben. Diese rück- oder vorwärtstreibenden inneren Kräfte rühren davon her, daß die Gitterbausteine in einen Verschiebungszustand gebracht wurden, der noch keine Gleichgewichtslage ist. Werden von diesem Ausgangszustand solche Kräfte wirksam, daß er in das neue Energieminimum fällt, so ist die Verschiebung v_{ijl} , bei der die äußeren Kräfte abgeschaltet wurden, bereits über den Potentialpaß hinweggegangen, und das Iterationsverfahren konvergiert; andernfalls liefert die ungenügend verzerrte Ausgangsposition wieder das Zurückrutschen in den ursprünglichen Zustand, z. B. das vorhin gewählte ideale Gitter.

Da wir demnach von einer passend gewählten Ausgangskonfiguration v_{ijl} ausgehen müssen, d. h.

von den Ausgangsverschiebungen aus den idealen Ruhelagen, so können wir setzen

$$\vec{\xi}_{ijl} = v_{ijl} + \vec{\zeta}_{ijl}, \quad (24)$$

wobei die unbekanntenen Verschiebungen $\vec{\xi}_{ijl}$ auf die $\vec{\zeta}_{ijl}$ transformiert sind. Während für die $\vec{\xi}_{ijl}$ noch große Verschiebungen von plastischem Charakter zugelassen wurden, erwarten wir jetzt von den $\vec{\zeta}_{ijl}$, daß sie bei hinreichend gut gewählten v_{ijl} nur noch kleine Werte annehmen werden, um den Kristall in die endgültige, stabile Lage zu versetzen.

Einsetzen von (24) in (22) ergibt die Gleichgewichtsbedingung für die neuen Unbekannten $\vec{\zeta}_{ijl}$,

$$\sum_{mnp} p_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + v_{mnp} - v_{ijl}) = 0. \quad (25)$$

Es bleibt noch die Bestimmung der Ausgangskonfiguration. Für sie benutzen wir die Vorstellungen der Elastizitätstheorie. Sei nämlich $\hat{s}(\mathbf{r})$ die linear-elastische Lösung eines Eigenspannungsproblems, so setzen wir für die Ausgangskonfiguration, die in dieses Minimum führen soll,

$$v_{ijl} \equiv \hat{s}(d \epsilon_{ijl}) \quad (26)$$

für Stellen, an denen $\hat{s}(\mathbf{r})$ zu Spannungen führt, die noch innerhalb des Geltungsbereichs der linearen elastischen Theorie liegen. An Stellen, an denen \hat{s} singular wird, oder mit zu großen Eigenspannungen verbunden ist, wird v_{ijl} etwa aus dem Modell des Versetzungskerns entnommen. Die Festsetzung (26) ist jedoch *nicht bindend*.

Da das Iterationsverfahren die Ausgangskonfiguration bis auf die Konvergenzbedingungen offen läßt, können selbstverständlich auch der praktischen Rechnung angepaßtere Werte verwendet werden, die z. B. Summationen über die nullte Näherung von Wechselwirkungskräften erleichtern usw. Festgehalten wird nur die Bedingung, daß in weiter Entfernung von der eindimensionalen Störung ein rein plastisches Verschiebungsfeld vorhanden sein soll, d. h. daß der Kristall nach den stattgefundenen Ausgangsverschiebungen wieder ideale Struktur in endlichen, aber nicht zu großen Bereichen aufweisen soll. (Bei einem ganzen Umlauf um die Störline ist natürlich, sofern plastische Deformationen stattgefunden haben, die Struktur im großen Zusammenhang unideal.) Im nächsten Paragraphen beschäftigen wir uns mit der Frage, wie die Gitterstatik I in diesen Prozeß eingebaut werden kann.

§ 6. Definition der idealen Gittermatrix

Mit der Einführung eines Iterationsverfahrens und der Vorgabe einer angepaßten nullten Näherung sind wir in der Lage, die noch verbleibenden unbekanntenen Verschiebungen $\vec{\zeta}_{ijl}$ als klein gegenüber dem Gitterabstand d anzusehen. Daher kann man in den Gln. (25) in eine Potenzreihe nach dem $\vec{\zeta}_{ijl}$ bzw. $(\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl})$ entwickeln. Wie bei kleinen Auslenkungen üblich, werden auch hier die linearen Anteile der Entwicklung am bedeutsamsten sein, und nur an einigen Stellen noch die nichtlinearen Anteile wesentlich ins Gewicht fallen, so daß wir ein Gleichungssystem, ähnlich jenem der Gitterstatik I (s. § 4) erhalten. Es liegt daher nahe, die in § 4 entwickelte Methode auch auf diesen Fall zu übertragen. Man muß sich jedoch des Unterschiedes der zwischen den Gln. (12) in § 4 und den Gln. (25) besteht, bewußt sein. Abgesehen von den in (25) nicht vorhandenen äußeren Kräften besteht dieser Unterschied vor allem darin, daß (12) die Reaktionen des Gitters auf kleine Auslenkungen aus den *idealen* Ruhelagen darstellt, eine Entwicklung von (25) jedoch Auslenkungen um Lagen eines *vorverformten*, d. h. *nicht idealen* Gitters beschreibt. Daraus folgt aber, daß im allgemeinen auch die Entwicklungskoeffizienten der beiden TAYLOR-Reihen verschieden sein werden, und demnach die Reziprokmatrixen dieser Koeffizienten auch nicht gleich sein können. Nun hatten wir aber gezeigt, daß die Reziprokmatrix $\mathfrak{R}'_{(mnp)(ijl)}$ der linearen Entwicklungsglieder $\mathfrak{U}'_{(ijl)(mnp)}$ von (12) nach (21) einfach bestimmt werden kann und so etwas wie eine gitterkonstante Rechengröße der atomistischen Rechnungen darstellt, d. h. eine Größe, die von speziellen Problemstellungen unabhängig ist, soweit man im elastischen Bereich rechnet. Andererseits wäre die Reziprokmatrix beliebiger TAYLOR-Entwicklungen, wie sie aus (25) folgen würden, eine praktisch nicht berechenbare Größe. Wir stellen uns daher das Programm:

Die linearen Entwicklungskoeffizienten der TAYLOR-Entwicklung von (25) sollen so umgeformt werden, daß trotz der Entwicklung über einem vorverformten Zustand die Koeffizienten $\mathfrak{U}'_{(ijl)(mnp)}$ erscheinen, d. h. die ideale Gittermatrix, so daß zur Umkehrung die Reziprokmatrix des idealen Gitters $\mathfrak{R}'_{(mnp)(ijl)}$ verwendet werden kann.

Um dieses Programm zu erfüllen, ist es offensichtlich notwendig, daß man bei der linearen Koeffizienten-

$x > 0$ geführt, und die Gitterteilchen in dieser Halbebene mögen noch der oberen Hälfte zugehören. Da die Schraubenachse eine Gerade ist, hat das Problem der Schraubenversetzung im unendlich ausgedehnten Kristall eine Translationsinvarianz längs der Schraubenachse. Mit der Entsprechung von (i, x) (j, y) (l, z) muß also für das Verschiebungsfeld gelten

$$\vec{\xi}_{ijl} = \vec{\xi}_{i, j+a, l} \tag{29}$$

bei beliebigem a .

Die übrigen Symmetrien spielen bei den allgemeinen Betrachtungen keine Rolle, sondern erleichtern nur die praktische Rechnung, so daß wir an dieser Stelle nicht auf sie einzugehen brauchen.

Die elastische Lösung weist außerhalb der Achse keinerlei Singularitäten auf und kann in Bereichen geringer Eigenspannung, d. h. in genügendem Abstand von der Achse, vollständig für die Ausgangskonfiguration verwendet werden⁴.

Im Sinne des letzten Abschnitts in § 6 interessiert vor allem die Deformation, die als Folge der Vorverschiebungen v_{ijl} auftritt. Sie wird atomistisch ersetzt durch die Verschiebungsdifferenzen

$$v_{mnp} - v_{ijl} \equiv \mathfrak{D}_{(mnp)(ijl)} \tag{30}$$

von miteinander in Wechselwirkung stehenden Gitterteilchen.

Wir betrachten im folgenden nur eine begrenzte Anzahl von Wechselwirkungen eines Gitterteilchens mit seinen Nachbarn, und vernachlässigen alle jene Wechselwirkungen, welche außerhalb einer Kugel mit einem Radius R_0 um das herausgegriffene Gitterteilchen liegen. Es können dann zwei Fälle unterschieden werden:

1. Innerhalb der Wechselwirkungskugel des Teilchens mit der Nummer i, j, l liegt kein Schnitt.

Dann gilt $|\mathfrak{D}_{(mnp)(ijl)}| < d$ (31)

für Verschiebungsdifferenzen innerhalb dieser Kugel um i, j, l und

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \mathfrak{D}_{(mnp)(ijl)} = 0, \tag{32}$$

wenn $r = (i^2 + l^2)^{1/2}$ bedeutet.

Der Rand ist also spannungsfrei, da die Verschiebungsdifferenzen dort verschwinden.

2. Der Schnitt geht durch die Wechselwirkungskugel, oder reicht in sie hinein.

Dann erleiden die Verschiebungen am Schnitt in weiterer Entfernung von der Achse einen Sprung um die Gitterkonstante. An der Schraubenachse selbst und in ihrer Nähe liegt auch ein Sprung vor, der jedoch kleiner als d bleibt. Dieser Sprung betrifft in der Kontinuumstheorie die Verschiebungen an der Ober- und Unterseite der Schnittfläche, in der atomistischen Theorie aber die Verschiebung der um einen endlichen Abstand benachbarten Ionen in den zwei Halbebenen $z = 0, x > 0$ (obere Schnittseite) und $z = -d, x > 0$ (untere

Schnittseite). Oberhalb und unterhalb des Sprunges sind die Verschiebungen stetig.

Liege i, j, l oberhalb des Sprunges und m, n, p unterhalb, so gilt also

$$\mathfrak{D}_{(mnp)(ijl)} = d e_2 + b_{(mnp)(ijl)}, \text{ wo } l > 0, p < 0, \tag{33}$$

mit $\lim_{r \rightarrow \infty} b_{(mnp)(ijl)} = 0.$ (34)

Tatsächlich ist Gl. (34) schon wenige Gitterabstände von der Schraubenachse, d. h. vom Kern weg erreicht. Von dieser Stelle an handelt es sich also um eine plastische Deformation der beiden Schnittflächen gegeneinander, die ebenfalls kräftefrei sein muß. Der gesamte Rand für $r \rightarrow \infty$ ist also kräftefrei.

Auf Einzelheiten der Ausgangskonfiguration können wir hier nicht eingehen.

§ 8. Bereichsgleichungen

Die Gittergl. (25), die das allgemeine Gleichgewichtsproblem eines Kristalls in der Nähe eines relativen Minimums beschreiben, werden nun für eine Schraubenversetzung ausgewertet. Dazu entwickeln wir nach § 6 in eine Potenzreihe nach den nunmehr kleinen $\vec{\zeta}_{ijl}$ mit dem Ziel, in den linearen Gliedern die ideale Gittermatrix herzustellen. Die Potenzreihenentwicklung wird durch folgenden Satz erleichtert: Hat man eine konvergente Potenzreihe $P(z) = \sum a_n z^n$ und ersetzt $z = x + b$, wobei der

Wertebereich von x nur solche Werte durchläuft, für die z im Konvergenzkreis bleibt, so gewinnt man die Potenzentwicklung für x durch bloßes Einsetzen in $P(z)$ und Umordnen nach Potenzen von x .

Daraus folgt unmittelbar: Solange die Deformationen $(v_{mnp} - v_{ijl})$ klein bleiben, ist die Entwicklung (10) auch für ein $a = (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + v_{mnp} - v_{ijl})$ gültig, d. h. man kann aus ihr durch bloßes Umordnen nach Potenzen von $(\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl})$ eine Potenzreihe für die $\vec{\zeta}_{ijl}$ erhalten. Von dieser Möglichkeit wird im nachfolgenden insoweit Gebrauch gemacht, als es notwendig ist, um für die ζ -Differenzen die Form der Gittergleichungen des idealen Gitters herzustellen.

Damit können wir uns direkt der Behandlung der Gleichungen für die Schraubenversetzung zuwenden.

Wir unterscheiden dabei einen Randbereich, in welchem die Eigenspannungen innerhalb der geforderten Genauigkeitsgrenze vernachlässigt werden können, was allgemein für $r = (i^2 + l^2)^{1/2} \rightarrow \infty$ gilt, und einen Innenbereich, der alle anderen r umfaßt. Ferner müssen wir unterscheiden: Gleichungen, de-

⁴ Vgl. E. KRÖNER, Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, Springer-Verlag, Berlin 1958, S. 75.

ren Wechselwirkungen den Schnitt enthalten, und Gleichungen, die vom Schnitt nicht betroffen werden.

Gleichungen im Randbereich ohne Schnitt

Der Randbereich ist nach (32) durch ein Verschwinden der Verschiebungsdifferenzen gekennzeichnet. Berücksichtigt man dies und ferner, daß die $\vec{\zeta}_{ijl}$ nur noch kleine Auslenkungen sein sollen, so brauchen wir in der Potenzentwicklung von (25) entsprechend (10) nur die in ζ linearen Glieder aufnehmen, und es ergibt sich mit (32)

$$\sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) = 0. \quad (35)$$

Die konstanten Glieder der Entwicklung heben sich zufolge (11) heraus. (35) sind die konventionellen Gittergleichungen für Auslenkungen aus den Ruhelagen eines idealen Gitters. Man findet keinerlei Hinweis mehr, daß alle Bausteine bereits gleiche Relativverschiebungen hinter sich haben.

Gleichungen im Randbereich mit Schnitt

Wir greifen einen Punkt heraus, der oberhalb des Schnittes liegt (der Fall unterhalb des Schnittes verläuft analog). Dann gilt wieder nach (32)

$$v_{mnp} - v_{ijl} = 0 \quad (36)$$

für Wechselwirkungen innerhalb der Kugel. Jedoch müssen die Nachbarn auf derselben Seite des Schnittes liegen. Für Nachbarn, die durch den Schnitt getrennt sind, gilt dagegen nach (33) und (34)

$$v_{mnp} - v_{ijl} = d e_2 \quad (37)$$

mit $l \geq 0, p \leq -1$.

Da der maximale Konvergenzbereich bei Wechselwirkung nächster Nachbarn in einer TAYLOR-Entwicklung um die ideale Lage, im Gitterabstand selbst liegt, ist mit (37) die Möglichkeit der Umordnung nach dem eben erwähnten Satz nicht mehr gegeben. Wir gehen vielmehr von (25) direkt aus, wobei wir (36) und (37) einsetzen und vom Translationssatz (8) Gebrauch machen. Unsere Gln. (25) lauten dann in unentwickelter Form

$$\sum_{\substack{m,n \\ p \geq 0}} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) + \sum_{\substack{m,n \\ p \leq -1}} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + d e_2) = 0. \quad (38)$$

Daraus folgt mit Hilfe von (8)

$$\mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + d e_2) = \mathfrak{p}_{(ijl)(m, n+1, p)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) \quad (39)$$

und wegen der Translationsinvarianz (29)

$$\mathfrak{p}_{(ijl)(m, n+1, p)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) = \mathfrak{p}_{(ijl)(m, n+1, p)} (\vec{\zeta}_{m, n+1, p} - \vec{\zeta}_{ijl}). \quad (40)$$

Da aber n auch von $-\infty$ bis ∞ summiert werden kann, da der Rest der Wechselwirkungen außerhalb der Kugelumgebungen nur vernachlässigbare Einflüsse ausübt, so gilt

$$\sum_{\substack{m,n \\ p \leq -1}} \mathfrak{p}_{(ijl)(m, n+1, p)} (\vec{\zeta}_{m, n+1, p} - \vec{\zeta}_{ijl}) = \sum_{\substack{m,n \\ p \leq -1}} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}), \quad (41)$$

so daß mit den Gln. (39), (40), (41) die Gl. (38) übergeht in

$$\sum_{mnp} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) = 0, \quad (42)$$

was in der am Rand gerechtfertigten linearen Näherung zu

$$\sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) = 0 \quad (43)$$

wird. Auch der Schnitt führt also zu denselben Gleichungen wie sie außerhalb des Schnittes gültig sind. Dies ist auf die Wirkung der rein plastischen Deformation am Rande zurückzuführen.

Innenbereich ohne Schnitt

Hier sind die Deformationen ungleich Null, aber noch kleiner als d (man kann sie sogar so einrichten, daß die Restdeformation bei der TAYLOR-Entwicklung kleiner als d wird, indem man unter Umständen

eine plastische Deformation zusätzlich einführt, jedoch können wir hierauf nicht genauer eingehen). Jedenfalls wird der Konvergenzbereich noch nicht überschritten.

Anwendung von (10) auf (25) ergibt

$$\sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) = - \sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} (v_{mnp} - v_{ijl}) - \sum_{mnp} \bar{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + v_{mnp} - v_{ijl}). \quad (44)$$

Dabei wurde, wie man sieht, die Umordnung nur teilweise vollzogen, nämlich genau soweit, als es die Herstellung der idealen Gittermatrix auf der linken Seite verlangt. Die in den $\vec{\zeta}_{ijl}$ rein nichtlinearen $\bar{p}_{(ijl)(mnp)}$ weisen zufolge der Umordnung auch lineare Terme in den $\vec{\zeta}_{ijl}$ auf. Jedoch werden diese auf der rechten Seite belassen, um die ideale Gittermatrix nicht zu stören. Im allgemeinen muß man jedenfalls auch die Nichtlinearitäten mit in die Rechnung einbeziehen.

Innenbereich mit Schnitt

Man erhält aus (25) mit Hilfe des Translationssatzes (8) und der Entwicklung (10)

$$\begin{aligned} \sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) &= - \sum_{mnp}^{(1)} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (v_{mnp} - v_{ijl}) - \sum_{mnp}^{(2)} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot \mathfrak{h}_{(ijl)(mnp)} \\ &- \sum_{mnp}^{(1)} \bar{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + v_{mnp} - v_{ijl}) - \sum_{mnp}^{(2)} \bar{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + \mathfrak{h}_{(ijl)(mnp)}). \end{aligned} \quad (45)$$

Die Gesamtsumme Σ über m, n, p wurde dabei zerlegt in $\Sigma^{(1)}$ und $\Sigma^{(2)}$, wobei bei $\Sigma^{(2)}$ die Deformation nach (33) aufgespalten und der unentwickelte Ausdruck nach (8) umgeformt wurde. Man beachte dabei die Translationsinvarianz der $\mathfrak{h}_{(ijl)(mnp)}$!

Die Gln. (35), (43), (44) und (45) erschöpfen die ganze Mannigfaltigkeit der möglichen Teilchennumerierungen, d. h. in ihnen sind die Gleichgewichtsbedingungen sämtlicher Teilchen enthalten. Da auf der linken Seite stets die ideale Gittermatrix steht, und die Numerierung vollständig durchläuft (es wurde aus dem Gitter kein Teilchen entfernt), können wir das erreichte Ergebnis auch so formulieren: Die Gleichgewichtsbedingungen für die Teilchenlagen in dem relativen Minimum der Gitterenergie für eine gerade Schraubenversetzung in e_2 -Richtung werden als ein Kräftegleichgewicht aufgefaßt, bei dem die linearen Gitterkräfte gleich sein müssen den nichtlinearen Kräften der Gitterreaktion sowie jenen linearen Korrekturen, die die Abweichungen von der idealen Gittermatrix enthalten.

Man ersieht daraus, daß im Fall der Schraubenversetzung die Verwirklichung unseres Programms gelungen ist: Die Gleichgewichtsbedingungen über einem vorverformten Zustand in die Form der Gleichgewichtsbedingungen (15) eines idealen Gitters unter Einfluß von beliebigen Kräften zu bringen.

Daher können wir auch die für diesen Fall entwickelten Methoden hierauf übertragen.

Die dem Problem eigene Translationsinvarianz vereinfacht die Rechnung wesentlich. Auf diese Auswirkungen gehen wir erst in § 12 ein. Ohne weitere spezielle Rechnungen vorzunehmen, können wir aber schon folgende Aussage machen: Die Gln. (35) und (43) zeigen, daß der *gesamte* Rand kräftefrei ist. Dieser Rand ist bekanntlich durch $r = (i^2 + l^2)^{1/2} \rightarrow \infty$ definiert. Wendet man darauf den in § 4 erwähnten Satz über die Auswirkung einer Quellenverteilung von Teilchenkräften innerhalb eines Zylinders von endlichem Radius an, so folgt: Bei der Schraubenversetzung verschwinden am Rande in unendlicher Entfernung von der Schraubennachse die Korrekturverschiebungen $\vec{\zeta}_{ijl}$, sofern bei der Ausgangskonfiguration am Rand nur plastische Deformationen auftreten. Oder: Sofern die Vorverschiebungen am Rande nur plastische Deformationen beinhalten, sind diese streng gültig. Da aber die strenge Lösung $\vec{\zeta}_{ijl} = \vec{\zeta}_{ijl} + v_{ijl}$ von der Zerlegung in Vorverschiebung und Korrektur innerhalb der Konvergenzgrenzen unabhängig ist, gilt allgemein: Die atomistischen Gleichungen für die Schraubenversetzung liefern am Rande des Zylinders, d. h. für $r \rightarrow \infty$, die ideale Gitterstruktur.

Alle nichtlinearen Glieder liefern also nur innerhalb endlicher Bereiche Korrekturen $\vec{\zeta}_{ijl}$ zur elastischen Ausgangskonfiguration. Am Rand ist bei rein plastischer Verformung der ideale Zustand streng atomistisch bereits erreicht.

§ 9. Veränderung der Teilchenzahl

Wie aus dem elastizitätstheoretischen Modell bekannt ist, muß zur Erzeugung einer Stufenversetzung Materie aus einem Spalt von der Breite der Gitterkonstanten entfernt werden, so daß es in diesem Fall ohne Änderung der Teilchenzahl des ursprünglichen Kristalls nicht mehr abgeht. Das ist eine sehr folgenreiche physikalische Operation, welche sich auch in der mathematischen Beschreibung auswirken muß. Dieser Frage gehen wir hier nach. Zuerst beschreiben wir kurz die Methodik der Entfernung und des Neueinsensens von Teilchen. Am besten geht man dabei von den Wechselwirkungsenergien aus. Es seien die potentiellen Energien der zu entfernenden Teilchen

$$\sum_{\mu\nu\lambda mnp} P_{(\alpha\beta\gamma)(mnp)}(\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{\alpha\beta\gamma}), \tag{46}$$

wobei α, β, γ über die Indizes der Teilchen läuft, die gerade entfernt werden sollen, und m, n, p sämtliche Teilchenindizes bedeuten, für die mit den α, β, γ Teilchen eine Wechselwirkung vorliegt. Analog erhält man mit neuen Teilchen an den durch die Indizes μ, ν, λ charakterisierten Orten die Einsetzwechselwirkungen

$$\sum_{\mu\nu\lambda mnp} P_{(\mu\nu\lambda)(mnp)}(\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{\mu\nu\lambda}), \tag{47}$$

und die gesamte Wechselwirkungsenergie des so einer Veränderung der Teilchenzahl unterworfenen Kristalls lautet (s. Anm. ⁵)

$$E_p' = E_p - \sum_{\alpha\beta\gamma mnp} P_{(\alpha\beta\gamma)(mnp)} + \sum_{\mu\nu\lambda mnp} P_{(\mu\nu\lambda)(mnp)} - \sum_{\mu\nu\lambda\alpha\beta\gamma} P_{(\mu\nu\lambda)(\alpha\beta\gamma)}, \tag{48}$$

wenn E_p die Wechselwirkungsenergie des ungestörten Systems bedeuten möge. Das Problem besteht nun darin, wie bei beträchtlichen Veränderungen der Gitterstruktur durch Einsetzen und Entfernen von Teilchen die konventionelle Gitterstatik aufrecht erhalten bzw. wiederhergestellt werden kann.

Dazu beschränken wir uns zunächst auf den Fall der Entfernung von Teilchen und betrachten die Gleichgewichtsbedingungen. Diese sind für den Kristall mit idealer Teilchenzahl von der Energie E_p durch deren Minimalforderung (22) gegeben. Wir müssen aber jetzt die Terme (46) mitberücksich-

tigen. Diese werden definitiv den äußeren Störkräften f_{ijl} gleichgesetzt. Die Wirkung der Entfernung der Teilchen auf das Restgitter wird also als die Einwirkung einer äußeren Kraft definiert. Dann zerfallen die Gleichgewichtsbedingungen in zwei Gruppen, wenn man die in (46) gebildeten Kräfte formal einführt. Die erste Gruppe betrifft das Gleichgewicht an den herausgenommenen Teilchen und lautet als Minimalbedingung von E_p'

$$\sum_{mnp} p_{(\alpha\beta\gamma)(mnp)}(\xi_{mnp} - \xi_{\alpha\beta\gamma}) = f_{\alpha\beta\gamma} \tag{49}$$

$$\equiv \sum_{mnp} p_{(\alpha\beta\gamma)(mnp)}(\xi_{mnp} - \xi_{\alpha\beta\gamma}),$$

wobei die rechte Seite die von (46) herrührenden Störkräfte sind. Die Störkräfte, die in das Gitter mit idealer Teilchenzahl und der Energie E_p eingeführt werden, annullieren also die Gleichgewichtsbedingungen der herausgenommenen Teilchen, was natürlich zu erwarten ist.

Die zweite Gruppe von Gleichungen gilt für das Gleichgewicht an dem Ion $i, j, l \neq \alpha, \beta, \gamma$ und lautet

$$\sum_{mnp} p_{(ijl)(mnp)}(\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl}) = f_{ijl} \tag{50}$$

$$\equiv \sum_{\alpha\beta\gamma} p_{(ijl)(\alpha\beta\gamma)}(\vec{\xi}_{\alpha\beta\gamma} - \vec{\xi}_{ijl}).$$

In ihnen treten die Wechselwirkungen der herausgenommenen Teilchen mit den Teilchen i, j, l als Störkräfte auf. Sie annullieren sich mit den links stehenden vollständigen Wechselwirkungsgliedern, in denen ja auch die Teilchen α, β, γ noch enthalten sind, so daß im Endeffekt die Kraft zwischen i, j, l und α, β, γ herausfällt. Der Sinn der Methode, die herausgenommenen Teilchen nicht direkt von der idealen Gitterenergie E_p abzuziehen, liegt in der Absicht, die Numerierung des idealen Gitters aufrechtzuerhalten. Entfernt man nämlich die Teilchen α, β, γ direkt, so fehlen in den Gittergleichungen alle jene, die zu den Nummern α, β, γ gehören. Dieses System erfüllt aber die Abzählbedingung 2. für die Existenz der idealen Gittermatrix nicht, da mit den fehlenden Gleichungen auch die in ihnen auftretenden linearen Glieder nicht vorhanden sein können.

Man erkennt daraus: Zur Konstruktion einer idealen Gittermatrix ist es eine notwendige Bedingung, die Identitäten (49) in der Rechnung mitzuführen.

Dies kann zufolge des Satzes geschehen, daß das Hinzufügen von Identitäten zu einem Gleichungs-

⁵ m, n, p läuft immer über sämtliche Teilchen des ursprünglichen Gitters einschließlich der herausgenommenen α, β, γ !

Da hier Teilchen entfernt werden, müssen wir nach § 9 zwei Gruppen von Gleichungen unterscheiden: Die Identitäten (49) und die Gleichgewichtsbedingungen (50). Bei der Entfernung der Halbebene $x = 0, z < 0$ lauten die Gln. (50)

$$\sum_{mnp} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl} + \mathfrak{v}_{mnp} - \mathfrak{v}_{ijl}) \quad (55)$$

$$= \sum_{\substack{p < 0 \\ n}} \mathfrak{p}_{(ijl)(0np)} (\vec{\xi}_{0np} - \vec{\xi}_{ijl} - \mathfrak{v}_{ijl}) .$$

Die rechten Seiten von (55) sind gerade die von der Entfernung der Halbebene herrührenden Störkräfte auf ein Gitterteilchen i, j, l , das im Kristall verbleibt. Den zu entfernenden Teilchen $(0, n, p) - \infty < n < \infty, -\infty < p < 0$ wurde die Vorverschiebung $\mathfrak{v}_{0np} = 0$ gegeben. Dies geschieht aus Symmetriegründen. Jedoch bemerken wir noch einmal ausdrücklich, daß die Koordinaten der zu entfernenden Teilchen als Parameter eingehen und willkürlich gewählt werden können. Da sie aber durch die gesamte Rechnung mitgeschleppt werden müssen, empfiehlt sich selbstverständlich ein praktisch möglichst günstiger Wert. Die $\vec{\xi}_{0np}$ werden erst nach Durchführung der Rechnung festgelegt (damit die Abzählordnung der Freiheitsgrade durchsichtig bleibt!). Auf die Identitäten gehen wir zum Schluß noch ein.

Für die Ausgangskonfiguration \mathfrak{v}_{ijl} nehmen wir das kontinuierliche Verschiebungsfeld an, das nur eine einzige Schnittfläche, nämlich jene längs der herausgenommenen Halbebene, aufweist. Die Be-

reichsgleichungen kann man dann wieder unterteilen in Randzone und Innenzone, mit und ohne Schnitt. Da die in § 7 definierten Kugelumgebungen festlegen, mit welchen Nachbarn noch wesentliche Wechselwirkungen vorliegen und mit welchen Nachbarn diese zu vernachlässigen sind, sind bei Kugelumgebungen, die den Schnitt nicht enthalten, auch die Störglieder aus (55) zu vernachlässigen, da Schnitt und herausgenommene Halbebene miteinander zusammenfallen. Der Rand außerhalb des Schnittes ist also von äußeren Störkräften frei, und bei verschwindenden Deformationen erhält man die zu (35) analogen Gleichungen, die wir aus Raumgründen hier unterdrücken.

In genau der gleichen Weise ergeben sich die Gleichungen für den Innenbereich ohne Schnitt. Dort sind die von den Nichtlinearitäten zufolge nichtverschwindender Deformationen herrührenden Kräfte nicht mehr zu vernachlässigen, und man erhält das Analogon zu (44). Es bleiben noch die Gleichungen im Innen- und Randbereich deren Kugelumgebungen den Schnitt beinhalten.

Gleichungen im Innenbereich mit Schnitt

Hier müssen wir links und rechts des Schnittes gelegene Teilchen unterscheiden. Wir wählen ein $i < 0$. Der Fall des auf der anderen Seite befindlichen Teilchens $i > 0$ verläuft analog.

Für die Deformationen gelten die Gln. (53) und (54). Beachtet man, daß nach dem Translationsatz (8)

$$\mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl} - d \mathbf{e}_1 + \mathfrak{h}_{(ijl)(mnp)}) = \mathfrak{p}_{(ijl)(m-1, np)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl} + \mathfrak{h}_{(ijl)(mnp)}) \mathfrak{p}_{(ijl)(m-1, np)} \quad (56)$$

wird, so kann man aus (55) durch Einteilung in drei Summationsbereiche und Verwendung der Deformationsdarstellung (53) im dritten Summanden auf der linken Seite die Gln. (55) für diesen Bereich bei Beachtung von (56) überführen in

$$\sum_{\substack{m \leq 0 \\ n, p}} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl} + \mathfrak{v}_{mnp} - \mathfrak{v}_{ijl}) + \sum_{\substack{m > 0 \\ p \geq 0 \\ n}} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl} + \mathfrak{v}_{mnp} - \mathfrak{v}_{ijl}) \quad (57)$$

$$+ \sum_{\substack{m > 0 \\ p < 0 \\ n}} \mathfrak{p}_{(ijl)(m-1, np)} (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl} + \mathfrak{h}_{(ijl)(mnp)}) = \sum_{\substack{p < 0 \\ n}} \mathfrak{p}_{(ijl)(0np)} (\vec{\xi}_{0np} - \vec{\xi}_{ijl} - \mathfrak{v}_{ijl}) .$$

Die Einführung von (56) zerstört hier die Numerierung der idealen Gittermatrix bei einer TAYLOR-Entwicklung von (57). Man kann sich aber durch Addition von

$$\sum_{\substack{m > 0 \\ p < 0 \\ n}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)}^0 + \sum_{\substack{m > 0 \\ p < 0 \\ n}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\xi}_{mnp} - \vec{\xi}_{ijl}) \quad (\text{s. Anm. 7}) \quad (58)$$

7 Die Addition der Absolutglieder in (58) zu Gl. (57) bewirkt das Verschwinden der Absolutglieder auf der linken Seite von (59).

auf beiden Seiten von (57) helfen. (57) geht dabei über in

$$\begin{aligned} \sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) &= - \sum_{\substack{m \leq 0 \\ n, p}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\mathfrak{v}_{mnp} - \mathfrak{v}_{ijl}) - \sum_{\substack{m > 0 \\ p > 0 \\ n}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\mathfrak{v}_{mnp} - \mathfrak{v}_{ijl}) + \sum_{\substack{m > 0 \\ p < 0 \\ n}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) \\ &- \sum_{\substack{m > 0 \\ p < 0 \\ n}} \mathfrak{p}_{(ijl)(m-1, np)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + \mathfrak{b}_{(ijl)(mnp)}) + \sum_{\substack{p < 0 \\ n}} \mathfrak{p}_{(ijl)(0np)} (\vec{\zeta}_{0np} - \vec{\zeta}_{ijl} - \mathfrak{v}_{ijl}) \quad (59) \\ &- \sum_{\substack{m \leq 0 \\ n, p}} \bar{\mathfrak{p}}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + \mathfrak{v}_{mnp} - \mathfrak{v}_{ijl}) - \sum_{\substack{m > 0 \\ p > 0 \\ n, p}} \bar{\mathfrak{p}}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} + \mathfrak{v}_{mnp} - \mathfrak{v}_{ijl}) + \sum_{\substack{m > 0 \\ p < 0 \\ n}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)}^0 \cdot \end{aligned}$$

Die linke Seite ist nun genau die ideale Gittermatrix. Selbstverständlich läßt sich die etwas umfangreiche rechte Seite noch reduzieren, doch ist dies nicht die Aufgabe unserer allgemeinen Ausführungen.

Gleichungen im Randbereich mit Schnitt

Wie bei der Schraubenversetzung, so muß auch bei der Stufenversetzung der Rand kräftefrei sein, da in ihm ein ideales Gitter wiederhergestellt ist. Für den Rand gilt die Gl. (54). Man erhält unter Anwendung von (53), (54) für diesen Fall aus (55), wenn man $i < 0$ voraussetzt

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{m < 0 \\ n, p}} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) + \sum_{n, p} \mathfrak{p}_{(ijl)(0np)} \left(\vec{\zeta}_{0np} - \vec{\zeta}_{ijl} - d \frac{\mathfrak{e}_1}{2} \right) + \sum_{\substack{m > 0 \\ n, p}} \mathfrak{p}_{(ijl)(mnp)} (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl} - d \mathfrak{e}_1) \quad (60) \\ = \sum_{(ijl)(0np)} \mathfrak{p}_{(ijl)(0np)} \left(\vec{\zeta}_{0np} - \vec{\zeta}_{ijl} - d \frac{\mathfrak{e}_1}{2} \right). \end{aligned}$$

Wendet man auf den dritten Term von (60) den Translationssatz an, entwickelt in eine TAYLOR-Reihe, und addiert

$$\sum_{\substack{m > 0 \\ n, p}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) \quad (\text{s. Anm. }^8) \quad (61)$$

auf beiden Seiten, so bleibt

$$\begin{aligned} \sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) &= - \sum_{\substack{m > 0 \\ n, p}} \mathfrak{A}_{(ijl)(m-1, np)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) \quad (62) \\ &+ \sum_{n, p} \mathfrak{A}_{(ijl)(0np)} \cdot (\vec{\zeta}_{0np} - \vec{\zeta}_{ijl}) + \sum_{\substack{m > 0 \\ n, p}} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}). \end{aligned}$$

Der Rest der Entwicklung der Störkräfte auf der rechten Seite von (60) wurde gegen die linke Seite weggekürzt. Weiterhin wurden nur die linearen Glieder berücksichtigt, da aus korrespondenzmäßigen Gründen zur Elastizitätstheorie die Korrekturen am Rande verschwinden müssen.

Es scheint nun so, als ob die Gln. (62) im Gegensatz zur anschaulichen Forderung einen nichtkräftefreien Rand und demnach endliche $\vec{\zeta}_{mnp}$ bzw. $\vec{\zeta}_{ijl}$ erzwingen

würden, da neben der idealen Gittermatrix auf der linken Seite von (62) noch Störkräfte auf der rechten Seite auftauchen. Um zu zeigen, daß die Störkräfte nur Scheinkräfte ohne Wirkung sind, die durch die Herstellung einer idealen Gittermatrix erzwungen werden, definieren wir zunächst die ideale Struktur für den verschobenen Fall mit Teilchenentfernung. Da auch hier bei der Ausgangskonfiguration am Rande nur plastische Deformationen vorausgesetzt werden, besteht diese Definition darin, daß die Korrekturen $\vec{\zeta}_{ijl}$ bzw. $\vec{\zeta}_{mnp}$ zu den Vorverschiebungen \mathfrak{v}_{ijl} bzw. \mathfrak{v}_{mnp} verschwinden müssen, $\vec{\zeta}_{ijl} = 0$ (den Parameter $\vec{\zeta}_{0np}$ setzen wir hier aus Gründen der Anschaulichkeit gleich Null), was formal der Gleichgewichtsbedingung für die ideale Struktur entspricht. Da wir unser System auf die Gitter-

⁸ Entwickelt man in (59) auch noch den 4. und 5. Term, so verschwinden alle Absolutglieder auf der rechten Seite dieser Gleichung. Es ist also nicht mehr notwendig, die Absolutglieder bei der Addition von (61) zu (60) mitzuführen, da sie in Gl. (62) überhaupt nicht mehr in Erscheinung treten.

matrix der idealen Struktur und einen Rest von Störkräften reduziert haben, so muß sich also die Kräftefreiheit des Randes auch hier in der üblichen Weise

$$\sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) = 0 \quad (63)$$

ausdrücken lassen, was natürlich $\vec{\zeta}_{ijl} = 0$ liefert.

Daß hier die $\vec{\zeta}_{ijl}$ über einem vorverschobenen Zustand verschwinden sollen, um die ideale Struktur zu ergeben, ist für die Formulierung der Bedingung (63) ganz unerheblich. Man vergleiche § 4! Denn der Satz über die Kräftefreiheit des Randes (und die dann dort ebenfalls verschwindenden Verschiebungen) ist von der Interpretation des Gleichungssystems unabhängig.

Um nachzuweisen, daß auch hier der Rand kräftefrei ist, kann man folgendermaßen argumentieren: Die Störkräfte haben die Gestalt einer Linearform

$$\mathfrak{C}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) . \quad (64)$$

Führt man nun, wie im nächsten Paragraphen ausführlich gezeigt wird, die Iteration durch, indem man mit einer nullten Näherung $\vec{\zeta}_{ijl}^0 = 0$ beginnt, so ist der Rand wegen der Linearform in den $\vec{\zeta}_{ijl}$ kräftefrei. Also gilt, daß die Kräftequellen in der ersten Näherung auf einen endlichen Zylinder beschränkt sind. Daraus folgt, daß die Korrekturverschiebungen $\vec{\zeta}_{ijl}^{(1)}$ in erster Näherung am Rande verschwinden. Damit sind aber auch die Kräfte in der nächsten Näherung am Rande gleich Null. Das Verfahren kann fortgesetzt werden, und es läßt sich streng nachweisen, daß für alle Näherungen der Rand kräftefrei bleiben muß. Wir gehen hier nicht näher darauf ein.

Es bleiben noch die Identitäten (49). Von ihnen verwenden wir gerade nur so viel, als zur Herstellung der idealen Gittermatrix erforderlich ist. Dies sind die linearen Glieder. Den Rest kürzen wir heraus. (49) lautet also hierher übertragen

$$\begin{aligned} \sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(0jl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) \\ = \sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(0jl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}), \quad -\infty < l < 0. \end{aligned} \quad (65)$$

Faßt man alle Gln. (59), (62), (68) und die nicht-angeschriebenen Gleichungen für die Bereiche ohne Schnitt zusammen, so ergibt sich: Auch hier ist die ideale Gittermatrix herstellbar, und die Rechnung kann von den für das ideale Gitter entwickelten Hilfsmitteln Gebrauch machen. Man sieht ferner, daß genau wie im Fall der Schraubenversetzung wegen der am Rand verschwindenden Kräfte der Satz gilt: In unendlicher Entfernung von der Versetzungslinie verschwinden die Korrekturen $\vec{\zeta}_{ijl}$, sofern die Ausgangskonfiguration am Rand nur pla-

stische Deformationen beinhaltet. Daraus folgt wegen der Unabhängigkeit der strengen Lösung von der Zerteilung in Korrektur und Ausgangskonfiguration: Die Gittergleichungen ergeben in unendlicher Entfernung von der Versetzungslinie in Strenge die ideale Struktur.

§ 12. Das Iterationsverfahren

Nachdem wir in den vorangehenden Paragraphen sowohl bei der Schraubenversetzung als auch bei der Stufenversetzung trotz einer Vorverformung des gesamten Gitters die atomistischen Gleichungen auf die Form von Gittergleichungen für Auslenkungen um ideale Ruhelagen gebracht haben, können wir jetzt den weiteren Lösungsweg dieser Gleichungen erläutern.

Die allgemeine Gestalt lautet nämlich

$$\sum_{mnp} \mathfrak{A}_{(ijl)(mnp)} \cdot (\vec{\zeta}_{mnp} - \vec{\zeta}_{ijl}) = \mathfrak{f}_{ijl}(\vec{\zeta}_{mnp}), \quad (66)$$

wobei die $\mathfrak{f}_{ijl}(\vec{\zeta}_{mnp})$ in den verschiedenen Bereichen mit den rechten Seiten der jeweils dort geltenden Gleichungen identifiziert werden. Bildet man nach § 4 die Umkehrung von (66) mit Hilfe der Reziprokmatrix, so entsteht

$$\vec{\zeta}_{ijl} = \sum_{rst} \mathfrak{R}_{(ijl)(rst)} \cdot \mathfrak{f}_{(rst)}(\vec{\zeta}_{mnp}) . \quad (67)$$

Da die $\mathfrak{f}_{(rst)}$ nur an Stellen von Bedeutung sind, an denen die ideale Struktur gestört ist, werden sie also wesentlich nur im Kern der Versetzung \neq Null sein, d. h. auch hier werden in den $\mathfrak{f}_{(rst)}$ nur wenige Freiheitsgrade $\vec{\zeta}_{mnp}$ auftauchen, nämlich jene des Versetzungskerns, und die Umkehrung enthält, genau wie in § 4 gezeigt, die Reduktion eines Systems von abzählbar unendlich vielen Gleichungen auf endlich viele. Man vergleiche dazu die Bemerkungen in § 4, die auf die Gln. (18) führen.

Wir können uns hier nicht ausführlich darauf einlassen. Der weitere Weg ist unabhängig von dieser Zerteilung festgelegt.

Da die $\vec{\zeta}_{ijl}$ auch in der rechten Seite von (67) auftreten, muß das Iterationsverfahren in der üblichen Weise durchgeführt werden. Man wird dazu von der nullten Näherung ausgehen, d. h. die kleinen Korrekturen $\vec{\zeta}_{ijl}$ zur Ausgangskonfiguration \mathfrak{v}_{ijl} auf der rechten Seite gleich Null setzen, $\vec{\zeta}_{ijl}^0 \equiv 0$. Dann erhält man links gewisse $\vec{\zeta}_{ijl}^{(1)}$ usw. Diese setzt man

rechts wieder ein und erhält ein $\vec{\zeta}_{ijl}^{(2)}$. Das Verfahren ist dann abgeschlossen, wenn theoretisch

$$\vec{\zeta}_{ijl}^{(n)} = \vec{\zeta}_{ijl}^{(n+1)} \tag{68}$$

gilt, was praktisch nur näherungsweise innerhalb der Fehlergrenzen der gesamten Rechnung erfüllt werden muß, d. h.

$$\vec{\zeta}_{ijl}^{(n)} \approx \vec{\zeta}_{ijl}^{(n+1)}. \tag{69}$$

Die tatsächlichen Rechnungen zeigen, daß dies nach höchstens zwei Schritten erreicht ist.

Es bleibt schließlich noch eine Bemerkung zur Translationsinvarianz: Da bei beiden Problemen die $\vec{\zeta}_{ijl}$ und die $\vec{\zeta}_{ijl}$ translationsinvariant in y -Richtung sind, werden auch die Kräfte \mathfrak{f}_{rst} in y -Richtung translationsinvariant (was man mathematisch leicht bei Betrachtung der rechten Seiten der Gleichungen einsieht)

$$\mathfrak{f}_{rst} = \mathfrak{f}_{r, s+\alpha, t} \tag{70}$$

mit beliebigem α .

Wir können deshalb den Index s bzw. bei den Verschiebungen j und n vollständig weglassen. Die

Summation über s in (67) ist dann von den Kräften und Verschiebungen unabhängig, und mit

$$R_{(il)(rt)} \equiv \sum_s \mathfrak{R}_{(ijl)(rst)} \tag{71}$$

entsteht aus (67)

$$\vec{\zeta}_{il} = \sum_{rt} R_{(il)(rt)} \cdot \mathfrak{f}_{rt}(\vec{\zeta}_{mp}). \tag{72}$$

(72) kann man auch dahingehend interpretieren, daß ganze Gittergeraden miteinander in Wechselwirkung stehen und die $\vec{\zeta}_{il}$ die Verschiebungen dieser starren Gittergeraden beschreiben. Abgesehen von der praktischen Behandlung der Rechnung und dem heuristischen Gesichtspunkt ist jedoch die frühe Benutzung der Translationsinvarianz eher störend als nützlich. Deshalb haben wir das Gittergeradenproblem auch an den Schluß gesetzt.

Numerische Rechnungen folgen in weiteren Arbeiten.

Herrn Dr. E. KRÖNER danken wir für rege Diskussionen über dieses Thema herzlich.

Wärmeleitfähigkeit dünner Drähte

VON WOLFGANG KLOSE

Aus der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Institut für Festkörperforschung
(Z. Naturforsch. 13 a, 978—985 [1958]; eingegangen am 28. Mai 1958)

Mit Hilfe der BOLTZMANN-Gleichung und eines vereinfachten Stoßterms wird für einen zylindrischen Leiter die thermische Leitfähigkeit berechnet. Sodann folgt eine Begründung der für den Stoßterm angesetzten Näherung. Es zeigt sich, daß in einer bestimmten Näherung ein die Rolle einer Relaxationszeit spielender Parameter auftritt.

Werden die geometrischen Ableitungen eines metallischen Leiters so verändert, daß sie mit der aus der BLOCHSchen Theorie bekannten freien Weglänge vergleichbar sind, kann experimentell ein Abnehmen der elektrischen Leitfähigkeit festgestellt werden^{1, 2}. Anschaulich läßt sich dieser Effekt interpretieren durch die erhöhte Bedeutung der Zusammenstöße der Leitungselektronen mit den Wänden des Leiters.

Schaltet man nach Eintritt dieses Effektes ein Magnetfeld ein, findet eine Erhöhung der elektrischen Leitfähigkeit statt¹. Dies wird anschaulich auf die Verringerung der Anzahl der Wandstöße zurückgeführt; die Elektronen durchlaufen im Ma-

gnetfeld Spiralbahnen und gelangen so weniger häufig an die Oberflächen.

Die zur Wahrnehmung dieser Effekte benötigte Geometrie kann realisiert werden

1. durch dünne Schichten,
2. durch dünne Drähte.

Um noch mit „wirklichen“ Schichten und Drähten arbeiten zu können, müssen die Messungen bei sehr tiefen Temperaturen ausgeführt werden (Heliumtemperaturen), um die normale freie Weglänge möglichst groß zu machen.

Während bisher keiner der zwei erwähnten Möglichkeiten der absolute Vorzug zu geben war, hat sich das durch die genauere Kenntnis der *Whisker*³ geändert. *Whisker* sind unter speziellen Bedingungen hergestellte Metalleinkristalle in Form dünner

¹ Vgl. z. B. D. K. C. MACDONALD, Nature, Lond. 163, 673 [1949].

² E. H. SONNHEIMER, Adv. Phys. 1, 1 [1952].

³ A. H. COTTRELL, Progr. Metal Phys., Lond. 1953, 205.