

Anwendung der nichtlinearen Elastizitätstheorie auf Fehlstellen in Kristallen

Von ALFRED SEEGER und ERICH MANN

Aus dem Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart,
und dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart
(Z. Naturforschg. 14 a, 154–164 [1959]; eingegangen am 18. September 1958)

Herrn Professor Dr. Dr. h. c. RICHARD GRAMMEL zum 70. Geburtstag gewidmet

Vom Kontinuumsstandpunkt aus betrachtet können Fehlstellen in Kristallen als Eigenspannungszustände mit Singularitäten (in manchen Fällen auch als Eigenspannungen in mehrfach zusammenhängenden Körpern) beschrieben werden. Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der systematischen Anwendung der nichtlinearen Elastizitätstheorie auf derartige Probleme. Man erreicht dadurch eine gegenüber der üblicherweise verwendeten linearen Theorie verbesserte Beschreibung der Verhältnisse in der unmittelbaren Umgebung der Fehlstellen, in der sehr große Verzerrungen auftreten können. Außerdem lassen sich mit der nichtlinearen Theorie einige in Abschnitt 1 aufgeführte Effekte beschreiben, die von der linearen Theorie prinzipiell nicht wiedergegeben werden können. In Abschnitt 2 wird kurz der Formalismus der sog. Elastizitätstheorie 2. Ordnung (die im HOOKEschen Gesetz die Quadrate der Ableitungen der Verschiebungen berücksichtigt) und die experimentelle Bestimmung der hier auftretenden elastischen Konstanten höherer Ordnung besprochen. Abschnitt 3 behandelt ein praktisch wichtiges Sonderproblem, nämlich die Bestimmung der Dilatation, die für die Kleinwinkelstreuung von RÖNTGEN-Strahlen und Neutronen sowie für die Streuung der Leitungselektronen durch Fehlstellen wichtig ist. Wie in den beiden folgenden Abschnitten wird dabei als Rechenmethode die von der linearen Lösung ausgehende Störungsrechnung benutzt. Abschnitt 4 gibt die ausführliche und vollständige Lösung für das Verschiebungsfeld einer Schraubenversetzung in einem isotropen Medium. Als letztes, knapper dargestelltes Beispiel wird in Abschnitt 5 als Modell für ein auf einem Zwischen-gitterplatz eingebautes Atom eine in eine Kugelschale eingewängte Kugel gleicher elastischer Konstanten behandelt. Bei beiden Problemen wird gefunden, daß eine von ZENER angegebene allgemeine Formel für die Volumänderung infolge von Eigenspannungen in homogenen Medien zutrifft.

1. Einleitung und Überblick

Das bis jetzt ergiebigste Verfahren zur theoretischen Behandlung der bei der plastischen Verformung von Kristallen auftretenden *Fehlstellen* ist wohl die Anwendung der *Elastizitätstheorie* gewesen. Für *makroskopische Betrachtungen* zur Verformung von Kristallen ist die Elastizitätstheorie nur von beschränkter Bedeutung, da bekanntlich die meisten Kristalle sich bei Dehnungen, die die Größenordnung von 10^{-4} übersteigen, bleibend verformen. Die bleibende (=plastische) Verformung beruht darauf, daß sich unter der Wirkung der entsprechenden Spannungen bestimmte in den Kristallen enthaltene Fehlstellen, die *Versetzungen*, in irreversibler Weise bewegen, also beim Entlasten nicht mehr in ihre Ausgangspositionen zurückkehren. Diese Fehlstellen sind in eine fehlstellenfreie Kristallmatrix eingebettet, deren Elastizitätsgrenze (gegeben durch die sog. theoretische Schubfestigkeit τ_{th}) viel höher als die kritische Schubspannung

makroskopischer Kristalle liegt und elastischen Verzerrungen von der Größenordnung 10^{-2} bis 10^{-1} entspricht. Die Anwendung der Elastizitätstheorie auf *einzelne Fehlstellen* und deren energetische Wechselwirkung untereinander besitzt deshalb einen wesentlich weiteren Gültigkeitsbereich, als man auf Grund des oben erwähnten makroskopischen Verhaltens erwarten würde; in der Tat verdanken wir ihr einen Großteil neuerer theoretischer Kenntnisse über Fehlstellen in Kristallen (siehe die Zusammenfassungen von NABARRO¹, SEEGER², ESHELBY³ und KRÖNER⁴).

Die meisten der eben erwähnten Untersuchungen benutzen die *lineare Elastizitätstheorie* und beschreiben die Fehlstellen als *Eigenspannungszustände* mit Singularitäten. Beispielsweise treten linienhafte Singularitäten des Verzerrungsfeldes bei der Behandlung der Versetzungen, punktförmige Singularitäten bei den Kompressions- und Dilatationszentren (als Modelle für Zwischen-gitteratome und Leerstellen) auf. Natürlich versagt

¹ F. R. N. NABARRO, Adv. Phys. 1, 269 [1952].

² A. SEEGER, Theorie der Gitterfehlstellen, Handbuch d. Physik VII/1, Springer-Verlag, Berlin–Göttingen–Heidelberg 1955, S. 383–665.

³ J. D. ESHELBY, Solid State Phys. 3, 79 [1956].

⁴ E. KRÖNER, Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, Ergebnisse der angewandten Mathematik, Heft 5, Springer-Verlag, Berlin–Göttingen–Heidelberg 1958.



die Elastizitätstheorie am Orte der Singularitäten; sie muß dort entweder durch atomistische Betrachtungen oder durch eine Abschneidevorschrift ersetzt werden. Es gibt jedoch eine Reihe von Problemen, bei denen sich die Abweichungen von der Elastizitätstheorie in einer so weiten Umgebung der Singularitäten bemerkbar machen, daß es mit den heute zur Verfügung stehenden Rechenhilfsmitteln nicht möglich ist, die atomistische Betrachtungsweise über einen ausreichend großen Bereich zu erstrecken. Als Beispiele für solche Fragen seien erwähnt der in letzter Zeit besonders ausführlich diskutierte Einfluß von Versetzungen auf die Kristalldichte⁵⁻¹⁰. gewisse röntgenographische Effekte (die lineare Elastizitätstheorie ergibt z. B. bei der Anwendung auf innere Spannungen in elastisch homogenen Kristallen keine Änderung der mittleren Gitterkonstanten) und die bevorzugte Diffusion entlang von Versetzungslienien¹¹.

In allen diesen Fällen bringt die Anwendung der *nichtlinearen* Elastizitätstheorie große Vorteile. Es ist auf diese Weise möglich, den Gültigkeitsbereich der kontinuumsmäßigen Behandlung der Fehlstellenumgebung so nahe an die Singularität heranzuschieben, daß der Rest durch atomphysikalische Betrachtungen oder ein Abschneideverfahren in befriedigender Weise erfaßt werden kann. In der vorliegenden Arbeit befassen wir uns mit der Anwendung der nichtlinearen Elastizitätstheorie isotroper Medien auf zwei Grundtypen von Fehlstellen in festen Körpern, nämlich auf eine in der Achse eines Hohlzylinders verlaufende Schraubenversetzung und auf einen kugelförmigen Einschluß im Mittelpunkt einer elastischen Kugel (als Modell eines Zwischengitteratoms).

Der Formalismus der allgemeinen nichtlinearen Elastizitätstheorie¹² ist zu schwerfällig, um auf derartige Probleme, insbesondere das erstgenannte, angewandt zu werden. Die Näherung, die wir hier verwenden werden, ist dadurch bestimmt, daß von den beiden der linearen Elastizitätstheorie zugrunde lie-

genden Linearisierungen, der geometrischen (Verzerrungen!) und der physikalischen (HOOKEsches Gesetz!), die letztergenannte in unserem Falle die schwerwiegendere ist und daß keine elastischen Konstanten höherer als dritter Ordnung experimentell bestimmt sind¹³. [Die gewöhnlichen elastischen Moduln, also die Koeffizienten der Quadrate der Verzerrungen im Energieausdruck – vgl. Gl. (4) –, werden elastische Konstanten zweiter Ordnung genannt, die Koeffizienten der dritten Potenzen der Verzerrungen Konstanten 3. Ordnung usw.] Es wäre somit zur Zeit nicht lohnend, im HOOKEschen Gesetz neben den räumlichen Ableitungen der Verschiebungen höhere Potenzen als deren Quadrate zu berücksichtigen. Dies führt uns auf die Elastizitätstheorie 2. Ordnung, wie sie von MURNAGHAN¹⁴ dargestellt und zur Lösung spezieller Probleme verwendet wird. Die wichtigsten Formeln dieser Theorie stellen wir der Einfachheit halber in Ziff. 2 kurz zusammen. Es liegt im Sinne der verwendeten Näherung, daß die Lösung 2. Ordnung durch Störungsrechnung, ausgehend von der Lösung der linearen Theorie, gewonnen wird.

2. Der Formalismus der Elastizitätstheorie

2. Ordnung

Im Gegensatz zur linearen Elastizitätstheorie ist bei der nichtlinearen Elastizitätstheorie für die Beschreibung der Verzerrungen wesentlich, zwischen den von der Hydromechanik her wohlbekannten Standpunkten von EULER und LAGRANGE zu unterscheiden. Es ist üblich¹⁵, den EULERSchen (d. h. auf die Teilchenkoordinaten im verformten Zustand bezogenen) Verzerrungstensor mit ϵ und den LAGRANGESchen (auf die Teilchenkoordinaten im unverformten Ausgangszustand bezogenen) Verzerrungstensor mit η zu bezeichnen. Wir verwenden in der vorliegenden Arbeit ausschließlich die LAGRANGESche Beschreibungsweise, bezeichnen aber den LAGRANGESchen Verzerrungstensor, da in unserem Problem-

⁵ P. HAASEN u. A. W. LAWSON JR., 8th Annual Report on High Pressure Research (University of Chicago) 1955, S. 67.

⁶ H. STEHLÉ u. A. SEEGER, Z. Phys. 146, 217 [1956].

⁷ A. SEEGER, Dislocations and Mechanical Properties of Crystals, J. Wiley & Sons, New York 1957, S. 504.

⁸ W. M. LOMER, Phil. Mag. 2, 1053 [1957].

⁹ A. SEEGER u. P. HAASEN, Phil. Mag. 3, 470 [1958].

¹⁰ A. SEEGER, Suppl. Nuovo Cim. [X] 7, 632 [1958].

¹¹ A. SEEGER, Disc. Faraday Soc. 23, 158 [1957].

¹² Siehe z. B. A. E. GREEN u. W. ZERNA, Theoretical Elasticity, Clarendon Press, Oxford 1954.

¹³ Abgesehen von der Bestimmung höherer Glieder in der Druckabhängigkeit der Kompressibilität in Explosionswellenversuchen (J. M. WALSH, M. H. RICE, R. G. McQUEEN u. F. L. YARGER, Phys. Rev. 108, 196 [1957]).

¹⁴ F. D. MURNAGHAN, Finite Deformation of an Elastic Solid, J. Wiley & Sons, New York 1951.

¹⁵ Siehe z. B. I. S. SOKOLNIKOFF, Tensor Analysis, J. Wiley & Sons, New York 1951.

kreis γ bereits für den sog. Inkompatibilitätstensor¹⁶ vergeben ist⁴, mit γ .

Bei Eigenspannungsproblemen, bei denen ja keine äußeren Kräfte wirken, kann man entweder mit den Verschiebungen arbeiten, wodurch die Kompatibilitätsbedingungen identisch erfüllt werden, oder aber Spannungsfunktionen einführen und auf diese Weise die Gleichgewichtsbedingungen identisch erfüllen. Für die *allgemeine* Behandlung von Eigenspannungszuständen mit Hilfe der nichtlinearen Elastizitätstheorie bietet zweifellos das zweitgenannte Verfahren wichtige Vorteile: Beim Übergang von der linearen zur nichtlinearen Theorie ändern in EULER-schen Koordinaten der Spannungstensor und die Gleichgewichtsbedingungen ihre Form nicht, während der Zusammenhang zwischen Verschiebungen und Verzerrungen sowie zwischen den Verzerrungen und den Inkompatibilitäten (die mit dem RIEMANN-CHRISTOFFELSchen Krümmungstensor bzw. dem sog. EINSTEIN-Tensor des verformten Mediums zusammenhängen) wesentlich komplizierter werden. Außerdem kann man mit Hilfe der Spannungsfunktionen auch Probleme behandeln, in denen die Kompatibilitätsbedingungen in dreidimensionalen Bereichen verletzt sind, während sich Verschiebungen bekanntlich nur dann definieren lassen, wenn die Kompatibilitätsbedingungen überall mit Ausnahme punktförmiger, linien- oder flächenhafter Singularitäten erfüllt sind. Dennoch werden wir bei den in Abschnitt 4 und 5 zu behandelnden *speziellen* Problemen mit den Verschiebungen und nicht mit den Spannungsfunktionen rechnen, da wir auf diese Weise den ausgearbeiteten Formalismus der MURNAGHANSchen Theorie (den wir im folgenden kurz zusammenstellen wollen) ungeändert übernehmen können. Wir hoffen jedoch, im Rahmen allgemeiner Fragestellungen auf die Methode der Spannungsfunktionen zurückkommen zu können^{16a}.

Nach MURNAGHAN¹⁴ definiert man den Verzerrungstensor γ der nichtlinearen Theorie durch

$$\gamma = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{J} - \mathbf{I}) = (\gamma_{ik}) = (\gamma_{ki}), \quad (1)$$

¹⁶ Zur Charakterisierung des Inkompatibilitätstensors γ sei erwähnt, daß im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie $\gamma = 0$ die Kompatibilitätsbedingungen sind.

^{16a} *Zusatz b. d. Korr.:* Die oben erwähnte allgemeine nichtlineare Theorie der Eigenspannungen (unter Verwendung der Spannungsfunktionen und des EINSTEIN-Tensors) ist in der Zwischenzeit entwickelt und in derselben Näherung wie in der vorliegenden Arbeit auf Stufen- und Schraubenversetzungen in isotropen Medien angewandt worden (E. KRÖNER u. A. SEEGER, Arch. Rational Mech. Analysis 3 [1959], im Druck).

wo \mathbf{I} die 3×3 Einheitsmatrix, \mathbf{J} die JACOBISCHE Matrix (Funktionalmatrix)

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial a} & \frac{\partial x}{\partial b} & \frac{\partial x}{\partial c} \\ \frac{\partial y}{\partial a} & \frac{\partial y}{\partial b} & \frac{\partial y}{\partial c} \\ \frac{\partial z}{\partial a} & \frac{\partial z}{\partial b} & \frac{\partial z}{\partial c} \\ \frac{\partial a}{\partial a} & \frac{\partial b}{\partial b} & \frac{\partial c}{\partial c} \end{pmatrix} \quad (2)$$

und $\tilde{\mathbf{J}}$ die zu \mathbf{J} transponierte Matrix sind. In Gl. (2) bedeuten a, b, c die Koordinaten eines Teilchens im unverformten Zustand (Anfangskoordinatensystem), $x(a, b, c)$, $y(a, b, c)$ und $z(a, b, c)$ diejenigen im verformten Zustand (Endkoordinatensystem). Die Energiedichte Φ (pro Volumeneinheit) eines isotropen Mediums drückt sich im Rahmen der Theorie 2. Ordnung folgendermaßen in den Invarianten

$$J_1 = \gamma_{11} + \gamma_{22} + \gamma_{33}, \quad (3a)$$

$$J_2 = \begin{vmatrix} \gamma_{22} & \gamma_{23} \\ \gamma_{32} & \gamma_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \gamma_{33} & \gamma_{31} \\ \gamma_{13} & \gamma_{11} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} \end{vmatrix} \quad (3b)$$

$$\text{und } J_3 = \det \gamma = \begin{vmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \gamma_{13} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \gamma_{23} \\ \gamma_{31} & \gamma_{32} & \gamma_{33} \end{vmatrix} \quad (3c)$$

des Verzerrungstensors γ aus:

$$\Phi = \frac{\lambda + 2\mu}{2} J_1^2 - 2\mu J_2 + \frac{l + 2m}{3} J_1^3 - 2m J_1 J_2 + n J_3. \quad (4)$$

In Gl. (4) stellen λ und μ die LAMÉSchen elastischen Konstanten dar, die mit dem Kompressionsmodul K , dem Schubmodul G und der Querkontraktionszahl ν durch die Gleichungen

$$G = \mu, \quad (5a)$$

$$K = \frac{2}{3} \frac{1+\nu}{1-2\nu} G = \lambda + \frac{2}{3} \mu \quad (5b)$$

verknüpft sind. l, m, n sind die drei MURNAGHANSchen Elastizitätstkonstanten 3. Ordnung¹⁷. Mit ihrer Hilfe läßt sich die Variation von G und K mit dem hydrostatischen Druck p in der Form

¹⁷ *l, m, n* sind die von MURNAGHAN¹⁴ im Zusammenhang mit der LAGRANGESchen Beschreibungsweise eingeführten Konstanten. Mit den von F. D. MURNAGHAN, Amer. J. Math. 59, 235 [1937] und I. S. SOKOLNIKOFF¹⁵ im Rahmen der EULER-schen Beschreibungsweise benützten und gleich bezeichneten Konstanten (die wir hier l', m', n' nennen) hängen sie folgendermaßen zusammen:

$$\begin{aligned} l &= -2(3\lambda + 4\mu) + 3l' + m', & n &= -12\mu + n', \\ m &= -2\mu - \frac{1}{2}m', & \\ l' &= 2(\lambda + 2\mu) + (l + 2m)/3, & \\ m' &= -4\mu - 2m, & n' &= 12\mu + n. \end{aligned}$$

$$\frac{dG}{dp} = - \frac{\lambda + \mu + m - \frac{1}{6}n}{K}, \quad (6 \text{ a})$$

$$\frac{dK}{dp} = - 2 \frac{l + \frac{1}{6}n}{K} \quad (6 \text{ b})$$

schreiben¹⁸.

Der Spannungstensor im Endkoordinatensystem ist gegeben durch

$$\sigma = \frac{\varrho_x}{\varrho_a} \mathbf{J} \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \tilde{\mathbf{J}}, \quad (7 \text{ a})$$

der sog. modifizierte Spannungstensor in Anfangskoordinaten durch

$$\sigma_a = \mathbf{J} \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma}. \quad (7 \text{ b})$$

Im Gegensatz zu σ braucht σ_a nicht symmetrisch zu sein. ϱ_x und ϱ_a sind die Massendichten im verzerrten bzw. im unverzerrten Zustand. Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{\varrho_a}{\varrho_x} &= \det \mathbf{J} = [\det(\mathbf{I} + 2\gamma)]^{1/2} \quad (8) \\ &= (1 + 2J_1 + 4J_2 + 8J_3)^{1/2}. \end{aligned}$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} &= \lambda J_1 \mathbf{I} + 2\mu \gamma \\ &+ (l J_1^2 - 2m J_2) \mathbf{I} + 2m J_1 \gamma + n \co \gamma \end{aligned} \quad (9)$$

mit dem Kofaktor

$$\co \gamma = \begin{pmatrix} + & \begin{vmatrix} \gamma_{22} & \gamma_{23} \\ \gamma_{32} & \gamma_{33} \end{vmatrix} & - & \begin{vmatrix} \gamma_{21} & \gamma_{23} \\ \gamma_{31} & \gamma_{33} \end{vmatrix} & + & \begin{vmatrix} \gamma_{21} & \gamma_{22} \\ \gamma_{31} & \gamma_{32} \end{vmatrix} \\ - & \begin{vmatrix} \gamma_{12} & \gamma_{13} \\ \gamma_{32} & \gamma_{33} \end{vmatrix} & + & \begin{vmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{13} \\ \gamma_{31} & \gamma_{33} \end{vmatrix} & - & \begin{vmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{31} & \gamma_{32} \end{vmatrix} \\ + & \begin{vmatrix} \gamma_{12} & \gamma_{13} \\ \gamma_{22} & \gamma_{23} \end{vmatrix} & - & \begin{vmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{13} \\ \gamma_{21} & \gamma_{23} \end{vmatrix} & + & \begin{vmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} \end{vmatrix} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Wirken keine Volumkräfte, so lauten die Gleichgewichtsbedingungen (im Endkoordinatensystem)

$$\operatorname{Div}_x \sigma = 0 \quad (11 \text{ a})$$

bzw. (in Anfangskoordinaten)

$$\operatorname{Div}_a \tilde{\sigma}_a = \operatorname{Div}_a \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \tilde{\mathbf{J}} \right) = 0. \quad (11 \text{ b})$$

Bezeichnen $d\mathfrak{S}_x$ und $d\mathfrak{S}_a$ die vektoriellen Flächenelemente der Oberfläche im End- bzw. Anfangszustand, so lauten die Randbedingungen an der Oberfläche des elastischen Körpers (\mathfrak{f} = Oberflächenspannung pro Flächeneinheit)

$$\sigma d\mathfrak{S}_x = dS_x \mathfrak{f} \quad (12 \text{ a})$$

¹⁸ In Gl. (6) bedeuten G und K die elastischen Moduln im normalen quadratischen Energieausdruck, wobei als Energiehauptpunkt der Zustand mit hydrostatischem Druck p gewählt ist. Alle übrigen elastischen Konstanten dieser Arbeit sind im Grenzfall $p=0$ zu nehmen.

¹⁹ Siehe z. B. die Zusammenstellungen in den oben zitierten Arbeiten^{9, 10}.

oder

$$\sigma_a d\mathfrak{S}_a = dS_x \mathfrak{f}. \quad (12 \text{ b})$$

Wir fügen noch einige Bemerkungen über die experimentelle Bestimmung der elastischen Konstanten 3. Ordnung l , m und n eines isotropen Mediums sowie über die Verhältnisse bei Kristallen an. Zwei Kombinationen dieser drei Konstanten, nämlich die durch Gl. (6) gegebenen Druckabhängigkeiten des Kompressionsmoduls K und des Schubmoduls G , lassen sich verhältnismäßig leicht experimentell bestimmen und sind für eine ganze Reihe von Stoffen gemessen worden¹⁹. Diese Kombinationen gehen ferner in den Ausdruck für die thermische Ausdehnung ein²⁰, so daß man aus der gemessenen thermischen Ausdehnung weitere Rückschlüsse ziehen kann.

Schwieriger ist die Bestimmung der dritten Konstanten dritter Ordnung, da dafür eine Scherverformung endlicher Größe erforderlich ist. Dies könnte z. B. in der Weise geschehen, daß die Probe einer großen Scherverformung unterworfen wird und durch Ultraschallmessungen die Schallgeschwindigkeiten im gescharten Zustand und damit die Schubabhängigkeiten der elastischen Konstanten gemessen werden. Dies ist tatsächlich bei einigen Materialien durchgeführt worden²¹. Die Methode ist jedoch, da bleibende Verformungen nicht auftreten dürfen, notwendigerweise auf Stoffe mit großer kritischer Schubspannung bzw. (bei spröde brechenden Materialien) großer Bruchfestigkeit beschränkt. Als einziges Metall ist bis jetzt vielkristallines Eisen²¹ auf diese Weise untersucht worden, wobei allerdings die erreichte Genauigkeit nicht sehr groß war.

Größere Genauigkeiten in der Bestimmung der dritten Konstanten dritter Ordnung kann man bei vielkristallinen Metallen mit Hilfe des sogenannten POYNTING-Effekts^{22, 23} (Verlängerung und Volumenvergrößerung bei endlicher Torsion eines Drahtes) erreichen, da dieser mit Hilfe der sehr empfindlichen POYNTINGSchen Versuchsanordnung verhältnismäßig genau gemessen werden kann. In der Tat ist es möglich gewesen, auf diese Weise die Konstan-

²⁰ L. BRILLOUIN, *Les Tenseurs en Mécanique et en Élasticité*, 2. Aufl., Masson & Cie., Paris 1949.

²¹ D. S. HUGHES u. J. L. KELLY, *Phys. Rev.* **92**, 1145 [1953].

²² J. H. POYNTING, *Proc. Roy. Soc., Lond. A* **82**, 546 [1909].

²³ J. H. POYNTING, *Proc. Roy. Soc., Lond. A* **86**, 534 [1912].

ten l , m und n in einigen Fällen in praktisch brauchbarer Weise zu bestimmen²⁴.

Bei kubischen Einkristallen (an denen wir im Hinblick auf die kubische Struktur vieler Metalle besonders interessiert sind) gibt es bekanntlich drei elastische Konstanten zweiter Ordnung und sechs elastische Konstanten dritter Ordnung. Drei der zuletzt genannten sechs Konstanten, nämlich die Druckabhängigkeit der „normalen“ elastischen Konstanten, sind in vielen Fällen mit Ultraschall gemessen worden²⁵. Schwierigkeiten bereitet jedoch bei duktilen Metallen wegen der außerordentlich niedrigen kritischen Schubspannungen der Einkristalle makroskopischer Dimension die Bestimmung der übrigen drei Konstanten dritter Ordnung. Der zur Zeit einzige gangbare Weg scheint uns in Messungen an Fadeneinkristallen („whiskers“) verschiedener kristallographischer Orientierung zu bestehen. Manche dieser Fadeneinkristalle verformen sich bis zu Spannungen, die an die theoretische Schubfestigkeit τ_{th} heranreichen und Dehnungen von einigen Prozent entsprechen, vollkommen elastisch. Bei derart großen Dehnungen konnten im Zugversuch an Eisen-Fadenkristallen deutliche Abweichungen vom Hookeschen Gesetz beobachtet²⁶ und zur Bestimmung elastischer Konstanten höherer Ordnung verwendet werden²⁷. Es liegt jedoch bis jetzt noch keine ausreichende Zahl derartiger experimenteller Resultate vor, um sämtliche Konstanten eines Einkristalls zu bestimmen. Aus diesem Grunde (und auch der Einfachheit wegen) beschränken wir uns in der vorliegenden Arbeit auf isotrope Medien. Von den im Rahmen der linearen Theorie durchgeführten Rechnungen über Gitterfehler her weiß man, daß in vielen Fällen der Einfluß der Anisotropie bei kubischen Kristallen gering ist.

3. Anwendung der nichtlinearen Elastizitätstheorie auf die Berechnung der Volumdilatation

Sind die elastischen Konstanten 3. Ordnung l , m , n sowie die Lösung eines Problems auf Grund der linearen Elastizitätstheorie bekannt, so kann man,

²⁴ A. SEEGER u. O. BUCK, Veröffentlichung in Vorbereitung. In dieser Arbeit werden ausführliche Zahlenangaben über die elastischen Konstanten dritter Ordnung gemacht werden, so daß wir in der vorliegenden Arbeit nicht auf die numerische Ausrechnung der l , m und n einzugehen brauchen.

²⁵ Siehe die in den Zitaten^{9, 10} aufgeführten Arbeiten sowie W. B. DANIELS u. C. S. SMITH, Phys. Rev. **111**, 713 [1958] (Druckabhängigkeit der elastischen Konstanten der Edel-

ausgehend von den Gleichungen des Abschnittes 2, im Prinzip eine zweite Näherung des Verschiebungsfeldes berechnen. Dies wird an zwei Beispielen in den Abschnitten 4 und 5 durchgeführt. Bei komplizierteren Problemen kann jedoch die Berechnung der 2. Näherung des Verschiebungsfeldes sehr mühsam sein, so daß sich die Frage stellt, ob man sich nicht für manche Zwecke mit einer Teillösung begnügen kann. In der Tat interessiert für eine ganze Reihe physikalischer Fragestellungen nicht das Verschiebungsfeld, sondern nur die Volumdilatation Θ in der Umgebung einer Fehlstelle in einem Kristall. Wir bringen hierfür einige Beispiele:

1. Die von einer Fehlstelle in einem Kristall hervorgerufene makroskopische Dichteänderung bzw. Volumexpansion

Wie in Abschnitt 1 erwähnt, werden Fehlstellen in Kristallen elastizitätstheoretisch durch Eigenspannungszustände beschrieben. Im Gültigkeitsbereich der linearen Elastizitätstheorie rufen Eigenspannungszustände in einem homogenen Medium nach dem sog. Volumensatz von COLONNETTI²⁸ keine Änderung der mittleren Dichte hervor. Erst die Berücksichtigung der nichtlinearen Effekte gibt eine Vergrößerung des makroskopischen Volumens. Im Rahmen der Elastizitätstheorie 2. Ordnung hat ZENER²⁹ dieses Problem vollständig gelöst. Sein Ergebnis ist, daß die mittlere Dilatation eines in einem Eigenspannungszustand befindlichen elastisch homogenen Körpers durch

$$\bar{\Theta} = \frac{1}{K} \left(\frac{dK}{dp} - 1 \right) \bar{W}_d + \frac{1}{G} \left(\frac{dG}{dp} - \frac{G}{K} \right) \bar{W}_s \quad (13)$$

gegeben ist. Hier bedeuten \bar{W}_d bzw. \bar{W}_s die bei der Erzeugung der im Körper vorhandenen Volumdilatationen bzw. Scherungen gemäß der linearen Elastizitätstheorie pro Volumeneinheit zu leistende mechanische Arbeit oder auch in guter Näherung die Dilatations- bzw. Schubanteile der gespeicherten mittleren Energiedichte. Gl. (13) wurde von ZENER unter Zuhilfenahme thermodynamischer Argumente abgeleitet. Wir werden an Hand der Beispiele in

metalle) und R. E. SCHMUNK u. C. S. SMITH, J. Phys. Chem. Solids **9** [1959], im Druck (Al sowie Mg).

²⁶ S. S. BRENNER, J. Appl. Phys. **27**, 1484 [1956].

²⁷ A. SEEGER u. O. BUCK, siehe Anm.²⁴.

²⁸ G. COLONNETTI, Atti Accad. naz. Lincei, Rend., Cl. Sci. fis. mat. natur., V. Ser. **27/2**, 155 [1918].

²⁹ C. ZENER, Trans. Amer. Inst. Min. Metallurg. Engrs. **147**, 361 [1942].

Ziff. 4 und 5 sehen, daß die Elastizitätstheorie 2. Ordnung, allerdings erst nach längeren Rechnungen, dasselbe Ergebnis wie Gl. (13) gibt. Wegen weiterer Diskussion der Gl. (13) sowie Anwendungen auf die Versetzungstheorie mit numerischer Auswertung vergleiche man die oben erwähnten Arbeiten^{9, 10} von SEEGER und HAASEN.

2. Die von einer Fehlstelle hervorgerufene Kleinwinkelstreuung von Röntgen- oder Neutronenstrahlen

RÖNTGEN- und Neutronenstrahlen erleiden durch lokale, sich über mehrere Atomabstände erstreckende Variationen der Kristalldichte eine Streuung um kleine Winkel. Die Streuamplitude ist näherungsweise proportional zu dem über den gesamten Kristall zu erstreckenden Integral

$$A(\mathbf{g}) = \int \int \int \Theta(\mathbf{r}) \exp \{ -i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} \} d\mathbf{r}, \quad (14)$$

in dem \mathbf{g} die vektorielle Differenz zwischen den Ausbreitungsvektoren des einfallenden und des gestreuten Strahls darstellt^{30, 31}. Die Kleinwinkelstreuung stellt somit im wesentlichen eine FOURIER-Analyse des in einem festen Körper vorhandenen Dilatationsfeldes dar.

3. Der elektrische Widerstand von Fehlstellen in Metallen

Beschreibt man, wie man es zur Vereinfachung häufig tut, die Leitungselektronen als ein Gas freier Elektronen, so ist das Streupotential einer Fehlstelle proportional zu Θ . Für die Berechnung des von ausgedehnten Fehlstellen, wie z. B. Versetzungen, hervorgerufenen zusätzlichen elektrischen Widerstands ist deshalb die Kenntnis des Dilatationsfeldes einer Fehlstelle wesentlich.

Da die Berechnung der skalaren Dilatation $\Theta(\mathbf{r})$ eine wesentlich einfache Aufgabe als diejenige des vektoriellen Verschiebungsfeldes $\mathbf{\hat{s}}(\mathbf{r})$ darstellt, befassen wir uns im vorliegenden Abschnitt mit der Ermittlung von Θ , wobei wir im Sinne des eingangs Gesagten höhere Glieder als solche, die in den Ableitungen der Verschiebungen quadratisch sind, vernachlässigen. Wir denken uns das Verschiebungsfeld in der Form

$$\mathbf{\hat{s}}(\mathbf{r}) = \mathbf{\hat{s}}^{(1)}(\mathbf{r}) + \mathbf{\hat{s}}^{(2)}(\mathbf{r}) + \dots \quad (15)$$

³⁰ A. GUINIER u. G. FOURNET, Small Angle Scattering of X-Rays. J. Wiley & Sons, New York 1955.

³¹ J. BLIN, Diffusion Centrale des Rayons X par les Métaux (Thèse Paris 1954).

dargestellt, wobei $\mathbf{\hat{s}}^{(1)}$ die von der linearen Theorie gegebene Lösung des Problems und $\mathbf{\hat{s}}^{(2)}$ die mit Hilfe der Störungsrechnung berechnete nächste Näherung ist.

Aus Gl. (8) folgt, daß die Volumdilatation durch

$$\Theta \equiv \frac{\varrho_a - \varrho_x}{\varrho_x} = (1 + 2 J_1 + 4 J_2 + 8 J_3)^{1/2} - 1 \quad (16)$$

gegeben ist. Entwickelt man die Quadratwurzel und vernachlässigt höhere Glieder, so erhält man

$$\Theta = J_1 + 2 J_2 - \frac{1}{2} J_1^2. \quad (17)$$

Im Rahmen der angestrebten Näherung kann man in den beiden letzten Gliedern von Gl. (17) die lineare Lösung einsetzen und damit diese Glieder durch die Volumdichte der Dilatationsenergie

$$W_d = (\lambda + \frac{2}{3} \mu) \frac{1}{2} J_1^2 \quad (18)$$

und die Volumdichte der Scherenergie

$$W_s = \mu (\frac{2}{3} J_1^2 - 2 J_2) \quad (19)$$

der linearen Lösung ausdrücken.

Das in Gl. (17) linear auftretende J_1 -Glied ist gleich der Summe der Spuren der Verzerrungstensoren 1. und 2. Näherung. Da man die Quadrate der Ableitungen von $\mathbf{\hat{s}}^{(2)}$ vernachlässigen darf, kann man schreiben

$$J_1 = \operatorname{div} \mathbf{\hat{s}}^{(1)} + \operatorname{div} \mathbf{\hat{s}}^{(2)} + \frac{1}{2} \operatorname{Grad} \mathbf{\hat{s}}^{(1)} \cdot \operatorname{Grad} \mathbf{\hat{s}}^{(1)}. \quad (20)$$

Das einzige Glied in Gl. (17), das man nicht aus der linearen Lösung erhalten kann, ist somit $\operatorname{div} \mathbf{\hat{s}}^{(2)}$. Dieses kann man in folgender Weise berechnen: Ermittelt man, ausgehend von der Lösung $\mathbf{\hat{s}}^{(1)}$ der linearen Theorie, die zweite Näherung $\mathbf{\hat{s}}^{(2)}$ mit Hilfe der Störungsrechnung (dies wird an einem Beispiel ausführlich in Abschnitt 4 durchgeführt werden), so genügt – wie immer bei der Anwendung der Störungsrechnung – die zweite Näherung einer Differentialgleichung, die sich von derjenigen für die erste Näherung nur im inhomogenen Glied unterscheidet. Es gilt also

$$(2\mu + \lambda) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{\hat{s}}^{(2)}(\mathbf{r}) - \mu \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{\hat{s}}^{(2)}(\mathbf{r}) + \mathbf{\tilde{f}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (21)$$

Der Vektor $\mathbf{\tilde{f}}$ der „Kraftdichte“ läßt sich unter Verwendung der Formeln von § 2 in den Produkten und Quadraten der ersten Ableitungen von $\mathbf{\hat{s}}^{(1)}$ ausdrücken. Da die allgemeine Formel für $\mathbf{\tilde{f}}(\mathbf{r})$ sehr umfangreich ist, verzichten wir darauf, sie anzuschreiben.

Durch Divergenzbildung erhält man aus Gl. (21)

$$\Delta \operatorname{div} \mathbf{\hat{s}}^{(2)} + \frac{1}{2\mu + \lambda} \operatorname{div} \mathbf{\tilde{f}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (22)$$

so daß $\operatorname{div} \hat{s}^{(2)}$ einer Poissonschen Differentialgleichung mit der Quelldichte $\operatorname{div} \hat{\mathfrak{F}}/(2\mu + \lambda)$ genügt und, wenn keine besonderen Randbedingungen vorliegen, durch

$$\operatorname{div} \hat{s}^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi(2\mu + \lambda)} \iiint \frac{\operatorname{div} \hat{\mathfrak{F}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau_{\mathbf{r}'} \quad (23)$$

gegeben ist. Läßt sich $\hat{\mathfrak{F}}$ aus einem Potential ableiten, also in der Form

$$\hat{\mathfrak{F}}(\mathbf{r}) = - (2\mu + \lambda) \operatorname{grad} U(\mathbf{r}) \quad (24)$$

schreiben, so ist beim Fehlen von Randbedingungen $\operatorname{div} \hat{s}^{(2)}$ bis auf eine additive Konstante identisch mit U .

Wir verzichten auf die Wiedergabe von Beispielen zu vorstehender Methode, erwähnen jedoch, daß sie von A. SEEGER und O. BUCK (unveröffentlicht) auf eine Reihe von Problemen mit Erfolg angewandt und zur Lösung einiger der eingangs dieses Abschnitts genannten Fragestellungen verwendet worden ist.

4. Die Schraubenversetzung

Ein kontinuumsmechanisches Modell einer Schraubenversetzung mit BURGERS-Vektor \mathfrak{b} in einem Kristall kann man erzeugen, indem man einen hohlen Kreiszylinder mit Außenradius R und Innenradius r_0 längs einer durch die Achse gehenden Ebene aufschneidet, die beiden Ufer der Schnittfläche parallel zur Achse um den Vektor \mathfrak{b} verschiebt und dann wieder zusammenheftet (Abb. 1). Im Kontinuumsmodell bleibt der als Versetzungssstärke bezeichnete Betrag b des Vektors vollkommen unbestimmt. In einem Kristall unterliegt er dagegen der Bedingung, ein Gittervektor des betreffenden Kristalls (und zwar in vielen Fällen der kürzest mögliche) sein zu müssen.

Wir führen ein der Symmetrie des Problems angepaßtes Zylinderkoordinatensystem ein; unter Ab-

Wir setzen deshalb a) $u = k u_1(r)$, b) $w = w_0 + k w_1(\varphi)$, c) $s = k s_1(z)$, und erhalten, wenn wir höhere Potenzen als k^2 vernachlässigen,

$$\Upsilon = k \begin{pmatrix} \frac{du}{dr} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{u}{r} & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} \\ 0 & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} & 0 \end{pmatrix} + k^2 \begin{pmatrix} \frac{d^2 u}{dr^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{u}{r} \right)^2 + \frac{1}{2r^2} \left(\frac{dw}{d\varphi} \right)^2 & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} \frac{ds}{dz} \\ 0 & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} \frac{ds}{dz} & \frac{1}{2} \left(\frac{ds}{dz} \right)^2 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

³² Wir müssen darauf hinweisen, daß in einem Zylinder endlicher Länge die Lösung Gl. (27) *kein* Eigenspannungszustand ist, da sie nur dann möglich ist, wenn an den beiden Endflächen Momente entgegengesetzt gleicher Größe angreifen. Beim Fehlen dieser Momente würde sich der Zylinder torzieren. Indem wir unser Augenmerk auf den

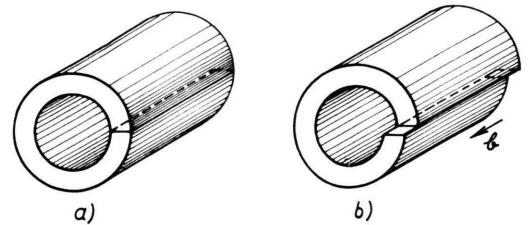


Abb. 1. Kontinuumsmechanisches Modell einer Schraubenversetzung. (a) Hohlzylinder vor dem Aufschneiden. (b) Hohlzylinder nach dem Aufschneiden und nach Einführen einer Schraubenversetzung.

änderung der in Ziff. 2 benützten Bezeichnungen seien die Anfangskoordinaten eines Punktes $(r; \varphi; z)$ und die Endkoordinaten $[r + k u(r); \varphi; z + k w(\varphi) + k s(z)]$. Hierbei bedeutet k einen Parameter zur Kennzeichnung der Größenordnung bei der Störungsrechnung, der am Ende der Rechnung gleich eins gesetzt wird. Es gilt somit

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 1 + k \frac{du}{dr} & 0 & 0 \\ 0 & 1 + k \frac{u}{r} & 0 \\ 0 & k \frac{1}{r} \frac{dw}{d\varphi} & 1 + k \frac{ds}{dz} \end{pmatrix} \quad (25)$$

und

$$\Upsilon = k \begin{pmatrix} \frac{du}{dr} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{u}{r} & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} \\ 0 & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} & \frac{ds}{dz} \end{pmatrix} + k^2 \begin{pmatrix} \frac{d^2 u}{dr^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{u}{r} \right)^2 + \frac{1}{2r^2} \left(\frac{dw}{d\varphi} \right)^2 & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} \frac{ds}{dz} \\ 0 & \frac{1}{2r} \frac{dw}{d\varphi} \frac{ds}{dz} & \frac{1}{2} \left(\frac{ds}{dz} \right)^2 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Die Lösung der linearen Elastizitätstheorie (Vernachlässigung der Glieder mit k^2) ist bekanntlich³²

$$w = w_0 + \frac{b}{2\pi} \varphi. \quad (27)$$

(28 a, b, c)

Mittelteil eines sehr lang gedachten Zylinders richten, können wir das vorliegende Problem wie einen Eigenspannungszustand behandeln. Insbesondere werden wir sehen, daß die nur für Eigenspannungszustände abgeleitete ZENERsche Formel Gl. (13) erfüllt wird.

$$J_1 = k^2 \left(\frac{du_1}{dr} + \frac{u_1}{r} + \frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 + \frac{ds_1}{dz} \right), \quad J_2 = -k^2 \frac{1}{4} \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2, \quad (29 \text{ a, b})$$

$$\text{co } \Upsilon = k^2 \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_1^2 = 0, \quad J_1 \Upsilon = 0 \quad (29 \text{ c, d, e})$$

$$\text{und daraus } \frac{\partial \Phi}{\partial \Upsilon} = k \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_0}{d\varphi} \\ 0 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_0}{d\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (30)$$

$$= k^2 \begin{pmatrix} (2\mu + \lambda) \frac{du_1}{dr} + \lambda \left[\frac{u_1}{r} + \frac{ds_1}{dz} \right] + \left(\frac{\lambda}{2} + \frac{m}{2} - \frac{n}{4} \right) \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & (2\mu + \lambda) \frac{u_1}{r} + \lambda \left[\frac{du_1}{dr} + \frac{ds_1}{dz} \right] + \left(\mu + \frac{\lambda + m}{2} \right) \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_1}{d\varphi} \\ 0 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_1}{d\varphi} & \lambda \left[\frac{du_1}{dr} + \frac{u_1}{r} \right] + (2\mu + \lambda) \frac{ds_1}{dz} + \left(\frac{\lambda + m}{2} \right) \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 \end{pmatrix}$$

$$\text{sowie } \boldsymbol{\sigma}_a = \mathbf{J} \frac{\partial \Phi}{\partial \Upsilon} = k \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_0}{d\varphi} \\ 0 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_0}{d\varphi} & 0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$+ k^2 \begin{pmatrix} (2\mu + \lambda) \frac{du_1}{dr} + \lambda \left(\frac{u_1}{r} + \frac{ds_1}{dz} \right) + \left(\frac{\lambda + m}{2} - \frac{n}{4} \right) \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda \left(\frac{du_1}{dr} + \frac{ds_1}{dz} \right) + (2\mu + \lambda) \frac{u_1}{r} + \left(\mu + \frac{\lambda + m}{2} \right) \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_1}{d\varphi} \\ 0 & \frac{\mu}{r} \frac{dw_1}{d\varphi} & \lambda \left(\frac{du_1}{dr} + \frac{u_1}{r} \right) + (2\mu + \lambda) \frac{ds_1}{dz} + \left(\mu + \frac{\lambda + m}{2} \right) \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 \end{pmatrix}$$

Die Divergenz eines Tensors $\boldsymbol{\sigma}$ ist in Zylinderkoordinaten (r, φ, z)

$$\text{Div } \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{\sigma_{rr}}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\varphi r}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{zr}}{\partial z} - \frac{\sigma_{\varphi \varphi}}{r} \\ \frac{\partial \sigma_{r\varphi}}{\partial r} + \frac{\sigma_{r\varphi}}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\varphi \varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{z\varphi}}{\partial z} + \frac{1}{r} \sigma_{\varphi r} \\ \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial r} + \frac{\sigma_{rz}}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\varphi z}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (32)$$

$$\text{also } \text{Div } \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_a = \begin{pmatrix} k^2 \left[(2\mu + \lambda) \left(\frac{d^2 u_1}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_1}{dr} - \frac{u_1}{r^2} \right) - \left(\mu + \lambda + m - \frac{n}{4} \right) \frac{1}{r^3} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 \right] & 0 \\ 0 & k^2 \left[\frac{\mu}{r^2} \frac{d^2 w_1}{d\varphi^2} + (2\mu + \lambda) \frac{d^2 s_1}{dz^2} \right] \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Die Gleichgewichtsbedingungen führen somit auf die Gleichungen

$$(2\mu + \lambda) \left(\frac{d^2 u_1}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_1}{dr} - \frac{u_1}{r^2} \right) = \left(\mu + \lambda + m - \frac{n}{4} \right) \frac{1}{r^3} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2, \quad (34 \text{ a})$$

$$\frac{\mu}{r^2} \frac{d^2 w_1}{d\varphi^2} = - (2\mu + \lambda) \frac{d^2 s_1}{dz^2}. \quad (34 \text{ b})$$

Gl. (34 b) ist nur dann zu erfüllen, wenn

$$d^2 w_1 / d\varphi^2 = 0, \quad d^2 s_1 / dz^2 = 0, \quad (35 \text{ a, b})$$

also (bis auf unwesentliche additive Konstanten)

$$w_1 = C_1 \varphi, \quad s_1 = C_2 z \quad (36 \text{ a, b})$$

gilt. Ist $C_2 \neq 0$, so wird das Kristallgitter in z -Richtung aufgeweitet, und zwar um den Faktor $(1 + k^2 C_2)$. Da die Stärke der Schraubenversetzung gleich einem Atomabstand in z -Richtung (bzw. einem ganzzahligen Vielfachen desselben) ist, muß die

z -Komponente der Verschiebung

$$w = (b/2\pi) (1 + k^2 C_2) \varphi, \quad (37)$$

also

$$C_1 = C_2 b k/2\pi \quad (38)$$

sein. Gl. (38) bedeutet, daß Gl. (36 a) eine Verschiebung proportional k^3 gibt und in der hier verwendeten Näherung zu vernachlässigen ist.

Durch Variation der Konstanten der homogenen Lösung erhält man als Lösung der Gl. (34 a)

$$u_1 = B_1/r + B_2 r + A(\ln r/r) \quad (39)$$

$$\text{mit } A = -\frac{\mu+\lambda+m-n/4}{2\mu+\lambda} \frac{b^2}{8\pi^2} \quad (40)$$

$$= \frac{1}{3} \left(\frac{1+r}{1-r} \right) \frac{b^2}{8\pi^2} \left(\frac{dG}{dp} + \frac{n}{12K} \right).$$

Zwei der Gleichungen für die drei Integrationskonstanten B_1 , B_2 , C_2 erhält man aus der Forderung, daß auf die beiden Mantelflächen des Zylinders keine äußeren Kräfte wirken, also nach Gl. (12 b)

$$\sigma_{rr,a} = k^2 \left[(2\mu+\lambda) \left(B_2 - \frac{B_1}{r^2} + \frac{A}{r^2} - \frac{A \ln r}{r^2} \right) \right. \quad (41)$$

$$+ \lambda \left(\frac{B_1}{r^2} + B_2 + \frac{A \ln r}{r^2} + C_2 \right)$$

$$\left. + \left(\frac{\lambda+m}{2} - \frac{n}{4} \right) \frac{1}{r^2} \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 \right] = 0$$

für $r=r_0$ und $r=R$

ist. Löst man die beiden in (41) enthaltenen Gleichungen nach B_1 und B_2 auf, so bekommt man

$$B_1 = \frac{(\lambda+m-n/2) b^2}{16\mu\pi^2} \quad (42 \text{ a})$$

$$- A \left\{ \frac{R^2 \ln r_0 - r_0^2 \ln R}{R^2 - r_0^2} - \frac{2\mu+\lambda}{2\mu} \right\},$$

$$B_2 = \frac{\mu}{\mu+\lambda} A \frac{\ln R/r_0}{R^2 - r_0^2} - \frac{\lambda}{2(\mu+\lambda)} C_2. \quad (42 \text{ b})$$

Die dritte Integrationskonstante C_2 wird durch die Forderung bestimmt, daß auf Querschnitten senkrecht zur Versetzungslinie im Durchschnitt keine Normalspannung wirken soll. (Die stärkere Forderung, daß die Querschnitte senkrecht zur Versetzungslinie spannungsfrei sein sollen, kann *nicht* erfüllt werden, da – wie oben erwähnt – bereits die lineare Theorie ein Moment in diesen Querschnitten liefert, das einen eine Schraubenversetzung enthaltenden Zylinder endlicher Länge zu tordieren sucht.) Es muß somit im Endkoordinatensystem

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{r=r_0+u(r_0)}^{r=R+u(R)} \sigma_{zz} r \, dr \, d\varphi = 0 \quad (43)$$

gelten. Mit

$$\sigma_{zz} = k^2 \left[\lambda \left(2B_2 + \frac{A}{r^2} \right) \right. \quad (44)$$

$$\left. + (2\mu+\lambda) C_2 + \left(2\mu + \frac{\lambda+m}{2} \right) \frac{b^2}{4\pi^2 r^2} \right]$$

findet man aus Gl. (43) bis auf Glieder höherer Ordnung in k

$$k^2 \left[2\lambda B_2 \frac{R^2 - r_0^2}{2} + \lambda A \ln \frac{R}{r_0} + (2\mu+\lambda) C_2 \frac{R^2 - r_0^2}{2} \right. \quad (45 \text{ a})$$

$$\left. + \frac{b^2}{4\pi^2} \left(2\mu + \frac{\lambda}{2} + \frac{m}{2} \right) \ln \frac{R}{r_0} \right] = 0,$$

woraus sich nach Einsetzen von B_1 und B_2 schließlich

$$C_2 = -\frac{(4\mu+\lambda+m)(\mu+\lambda)(b^2/4\pi^2) + 2(2\mu\lambda+\lambda^2)A}{\mu(2\mu+3\lambda)} \cdot \frac{\ln R/r_0}{R^2 - r_0^2} \quad (45 \text{ b})$$

ergibt.

Setzt man die damit vollständig bestimmte Lösung in den Ausdruck (4) für die Energiedichte ein, so sieht man, daß (abgesehen von höheren Potenzen als k^3) alle dort auftretenden Invarianten Null sind mit Ausnahme von

$$J_2 = -\frac{k^2}{4r^2} \left(\frac{dw}{d\varphi} \right)^2 = -\frac{k^2}{4r^2} \left\{ \left(\frac{dw_0}{d\varphi} \right)^2 + \dots \right\} \quad (46)$$

$$= -k^2 \frac{b^2}{16\pi^2 r^2}.$$

In der hier verwendeten Näherung wird somit die Energiedichte ($k=1$)

$$\Phi = \frac{\mu b^2}{8\pi^2 r^2}, \quad (47)$$

während sich für die Linienergie der Versetzung (bezogen auf die Längeneinheit im verformten Zustand)

$$E = 2\pi \int_{r_0+u(r_0)}^{R+u(R)} \frac{\varrho_x}{\varrho_a} \Phi r \, dr = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}, \quad (48)$$

also derselbe Wert wie in der linearen Theorie, ergibt.

Die Volumdilatation ist

$$\Theta = \frac{\varrho_a - \varrho_x}{\varrho_x} = \det \mathbf{J} - 1 \quad (49 \text{ a})$$

oder (bis auf Glieder höherer Ordnung als k^2)

$$\Theta = k^2 \left(\frac{du_1}{dr} + \frac{u_1}{r} + \frac{ds_1}{dz} \right) = (2B_2 + C_2) + \frac{A}{r^2}. \quad (49 \text{ b})$$

Im Regelfall ist A [vgl. Gl. (40)] eine positive Konstante; es ist also im Rahmen der Elastizitätstheorie 2. Ordnung eine positive Dilatation vorhanden, die mit dem Abstand r von der Schraubenversetzung wie $1/r^2$ variiert. (Bekanntlich tritt bei der Schrau-

benversetzung nach der linearen Theorie keine Dilatation auf.) Diesem Hauptanteil ist eine kleine ortsunabhängige Dilatation überlagert, die ebenfalls meist positiv sein dürfte und die zur gesamten Volumvergrößerung nur wenig beiträgt. Die Vergrößerung des Volumens pro Längeneinheit der Versetzung ist (wiederum unter Vernachlässigung höherer Glieder als k^2) gegeben durch

$$\begin{aligned} \Delta V &= \int_{r_0}^R 2\pi \Theta r dr \quad (50) \\ &= \pi (R^2 - r_0^2) (2B_2 + C_2) + 2\pi A \ln \frac{R}{r_0} \\ &= -\frac{b^2}{4\pi} \frac{12\mu + 6\lambda + 6m - n}{2(3\lambda + 2\mu)} \ln R/r_0. \end{aligned}$$

Die mittlere Dilatation

$$\bar{\Theta} = \Delta V / \pi (R^2 - r_0^2) \quad (51)$$

ist der sich aus der linearen Theorie ergebenden mittleren Energiedichte

$$\bar{W}_s = \frac{G}{4\pi^2} \frac{b^2}{R^2 - r_0^2} \ln \frac{R}{r_0} \quad (52)$$

proportional.

$$\text{Es gilt} \quad \bar{\Theta} = \frac{1}{G} \left(\frac{dG}{dp} - \frac{G}{K} \right) \bar{W}_s \quad (53)$$

in Übereinstimmung mit der von ZENER abgeleiteten Gl. (13). Die zahlenmäßige Diskussion der Gl. (50) bzw. Gl. (53) sowie der entsprechenden Gleichungen für Stufenversetzungen wurde für eine Anzahl von Stoffen an anderer Stelle gegeben^{9, 10}.

Läßt man den äußeren Zylinderradius R unendlich groß werden, so erhält man

$$\begin{aligned} B_1 &= \left\{ \frac{4\mu + 4\lambda + 4m - n}{4(2\mu + \lambda)} \ln r_0 - \frac{(4\mu + n)}{8\mu} \right\} \frac{b^2}{8\pi^2}, \\ B_2 &= C_2 = 0 \end{aligned} \quad (54)$$

und damit

$$\begin{aligned} u &= A \frac{\ln(r/r_0)}{r} - \frac{b^2}{16\pi^2} \frac{1}{r} \left(1 + \frac{n}{4\mu} \right), \quad (55) \\ s &= 0, \quad w_1 = 0. \end{aligned}$$

Aus Gl. (49 b) bekommt man für die Volumdilatation in der Umgebung einer Versetzung in einem unendlich ausgedehnten Medium

$$\Theta = A/r^2. \quad (56)$$

Gl. (56) war schon früher⁶ erhalten worden, wobei sich die Konstante A in atomphysikalischen Größen ausdrückte.

5. Elastizitätstheoretisches Modell für ein Zwischengitteratom

Ein in der Literatur vielfach verwendetes Modell für ein auf einem Zwischengitterplatz eingebautes Atom ist eine Hohlkugel, in das eine zweite Kugel eingezwängt ist. Im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie ergibt sich, daß in der eingezwängten Kugel (im folgenden mit II bezeichnet) ein reiner hydrostatischer Spannungszustand vorhanden ist, während im Außenbereich das Spannungsfeld eines sog. Dilatationszentrums vorliegt. Wir werden in diesem Zusammenhang folgendes Problem behandeln: In einer Hohlkugel I mit Außenradius R_a und Innenradius R_i wird eine Kugel gleicher elastischer Eigenschaften, jedoch mit einem Radius $R_0 \neq R_i$ eingebracht. Gefragt ist nach den sich nach der Theorie 2. Ordnung ergebenden Verschiebungen sowie nach der lokalen und der gesamten Volumänderung.

Man könnte ohne größere Schwierigkeiten auch das allgemeinere Problem lösen, daß die Körper I und II verschiedene elastische Eigenschaften haben, da bei MURNAGHAN¹⁴ die Lösung für eine Hohlkugel mit beliebigem Außen- und Innendruck p_a bzw. p_i angegeben wird und man durch geeignetes Zusammensetzen zweier solcher Lösungen das allgemeinere Problem behandeln kann. Wir beschränken uns hier auf die speziellere Lösung, da uns vor allem an einem Vergleich der Dichteänderung mit der ZENER-schen Gl. (13) gelegen ist und diese Gleichung nur auf elastisch homogene Körper anwendbar ist.

Aus Symmetriegründen treten nur Radialverschiebungen, die Funktionen des Abstands vom Kugelmittelpunkt sind und die wir mit $u^I(r)$ und $u^{II}(r)$ bezeichnen, auf. Durch Anwendung des in den §§ 2 und 4 geschilderten Rechenverfahrens erhält man für die Verschiebung in der äußeren Kugel mit $R_0 = R_i(1+k)$

$$u^I(r) = k \left(\frac{B_1}{r^2} + B_2 r \right) + k^2 \left(\frac{B_3}{r^5} + \frac{B_4}{r^2} + B_5 r \right) \quad (57)$$

und für die Verschiebung in der inneren Kugel

$$u^{II}(r) = k C_1 r + k^2 C_2 r. \quad (58)$$

Die in der linearen Lösung enthaltenen Konstanten ergeben sich als

$$B_1 = \frac{3\lambda + 2\mu}{3(\lambda + 2\mu)} R_i^3 \equiv \beta R_i^3, \quad (59)$$

$$B_2 = \frac{4\mu}{3\lambda + 2\mu} \frac{B_1}{R_a^3} = (1 - \beta) \frac{R_i^3}{R_a^3}, \quad (60 \text{ a})$$

$$C_1 = (1 - \beta) \left(\frac{R_i^3}{R_a^3} - 1 \right). \quad (60 \text{ b})$$

Als Stärke des Dilatationszentrums bezeichnet man häufig

$$C = k B_1. \quad (61)$$

Da sich für die in der quadratischen Lösung auftretenden Konstanten nur für

$$B_3 = B_1^2 N; \quad N = \frac{\lambda + 3\mu + 2m}{\lambda + 2\mu} \quad (62)$$

ein einfacher Ausdruck ergibt, verzichten wir darauf, die übrigen Konstanten anzuschreiben.

Für die Dilatation im Gebiet I findet man

$$\Theta^I = 3k B_2 + 3k^2 \{B_5 + B_2^2 - (1 + N) B_1^2 / r^6\}, \quad (63)$$

wobei sich B_5 aus Gliedern der Größenordnungen $(R_i/R_a)^3$ und $(R_i/R_a)^6$ zusammensetzt.

Durch Integration über die Hohlkugel I erhält man für die Volumänderung im Bereich I

$$\Delta V^I = 4\pi \left\{ k B_2 (R_a^3 - R_i^3) + k^2 \left[(B_5 + B_2^2) (R_a^3 - R_i^3) + (B_1^2 + B_1^2 N) \left(\frac{1}{R_a^3} - \frac{1}{R_i^3} \right) \right] \right\} \quad (64)$$

und entsprechend für die Volumänderung im Bereich II

$$\Delta V^{II} = 4\pi k \{C_1 + k(3C_1 + C_2 + C_1^2)\} R_i^3. \quad (65)$$

Für die gesamte Volumänderung $\Delta V = \Delta V^I + \Delta V^{II}$ ergibt sich nach einigen Umformungen, wenn

$$V_0 = \frac{4\pi}{3} R_a^3 \left(1 + 3k \frac{R_i^3}{R_a^3} \right) \quad (66)$$

das Gesamtvolume der beiden unverformten Körper bezeichnet,

$$\Theta \equiv \frac{\Delta V}{V_0} = 3k^2 B_1^2 \left(\frac{1}{R_a^6} - \frac{1}{R_a^3 R_i^3} \right) + \left\{ \frac{\frac{3}{2}(3\lambda + 2\mu) + 9l + n}{3\lambda + 2\mu} \frac{(4\mu)^2}{(3\lambda + 2\mu)^2} + \frac{2(3\lambda + 2\mu) + 8\mu + 6m - n}{3\lambda + 2\mu} \right\}. \quad (67)$$

Um diesen Ausdruck mit Gl. (13) vergleichen zu können, muß man die mittleren Energiedichten, wie sie aus der linearen Theorie folgen, kennen.

Es ergibt sich für die im Bereich I gespeicherte Dilatationsenergie

$$E_d^I = 2\pi(3\lambda + 2\mu) B_2^2 k^2 (R_a^3 - R_i^3), \quad (68)$$

für die dort gespeicherte Scherenergie

$$E_s^I = 8\pi\mu B_1^2 k^2 \left(\frac{1}{R_i^3} - \frac{1}{R_a^3} \right) \quad (69)$$

und für die im Bereich II gespeicherte Energie

$$E_d^{II} = 2\pi(3\lambda + 2\mu) C_1^2 k^2 R_i^3. \quad (70)$$

Als mittlere Energiedichten des gesamten Körpers erhält man

$$W_d = \frac{E_d^I + E_d^{II}}{V_0} = \frac{3}{2} \frac{(4\mu)^2}{3\lambda + 2\mu} k^2 B_1^2 \left(\frac{1}{R_i^3 R_a^3} - \frac{1}{R_a^6} \right) \quad (71)$$

und

$$W_s = \frac{E_s^I}{V_0} = 6\mu k^2 B_1^2 \left(\frac{1}{R_i^3 R_a^3} - \frac{1}{R_a^6} \right). \quad (72)$$

Führt man Gl. (71) und (72) in Gl. (67) ein und berücksichtigt die Gln. (5) und Gl. (6), so erhält man genau die ZENERSche Formel Gl. (13).

Es ist damit gezeigt, daß auch im vorliegenden Beispiel, bei dem sowohl Scher- als auch Dilatationsenergie ins Spiel kommen, die ZENERSche Formel das gleiche Ergebnis wie die wesentlich umständlichere Rechnung auf Grund der Elastizitätstheorie 2. Ordnung ergibt. Allerdings liefert die ZENERSche Formel nur die integrale Volumänderung, während die ausführliche Rechnung auch die lokale Volumänderung, also die Dilatation, gibt.

Die Verfasser sind den Herren Dr. P. HAASEN, Dr. F. KRÖNER und cand. phys. O. BUCK für anregende Diskussionen zu Dank verpflichtet. Einer der Autoren (A. S.) gedenkt ferner dankbar zahlreichen Diskussionen während des von Professor Dr. GRAMMEL geleiteten Kolloquiums über Verformung und Fließen des Festkörpers (Madrid 1955), während dem er wertvolle Anregungen zu vorliegender Arbeit erhalten hat.