

Elektronentheoretische Untersuchungen über Fehlstellen in Metallen

IX. Der elektrische Widerstand von Stufenversetzungen

Von ALFRED SEEGER und HELMUT BROSS

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

(Z. Naturforschg. 15 a, 663—689 [1960]; eingegangen am 29. April 1960)

In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, daß der elektrische Widerstand einer Stufenversetzung in einem einwertigen Metall um rund eine Größenordnung größer ist als bisher allgemein angenommen worden war. Während die bisherigen theoretischen Arbeiten für Stufenversetzungen in einem unendlichen Kristall einen endlichen (und verhältnismäßig niedrigen) Widerstandswert lieferten, wird hier nachgewiesen, daß in Wirklichkeit der elektrische Widerstand logarithmisch von einem äußeren Abschneideradius R abhängt. Das Versagen der früheren Rechnungen beruht in erster Linie auf der unzulässigen Verwendung der ersten BORNschen Näherung sowie auf Unvollständigkeiten des verwendeten Streupotentials. Um die maßgebenden Effekte zu erhalten, hat man neben dem von der linearen Elastizitätstheorie gelieferten $\sin \varphi/\varrho$ -Glieder im Potential weitere Glieder zu berücksichtigen, die durch die nicht-lineare elastische Theorie und durch den genauen Zusammenhang zwischen Potential und Dilatation geliefert werden. Die entstehende SCHRÖDINGER-Gleichung wird teils streng, teils durch Störungsrechnung 2. Ordnung so gelöst, daß alle Terme berücksichtigt werden, die einen merklichen Beitrag zum Widerstand bis zu Abschneideradien R von der Größenordnung 10^{-3} cm geben. Ausführliche numerische Angaben werden für Kupfer gemacht, für das die Werte der nicht-linearen elastischen Konstanten experimentell bekannt sind. Der Vergleich mit den Experimenten, der vor allem auf dem Verhältnis von elektrischem Widerstand zur gespeicherten Energie beruht, ergibt gute Übereinstimmung mit dem Experiment, wenn man die kürzlich von SEEGER, BERNER und WOLF ermittelten Stapelfehlerbreiten aufgespaltener Versetzungen sowie den früher berechneten Reflexionskoeffizienten von Stapelfehlern berücksichtigt.

1. Einleitung und Problemstellung

Trotz jahrelanger Bemühungen¹⁻⁸ ist das Problem der Berechnung des elektrischen Widerstands einer Stufenversetzung in einem Metall selbst im einfachsten Falle noch nicht befriedigend gelöst, wie wir sogleich näher ausführen werden. Als „einfachsten Fall“, den wir auch in der vorliegenden Arbeit ins Auge fassen, betrachten wir eine einzelne, nicht in ein Stapelfehlerband aufgespaltene Stufenversetzung in einem elastisch isotropen Metall, dessen Leitungselektronen in der Einteilchennäherung als freies Elektronengas mit sphärischen Energieflächen behandelt werden dürfen. Unter diesen Voraussetzungen wird der elektrische Zusatzwiderstand der Versetzungen ausschließlich durch die Streuung der Leitungselektronen an den Ladungsinhomogenitäten hervorgerufen, welche mit den Dilatationen im Verzerrungsfeld und im Kern der Versetzungen verbunden sind. In allen uns bekannten Arbeiten wurde diese Streuung mit Hilfe der Störungsrechnung

1. Näherung, oder — was dasselbe ist — mit der BORNschen Näherung behandelt. Beschränken wir uns bei der Ermittlung des Dilatationsfeldes zunächst auf den Gültigkeitsbereich der linearen Elastizitätstheorie, so besitzt die Dilatation in der Umgebung einer Stufenversetzung eine charakteristische Symmetrie oder — genauer gesagt — Antisymmetrie: Die Dilatationen und damit in erster Näherung auch die Streupotentiale in Punkten, welche zur Gleitebene der Stufenversetzung symmetrisch gelegen sind, sind entgegengesetzt gleich. Denkt man sich im Sinne der BORNschen Näherung die gestreute Welle aus den Beiträgen der Streuung durch die einzelnen Volumelemente aufgebaut, so liegen definierte Phasenbeziehungen vor, die zu einer destruktiven Interferenz der von entgegengesetzten Seiten der Gleitebene kommenden Beiträge führen. Diese Interferenz bewirkt, daß sich der Streuquerschnitt einer Stufenversetzung als endlich ergibt, obwohl die Komponenten des Verzerrungstensors als Funktion des Abstandes ϱ von den Versetzungslinien nur

¹ J. S. KOEHLER, Phys. Rev. **75**, 106 [1949].

² J. K. MACKENZIE u. E. H. SONDHEIMER, Phys. Rev. **77**, 264 [1949].

³ R. LANDAUER, Phys. Rev. **82**, 520 [1951].

⁴ D. L. DEXTER, Phys. Rev. **86**, 770 [1952].

⁵ S. C. HUNTER u. F. R. N. NABARRO, Proc. Phys. Soc., Lond. **A 220**, 542 [1953].

⁶ P. G. KLEMENS, Can. J. Phys. **34**, 1212 [1956].

⁷ P. G. KLEMENS, Can. J. Phys. **35**, 441 [1957].

⁸ W. A. HARRISON, Phys. Chem. Solids **5**, 44 [1957].

⁹ H. STEHLE u. A. SEEGER, Z. Phys. **146**, 217 [1956].



äußerst langsam, nämlich wie ϱ^{-1} abnehmen. Dieses langsame Abklingen ruft bekanntlich bei der Berechnung der elastischen Energie und der Volumänderung logarithmische Divergenzen hervor, die uns zur Einführung eines äußeren Abschneideradius R zwingen.

Stört man die erwähnte destruktive Interferenz – wenn auch nur in sehr geringem Maße –, so ändern sich die Verhältnisse bei der Berechnung des Streuquerschnittes und damit des elektrischen Widerstandes schlagartig: es tritt hier ebenfalls eine logarithmische Divergenz auf. In Wirklichkeit ist eine solche Störung immer vorhanden, da man ja bei strenger Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung die Streuamplitude bei Vorzeichenumkehr des Streupotentials *nicht* wie in der BORNSchen Näherung durch Vorzeichenumkehr erhält. Wie wir im einzelnen zeigen werden, liefert in der Tat eine verbesserte Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung eine logarithmische Divergenz des Streuquerschnittes und damit – nach Einführung eines geeigneten äußeren Abschneideradius R – einen wesentlich größeren elektrischen Widerstand von Stufenversetzungen als die BORNSche Näherung, auf der, wie schon erwähnt, alle bisherigen Rechnungen basieren. Es mag zunächst überraschen, daß dieser Effekt gerade bei großen Abständen auftritt, wo die Streupotentiale am kleinsten sind und damit die BORNSche Näherung am besten anwendbar sein sollte. Man muß jedoch bedenken, daß es sich dabei um die Differenz zweier sehr großer Effekte handelt, die schon durch kleine Veränderungen beeinflusst wird. Die Verhältnisse liegen hier analog wie bei der Berechnung der totalen Volumänderung einer Versetzung als eines elastischen Effekts zweiter Ordnung, dessen entscheidende Beiträge ja ebenfalls aus den weit von der Versetzungslinie entfernten Gebieten kommen⁹, in denen an und für sich die elastische Theorie erster Ordnung besonders gut zutreffen sollte.

Die oben erwähnte Antisymmetrie ist in Wirklichkeit noch in anderer Weise gestört, die ebenfalls auf die logarithmische Divergenz des Streuquerschnittes führt. Verbessert man die Aussagen der linearen Elastizitätstheorie durch Anwendung der Elastizitätstheorie 2. Ordnung^{9–12}, so findet man,

daß der eingangs besprochenen, zur Gleitebene antisymmetrischen Dilatation eine symmetrische Dilatation überlagert ist, die bewirkt, daß die Versetzung im Durchschnitt nicht elektrisch neutral, sondern negativ aufgeladen ist (siehe Anhang A und § 2). Würde man die Streuung der Leitungselektronen an dem entsprechenden, in guter Näherung um die Versetzungslinie rotationssymmetrischen Streupotential ebenfalls mit Hilfe der BORNSchen Näherung behandeln, so erhielte man wegen Superpositionsprinzips (und der besonderen Symmetrieverhältnisse) ebenfalls wieder einen endlichen Streuquerschnitt. Löst man das Streuproblem jedoch für den rotationssymmetrischen Potentialanteil „streng“¹³ (was verhältnismäßig leicht möglich ist⁹), so erhält man auch dann schon die logarithmische Divergenz des Streuquerschnittes, wenn man das von der linearen Elastizitätstheorie gelieferte asymmetrische Streupotential mit Hilfe der Störungsrechnung 1. Näherung behandelt. Es zeigt sich auch bei dieser Betrachtungsweise, daß schon geringe Abweichungen von den in den früheren Arbeiten zugrunde gelegten Verhältnissen das Ergebnis sehr stark beeinflussen und zu einem wesentlich vergrößerten Versetzungs-widerstand führen.

In genau gleicher Weise, wie es im vorstehenden Abschnitt geschildert wurde, wirkt sich auch die Berücksichtigung höherer Glieder bei der Ableitung des Streupotentials mit Hilfe der THOMAS-FERMI-Methode aus (vgl. § 2).

Man kann die vorstehenden Erörterungen dahingehend zusammenfassen, daß – im Gegensatz zu der seitherigen Auffassung – der elektrische Widerstand einer Stufenversetzung logarithmisch von einem äußeren Abschneideradius abhängt und daß drei verschiedene *physikalische* Ursachen zu diesem logarithmischen Glied beitragen¹⁴. Das korrekterweise zu benutzende Potential ist so kompliziert, daß eine strenge Lösung der vollständigen SCHRÖDINGER-Gleichung nicht möglich ist und wir zur expliziten Berechnung der logarithmischen Glieder die Störungsrechnung verwenden müssen. Wir können jedoch zeigen, daß eine bei großen Abständen von der Versetzung (wo ja die logarithmische Divergenz ihren Ursprung hat) strenge Lösung $\log R$ -Glieder

¹⁰ A. SEEGER U. E. MANN, Z. Naturforschg. **14a**, 154 [1959].

¹¹ E. KRÖNER U. A. SEEGER, Arch. Rat. Mech. Analys. **3**, 97 [1959].

¹² H. PFLEIDERER, A. SEEGER U. E. KRÖNER, Z. Naturforschg. **15a** [1960], Septemberheft.

¹³ Unter einer „strengen“ Lösung wollen wir hier und im folgenden eine solche verstehen, bei der Näherungen nur an unwesentlichen Stellen gemacht sind.

¹⁴ *Mathematisch* treten jedoch in dieser Arbeit nur zwei verschiedene logarithmische Glieder auf, nämlich die unten mit β^2 und $\kappa \cdot \beta$ bezeichneten.

erhält, also das mit Hilfe der Störungsrechnung höherer Ordnung ermittelte Verhalten zeigt (§ 3 b).

Für die folgende Beschreibung des Gangs der Störungsrechnung kennzeichnen wir das „lineare“ Potential durch die Konstante β und den rotations-symmetrischen Anteil des „quadratischen“ Potentials durch die Konstante κ [siehe Gl. (2.9 a)]. Wir werden die Berechnung des Widerstands einer Stufenversetzung so durchführen, daß in der Streuwahrscheinlichkeit die in den genannten Konstanten quadratischen Glieder voll berücksichtigt werden. Das Glied mit β^2 bekommen wir durch die BORNSche Näherung 2. Ordnung, das Glied mit κ^2 ist in der oben erwähnten strengen Lösung von STEHLE und SEEGER⁹ enthalten und das Glied mit $\kappa \cdot \beta$ bekommen wir durch die ebenfalls schon erwähnte, von der strengen κ^2 -Lösung ausgehende Störungsrechnung 1. Ordnung. Die Glieder mit κ_2 und κ_3 , die zu dem winkelabhängigen Anteil des „quadratischen“ Potentials gehören, sind für die Streuung weniger wichtig und werden nur in 1. Näherung behandelt werden. Wir sind der Auffassung, daß wir auf diese Weise alle wesentlichen Züge des Problems – vielleicht abgesehen vom Versetzungs-„Kern“, wo wir mit einem inneren Abschneideradius ϱ_0 arbeiten – erfaßt haben.

Wir schließen diese einleitenden Erörterungen mit einigen Bemerkungen darüber ab, weshalb beim vorliegenden Problem die „linearen“ und die „quadratischen“ Glieder gleichermaßen wichtig sind, während höhere Glieder mit Recht vernachlässigt werden können. Wir interessieren uns besonders für die Verhältnisse bei großen Abständen ϱ von der Versetzungslinie, so daß man die einzelnen Terme nach ihrem Verhalten für große ϱ einteilen kann. In Gl. (2.9 a) überwiegt danach das β -Glieder, das proportional zu ϱ^{-1} ist, über das zu ϱ^{-2} proportionale κ -Glieder. Ordnet man jedoch die einzelnen Beiträge nach ihrem Symmetriecharakter an, d. h. nimmt man eine Multipolentwicklung vor, so ist das führende Glied der zu ϱ^{-2} proportionale Linienpol, während der Liniendipol des β -Gliederes erst an zweiter Stelle kommt. Für die praktische Rechnung bedeutet dies, daß beide Glieder etwa gleich wichtig sind. Alle übrigen Beiträge fallen entweder bei großen Abständen rascher ab als die vorstehend genannten – dies trifft für die in Gl. (2.9 a) nicht angeschriebenen

Glieder dritter und höherer Ordnung zu – oder gehören zu einem höheren Multipol. Ein Beispiel für letzteres sind die κ_2 - und κ_3 -Glieder in Gl. (2.9 a), die einem Linien-Quadrupol entsprechen.

Wegen der Vielzahl der verschiedenen Beiträge zum Potential und der Notwendigkeit, Störungsrechnung höherer Ordnung zu treiben, ist die Berechnung der Streuamplitude (§ 3, Anhang B) recht kompliziert. Wegen der geringen Symmetrie erfordert auch die Lösung des Transportproblems (§ 4, Anhang C) einen erheblichen mathematischen Aufwand. In beiden Fällen müssen wir uns darauf beschränken, den Gang der Rechnung sowie die wichtigsten Resultate anzugeben, und im übrigen annehmen, daß der Leser von früheren Arbeiten her (insbesondere III⁹, IV¹⁵, V¹⁶, VI¹⁷) mit der verwendeten Methodik vertraut ist.

2. Das Streupotential

Zur Berechnung des Streupotentials in der Umgebung der Versetzung müssen wir eine von OVERHAUSER¹⁸ angegebene self-consistent-Methode für nichtlineare Verzerrungen verallgemeinern. Wir machen hierzu folgende Näherungen: 1. Die Elektronen werden als quasi-frei betrachtet; 2. die positiven Ladungen denkt man sich gleichmäßig mit der Ladungsdichte eN_0 im unverzerrten Kristall verschmiert.

Wir betrachten nun ein kleines Volumen v_0 , das durch die inneren Spannungen der Versetzungen in das Volumen $v(r)$ übergeführt wird. Wegen der Konstanz der positiven Ladungen, die in diesem Volumen enthalten sind, wird die Dichte der positiven Ladungen im Kristall wie folgt verändert:

$$\delta\sigma_+ = e \frac{N_0 v_0}{v} - N_0 = -e N_0 \cdot \Theta. \quad (2.1)$$

Die Größe $\Theta = (v - v_0)/v$ ist die Dilatation des Kristalls in den Koordinaten des verzerrten Zustandes.

Diese positive Ladungsänderung wird nun teilweise durch eine Verschiebung des Elektronengases rückgängig gemacht, die sich mit Hilfe der THOMAS-FERMI-Methode berechnen läßt. Mit $U(r)$ bezeichnen wir das self-consistent-Potential, das im verzerrten Kristall durch die Änderung der positiven und negativen Ladungen hervorgerufen wird. Der maximale Ausbreitungsvektor k_m in jedem Punkt des

¹⁶ H. BROSS u. A. SEEGER, J. Phys. Chem. Sol. **4**, 161 [1958].

¹⁵ A. SEEGER u. H. STEHLE, Z. Phys. **146**, 242 [1956].

¹⁷ H. BROSS u. A. SEEGER, J. Phys. Chem. Sol. **6**, 324 [1958].

¹⁸ A. W. OVERHAUSER, Phys. Rev. **89**, 689 [1953].

Gitters ist gegeben durch

$$\frac{\hbar^2 k_m^2}{2 m^*} = \zeta + e U(r), \quad (2.2)$$

wo $\zeta = \hbar^2 k_F^2 / 2 m^*$ die FERMI-Energie im unverzerrten Kristall ist. Die Elektronendichte als Funktion des Ortes wird dann

$$n(r) = \frac{k_m^3}{3 \pi^2} = \frac{1}{3 \pi^2} \left(\frac{2 m^*}{\hbar^2} \zeta \right)^{3/2} \left[1 + \frac{e U}{\zeta} \right]^{3/2}. \quad (2.3)$$

Da $e U \ll \zeta$ ist, können wir den obigen Ausdruck nach Potenzen $e U / \zeta$ entwickeln. Im Gegensatz zu OVERHAUSER müssen wir jedoch an dieser Stelle mindestens noch die quadratischen Glieder mitnehmen. Die Änderung der Ladungsdichte der Elektronen wird dann

$$\delta \sigma_-(r) = -e N_0 \left[\frac{3}{2} \frac{e U}{\zeta} + \frac{3}{8} \left(\frac{e U}{\zeta} \right)^2 \right], \quad (2.4)$$

wenn wir noch die Beziehung $N_0 = \frac{1}{3 \pi^2} \left(\frac{2 m^*}{\hbar^2} \zeta \right)^{3/2}$ berücksichtigen.

Das zunächst noch unbekannte self-consistent-Potential $U(r)$ ist durch die folgende, nichtlineare Differentialgleichung bestimmt:

$$\begin{aligned} \Delta U &= -4 \pi [\delta \sigma_+ + \delta \sigma_-] \\ &= 4 \pi e N_0 \left[\Theta + \frac{3}{2} \frac{e U}{\zeta} + \frac{3}{8} \left(\frac{e U}{\zeta} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Entwickelt man die Dilatation $\Theta(r)$ und das Potential $U(r)$ in ebene Wellen

$$\Theta = \sum \Theta_q \cdot e^{i q r} \quad \text{und} \quad U = \sum U_q \cdot e^{i q r},$$

dann geht die obige Differentialgleichung in folgendes Gleichungssystem für die FOURIER-Amplituden über

$$q^2 U_q = -4 \pi e N_0 \left[\Theta_q + \frac{3}{2} \frac{e U_q}{\zeta} + \frac{3}{8} \left(\frac{e}{\zeta} \right)^2 \sum_{q'} U_{q'} U_{q-q'} \right]. \quad (2.6)$$

Da $e U_q \ll \zeta$ ist, können wir diese Gleichungen durch Iteration lösen. Gehen wir bis zu quadratischen Gliedern in den FOURIER-Komponenten der Dilatation, dann wird

$$U_q = -\frac{2}{3} \frac{\zeta}{e} \left\{ \Theta_q + \frac{1}{6} \sum_{q'} \Theta_{q'} \Theta_{q-q'} \frac{1}{1 + \frac{1}{6 \pi} \frac{q'^2 \zeta}{e^2 N_0}} \frac{1}{1 + \frac{1}{6 \pi} \frac{|q-q'|^2 \zeta}{e^2 N_0}} \right\} \left[1 + \frac{1}{6 \pi} \frac{q^2 \zeta}{e^2 N_0} \right]^{-1}. \quad (2.7)$$

Wenn das Verzerrungsfeld nicht stark veränderlich ist, kann der Ausdruck $\frac{q^2 \zeta}{6 \pi e^2 N_0}$ gegenüber 1 vernachlässigt werden. Nach Multiplikation mit $e^{i q r}$ und Summation über q , ergibt sich dann folgende Gleichung für das Streupotential:

$$U(r) = -\frac{2}{3} \frac{\zeta}{e} \left[\Theta(r) + \frac{1}{6} \Theta(r)^2 \right]. \quad (2.8)$$

Setzt man die im Anhang A berechneten Dilatationen in Gl. (2.8) ein, und vernachlässigt höhere Potenzen als b^2 , so erhält man für eine Stufenversetzung

$$-e \frac{2 m^*}{\hbar^2} U(r) \quad (2.9 a)$$

$$= \beta k_F \cdot \frac{\sin \varphi}{\varrho} + \frac{\kappa}{\varrho^2} + \frac{\kappa_2 + \kappa_3 \cdot \ln(\varrho/\varrho_i)}{\varrho^2} \cos 2 \varphi$$

und für eine Schraubenversetzung

$$-e \frac{2 m^*}{\hbar^2} U(r) = \frac{\kappa}{\varrho^2}. \quad (2.9 b)$$

In Gl. (2.9) haben wir Zylinderkoordinaten ϱ , φ , z eingeführt, wobei die Versetzungen in der z -Achse verlaufen und der Winkel von der Richtung des BURGERS-Vektors der Stufenversetzung aus gerechnet wird. In den im Anhang A eingeführten Größen

drücken sich die Parameter der Gl. (2.9 a) wie folgt aus:

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{2}{3} \frac{b}{2 \pi} k_F C_0, \\ \kappa &= \frac{2}{3} \left(\frac{b k_F}{2 \pi} \right)^2 \left(C_e + \frac{1}{12} C_0^2 \right), \\ \kappa_2 &= \frac{2}{3} \left(\frac{b k_F}{2 \pi} \right)^2 \left(C_e - \frac{1}{12} C_0^2 \right), \\ \kappa_3 &= \frac{2}{3} \left(\frac{b k_F}{2 \pi} \right)^3 C_3, \end{aligned} \quad (2.10 a)$$

während in Gl. (2.9 b)

$$\kappa = \frac{2}{3} \left(\frac{b k_F}{2 \pi} \right)^2 C_s \quad (2.10 b)$$

gilt.

Wir fügen noch einige Bemerkungen über die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Abscheideradien an. In Ziff. 1 wurde bereits auf die Bedeutung des *äußeren* Abscheideradius R hingewiesen. Daneben treten zwei innere Abscheideradien auf, ϱ_i und ϱ_0 . ϱ_i erscheint [vgl. Gl. (2.9 a)] in der 2. Näherung der elastizitätstheoretischen Lösung für das Dilatationsfeld einer Stufenversetzung (siehe auch die entsprechende Rechnung für Schraubenversetzungen⁹⁾). Der zweite innere Abscheideradius ϱ_0 muß eingeführt werden, weil Gl. (2.9) bei kleinen ϱ_0 ungültig wird. Dies gilt insbesondere für

die Glieder κ/ϱ^2 . STEHLE und SEEGER⁹ haben vorgeschlagen, für $\varrho < \varrho_0$ in diesen Gliedern ϱ^{-2} durch ϱ_0^{-2} zu ersetzen, wobei als zweckmäßige Wahl $\varrho_0 \approx \frac{1}{3} b$ erscheint. Wir werden uns dort, wo der Abschneideradius ϱ_0 für das Endergebnis wesentlich ist, diesem Vorgehen anschließen. Darüber hinaus nehmen wir bei den numerischen Rechnungen an, daß $\varrho_i = \varrho_0$ gesetzt werden darf.

3. Quantenmechanische Behandlung der Streuung der Leitungselektronen an einer Stufenversetzung

a) Die Schrödinger-Gleichung

Die Ein-Elektronen-SCHRÖDINGER-Gleichung für Elektronen an der FERMI-Oberfläche lautet mit dem Potential Gl. (2.8)

$$\Delta\psi + k_F^2 \psi = \left\{ \beta k_F \frac{\sin \varphi}{\varrho} + \frac{\kappa}{\varrho^2} + \frac{\kappa_2}{\varrho^2} \cos 2\varphi + \kappa_3 \cdot \ln(\varrho/\varrho_i) \frac{\cos 2\varphi}{\varrho^2} \right\} \psi. \quad (3.1)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit für die Streuung der Elektronen am Potential $U(r)$ bekommt man aus jenen Lösungen der Gl. (3.1), die sich für $\varrho \rightarrow \infty$ als Überlagerung einer ebenen Welle $V^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ (V = Kristallvolumen) und einer gestreuten (d. h. auslaufenden) Welle darstellen läßt. Die k_z -Kompo-

nente des Ausbreitungsvektors \mathbf{k} bleibt bei der Streuung ungeändert; durch den Ansatz

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i k_z z} \cdot R(\varrho, \varphi; k_\varrho) \quad (3.2)$$

erhält man

$$k_\varrho^2 = k_F^2 - k_z^2$$

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial R}{\partial \varrho} + \frac{1}{\varrho^2} \frac{\partial^2 R}{\partial \varphi^2} + k_\varrho^2 R = \left[\beta k_F \frac{\sin \varphi}{\varrho} + \frac{\kappa}{\varrho^2} + \frac{\kappa_2 + \kappa_3 \cdot \ln(\varrho/\varrho_i)}{\varrho^2} \cos 2\varphi \right] R. \quad (3.3)$$

Eine exakte Lösung dieser partiellen Differentialgleichung ist nicht möglich, weil eine Separation der Variablen nicht durchgeführt werden kann. Man ist deshalb auf Näherungsverfahren angewiesen, bei denen man exakte Lösungen aufsucht für eine Differentialgleichung, die aus dem Differentialoperator der linken und bestimmten Gliedern der rechten Seite gebildet ist und bei denen man die übrigen Terme der rechten Seite durch Störungsrechnung berücksichtigt. Für die Auswahl der streng zu berücksichtigenden Glieder ist das Verhalten der Differentialgleichung bei großem ϱ (Abschnitt b) und kleinem ϱ (Abschnitt c) maßgebend.

b) Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung in großen Abständen von der Stufenversetzung

Bei großer Entfernung von der Stufenversetzung können wir auf der rechten Seite der Differentialgleichung (3.3) alle Glieder bis auf $\beta \cdot k_F (\sin \varphi / \varrho)$ vernachlässigen. Es zeigt sich nun, daß wir dieses Glied, das bei der Stufenversetzung das wichtigste ist, exakt berücksichtigen können, wenn wir das Potential um ein Glied $-\frac{\beta^2}{4} \left(\frac{k_F}{k_\varrho} \right)^2 \frac{1}{\varrho^2}$ erweitern, durch das die Differentialgleichung (3.3) bei großen Werten von ϱ nur wenig verändert wird. Durch Einsetzen in die so entstehende Differentialgleichung

$$-\frac{\partial^2 R}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial R}{\partial \varrho} + \frac{1}{\varrho^2} \frac{\partial^2 R}{\partial \varphi^2} + \left(k_\varrho^2 - \beta k_F \frac{\sin \varphi}{\varrho} + \frac{\beta^2}{4} \frac{k_F^2}{k_\varrho^2} \frac{1}{\varrho^2} \right) R = 0 \quad (3.4)$$

kann man sich überzeugen, daß

$$R(\varrho, \varphi; k_\varrho) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\varrho k_\varrho)^\lambda \cdot Z_{n+\omega}(k_\varrho \varrho) \cdot e^{i n (\varphi - \chi)} \quad (3.5 a)$$

eine Lösung von (3.4) ist, wobei $Z_{n+\omega}(k_\varrho \varrho)$ eine beliebige Zylinderfunktion, die Größe χ eine Integrationskonstante und λ bzw. ω folgende Funktionen von χ

sind:

$$\lambda = i \frac{\beta}{2} \frac{k_F}{k_\varrho} \cos \chi, \quad \omega = -\frac{\beta}{2} \frac{k_F}{k_\varrho} \sin \chi. \quad (3.5 b)$$

Die allgemeine Lösung von (3.4) erhält man, wenn man eine Linearkombination aus den Lösungen (3.5) bildet und über die Integrationskonstante χ integriert.

$$R(\varrho, \varphi; k_\varrho) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i n \varphi} \int_{\chi=0}^{2\pi} e^{-i n \chi} (k_\varrho \varrho)^\lambda \cdot F(\chi) \{ \cos \alpha(\chi) \cdot J_{n+\omega}(k_\varrho \varrho) + \sin \alpha(\chi) \cdot N_{n+\omega}(k_\varrho \varrho) \} d\chi. \quad (3.6)$$

Die eine der so eingeführten Funktionen $F(\chi)$ ist durch die Forderung über das asymptotische Verhalten der

richtigen Lösung festgelegt. Die *nicht* vom Summationsindex n abhängige Phase $\alpha(\chi)$ läßt sich durch das Ver-

halten der Lösung bei kleinen Abständen vom Störzentrum bestimmen. Bei der Bestimmung der Funktion $F(\chi)$ an Hand der oben erwähnten Bedingungen für $\varrho \rightarrow \infty$ muß man berücksichtigen, daß durch das weitreichende $\sin \varphi/\varrho$ -Potential auch die ebene Welle modifiziert wird. Wenn man diese Veränderung der ebenen

Welle berücksichtigt, was zu ähnlichen Ausdrücken wie bei der von GORDON¹⁹ behandelten Streuung von Elektronen an einem nicht abgeschirmten COULOMB-Potential führt, so treten bei der Übergangswahrscheinlichkeit divergente Glieder auf. Diese Schwierigkeiten kann man vermeiden, wenn man einen äußeren Abschneideradius R einführt und für das Potential ansetzt

$$U(\varrho, \varphi) = \begin{cases} \beta k_F \frac{\sin \varphi}{\varrho} - \frac{\beta^2}{4} \frac{k_F^2}{k_\varrho^2} \frac{1}{\varrho^2} & \text{für } \varrho_0 < \varrho \leq R, \\ 0 & \text{für } R < \varrho < \infty. \end{cases} \quad (3.7)$$

Auf den inneren Abschneideradius ϱ_0 werden wir in Abschnitt c) zurückkommen. Die in (3.6) angegebene Lösung ist dann im Bereich $\varrho_0 < \varrho \leq R$ gültig. Im Be-

reich $R < \varrho < \infty$ muß sich die allgemeinste Lösung wie die einfallende, ebene Welle $V^{-1/2} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ und eine auslaufende Welle verhalten. Wie man sich leicht überzeugen kann, besitzt die Wellenfunktion

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i k_z z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i n \pi/2} e^{i n(\varphi - \varphi_0)} e^{i \eta_n} [\cos \eta_n \cdot J_n(k_\varrho \varrho) - \sin \eta_n \cdot N_n(k_\varrho \varrho)] \quad (3.8)$$

die oben genannte Eigenschaft, wenn der Ausbreitungsvektor der einfallenden Welle gegeben ist durch

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_\varrho \cdot \cos \varphi_0 \\ k_\varrho \cdot \sin \varphi_0 \\ k_z \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Die in Gl. (3.8) eingeführten Phasen η_n und die Funktion $F(\chi)$ bestimmen wir nun aus der Stetigkeitsforderung der Wellenfunktion und ihrer Ableitung an der Stelle $\varrho = R$. Die hierbei auftretenden gekoppelten Integralgleichungen lassen sich nicht exakt lösen.

Wie STEHLE und SEEGER⁹ in einer früheren Arbeit erläutert haben, können Elektronen, deren (klassisch betrachteter) Bahndrehimpuls einen bestimmten Höchst-

wert überschreitet, nicht mehr in das abgeschnittene Störpotential eindringen. Wenn wir diesen Höchstwert durch die Zahl M charakterisieren, wobei $M \approx k_\varrho R$ ist, so sind alle Phasen η_n mit $n > M$ Null. Außerdem läuft die in Gl. (3.6) angeschriebene Summe nur von $-M$ bis M . Für $|m| > M$ ist sie dagegen durch

$$\sum_{n=M}^{\infty} e^{i n \pi/2} [e^{i n(\varphi - \varphi_0)} + e^{-i n(\varphi - \varphi_0)}] \cdot J_n(k_\varrho \varrho)$$

zu ersetzen. Mit diesen Näherungen lassen sich nun auch die Integralgleichungen lösen. Zunächst können wir, da $k_\varrho R > n$ ist, die asymptotischen Entwicklungen der BESSEL-Funktionen benutzen. Für $|n| < M$ erhält man folgende beide Integralgleichungen

$$\int_0^{2\pi} F(\chi) \cdot (k_\varrho R)^\lambda \cdot e^{i(\alpha + \omega \pi/2)} e^{-i n \chi} \cdot d\chi = \frac{1}{V} e^{i n \pi/2} \cdot e^{-i n \varphi_0}, \quad (3.10 a)$$

$$\int_0^{2\pi} F(\chi) \cdot (k_\varrho R)^\lambda \cdot e^{-i(\alpha + \omega \pi/2)} e^{-i n \chi} \cdot d\chi = \frac{1}{V} e^{i n \pi/2} \cdot e^{-i n \varphi_0} \cdot e^{2i \eta_n}, \quad (3.10 b)$$

die sich mit Hilfe des FOURIER-Theorems einfach auflösen lassen. Es wird dann

$$F(\chi) = \frac{1}{2\pi V} (k_\varrho \varrho)^{-\lambda} \cdot e^{-i(\alpha + \omega \pi/2)} \frac{\sin(M + \frac{1}{2})(\chi + \frac{1}{2}\pi - \varphi_0)}{\sin \frac{1}{2}(\chi + \frac{1}{2}\pi - \varphi_0)}, \quad (3.11)$$

$$e^{2i \eta_n} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} e^{i n(\varphi_0 - \pi/2)} \int_0^{2\pi} e^{-i n \chi} \cdot e^{-i(2\alpha + \omega \pi)} \frac{\sin(M + \frac{1}{2})(\chi + \frac{1}{2}\pi - \varphi_0)}{\sin \frac{1}{2}(\chi + \frac{1}{2}\pi - \varphi_0)} d\chi & \text{für } |n| < M, \\ 1 & \text{für } |n| > M. \end{cases} \quad (3.12)$$

In Gl. (3.6) läuft die Summation von $-M$ bis $+M$. Da die BESSEL-Funktionen mit negativen Indizes m für kleine ϱ jedoch divergieren, kann das in Gl. (3.7) eingeführte Potential für $\varrho \rightarrow 0$ keine reguläre Lösung haben. Ähnlich wie bei der Behandlung der Schraubenversetzungen⁹, wo ja ein ähnliches Potential auftritt wie hier für kleines ϱ , müssen wir einen inneren Abschneideradius ϱ_0 einführen.

Durch die Stetigkeitsforderungen an diesem inneren Abschneideradius wird die allein noch freie Phasenfunktion $\alpha(\chi)$ bestimmt. Leider ist die explizite Bestimmung mit sehr großen mathematischen Schwierigkeiten verknüpft, weil sich die hierbei auftretenden Integralgleichungen nicht mehr näherungsweise lösen lassen.

¹⁹ W. GORDON, Z. Phys. **48**, 180 [1928].

Wir verzichten daher zunächst darauf, diesen Weg weiterzuverfolgen, obwohl er wahrscheinlich der einzige ist, mit dem man die SCHRÖDINGER-Gleichung mit einem $\sin \varphi/\varrho$ -Glied im Potential exakt lösen kann.

Für die weiteren Untersuchungen sind für uns zwei Folgerungen von Interesse:

1. Das Streupotential $\sin \varphi/\varrho$ besitzt nur dann eine endliche Übergangswahrscheinlichkeit, wenn man einen äußeren Abschneideradius R einführt.
2. Wie man sich durch Einsetzen von Gl. (3.11) in (3.6) überzeugen kann, kann der äußere Abschneideradius alle weiteren Rechnungen nur über das Glied $(\varrho/R)^2$ beeinflussen, was zu einer logarithmischen Abhängigkeit von R führt.

c) *Die Lösung der Schrödinger-Gleichung in der unmittelbaren Umgebung der Stufenversetzung und die daran anschließende Störungsrechnung*

Bei kleinen Entfernungen von der Stufenversetzung läßt sich die Winkelabhängigkeit von der Dif-

ferentialgleichung (3.3) abseparieren, weil nur noch das Glied κ/ϱ^2 auf der rechten Seite wesentlich ist. Der Ansatz

$$R(\varrho, \varphi) = e^{in\varphi} P_n(\varrho) \quad (3.13)$$

führt auf folgende Differentialgleichung für P_n :

$$\frac{d^2 P_n}{d\varrho^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{dP_n}{d\varrho} + \left(k_\varrho^2 - \frac{n^2 + \kappa}{\varrho^2} \right) P_n = 0. \quad (3.14)$$

Die Lösungen dieser Differentialgleichung, die besonders einfach sind, weil das Zentrifugalglied n^2/ϱ^2 und das Störglied κ/ϱ^2 zu einem Term ν^2/ϱ^2 zusammengefaßt werden können, wurden von SEEGER und STEHLE bei der Streuung der Elektronen an der Schraubenversetzung untersucht. Wie bei jenem Problem verliert das κ/ϱ^2 -Potential in der Umgebung des Versetzungskerns seine Gültigkeit. Wir führen deshalb auch hier einen inneren Abschneideradius $\varrho_0 \sim b/3$ ein, wobei für $\varrho < \varrho_0$ das Glied κ/ϱ^2 durch den konstanten Wert κ/ϱ_0^2 ersetzt werden soll. Für $\varrho > \varrho_0$ besitzt (3.14) folgende Lösung²⁰

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_z z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i \frac{n}{2} \pi} e^{i \eta_n(0)} e^{in(\varphi - \varphi_0)} \frac{e^{-2i\alpha_n} H_\nu^{(1)}(k_\varrho \varrho) + H_\nu^{(2)}(k_\varrho \varrho)}{2}, \quad (3.15)$$

die für sehr große Abstände vom Störzentrum in die einfallende ebene Welle $V^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ und die gestreute Welle übergeht. Die Phasenkonstante $\eta_n(0)$ ist dabei gegeben durch

$$\eta_n(0) = \frac{\pi}{2} (|n| - \nu_0) \quad \text{mit } \nu = +\sqrt{n^2 + \kappa}. \quad (3.16 \text{ a, b})$$

Die Phasenkonstante α_n beschreibt die Wirkung der Abschneidung und ist durch Gl. (38) der oben zitierten Arbeit bestimmt²¹.

Wenn man in der Ausgangsgleichung (3.3) das Glied κ/ϱ^2 nach links bringt, stehen auf der rechten Seite nur noch jene Glieder, die wir mit der Störungsrechnung behandeln wollen. Die GREENSche Funktion für den auf der linken Seite stehenden Differentialoperator ist

$$G(\varrho, \varrho'; \varphi, \varphi') = i\pi \begin{cases} \sum_{n=-\infty}^{\infty} H_\nu^{(1)}(k_\varrho \varrho) J_\nu(k_\varrho \varrho') e^{in(\varphi - \varphi')} & \text{für } 0 < \varrho' < \varrho, \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_\nu(k_\varrho \varrho) H_\nu^{(1)}(k_\varrho \varrho') e^{in(\varphi - \varphi')} & \text{für } \varrho' < \varrho < \infty, \end{cases} \quad (3.17)$$

so daß wir Gl. (3.3) in folgende Integralgleichung umschreiben können

$$\psi(\varrho, \varphi, z) = \psi_H(\varrho, \varphi, z) - \frac{1}{4\pi} \int \left\{ \beta k_F \frac{\sin \varphi'}{\varrho'} + \frac{\kappa_2 + \kappa_3 \cdot \ln(\varrho'/\varrho_0)}{\varrho'^2} \cos 2\varphi' \right\} \times G(\varrho, \varrho'; \varphi, \varphi') \psi(\varrho', \varphi', z) \varrho' d\varrho' d\varphi', \quad (3.18)$$

wobei $\psi_H(\varrho, \varphi, z)$ die Lösung der homogenen Gleichung ist und durch (3.15) bestimmt ist. Für die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit interessiert nur die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für gro-

²⁰ Man beachte, daß die einfallende Welle mit der x -Richtung den Winkel φ_0 bildet, während bei SEEGER und STEHLE¹⁵ $\varphi_0 = 0$ gesetzt werden durfte.

²¹ Hierbei sind folgende Druckfehler zu berichtigen: Auf der rechten Seite von Gl. (38) ist ein Faktor (-1) einzufügen. Gl. (38 b) muß lauten: $\xi_2 = [(1 - \xi^2) k_F^2 \varrho_0^2 - \kappa + \kappa_1 n \xi]^{1/2}$.

Des q . Asymptotisch geht die obige Integralgleichung über in

$$\psi(q, \varphi, z) \sim \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_z z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\pi/2} [e^{2i\eta_n} H_n^{(1)}(k_\varrho q) + H_n^{(2)}(k_\varrho q)] e^{in(\varphi-\varphi_0)} \quad (3.19)$$

$$- \frac{i}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} H_n^{(1)}(k_\varrho q) e^{in\varphi} \int \left\{ \beta k_F \frac{\sin \varphi'}{q'} + \frac{\kappa_2 + \kappa_3 \cdot \ln(q'/q_i)}{q'^2} \cos 2\varphi' \right\} e^{-in\varphi'} J_\nu(k_\varrho q') \psi(q', \varphi', z) q' dq' d\varphi'.$$

Die angegebene GREENSche Funktion liefert bei den vom Integral herrührenden Gliedern nur Wellen mit auslaufendem Charakter, wie vorgeschrieben ist.

Das Näherungsverfahren besteht nun darin, daß wir unter dem Integranden nicht die richtige Wellenfunktion einsetzen, sondern die Lösungen einsetzen, die wir mit dem $1/q^2$ -Potential erhalten haben. Bei der Berechnung des Integrals müssen wir wegen des Abschneideradius für $q' < q_0$ eine andere Funktion

als für $q' > q_0$ einsetzen. Da sich jedoch für kleine Werte von q die Beiträge zum Integral wegen der Winkelabhängigkeit $\sin \varphi$ und $\cos \varphi$ nahezu wegheben, machen wir keinen großen Fehler, wenn wir bei der Auswertung der obigen Integrale $q_0 = 0$ setzen und die Wellenfunktion (3.15) mit $\alpha_n = 0$ als nullte Näherung $\psi_0(r)$ benutzen.

Nach Ausführung der Integration läßt sich die gestreute Welle in der Form

$$\psi_{\text{gestreut}} \sim \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{\exp[i(k_\varrho q + k_z z)]}{\sqrt{k_\varrho q}} \{ \Phi_\kappa(\varphi, \varphi_0) + \Phi_\beta(\varphi, \varphi_0) + \Phi_{\kappa_2}(\varphi, \varphi_0) + \Phi_{\kappa_3}(\varphi, \varphi_0) \} \quad (3.20)$$

Schreiben, wenn wir die asymptotische Entwicklung der BESSEL-Funktionen benutzen. Dabei sind die von φ , φ_0 und k_ϱ abhängigen Ausdrücke Φ bestimmt durch

$$\Phi_\kappa = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\pi/4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in(\varphi-\varphi_0)} (e^{2i\eta_n} - 1), \quad (3.21 a)$$

$$\Phi_\beta \equiv -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{2V}{\pi}} e^{-ik_z z} \beta k_F \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2v_{n+1}}{4}\pi} e^{in\varphi} \int_{q'=0}^R \int_{\varphi'=0}^{2\pi} e^{-in\varphi'} \sin \varphi' \psi_0(q', \varphi', z) J_\nu(k_\varrho q') dq' d\varphi'$$

$$= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-i\pi/4} \beta k_F / k_\varrho \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^{n+1} e^{in(\varphi-\varphi_0)} \quad (3.21 b)$$

$$\left[e^{-i\frac{v_n+v_{n+1}}{2}\pi} e^{-i\varphi_0} \int_0^{k_\varrho R} J_{\nu_{n+1}}(x) J_{\nu_n}(x) dx - e^{-i\frac{v_{n-1}+v_n}{2}\pi} e^{i\varphi_0} \int_0^{k_\varrho R} J_{\nu_n}(x) J_{\nu_{n-1}}(x) dx \right],$$

$$\Phi_{\kappa_2} \equiv -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{2V}{\pi}} e^{-ik_z z} \kappa_2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2v_{n+1}}{4}\pi} e^{in\varphi} \int_{q'=0}^{\infty} \int_{\varphi'=0}^{2\pi} e^{-in\varphi'} \frac{\cos 2\varphi'}{q'} \psi_0(q', \varphi', z) J_{\nu_n}(k_\varrho q') dq' d\varphi'$$

$$= -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-i\pi/4} \kappa_2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in(\varphi-\varphi_0)} (-1)^n \quad (3.21 c)$$

$$\left[e^{-i\frac{v_n+v_{n+2}}{2}\pi} e^{-2i\varphi_0} \int_0^{\infty} \frac{1}{x} J_{\nu_n}(x) J_{\nu_{n+2}}(x) dx + e^{-i\frac{v_{n-2}+v_n}{2}\pi} e^{2i\varphi_0} \int_0^{\infty} \frac{1}{x} J_{\nu_{n-2}}(x) J_{\nu_n}(x) dx \right],$$

$$\Phi_{\kappa_3} \equiv -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{2V}{\pi}} e^{-ik_z z} \kappa_3 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2v_{n+1}}{4}\pi} e^{in\varphi} \int_{q'=0}^{\infty} \int_{\varphi'=0}^{2\pi} e^{-in\varphi'} \frac{\cos 2\varphi'}{q'} \ln(q'/q_i) \psi_0(q', \varphi', z) J_{\nu_n}(k_\varrho q') dq' d\varphi'$$

$$= -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-i\pi/4} \kappa_3 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n e^{in(\varphi-\varphi_0)} \quad (3.21 d)$$

$$\left[e^{-i\frac{v_n+v_{n+2}}{2}\pi} e^{-2i\varphi_0} \int_0^{\infty} \frac{1}{x} \ln \frac{x}{k_\varrho q_i} J_{\nu_n}(x) J_{\nu_{n+2}}(x) dx + e^{-i\frac{v_{n-2}+v_n}{2}\pi} e^{2i\varphi_0} \int_0^{\infty} \frac{1}{x} \ln \frac{x}{k_\varrho q_i} J_{\nu_{n-2}}(x) J_{\nu_n}(x) dx \right].$$

Wie schon im vorhergehenden Abschnitt erwähnt, müssen wir das Potential $\sin \varphi / \varrho$ außen abschneiden (Abschneideradius R), da sonst der Ausdruck Φ_β logarithmisch divergieren würde. Bei den beiden anderen Ausdrücken Φ_{α_1} und Φ_{α_2} kann die Integra-

tion dagegen über den ganzen Raum ausgeführt werden. Das in (3.21 c) auftretende Integral ist tabuliert²². Die beiden übrigen Integrale werden im Anhang (B, 1) berechnet. Mit den *reinen* Zahlenkonstanten a_n , b_n , c_n und d_n lassen sich die Integrale in folgender Weise schreiben

$$I_n = \int_0^{k_0 R} J_{\nu_{n+1}}(x) J_{\nu_n}(x) dx = a_n \ln \frac{k_0 R}{2} + b_n, \quad (3.22 a)$$

$$II_n = \int_0^\infty \frac{1}{x} J_{\nu_{n+2}}(x) J_{\nu_n}(x) dx \equiv c_n = \frac{2}{\pi} \frac{\sin\left(\frac{\nu_{n+2} - \nu_n}{2}\right)}{\nu_{n+2}^2 - \nu_n^2}, \quad (3.22 b)$$

$$III_n = \int_0^\infty \frac{1}{x} \ln\left(\frac{x}{k_0 \varrho_i}\right) J_{\nu_{n+2}}(x) J_{\nu_n}(x) dx = d_n - c_n \ln \frac{k_0 \varrho_i}{2}. \quad (3.22 c)$$

d) *Störungsrechnung zweiter Ordnung für das*

$$\text{Glied } \beta k_F \frac{\sin \varphi}{\varrho}$$

Mit der nichtlinearen Elastizitätstheorie haben wir bei der Berechnung der Dilatation auch die Glieder zweiter Ordnung in den Verzerrungen berücksichtigt. Es ist deshalb sinnvoll, bei dem Potential $\beta k_F (\sin \varphi / \varrho)$, das von linearen Verzerrungen herührt, die Wellenfunktion ψ_{gestreut} mindestens mit Störungsrechnung zweiter Ordnung zu ermitteln. Hierbei können wir alle übrigen Terme des Störpotentials vernachlässigen, wenn wir nur die Glieder mit β^2 erhalten wollen. Wie wir sehen werden, be-

kommen wir auf diese Weise den in § 3 b diskutierten wesentlichen Zug einer hinsichtlich der β -Abhängigkeit strengen Lösung, nämlich die logarithmische Variation der Streuwahrscheinlichkeit mit dem äußeren Abschneideradius R .

Bei der Störungsrechnung zweiter Ordnung muß die Wellenfunktion in erster Ordnung über den gesamten Raum bekannt sein. Geht man von der ebenen Welle $V^{-1/2} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ als nullter Näherung aus, so besitzt die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\Delta \psi + k^2 \psi = S(\mathbf{r}) \psi, \quad (3.23)$$

wo S ein nicht von der z -Koordinate abhängiger Störoperator ist, in erster Näherung die Lösung

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{V} e^{i k_z z} \int S(\tilde{\mathbf{r}}') \frac{e^{i \tilde{\mathbf{r}}' \cdot (\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}')} e^{i \tilde{\mathbf{r}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}'}}{\tilde{\mathbf{r}}^2 - \tilde{\mathbf{r}}'^2} d\tau \tilde{\mathbf{r}}'. \quad (3.24)$$

Alle zweidimensionale Vektoren haben wir dabei mit einer Tilde (\sim) bezeichnet. Die Wellenfunktion Gl. (3.24) können wir nun in die Integralgleichung für die gestreute Welle einsetzen, die bei zweidimensionalen Problemen die Form

$$\psi_{\text{gestr.}}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{4} e^{i k_z z} \int H_0^{(1)}(k_0 |\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}'|) S(\tilde{\mathbf{r}}') \psi(\mathbf{r}') e^{-i k_z z'} d\tau \tilde{\mathbf{r}}' \quad (3.25)$$

hat und bei großen Abständen vom Störzentrum in

$$\psi_{\text{gestr.}}(\mathbf{r}) \sim -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k_0 \varrho}} e^{-i \pi/4} e^{i k_0 \varrho} e^{i k_z z} \int e^{-i \tilde{\mathbf{r}}' \cdot \tilde{\mathbf{r}}} S(\tilde{\mathbf{r}}') \psi(\mathbf{r}') e^{-i k_z z'} d\tau \tilde{\mathbf{r}}' \quad (3.26)$$

übergeht. Hierbei haben wir die asymptotische Entwicklung der BESSEL-Funktionen benützt und den in Richtung $\tilde{\mathbf{r}}$ weisenden Vektor $k_0(\tilde{\mathbf{r}}/|\tilde{\mathbf{r}}|)$ mit $\tilde{\mathbf{f}}$ bezeichnet. Führt man das zweidimensionale Matrixelement

$$S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int e^{i(\tilde{\mathbf{f}} - \tilde{\mathbf{f}}) \cdot \tilde{\mathbf{r}}} S(\tilde{\mathbf{r}}) d\tau \tilde{\mathbf{r}} \quad (3.27)$$

²² I. M. RYSHIK u. I. S. GRADSTEIN, Summen-, Produkt- und Integraltafeln, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1957.

ein, so läßt sich die gestreute Welle als

$$\psi_{\text{gestr.}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{\exp\{i k_z z + i k_\varrho \varrho\}}{\sqrt{k_\varrho \varrho}} \Phi(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \quad (3.28 \text{ a})$$

schreiben, wobei in Störungsrechnung erster Ordnung

$$\Phi(\mathbf{f}, \mathbf{f}') = -i \pi^2 e^{-i \pi/4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}') \quad (3.28 \text{ b})$$

und in Störungsrechnung zweiter Ordnung

$$\Phi(\mathbf{f}, \mathbf{f}') = -i \pi^2 e^{-i \pi/4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int \frac{S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}'') S(\tilde{\mathbf{f}}'', \tilde{\mathbf{f}}')}{\tilde{\mathbf{f}}^2 - \tilde{\mathbf{f}}''^2} d\tau \tilde{\mathbf{f}}'' \quad (3.28 \text{ c})$$

ist.

Mit dem Störpotential²³

$$S(\varrho, \varphi) = \begin{cases} \beta k_F \frac{\sin \varphi}{\varrho} & \text{mit } 0 < \varrho < R, \\ 0 & \text{mit } R < \varrho < \infty, \end{cases} \quad (3.29)$$

bekommt man, wenn man den Vektor $\tilde{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{f}} - \tilde{\mathbf{f}}'$ mit $|\tilde{\mathbf{R}}| = K$ einführt,

$$S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \beta k_F \int_{\varrho=0}^R \int_{\varphi=0}^{2\pi} \sin \varphi e^{i K \varrho \cos(\Phi_0 - \varphi)} d\varrho d\varphi. \quad (3.30)$$

Dabei ist

$$K \cos \Phi_0 = k_\varrho \cos \varphi_0 - k_\varrho' \cos \varphi_0', \quad (3.31 \text{ a})$$

$$\int \frac{S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}'') S(\tilde{\mathbf{f}}'', \tilde{\mathbf{f}}')}{\tilde{\mathbf{f}}^2 - \tilde{\mathbf{f}}''^2} d\tau \tilde{\mathbf{f}}'' = -\frac{1}{16\pi} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_\varrho^2} \cdot \left\{ 2[1 + \cos(\varphi_0 + \varphi_0')] \ln \frac{k_F R}{\gamma_0} + \ln[2 - 2 \cos(\varphi_0 - \varphi_0')] - i \pi \cos(\varphi_0 + \varphi_0') \right\} \quad (3.33)$$

mit $\gamma_0 = e^C = 1,781$ ($C = \text{EULER-MASCHERONISCHE}$ Konstante).

Für kleine Werte von k_ϱ ist Gl. (3.33) nicht mehr gültig, weil die bei ihrer Ableitung gemachte Annahme $k_\varrho R \gg 1$ verletzt ist. Wir müssen deshalb eine zweite Näherung der SCHRÖDINGER-Gleichung für kleine Werte von k_ϱ auf einem anderen Wege suchen. Der Einfachheit halber gehen wir dabei nur bis zu quadratischen Gliedern in k_ϱ . Durch Entwicklung des Integranden von Gl. (3.25) nach Potenzen von k_ϱ können wir zunächst die Wellenfunktion in erster Näherung für den Gesamttraum bestimmen²⁴. Diese Funktion setzen wir dann in die Integral-Gl. (3.26) für die gestreute Welle ein und werten das

$$K \sin \Phi_0 = k_\varrho \sin \varphi_0 - k_\varrho' \sin \varphi_0'. \quad (3.31 \text{ b})$$

Nach kurzer Zwischenrechnung, wobei von der Integraldarstellung der BESSEL-Funktion $J_1(K \varrho)$ Gebrauch gemacht wird, ergibt sich

$$S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}') = \frac{i}{2\pi} \beta k_F \frac{K \sin \Phi_0}{K^2} [1 - J_0(K R)] \quad (3.32)$$

$$\text{mit } K^2 = k_\varrho^2 + k_\varrho'^2 - 2 k_\varrho k_\varrho' \cos(\varphi_0 - \varphi_0'). \quad (3.32 \text{ a})$$

Für $R \rightarrow \infty$ geht $S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}')$ in das bekannte Matrixelement über, wie es z. B. von HUNTER und NABARRO⁵ benützt wurde. Durch Einführung des äußeren Abschneideradius wurde erreicht, daß die Matrixelemente auch für $k_\varrho = 0$ endlich bleiben.

Das in (3.28 c) vorkommende Integral

$$\int \frac{S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}'') S(\tilde{\mathbf{f}}'', \tilde{\mathbf{f}}')}{\tilde{\mathbf{f}}^2 - \tilde{\mathbf{f}}''^2} d\tau \tilde{\mathbf{f}}''$$

läßt sich nicht allgemein berechnen. Im Anhang führen wir die Integration unter der Annahme durch, daß $k_\varrho R$ so groß ist, daß wir $J_0(k_\varrho R)$ und alle Glieder von der Form $1/(k_\varrho \varrho)^n$ mit $n \geq 1$ vernachlässigen können. Außerdem benutzen wir noch die Tatsache, daß die Streuung der Elektronen an der Stufenversetzung elastisch erfolgt und deshalb $|\mathbf{f}| = |\mathbf{f}'|$ ist. Man erhält dann

Integral bis zur zweiten Potenz in k_ϱ aus. Das Ergebnis dieses Verfahrens, bei dem sonst keine weiteren Schwierigkeiten auftreten, ist wieder eine gestreute Welle der Form (3.28 a), wobei jedoch die Funktion Φ in erster Näherung durch

²³ In manchen Fällen erweist es sich als günstig, das Potential $\sin \varphi/\varrho$ in anderer Weise abzuschneiden. So führt z. B. das Potential $S(\varphi, \varrho) = \beta \cdot k_F \cdot \sin \varphi/\varrho \cdot e^{-\varrho/R}$ auf folgenden Matrixelement:

$$S(\tilde{\mathbf{f}}, \tilde{\mathbf{f}}') = \frac{i}{2\pi} \beta k_F \frac{K \sin \Phi_0}{K^2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1 + K^2 R^2}} \right].$$

²⁴ Wenn wir als nullte Näherung wiederum die ebene Welle $\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ verwenden.

$$\Phi(\varphi_0, \varphi'_0; k_\varrho) = \frac{1}{8} \sqrt{2\pi} e^{-i\pi/4} \beta k_F (\sin \varphi_0 - \sin \varphi'_0) k_\varrho R^2 + O(k_\varrho^3) \quad (3.34)$$

und in zweiter Näherung durch

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi_0, \varphi'_0; k_\varrho) = & \frac{i}{16} \sqrt{2\pi} e^{-i\pi/4} \beta^2 k_F^2 R^2 \left\{ 1 - \frac{1}{4} (k_\varrho R)^2 [1 + \cos(\varphi_0 - \varphi'_0) - \cos(\varphi_0 + \varphi'_0)] \frac{\ln \gamma_0 k_\varrho R}{2} \right. \\ & - \frac{3}{16} (\cos 2\varphi_0 + \cos 2\varphi'_0) + \frac{1}{4} \cos(\varphi_0 + \varphi'_0) - \frac{3}{8} \cos(\varphi_0 - \varphi'_0) + \frac{1}{8} \\ & \left. - \frac{i\pi}{2} [1 + \cos(\varphi_0 - \varphi'_0) - \cos(\varphi_0 + \varphi'_0)] \right\} + O(k_\varrho^3) \end{aligned} \quad (3.35)$$

gegeben ist.

4. Lösung des Transportproblems

Wie aus den Gln. (3.21 a–d) und (3.28 c) für die Amplituden Φ der gestreuten Welle zu entnehmen ist, werden die Elektronen an der Stufenversetzung nicht isotrop gestreut; d. h. $\Phi(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ ist nicht nur vom Ausdruck $|\tilde{\mathbf{f}} - \tilde{\mathbf{f}}'| = k_F \sqrt{2[1 - \cos(\varphi_0 - \varphi'_0)]}$ abhängig. Infolgedessen läßt sich das Transportproblem nicht mit der Annahme einer skalaren Re-

laxationszeit für die Streuung der Elektronen lösen, sondern wir müssen, insbesondere wenn wir uns für die elektrische Leitfähigkeit bei tiefen Temperaturen interessieren, ein Variationsverfahren verwenden, das wir früher für anisotrope Streumechanismen abgeleitet haben¹⁶. Der Einfachheit halber folgen wir den dort benützten Bezeichnungen, so daß wir uns bei der Behandlung der formalen Transporttheorie kurz fassen können.

a) Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit $w(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ und der Matrixelemente $T_{nn'}^{mm'}$

Wenn wir mindestens die quadratischen Glieder im BURGERS-Vektor mitnehmen, ist die gestreute Welle gegeben durch

$$\begin{aligned} \psi_{\text{gestr.}}(\mathbf{r}) & \sim \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{\exp\{i(k_\varrho \varrho + k_z z)\}}{\sqrt{k_\varrho \varrho}} \{ \Phi_\kappa(\mathbf{f}, \mathbf{f}') + \Phi_\beta(\mathbf{f}, \mathbf{f}') + \Phi_{\kappa_2}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') + \Phi_{\kappa_3}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') + \Phi_{\beta^2}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \} \\ & \sim \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{\exp\{i(k_\varrho \varrho + k_z z)\}}{\sqrt{k_\varrho \varrho}} \sum_{(i)} \Phi_{(i)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}'), \end{aligned} \quad (4.1)$$

wobei wir durch Einklammern des Summationsindex (i) die Summation über $\kappa, \beta, \kappa_2, \kappa_3$ und β^2 angedeutet haben. Mit $\Phi_{\beta^2}(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ bezeichnen wir die Amplitude, die wir bei der Berücksichtigung des Gliedes $\beta k_F (\sin \varphi/\varrho)$ in Störungsrechnung zweiter Ordnung erhalten haben.

Wir denken uns nun die Stufenversetzung mit einem Zylinder der Länge L umgeben, dessen Achse mit dem Versetzungskern zusammenfällt. Wenn der Radius dieses Zylinders sehr groß ist, besitzt der in den Keil mit Öffnungswinkel $d\varphi'$ fallende Teilchenstrom den Wert²⁵

$$J_\varrho \varrho L d\varphi' = \frac{\hbar k_\varrho}{m^*} \psi \psi^* L \varrho d\varphi' = \frac{L}{V} \frac{\hbar}{m^*} \sum_{(i), (j)} \Phi_{(i)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \Phi_{(j)}^*(\mathbf{f}, \mathbf{f}'). \quad (4.2)$$

Da wir die einfallende Welle so normiert haben, daß ein Elektron mit Ausbreitungsvektor \mathbf{f} und positivem Spin im Volumen V enthalten ist, läßt sich der obenstehende Ausdruck mit Hilfe der Übergangswahrscheinlichkeit $w(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ berechnen:

$$J_\varrho \varrho L d\varphi' = \frac{V}{(2\pi)^3} \mathcal{W}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') d\tau_{\mathbf{f}} = \frac{V}{(2\pi)^3} w(\mathbf{f}, \mathbf{f}') k \frac{dk}{d\varepsilon} d\varphi' dk_z', \quad (4.3)$$

wobei wir schon berücksichtigt haben, daß die Streuung der Elektronen an dem statischen Gitterfehler elastisch erfolgt, d. h. $\mathcal{W}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') = w(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \delta[\varepsilon(\mathbf{f}) - \varepsilon(\mathbf{f}')]$ ist. Wir erhalten somit

$$\frac{V}{(2\pi)^3} w(\mathbf{f}, \mathbf{f}') k \frac{dk}{d\varepsilon} d\varphi' dk_z' = \frac{L}{V} \frac{\hbar}{m^*} \sum_{(i), (j)} \Phi_{(i)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \Phi_{(j)}^*(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \delta(k_z - k_z') dk_z' d\varphi', \quad (4.4)$$

²⁵ Wir lassen von nun an bei φ_0 und φ'_0 den unteren Index 0 weg.

wenn wir noch die Erhaltung der z -Komponente des Ausbreitungsvektors durch Einführung des Ausdrucks $\delta(k_z - k_z') dk_z'$ auf der rechten Seite berücksichtigen.

Aus den Gleichungen für die Amplituden $\Phi_{(i)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ können wir nun entnehmen, daß die Übergangswahrscheinlichkeit $w(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ nicht symmetrisch in \mathbf{f} und \mathbf{f}' ist, weil einige Ausdrücke $\Phi_{(i)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ $\Phi_{(j)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}')$ mit $i \neq j$ bei der Vertauschung von \mathbf{f} mit \mathbf{f}' ihr Vorzeichen ändern. Das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts ist also verletzt. Für die Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit muß nur der symmetrische Teil der Übergangswahrscheinlichkeit bekannt sein, den wir in folgender Weise schreiben können:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} w(\mathbf{f}, \mathbf{f}') k \frac{dk}{d\varepsilon} d\varphi' dk_z' = \frac{L}{2V} \frac{\hbar}{m^*} \sum_{(i), (j)} \{ \Phi_{(i)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}') \Phi_{(j)}^*(\mathbf{f}, \mathbf{f}') + \Phi_{(i)}(\mathbf{f}', \mathbf{f}) \Phi_{(j)}^*(\mathbf{f}', \mathbf{f}) \} \delta(k_z - k_z') dk_z' d\varphi'. \quad (4.5)$$

Die für die Streuung der Elektronen an der Stufenversetzung maßgebenden Matrixelemente $T_{nn'}^{mm'}$ sind dann gegeben durch

$$T_{nn'}^{mm'} = \frac{4L}{V} \frac{dk}{d\varepsilon} k^2 \frac{\hbar}{m^*} \sum_n^{mm'} \quad (4.6 a)$$

$$\text{mit } \sum_n^{mm'} = (-1)^m \int_{-1}^1 \sum_n^{mm'}(x) \prod_n^m(x) \prod_{n'}^{m'}(x) dx \quad (4.6 b)$$

$$\text{und } \sum_n^{mm'} = \frac{1}{16\pi} \sum_{(i), (j)} \int_0^{2\pi} \int \{ \Phi_{(i)}(\varphi, \varphi'; x) \Phi_{(j)}^*(\varphi, \varphi'; x) + \Phi_{(i)}(\varphi', \varphi; x) \Phi_{(j)}^*(\varphi', \varphi; x) \} \times e^{im\varphi} (e^{im'\varphi} - e^{im'\varphi'}) d\varphi d\varphi'. \quad (4.6 c)$$

Durch die oben angewandte Symmetrisierung der Übergangswahrscheinlichkeit ist $T_{nn'}^{mm'}$ invariant gegenüber einer Vertauschung der beiden Indexpaare m, n und m', n' . Wegen der Eigenschaft, daß die z -Komponente des Ausbreitungsvektors übernommen wird, ist jedoch schon der Ausdruck $\sum^{mm'}$ symmetrisch in m und m' . Aus Gl. (4.6 c) ist weiter ersichtlich, daß die Matrixelemente $T_{nn'}^{mm'}$ verschwinden, wenn mindestens ein oberer Index Null ist.

b) Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit

Das durch eine Stufenversetzung verursachte Potential besitzt, abgesehen von der Unabhängigkeit von der z -Koordinate, keine weiteren Symmetrieeigenschaften. Das bedeutet, daß bei der Entwicklung der Verteilungsfunktion nach Kugelflächenfunktionen alle Funktionen mit ungeradem unteren Index und beliebigem oberen Index auftreten können, so daß die Zahl der aufzulösenden Gleichungen sofort sehr groß wird, wenn wir Kugelflächenfunktionen höherer Ordnung mitnehmen würden. Der Einfachheit halber beschränken wir uns nur auf die Kugelfunktionen von der Ordnung 1. Die gesuchten Entwicklungskoeffizienten der Verteilungsfunktion sind durch folgendes lineares Gleichungssystem bestimmt

$$\mathcal{Y}_{11}^{(1)} T_{11}^{11} + \mathcal{Y}_{11}^{(1)-1} T_{11}^{1-1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{k^2}{\hbar} (-\epsilon_1 - i\epsilon_2), \quad (4.7 a)$$

$$\mathcal{Y}_{11}^{(1)} T_{11}^{1-1} + \mathcal{Y}_{11}^{(1)-1} T_{11}^{-1-1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{k^2}{\hbar} (\epsilon_1 - i\epsilon_2), \quad (4.7 b)$$

$$\mathcal{Y}_{11}^{(1)0} T_{11}^{01} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{k^2}{\hbar} \epsilon_3, \quad (4.7 c)$$

wobei ϵ_1, ϵ_2 und ϵ_3 die Einheitsvektoren eines kartesischen Koordinatensystems sind.

In dieser Näherung erhält man für die Komponenten des elektrischen Leitfähigkeitstensors

$$\sigma_{xx}^{(1)} = \frac{e^2}{3\pi^2} \frac{k^4}{\hbar^2} \frac{T_{11}^{1-1} + \frac{1}{2}(T_{11}^{11} + T_{11}^{-1-1})}{T_{11}^{1-1} T_{11}^{1-1} - T_{11}^{11} T_{11}^{-1-1}}, \quad (4.8 a)$$

$$\sigma_{yy}^{(1)} = \frac{e^2}{3\pi^2} \frac{k^4}{\hbar^2} \frac{T_{11}^{1-1} - \frac{1}{2}(T_{11}^{11} + T_{11}^{-1-1})}{T_{11}^{1-1} T_{11}^{1-1} - T_{11}^{11} T_{11}^{-1-1}}, \quad (4.8 b)$$

$$\sigma_{zz}^{(1)} = \frac{e^2}{3\pi^2} \frac{k^4}{\hbar^2} \frac{1}{T_{11}^{01}}, \quad (4.8 c)$$

$$\sigma_{xy}^{(1)} = \frac{e^2}{3\pi^2} \frac{k^4}{\hbar^2} \frac{1}{2i} \frac{T_{11}^{11} - T_{11}^{-1-1}}{T_{11}^{1-1} T_{11}^{1-1} - T_{11}^{11} T_{11}^{-1-1}}, \quad (4.8 d)$$

wobei alle Größen an der FERMI-Grenze zu nehmen sind.

Mit Hilfe der bekannten Beziehungen für die Berechnung von reziproken Tensoren können wir nun den Widerstandstensor ermitteln. Es ergibt sich, daß alle Elemente des Widerstandstensors proportional zu den Matrixelementen $T_{11}^{mm'}$ sind, so daß keine Abweichungen von der MATTHIESSENSchen Regel auf-

treten können. Wie nicht anders zu erwarten war, treten also Abweichungen von der Additivität des elektrischen Widerstandes erst dann auf, wenn wir Kugelflächenfunktionen höherer Ordnung mitnehmen.

Ist N die Zahl der Versetzungen/Flächeneinheit, so ist die Änderung des elektrischen Widerstandstensors durch $Z = NV/L$ Stufenversetzungen der Länge L gegeben durch

$$\Delta Q_{xx} = 4 \frac{N \hbar}{n_0 e^2} \left\{ \sum_1^{-1-1} - \frac{1}{2} \left(\sum_1^1 \frac{1}{1} + \sum_1^{-1-1} \right) \right\}, \quad (4.9 a)$$

$$\Delta Q_{yy} = 4 \frac{N \hbar}{n_0 e^2} \left\{ \sum_1^{-1-1} + \frac{1}{2} \left(\sum_1^1 \frac{1}{1} + \sum_1^{-1-1} \right) \right\}, \quad (4.9 b)$$

$$\Delta Q_{xy} = -4 \frac{N \hbar}{n_0 e^2} \frac{\sum_1^1 \frac{1}{1} - \sum_1^{-1-1}}{2i}, \quad (4.9 c)$$

$$\Delta Q_{zz} = \Delta Q_{xz} = \Delta Q_{yz} = 0. \quad (4.9 d)$$

Hierbei ist n_0 die Zahl der Leitungselektronen/Volumeneinheit ($k_F^3 = 3 \pi^2 n_0$).

c) Berechnung von $\Sigma_{n n'}^{m m'}$

Es erweist sich als zweckmäßig, folgende Abkürzung einzuführen

$$\begin{aligned} \Sigma_{(i), (j)}^{m m'} = & \frac{1}{32 \pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \{ \Phi_{(i)}(\varphi, \varphi'; x) \Phi_{(j)}^*(\varphi, \varphi'; x) + \Phi_{(i)}(\varphi', \varphi; x) \Phi_{(j)}^*(\varphi', \varphi; x) \\ & + \Phi_{(j)}(\varphi, \varphi'; x) \Phi_{(i)}^*(\varphi, \varphi'; x) + \Phi_{(j)}(\varphi', \varphi; x) \Phi_{(i)}^*(\varphi', \varphi; x) \} e^{im\varphi} (e^{im'\varphi} - e^{im'\varphi'}) d\varphi d\varphi'. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Durch Summation von $\Sigma_{(i), (j)}^{m m'}$ über alle Buchstaben (i) und (j) erhält man dann den Ausdruck $\Sigma^{m m'}$. Für die Berechnung der $\Sigma_{(i), (j)}^{m m'}$, die sehr umfangreich ist, benützen wir nun die Eigenschaft, daß sich nach den Gln. (3.21 a) bis (3.21 d), (3.28 c) und (3.33) die $\Phi_{(i)}$ in folgender Weise schreiben lassen

$$\Phi_{(i)}(\varphi, \varphi'; x) = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l,r} A_{l,r}^{(i)} e^{il(\varphi' - \varphi)} e^{ir\varphi}, \quad (4.11)$$

wobei

$$A_{l,0}^{\alpha} = (e^{2i\eta_l} - 1), \quad (4.11 a)$$

$$A_{l,\pm 1}^{\beta} = \pm \beta \frac{\pi}{2} \frac{k_F}{k_0} (-1)^l e^{-i \frac{\nu_{l+1} + \nu_l}{2}} \pi \int_0^{k_0 R} J_{\nu_{l+1}}(x) J_{\nu_l}(x) dx, \quad (4.11 b)$$

$$A_{l,\pm 2}^{\alpha} = -i(-1)^l \alpha_2 \frac{\pi}{2} e^{-i \frac{\nu_{l+2} + \nu_l}{2}} \pi \int_0^{\infty} \frac{1}{x} J_{\nu_{l+2}}(x) J_{\nu_l}(x) dx, \quad (4.11 c)$$

$$A_{l,\pm 2}^{\alpha} = -i \alpha_3 \frac{\pi}{2} (-1)^l e^{-i \frac{\nu_{l+2} + \nu_l}{2}} \pi \int_0^{\infty} \frac{1}{x} \ln \left(\frac{x}{k_0 R} \right) J_{\nu_{l+2}}(x) J_{\nu_l}(x) dx, \quad (4.11 d)$$

$$A_{0,0}^{\beta^2} = i \frac{\pi}{4} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_0^2} \ln \frac{k_0 R}{\gamma_0}, \quad (4.11 e)$$

$$A_{l,0}^{\beta^2} = -i \frac{\pi}{8} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_0^2} \frac{1}{|l|}, \quad l \neq 0 \quad \left. \vphantom{A_{l,0}^{\beta^2}} \right\} k_0 R > 1. \quad (4.11 f)$$

$$A_{1,2}^{\beta^2} \equiv A_{-1,-2}^{\beta^2} = i \frac{\pi}{8} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_0^2} \left[\ln \frac{k_0 R}{\gamma_0} - i \frac{\pi}{2} \right], \quad (4.11 g)$$

Wenn wir noch berücksichtigen, daß die oben eingeführten Koeffizienten folgende Eigenschaften besitzen

$$A_{-l+r,r}^{(i)} = (-1)^r A_{l,r}^{(i)}, \quad (4.12)$$

so wird

$$\Sigma_{(i), (j)}^{m m'} = \frac{1 + (-1)^{m+m'}}{16} \sum_{l,r} \{ A_{l,r}^{(i)} A_{l,r+m+m'}^{*(j)} - A_{l,r}^{(i)} A_{l+m',r+m+m'}^{*(j)} + A_{l,r}^{(j)} A_{l,r+m+m'}^{*(i)} - A_{l,r}^{(j)} A_{l+m',r+m+m'}^{*(i)} \} \quad (4.13)$$

Für $m=1$ und $m'=\pm 1$ sind folgende Ausdrücke von Null verschieden:

$$\sum_{\kappa}^{1-1} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sin^2(\eta_{l+1} - \eta_l), \quad (4.14 \text{ a})$$

$$\sum_{\beta}^{1-1} = \frac{\pi^2}{8} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_o^2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} I_l \left[I_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} - \nu_l) I_{l+1} \right], \quad (4.14 \text{ b})$$

$$\sum_{\kappa_2 \kappa_3}^{1-1} + 2 \sum_{\kappa_2 \kappa_3}^{1-1} + \sum_{\kappa_3 \kappa_3}^{1-1} = \frac{\pi^2}{8} \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\kappa_2 II_l + \kappa_3 III_l) \cdot \left[(\kappa_2 II_l + \kappa_3 III_l) + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+3} - \nu_{l+2} + \nu_{l+1} - \nu_l) (\kappa_2 II_{l+1} + \kappa_3 III_{l+1}) \right], \quad (4.14 \text{ c})$$

$$\sum_{\beta^2 \beta^2}^{1-1} = \frac{\pi^2}{256} \beta^4 \frac{k_F^4}{k_o^4} \left[6 \ln^2 \frac{k_o R}{\gamma_0} + 4 \ln \frac{k_o R}{\gamma_0} + \frac{5}{6} \pi^2 - 2 \right], \quad (4.14 \text{ d})$$

$$\sum_{\kappa \beta^2}^{1-1} = \frac{\pi}{16} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_o^2} \left\{ (\sin 2 \eta_0 - \sin 2 \eta_1) \ln \frac{k_o R}{\gamma_0} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2l} (\sin 2 \eta_{l+1} - 2 \sin 2 \eta_l + \sin 2 \eta_{l-1}) \right\}, \quad (4.14 \text{ e})$$

$$\sum_{\kappa_2 \beta^2}^{1-1} + \sum_{\kappa_3 \beta^2}^{1-1} = \frac{\pi^2}{32} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_o^2} \left\{ \left[(\kappa_2 II_{-1} + \kappa_3 III_{-1}) \cos(\nu_{-1} + \nu_1) \frac{\pi}{2} + (\kappa_2 II_0 + \kappa_3 III_0) \cos(\nu_0 + \nu_2) \frac{\pi}{2} \right] \cdot \ln \frac{k_o R}{\gamma_0} + \left[(\kappa_2 II_{-1} + \kappa_3 III_{-1}) \sin(\nu_{-1} + \nu_1) \frac{\pi}{2} + (\kappa_2 II_0 + \kappa_3 III_0) \sin(\nu_0 + \nu_2) \frac{\pi}{2} \right] \frac{\pi}{2} \right\}, \quad (4.14 \text{ f})$$

$$\sum_{\beta}^1 \frac{1}{\beta} = -\frac{1}{2} \sum_{\beta}^{1-1} \frac{1}{\beta}, \quad \sum_{\beta^2}^1 \frac{1}{\beta^2} = -\frac{\pi^2}{128} \beta^4 \frac{k_F^4}{k_o^4} \left(2 \ln^2 \frac{k_o R}{\gamma_0} + \ln \frac{k_o R}{\gamma_0} \right), \quad (4.15 \text{ a, b})$$

$$\sum_{\kappa}^1 \frac{1}{\kappa} + \sum_{\kappa}^1 \frac{1}{\kappa_3} = -\frac{\pi}{16} \sum_{l=-\infty}^{\infty} (-1)^l (\kappa_2 II_l + \kappa_3 III_l) \cdot \left\{ \sin \left[2 \eta_{l+2} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] - 2 \sin \left[2 \eta_{l+1} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] + \sin \left[2 \eta_l + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] \right\}, \quad (4.15 \text{ c})$$

$$\sum_{\kappa}^1 \frac{1}{\beta^2} = -\frac{\pi}{32} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_o^2} \left[(\sin 2 \eta_0 - \sin 2 \eta_1) \ln \frac{k_o R}{\gamma_0} + (\cos 2 \eta_0 - \cos 2 \eta_1) \frac{\pi}{2} \right], \quad (4.15 \text{ d})$$

$$\sum_{\kappa_2 \beta^2}^1 + \sum_{\kappa_3 \beta^2}^1 = -\frac{\pi^2}{32} \beta^2 \frac{k_F^2}{k_o^2} \left\{ \left[(\kappa_2 II_{-1} + \kappa_3 III_{-1}) \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{-1} + \nu_1) + (\kappa_2 II_0 + \kappa_3 III_0) \cos \frac{\pi}{2} (\nu_0 + \nu_2) \right] \cdot \ln \frac{k_o R}{\gamma_0} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l(l+1)(l+2)} (\kappa_2 II_l + \kappa_3 III_l) \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right\}. \quad (4.15 \text{ e})$$

Die Integration über $\cos \vartheta = x = k_z/k_F$ kann mit den im Anhang C angegebenen Hinweisen bei allen Ausdrücken $\Sigma_{(i),(j)}^{m,m'}$ mit Ausnahme von $\Sigma_{\beta^2 \beta^2}^{m,m'}$ ausgeführt werden. Wenn wir nämlich die für $k_o R > 1$ abgeleitete Beziehung (3.33) für Φ_{β^2} benutzen, erhalten wir nach Gleichung (4.6 b) ein Integral der Form

$$\int_{-1}^1 f(x) \frac{dx}{(1+x)(1-x)},$$

das sowohl bei $\cos \vartheta = 1$ als auch bei $\cos \vartheta = -1$ divergiert. Der Grund hierfür ist darin zu suchen, daß die oben benutzte Beziehung für Φ_{β^2} an der Stelle $k_o = 0$ ihre Gültigkeit verliert²⁶. Wir müssen deshalb die Inte-

gration über x in zwei Bereiche zerlegen, wobei wir für $k_o R > 1$ die Beziehung (3.33) und für $k_o R < 1$ die Beziehungen (3.35) benutzen, die wir durch eine TAYLOR-Entwicklung für kleine k_o erhalten haben. Das Problem besteht nun darin, wo die Grenze zwischen den beiden Bereichen liegt. Da $k_F R$ sehr groß ist, wird sie in der Gegend von $x = 1 - (1/2 k_F^2 R^2)$ liegen. Wir haben deshalb den Verlauf der Funktion $(1-x^2) \Sigma_{\beta^2 \beta^2}^{1-1}$ bzw. $(1-x^2) \Sigma_{\beta^2 \beta^2}^{1-1}$ in der Umgebung dieser Stelle nach den Beziehungen für $k_o R > 1$ und $k_o R < 1$ berechnet. Wie aus Abb. 1 und Abb. 2 ersichtlich ist, kommen sich die beiden nach verschiedenen Beziehungen berechneten Kurven sehr nahe. Wir begehen also sicher keinen großen Fehler, wenn wir nur die ersten Glieder bei den Entwicklungen für sehr große bzw. sehr kleine $k_o R$ benutzen. Als Nahtstelle x_0' nehmen wir bei $(1-x^2) \Sigma_{\beta^2 \beta^2}^{1-1}$ den Schnittpunkt der beiden Kurven. Bei $(1-x^2) \Sigma_{\beta^2 \beta^2}^{1-1}$ ziehen wir zunächst die Tangenten zwischen den

²⁶ Auch alle übrigen Terme divergieren an der Stelle $k_o = 0$.

Ihre Divergenzen werden jedoch durch Multiplikation mit

$\Pi_n^m(x) \Pi_n^{m'}(x)$ aufgehoben.

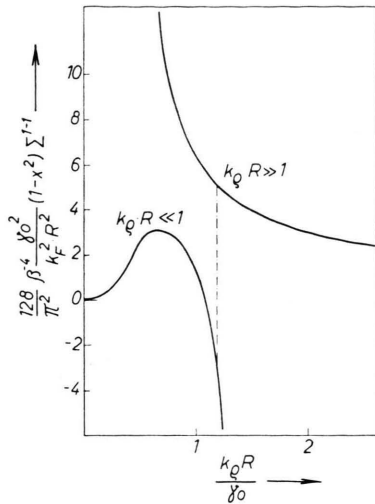


Abb. 1. Der Verlauf von $\Sigma^{1-1}_{\beta^2 \beta^2}$ als Funktion von $k_0 R / \gamma_0$. Es sind die unter den Voraussetzungen $k_0 R \gg 1$ und $k_0 R \ll 1$ errechneten Kurven eingetragen.

beiden Kurven und legen den Wert x_0 dadurch fest, daß wir eine senkrechte Verbindungslinie so zwischen die beiden Kurven legen, daß die von Tangente bzw. Vertikalen und von den Kurven begrenzten Flächen gleich groß sind. Die Integration über x , bei der wir noch nicht

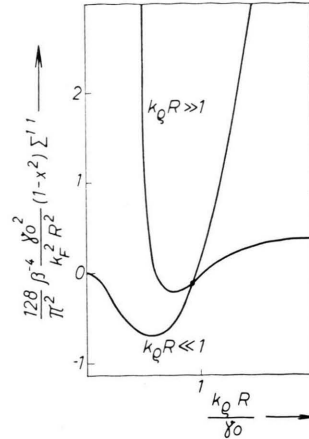


Abb. 2. Der Verlauf von $\Sigma^{1+1}_{\beta^2 \beta^2}$ als Funktion von $k_0 R / \gamma_0$. Es sind die unter den Voraussetzungen $k_0 R \gg 1$ und $k_0 R \ll 1$ errechneten Kurven eingetragen.

die numerischen Werte für die Nahtstelle einsetzen, kann dann mit den im Anhang C angegebenen Hinweisen durchgeführt werden. Es zeigt sich, daß die Werte der Nahtstellen das endgültige Ergebnis nur wenig beeinflussen, weil x_0 nur in den absoluten Gliedern, nicht dagegen in den logarithmischen Gliedern $\log^n(k_F R / \gamma_0)$ mit $n = 1, 2$ und 3 vorkommt.

Nach Durchführung der Integration über $\cos \vartheta$ lassen sich die den elektrischen Widerstand nach Gl. (4.9) bestimmenden Größen Σ^{1-1}_1 und Σ^{1+1}_1 in folgender Weise darstellen

$$\Sigma^{1-1}_1 = A_0 + A_1 \ln(k_F R) + A_2 \ln^2(k_F R) + A_3 \ln^3(k_F R), \quad (4.16)$$

$$\Sigma^{1+1}_1 \equiv \Sigma^{-1-1}_1 = B_0 + B_1 \ln(k_F R) + B_2 \ln^2(k_F R) + B_3 \ln^3(k_F R). \quad (4.17)$$

Die Konstanten A_n und B_n sind gegeben durch

$$A_0 = \frac{3}{4} \sigma^{(1)} + \frac{3 \pi^2}{8} \beta^2 \left[\left(2 - \frac{\pi^2}{12} \right) \sigma^{(3)} - \sigma^{(4)} - \sigma^{(5)} + \sigma^{(6)} \right] \quad (4.16 a)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{\pi^2}{4} \kappa_2^2 \sigma^{(7)} + \frac{\pi^2}{4} \kappa_2 \kappa_3 \left[\left(\frac{5}{3} - 2 \ln(k_F Q_i) \right) \sigma^{(7)} + \sigma^{(8)} + \sigma^{(9)} \right] \\ &+ \frac{\pi^2}{4} \kappa_3^2 \left[\left(\ln^2(k_F Q_i) - \frac{5}{3} \ln(k_F Q_i) + \frac{14}{9} - \frac{\pi^2}{12} \right) \sigma^{(7)} + \left(\frac{5}{6} - \ln(k_F Q_i) \right) (\sigma^{(8)} + \sigma^{(9)}) + \sigma^{(10)} \right] \\ &+ \frac{3 \pi}{32} \beta^2 \left[\ln(2/\gamma_0) \tau^{(1)} + \frac{1}{2} \tau^{(2)} + \frac{1}{2} \sigma^{(2)} \right] + \frac{3 \pi^2}{256} \beta^4 \tau^{(9)} + \frac{3 \pi^2}{32} \kappa_2 \beta^2 \left[(\ln(2/\gamma_0) - 1) \tau^{(3)} + \frac{\pi}{2} \tau^{(4)} \right] \\ &+ \frac{3 \pi^2}{32} \kappa_3 \beta^2 \left\{ [(1 - \ln(k_F Q_i)) \tau^{(3)} + \tau^{(5)}] [\ln(2/\gamma_0) - 1] + [(1 - \ln(k_F Q_i)) \tau^{(4)} + \tau^{(6)}] \frac{\pi}{2} + \left(\frac{\pi^2}{12} - 1 \right) \tau^{(3)} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_1 = \frac{3 \pi^2}{8} \beta^2 [-2 \sigma^{(3)} + \sigma^{(4)} + \sigma^{(5)}] &+ \frac{3 \pi^2}{256} \beta^4 \left[3 \ln^2(2/\gamma_0) + 2 \ln(2/\gamma_0) + \frac{\pi^2}{6} - 1 \right] \\ &+ \frac{3 \pi}{32} \beta^2 \tau^{(1)} + \frac{3 \pi^2}{32} \kappa_2 \beta^2 \tau^{(3)} + \frac{3 \pi^2}{32} \kappa_3 \beta^2 [(1 - \ln(k_F Q_i)) \tau^{(3)} + \tau^{(5)}], \end{aligned} \quad (4.16 b)$$

$$A_2 = \frac{3 \pi^2}{8} \beta^2 \sigma^{(3)} + \frac{3 \pi^2}{256} \beta^4 [3 \ln(2/\gamma_0) + 1], \quad A_3 = \frac{3 \pi^2}{256} \beta^4; \quad (4.16 c, d)$$

$$\begin{aligned}
B_0 = & \frac{3\pi^2}{16} \beta^2 \left[\left(2 - \frac{\pi^2}{12} \right) \sigma^{(3)} - \sigma^{(4)} - \sigma^{(5)} + \sigma^{(6)} \right] + \frac{3\pi}{16} \kappa_2 \sigma^{(13)} + \frac{\pi^2}{128} \beta^4 \tau^{(10)} \\
& + \frac{3\pi}{16} \kappa_3 \left[\sigma^{(14)} - \sigma^{(13)} \ln(k_F \varrho_i) - \frac{1}{2} \sigma^{(15)} \right] + \frac{3\pi}{64} \beta^2 \left[\tau^{(1)} \ln(2/\gamma_0) + \frac{1}{2} \tau^{(2)} + \frac{\pi}{2} \tau^{(7)} \right] \\
& + \frac{3\pi^2}{32} \kappa_2 \beta^2 [(\ln(2/\gamma_0) - 1) \tau^{(3)} + \sigma^{(11)}] + \frac{3\pi^2}{32} \kappa_3 \beta^2 \left\{ [(1 - \ln(k_F \varrho_i)) \tau^{(3)} + \tau^{(5)}] (\ln(2/\gamma_0) - 1) \right. \\
& \quad \left. + \left(\frac{\pi^2}{12} - 1 \right) \tau^{(3)} + (1 - \ln(k_F \varrho_i)) \sigma^{(11)} + \sigma^{(12)} \right\}, \quad (4.17 \text{ a})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_1 = & \frac{3\pi^2}{16} \beta^2 [-2 \sigma^{(3)} + \sigma^{(4)} + \sigma^{(5)}] + \frac{\pi^2}{128} \beta^4 \left[3 \ln^2(2/\gamma_0) + \frac{3}{2} \ln(2/\gamma_0) - \frac{\pi^2}{4} \right] \\
& + \frac{3\pi}{64} \beta^2 \tau^{(1)} + \frac{3\pi^2}{32} \kappa_2 \beta^2 \tau^{(3)} + \frac{3\pi^2}{32} \kappa_3 \beta^2 [(1 - \ln(k_F \varrho_i)) \tau^{(3)} + \tau^{(5)}], \quad (4.17 \text{ b})
\end{aligned}$$

$$B_2 = \frac{3\pi^2}{16} \beta^2 \sigma^{(3)} + \frac{\pi^2}{128} \beta^4 \left(\frac{3}{4} + 3 \ln(2/\gamma_0) \right), \quad B_3 = \frac{\pi^2}{128} \beta^4 \quad \text{mit } \gamma_0 = e^C = 1,781072. \quad (4.17 \text{ c, d})$$

Die Summen $\sigma^{(i)}$ und $\tau^{(i)}$ sind folgendermaßen definiert

$$\sigma^{(1)} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sin^2(\eta_{l+1} - \eta_l) (1 - x^2) dx, \quad (4.18 \text{ a})$$

$$\sigma^{(2)} = \int_{-1}^1 \sum_{l=1}^{\infty} [\sin 2\eta_{l+1} - 2 \sin 2\eta_l + \sin 2\eta_{l-1}] \frac{1}{l} dx, \quad (4.18 \text{ b})$$

$$\sigma^{(3)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} a_l \left[a_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} - \nu_l) a_{l+1} \right], \quad \sigma^{(4)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} a_l \left[b_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} - \nu_l) b_{l+1} \right], \quad (4.18 \text{ c, d})$$

$$\sigma^{(5)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} b_l \left[a_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} - \nu_l) a_{l+1} \right], \quad \sigma^{(6)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} b_l \left[b_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} - \nu_l) b_{l+1} \right], \quad (4.18 \text{ e, f})$$

$$\sigma^{(7)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l \left[c_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+3} - \nu_{l+2} + \nu_{l+1} - \nu_l) c_{l+1} \right], \quad (4.18 \text{ g})$$

$$\sigma^{(8)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l \left[d_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+3} - \nu_{l+2} + \nu_{l+1} - \nu_l) d_{l+1} \right], \quad (4.18 \text{ h})$$

$$\sigma^{(9)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} d_l \left[c_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+3} - \nu_{l+2} + \nu_{l+1} - \nu_l) c_{l+1} \right], \quad (4.18 \text{ i})$$

$$\sigma^{(10)} = \frac{1}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} d_l \left[d_l + \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+3} - \nu_{l+2} + \nu_{l+1} - \nu_l) d_{l+1} \right], \quad (4.18 \text{ k})$$

$$\sigma^{(11)} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l(l+1)(l+2)} c_l \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l), \quad \sigma^{(12)} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l(l+1)(l+2)} d_l \cos \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l), \quad (4.18 \text{ l, m})$$

$$\begin{aligned}
\sigma^{(13)} = & \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (-1)^l c_l \left\{ \sin \left[2\eta_{l+2} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] \right. \\
& \left. - 2 \sin \left[2\eta_{l+1} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] + \sin \left[2\eta_l + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] \right\} (1 - x^2) dx, \quad (4.18 \text{ o})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma^{(14)} = & \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (-1)^l d_l \left\{ \sin \left[2\eta_{l+2} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] \right. \\
& \left. - 2 \sin \left[2\eta_{l+1} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] + \sin \left[2\eta_l + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] \right\} (1 - x^2) dx, \quad (4.18 \text{ p})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma^{(15)} = & \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (-1)^l c_l \left\{ \sin \left[2\eta_{l+2} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] \right. \\
& \left. - 2 \sin \left[2\eta_{l+1} + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] + \sin \left[2\eta_l + \frac{\pi}{2} (\nu_{l+2} + \nu_l) \right] \right\} \ln \left(\frac{1-x^2}{4} \right) (1 - x^2) dx; \quad (4.18 \text{ q})
\end{aligned}$$

$$\tau^{(1)} = \int_{-1}^1 (\sin 2\eta_0 - \sin 2\eta_1) dx, \quad \tau^{(2)} = \int_{-1}^1 (\sin 2\eta_0 - \sin 2\eta_1) \ln \frac{1-x^2}{4} dx, \quad (4.19 a, b)$$

$$\tau^{(3)} = c_{-1} \cos(\nu_{-1} + \nu_1) \frac{\pi}{2} + c_0 \cos(\nu_0 + \nu_2) \frac{\pi}{2}, \quad \tau^{(4)} = c_{-1} \sin(\nu_{-1} + \nu_1) \frac{\pi}{2} + c_0 \sin(\nu_0 + \nu_2) \frac{\pi}{2}, \quad (4.19 c, d)$$

$$\tau^{(5)} = d_{-1} \cos(\nu_{-1} + \nu_1) \frac{\pi}{2} + d_0 \cos(\nu_0 + \nu_2) \frac{\pi}{2}, \quad \tau^{(6)} = d_{-1} \sin(\nu_{-1} + \nu_1) \frac{\pi}{2} + d_0 \sin(\nu_0 + \nu_2) \frac{\pi}{2}, \quad (4.19 e, f)$$

$$\tau^{(7)} = \int_{-1}^1 (\cos 2\eta_0 - \cos 2\eta_1) dx, \quad \tau^{(8)} = \int_{-1}^1 (\cos 2\eta_0 - \cos 2\eta_1) \ln \left(\frac{1-x^2}{4} \right) dx, \quad (4.19 g, h)$$

$$\tau^{(9)} = \ln^3(2/\gamma_0) + \ln^2(2/\gamma_0) + \left(\frac{\pi^2}{6} - 1 \right) \ln(2/\gamma_0) + \frac{3}{2} \zeta(3) - \frac{\pi^2}{12} - \ln^3 z_0 - \ln^2 z_0 + \left(1 - \frac{5}{12} \pi^2 \right) \ln z_0 + \frac{1}{8} \gamma_0^4 z_0^4 - \frac{1}{96} \gamma_0^6 z_0^6 \left(2 \ln \frac{\gamma_0^2 z_0}{2} + \frac{11}{12} \right), \quad (4.19 i)$$

$$\tau^{(10)} = \ln^3(2/\gamma_0) + \frac{3}{4} \ln^2(2/\gamma_0) - \frac{\pi^2}{4} \ln(2/\gamma_0) + \frac{3}{2} \zeta(3) - \frac{\pi^2}{16} - \ln^3 z_0' - \frac{3}{4} \ln^2 z_0' + \frac{\gamma_0^6 z_0'^6}{64} \left(2 \ln \frac{\gamma_0^2 z_0'}{2} - \frac{29}{24} \right) \quad (4.19 k)$$

$$\text{mit } z_0 = 2(1-x_0) \frac{k_F^2 R^2}{\gamma_0^2}, \quad z_0' = 2(1-x_0') \frac{k_F^2 R^2}{\gamma_0'^2}, \quad \zeta(3) = 1,20206 \quad (\text{RIEMANNSCHE } \zeta\text{-Funktion}).$$

5. Numerische Ergebnisse und Diskussion

a) Numerische Auswertung

Im folgenden legen wir durchweg den für einwertige kubisch-flächenzentrierte Metalle gültigen Zahlenwert ($b k_F/2\pi$) = 0,553 zugrunde. Bei der numerischen Diskussion und beim Vergleich mit den Experimenten beziehen wir uns auf Kupfer, für dessen elastische Konstanten wir $\nu = 0,348$ und $\mu = 0,45 \cdot 10^{12}$ dyn/cm² einsetzen. (In das Endergebnis gehen lediglich Verhältnisswerte der elastischen Konstanten ein, so daß die Kenntnis von μ nur für die Normierung von l , m und n benötigt wird.) Die nichtlinearen elastischen Konstanten l , m , n wurden aus zwei verschiedenen Gruppen von Meßergebnissen, die in Tab. 1 angegeben sind, ermittelt. Einzelheiten dieser Bestimmung werden an anderer Stelle mitgeteilt werden. In Tab. 1 sind neben den beiden Sätzen für l , m und n die daraus abgeleiteten Werte für die Konstanten C_i [Gl. (A 2–5)] und für die Parameter κ , κ_2 und κ_3 [Gl. (2.10)] aufgeführt. Ferner ergibt sich mit den oben angegebenen Zahlenwerten für Kupfer $C_0 = -0,466$ und $\beta = -0,172$ [vgl. Gl. (2.10 a)].

Wie schon bei der Behandlung der Schraubenversetzung⁹ haben wir die numerische Auswertung für $\kappa = 0$, $\kappa = 1/9$ und $\kappa = 1/4$ durchgeführt. Tab. 2 ent-

	F. BIRCH P.W. BRIDGMAN J. POYNTING	W. B. DANIELS C. S. SMITH J. POYNTING
l [10 ¹² dyn/cm ²]	–2,06	–2,07
m [10 ¹² dyn/cm ²]	–5,31	–5,90
n [10 ¹² dyn/cm ²]	–15,15	–15,06
C_e	1,14	1,33
C_2	1,05	1,26
C_3	–0,40	–0,51
C_s	0,0725	0,229
κ	0,236	0,275
(Stufenv.)		
κ_2	0,210	0,253
κ_3	–0,082	–0,104
κ	0,0148	0,0467
(Schraubenver.)		
A_0	0,04905	0,06212
A_1	0,00127	–0,00137
A_2	0,00493	0,00528
A_3	0,00010	0,00010
B_0	0,01122	0,01192
B_1	–0,00060	–0,00200
B_2	0,00247	0,00263
B_3	0,00007	0,00007

Tab. 1. Die für die numerische Auswertung zugrunde gelegten nichtlinearen elastischen Konstanten l , m , n von Kupfer sowie die damit berechneten Parameter. (Quellenangaben für die Bestimmung der l , m , n : F. BIRCH, J. Appl. Phys. **8**, 129 [1937]; P. W. BRIDGMAN, Proc. Amer. Acad. **70**, 285 [1935]; J. POYNTING, Proc. Roy. Soc., Lond. A **86**, 543 [1912]; W. B. DANIELS u. C. S. SMITH, Phys. Rev. **111**, 713 [1958].)

hält die in § 4 c eingeführten Größen $\sigma^{(i)}$ und $\tau^{(i)}$ für die genannten κ -Werte. Der Übergang zu den

	$\kappa = 0$	$\kappa = \frac{1}{9}$	$\kappa = \frac{1}{4}$
$\sigma^{(1)}$	0	0,0061	0,0336
$\sigma^{(2)}$	0	-0,2258	-0,3807
$\sigma^{(3)}$	0	0,0260	0,0451
$\sigma^{(4)} + \sigma^{(5)}$	0	0,1252	0,1569
$\sigma^{(6)}$	0,25	0,2298	0,2104
$\sigma^{(7)}$	0,125	0,1498	0,1490
$\sigma^{(8)} + \sigma^{(9)}$	$-\frac{1}{4}C$	-0,1082	-0,0692
	$\frac{1}{8}\left(C - \frac{1}{2}\right)^2$		
$\sigma^{(10)}$	$+\frac{1}{8}\left(C - \frac{1}{2}\right)$	0,0259	0,0141
	$+\frac{\pi^2}{96} - \frac{1}{16}$		
$\sigma^{(11)}$	0	0,0008	0,0017
$\sigma^{(12)}$	$\frac{\pi^2}{24} - \frac{7}{16}$	-0,0251	-0,0234
$\sigma^{(13)}$	0	0,0366	0,0594
$\sigma^{(14)}$	0	0,0191	0,0368
$\sigma^{(15)}$	0	-0,0586	-0,0940
$\tau^{(1)}$	0	-0,3076	-0,5562
$\tau^{(2)}$	0	0,8501	1,3133
$\tau^{(3)}$	-0,50	-0,5296	-0,4811
$\tau^{(4)}$	0	-0,0926	-0,1987
$\tau^{(5)}$	$\frac{1}{2}C$	0,1693	0,0761
$\tau^{(6)}$	0	0,0337	0,0471
$\tau^{(7)}$	0	-0,1147	-0,3910
$\tau^{(8)}$	0	0,3932	1,1033
$\tau^{(9)}$	0,8839	0,8839	0,8839
$\tau^{(10)}$	0,7693	0,7693	0,7693

Tab. 2. Zahlenwerte für $\sigma^{(i)}$ [Gl. (4.18)] und $\tau^{(i)}$ [Gl. (4.19)] für verschiedene κ -Werte. ($C=0,577$ bedeutet die EULERSche Konstante.)

in Tab. 1 aufgeführten κ -Werten geschah durch Inter- bzw. Extrapolation. Die in den Gln. (4.16) bzw. (4.17) auftretenden Koeffizienten A_i und B_i sind für die beiden verwendeten Sätze nichtlinearer elastischer Konstanten in Tab. 1 mit angegeben. Die Größe dieser Koeffizienten bestimmt die Güte der Konvergenz unseres Endergebnisses, das sich in der Form einer Potenzreihenentwicklung nach steigenden Potenzen von $\ln(k_F R)$ darstellt. Man überzeugt sich leicht, daß die Konvergenz für $k_F R = 10^5$ noch ausreichend ist. Sollten wesentlich größere Werte des Abschneideradius von Interesse sein, so müßte die Störungsrechnung zu höheren Ordnungen weitergeführt werden.

In Abb. 3 sind als Funktion von $k_F R$, also des äußeren Abschneideradius, der spezifische Widerstand einer isotropen Verteilung von Stufenversetzungen der Länge 1 pro Volumeneinheit, also

$$\bar{\Delta Q} = 1/3 (\Delta Q_{xx} + \Delta Q_{yy})$$

sowie das Verhältnis $\Delta Q_{yy}/\Delta Q_{xx}$ des Widerstandes in Richtung der Gleitebenenormalen (ΔQ_{yy}) und in Richtung des BURGERS-Vektors (ΔQ_{xx}) aufgetra-

gen. HUNTER und NABARRO⁵ hatten darauf hingewiesen, daß sowohl ihre Lösung wie auch diejenige von DEXTER⁴ für das eben genannte Verhältnis den Wert 3 liefert. In unserem Falle ist dieses Verhältnis immer kleiner als 3; es scheint jedoch für große Werte von

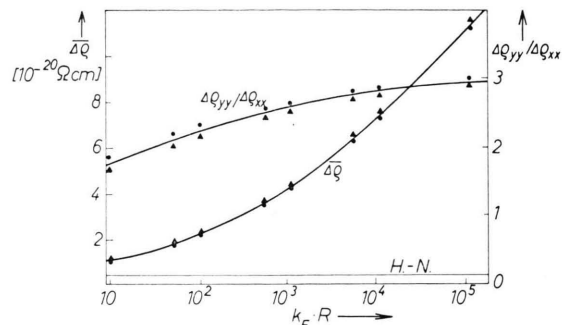


Abb. 3. Gemittelter elektr. Widerstand $\bar{\Delta Q} = \frac{1}{3} (\Delta Q_{xx} + \Delta Q_{yy})$ sowie Verhältnis $\Delta Q_{yy}/\Delta Q_{xx}$ des Widerstands senkrecht zur Gleitebene zum Widerstand in der Gleitebene von Stufenversetzungen in Kupfer als Funktion des Abschneideradius $k_F R$. ●: Berechnet mit $\kappa=0,236$; $\kappa_2=0,210$; $\kappa_3=-0,082$ (BIRCH, BRIDGMAN, POYNTING), ▲: Berechnet mit $\kappa=0,275$; $\kappa_2=0,253$; $\kappa_3=-0,104$ (DANIELS, SMITH, POYNTING), H.-N. bedeutet den von HUNTER und NABARRO⁵ berechneten Wert von $\bar{\Delta Q}$.

$k_F R$ sich dem Grenzwert 3 zu nähern. Erfreulicherweise fallen in Abb. 3 die mit den beiden verschiedenen Gruppen von elastischen Konstanten berechneten Resultate fast zusammen.

In Abb. 3 ist ferner der von HUNTER und NABARRO berechnete, vom Abschneideradius unabhängige $\bar{\Delta Q}$ -Wert eingetragen (vgl. § 5 b). Wie man sieht, liefert unsere Rechnung in dem praktisch interessierenden Bereich ($10^2 < k_F R < 10^5$) ein um rund eine Größenordnung größeres Ergebnis, was vor allem durch das Auftreten der R -abhängigen Glieder bedingt ist. Wie schon in § 1 erwähnt, geht die R -Abhängigkeit des Widerstands auf die β^2 - und die $\beta\kappa$ -Glieder in der Streuwahrscheinlichkeit zurück. In dem gesamten Bereich, in dem unsere Näherung gute Ergebnisse liefern sollte, d. h. also für $k_F R \leq 10^5$, überwiegen hierbei die $\beta\kappa$ -Glieder, und zwar selbst bei großen Werten von $k_F R$ (wo an und für sich der β^2 -Einfluß zunimmt) um mehr als eine Größenordnung. Das bedeutet, daß die Vergrößerung des elektrischen Widerstands der Stufenversetzungen gegenüber früheren Rechnungen in erster Linie der Berücksichtigung des aus der nichtlinearen Elastizitätstheorie folgenden Dilatationsfeldes zuzuschreiben ist. Die Durchsicht der numerischen Rechnung zeigt

ferner, daß diejenigen Glieder, die den in § 4 c eingeführten Abschneideradius x_0 und x_0' enthalten und die deshalb etwas unsicher sind, einen vernachlässigbar kleinen Beitrag geben. Die κ_2 - und κ_3 -Glieder sind mit den β^2 -Gliedern vergleichbar und somit ebenfalls mindestens eine Größenordnung kleiner als die führenden Terme. Damit hat sich nachträglich die Zulässigkeit aller von uns gemachten rechnerischen Vereinfachungen erwiesen. In dem für das Endresultat maßgebenden $\beta\kappa$ -Beitrag haben wir durch den Umstand, daß wir eine hinsichtlich der κ -Abhängigkeit strenge Lösung benützt haben, sogar eine höhere Genauigkeit erreicht, als dies durch die Störungsrechnung 2. Ordnung möglich wäre. Man darf also ohne Bedenken unsere Resultate auf verhältnismäßig große κ -Werte anwenden.

b) Vergleich mit anderen Arbeiten

Die älteren Arbeiten sind bei HUNTER und NABARRO⁵ ausführlich erörtert, so daß wir an die letztgenannte Arbeit anknüpfen können. Läßt man zur Vereinfachung den Einfluß von Scherungen auf den elektrischen Widerstand außer acht, so ist in dem Streupotential Gl. (2.9 a) bei HUNTER und NABARRO nur das β -Glieder enthalten; die daraus resultierende SCHRÖDINGER-Gleichung wird durch Störungsrechnung 1. Ordnung (sog. 1. BORNSche Näherung) gelöst. Werden unsere Rechnungen in dieser Weise spezialisiert, so stimmt das Ergebnis genau mit demjenigen von HUNTER und NABARRO überein: Der elektrische Widerstand einer Stufenversetzung ergibt sich als unabhängig vom äußeren Abschneideradius und als verhältnismäßig klein (Abb. 3). Wie wir in Ziff. 1 dargelegt haben, ist dieses Ergebnis qualitativ und quantitativ unrichtig und eine Folge von unzulässigen physikalischen Vereinfachungen [Vernachlässigung des κ -Gliedes in Gl. (2.9 a)] und mathematischen Vereinfachungen (Verwendung der 1. BORNSchen Näherung).

Die Rechnungen von KLEMENS^{6,7} unterscheiden sich im Hinblick auf die eben besprochenen Vereinfachungen nicht von denjenigen von HUNTER und NABARRO⁵ und liefern dementsprechend ein ähnliches Ergebnis, das in gleicher Weise zu kritisieren ist.

HARRISON⁸ machte die ad-hoc-Annahme, daß eine Stufenversetzung einen engen hohlen Kern besitze, von dem die gesamte Volumänderung der Stufenversetzung ausgehen soll. Dieser Kern wird als negativ aufgeladen angesehen und die Streuung daran

mit der ersten BORNSchen Näherung behandelt, wobei sich ein Widerstand ergibt, der eine Größenordnung kleiner als der von HUNTER und NABARRO ermittelte ist. HARRISON vertritt die Ansicht, daß dieses Ergebnis typisch für den Einfluß der besonderen Potentialverhältnisse im Versetzungskern ist. Dem ist aber entgegenzuhalten, daß die Größenordnung seines Ergebnisses ausschließlich dadurch bedingt ist, daß die gesamte experimentell beobachtete Volumänderung einer Versetzung auf den innersten Versetzungskern konzentriert ist, während sie in Wirklichkeit vor allem durch das elastische Fernfeld hervorgerufen wird^{9-12, 27}. Eine solche räumlich langsam variable Dilatation gibt einen wesentlich kleineren Beitrag zum elektrischen Widerstand. Eine theoretisch begründete Behandlung des mit der Volumaufweitung verbundenen Streupotentials mit Einschluß eines realistischen Anteils, der vom eigentlichen Kern herrührt, gibt ein wesentlich kleineres Verhältnis von elektrischem Zusatzwiderstand und Dichteänderung^{15, 8}. Solange keine unabhängige Begründung für die Existenz eines hohlen Versetzungskerns existiert, können wir den HARRISONschen Vorschlag nicht als eine Alternativmöglichkeit zur Deutung des experimentellen Verhältnisses zwischen Versetzungswiderstand und Dichteänderung bzw. gespeicherter Energie ansehen. Ähnliches gilt auch für einen Vorschlag von STROH²⁸, wonach Stufenversetzungen in Kupfer von einem Riß begleitet sind, der zu einem hohen elektrischen Widerstand und zu einer starken Volumvergrößerung Anlaß geben soll.

CARRUTHERS²⁹ gibt an, daß das Ergebnis von KLEMENS⁶ mit einem Faktor $\frac{1}{2}(\ln(R/r_0))^2$ zu versehen sei, wobei R und r_0 je einen äußeren und inneren Abschneideradius bedeuten. Er schließt dies in Analogie zu einer Berechnung³⁰ (in 1. BORNScher Näherung) der Streuung von Phononen an Stufenversetzungen. Wie wir bei der Besprechung des Wärmewiderstands (Ziff. d) ausführen werden, tritt bei seiner Rechnung dieser Faktor jedoch fälschlicherweise auf, so daß die Übertragung auf den elektrischen Fall hinfällig wird. Wir finden also auch hier das Ergebnis bestätigt, daß die 1. BORNSche Näherung keine Abhängigkeit vom Abschneideradius liefert.

²⁷ A. SEEGER, Suppl. Nuovo Cim. 7 [X], 632 [1958].

²⁸ A. N. STROH, Phil. Mag. 2, 1 [1957].

²⁹ P. CARRUTHERS, Phys. Rev. Let. 2, 336 [1959].

³⁰ P. CARRUTHERS, Phys. Rev. 114, 995 [1959].

Zusammenfassend kann man sagen, daß keine der bis jetzt veröffentlichten Rechnungen über den elektrischen Widerstand von *Stufenversetzungen* die Verhältnisse richtig wiedergibt, da in allen Fällen die 1. BORNSche Näherung verwendet wurde und darüber hinaus die Volumaufweitung und damit die negative durchschnittliche Aufladung der Versetzung, die zu dem κ -Glieder im Streupotential (2.9 a) führt, nicht richtig beschrieben wurde.

Von den vorstehend besprochenen Einwänden frei ist die Berechnung des elektrischen Widerstands von *Schraubenversetzungen* durch SEEGER und STEHLE (s. Anm. ^{15, 9}). Läßt man wiederum zur Vereinfachung die Scherungen außer acht, so ergibt sich der Potentialansatz Gl. (2.10), für den die κ -Werte ebenfalls in Tab. 1 aufgeführt sind. Das Ergebnis der strengen Berechnung des Widerstands einer isotropen Verteilung von Schraubenversetzungen, bei der kein äußerer Abschneideradius eingeführt zu werden braucht, ist als Funktion von κ in

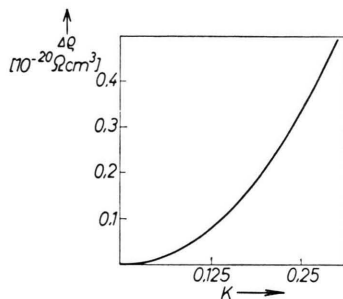


Abb. 4. Der gemittelte elektrische Widerstand $\bar{\Delta Q}$ von Schraubenversetzungen als Funktion von κ (für Kupfer).

Abb. 4 dargestellt. Für $\kappa = 0,047$ ergibt sich $\bar{\Delta Q} = 0,016 \cdot 10^{-20} \Omega \text{cm}^3$. Dieser Wert ist verhältnismäßig klein, so daß wir ihn in § 5 c vernachlässigen können. Es ist jedoch denkbar, daß sich bei anderen Metallen als Kupfer ein größeres κ und damit auch ein größerer Widerstand von Schraubenversetzungen ergibt.

c) Vergleich mit den Experimenten

Der Umstand, daß der Widerstand einer einzelnen Stufenversetzung logarithmisch von einem äußeren Abschneideradius abhängt, hat zur Folge, daß der elektrische Widerstand eines verformten Metalls nicht nur durch die Zahl, sondern auch durch die *Anordnung der Versetzungen* bestimmt wird. Insbesondere ist der Widerstand einer Gruppe von aufgestauten Versetzungen eines Vorzeichens größer als

die Summe der Widerstände der einzelnen Versetzungen. Die Rechnungen der vorliegenden Arbeit beziehen sich ausschließlich auf einzelne Versetzungen; die Erweiterung auf Versetzungsgruppen hoffen wir später geben zu können. Aus diesem Grunde eignen sich Messungen des elektrischen Widerstands an gedehnten Kupfereinkristallen ³¹, in denen die Versetzungen in der Form aufgestauter Gruppen vorhanden sind, weniger gut für den Vergleich mit der zur Zeit vorliegenden Theorie. Für diesen Vergleich stützen wir uns in erster Linie auf die Messungen von CLAREBROUGH, HARGREAVES und WEST ³², die an vielkristallinem gestauchtem Kupfer mit verschiedenen starker Stauchung ausgeführt wurden. Diese ermöglichen den Vergleich von Bestimmungen des elektrischen Zusatzwiderstands mit solchen der gespeicherten Energie. Da in beiden Fällen in die theoretischen Ausdrücke der Abschneideradius logarithmisch eingeht, wenn auch in etwas verschiedener Form, ist die Hoffnung berechtigt, daß sich bei einem solchen Vergleich die durch die Versetzungsanordnung bedingten Unsicherheiten z. Tl. herausheben.

Zum Vergleich zwischen Experiment und Theorie verwenden wir die folgenden drei Modelle: (A) Es sind nur Stufenversetzungen und keinerlei Schraubenversetzungen vorhanden. Dies ist ein Grenzfall, der bedeuten würde, daß alle ursprünglich vorhandenen Schraubenversetzungen sich durch Quergleitung annihiliert haben. (B) Es sind 2,5-mal soviel Schraubenversetzungen wie Stufenversetzungen vorhanden. Dies entspricht etwa den Verhältnissen im Bereich II der Verfestigungskurve von Einkristallen und würde den entgegengesetzten Grenzfall darstellen, daß überhaupt keine Quergleitung von Schraubenversetzungen stattgefunden hat. (C) Es sind gleich viel Stufen- und Schraubenversetzungen vorhanden. Dies entspricht dem Fall, daß die Zahl der ursprünglich vorhandenen Schraubenversetzungen etwas, aber nicht vollständig, durch Quergleitung reduziert worden ist, und sollte den wirklichen Verhältnissen einigermaßen gerecht werden.

Die theoretischen Angaben für jede der drei Möglichkeiten (A), (B) und (C) werden unter zwei verschiedenen Annahmen gemacht: (1) Die Stapelfehler der Versetzungen tragen nichts zum elektrischen

³¹ T. H. BLEWITT, R. R. COLTMAN u. J. K. REDMAN, Rep. Conf. Defects Crystalline Solids, Physical Society, Lond. 1955, S. 369.

³² L. M. CLAREBROUGH, M. E. HARGREAVES u. G. W. WEST, Acta Met. 5, 738 [1957].

Widerstand bei. (2) Die Stapelfehler besitzen einen mittleren Reflexionskoeffizienten $\bar{R} = 1/3$. Jede Stufenversetzung enthält einen Stapelfehlerstreifen von der Breite $3,2b$, jede Schraubenversetzung enthält einen solchen der Breite $1,5b$ ³³. Die elektrischen Widerstände von Versetzungen und Stapelfehlern sind additiv.

Als Energie pro Längeneinheit setzen wir nach dem PEIERLSSchen Modell (siehe Anm.³⁶, insbes. Ziff. 75) für eine Stufenversetzung

$$E_l = \frac{b^2 \mu}{4 \pi (1-\nu)} [\ln(R k_F) - 0,91] \quad (5.1)$$

und für eine Schraubenversetzung

$$E_l = \frac{b^2 \mu}{4 \pi} [\ln(R k_F) - 0,35] \quad (5.2)$$

an.

Tab. 3 gibt für verschiedene Werte von $k_F R$ die theoretischen Ergebnisse für das Verhältnis von

Modell	A1	A2	B1	B2	C1	C3
$k_F R = 10$	2,16	19,28	0,661	12,61	1,13	15,18
$k_F R = 10^2$	1,68	8,43	0,587	5,72	0,963	6,75
$k_F R = 10^3$	2,00	6,16	0,712	3,98	1,165	4,88
$k_F R = 10^4$	2,46	5,46	0,899	3,30	1,447	4,09
$k_F R = 10^5$	3,00	5,34	1,105	2,99	1,776	3,82

Tab. 3. Theoretische Werte für das Verhältnis von Versetzungswiderstand zu zugehöriger Energie für verschiedene Modelle und Abschneideradien (in $10^{-16} \Omega \text{ cm}^3/\text{dyn}$).

spezifischem elektrischem Widerstand und gespeicherter Energie an. Die experimentellen Werte³² sind (in $10^{-16} \Omega \text{ cm}^3/\text{dyn}$) 6,2 (nach 30% Stauchung), 6,3 (nach 55% Stauchung), 6,7 (nach 70% Stauchung). Für den Vergleich sind die Spalten A2, B2 und C2 in Tab. 3 maßgebend, da durch theoretische (siehe vorhergehende Fußnote sowie^{35, 7}) und neuere experimentelle³⁷ Ergebnisse ein Beitrag der Stapelfehler in der angegebenen Größe gesichert erscheint. Wie man sieht, liegen bei den Modellen A2 und C2 für Abschneideradien R zwischen $10^2 k_F^{-1}$ und $10^3 k_F^{-1}$ die theoretischen Ergebnisse im Bereich der experimentellen Werte. Auch der Gang mit zunehmender Kompression wird richtig wiedergegeben.

Der Einfluß von Stapelfehlern muß bei Aluminium wesentlich kleiner sein^{15, 38}. WINTENBERGER³⁹ findet als spezifischen Widerstand einer isotropen Versetzungsverteilung der Länge 1 pro Volumeneinheit $2,3 \cdot 10^{-20} \Omega \text{ cm}^3$. Obwohl unsere Rechnungen nicht speziell für Aluminium durchgeführt worden sind, ergibt ein Vergleich mit Abb. 3 bei Berücksichtigung der Schraubenversetzung und Vernachlässigung der Stapelfehler die richtige Größenordnung.

Zusammenfassend kann man also sagen, daß die in der vorliegenden Arbeit errechnete Größenordnung des Versetzungswiderstands durch die bis jetzt vorliegenden, allerdings noch nicht sehr umfangreichen Messungen bestätigt wird.

d) Der Zusammenhang mit dem Wärmewiderstand

Gemeinsam mit P. GRUNER haben die Verfasser der vorliegenden Arbeit gezeigt, daß durch konsequente Anwendung der nichtlinearen Elastizitätstheorie das Problem der Streuung von Phononen an Gitterfehlern, insbesondere an Versetzungen, in Analogie zu der hier durchgeführten Berechnung der Elektronenstreuung sich behandeln läßt. Es ergibt sich eine Art „vektorielle SCHRÖDINGER-Gleichung“, wobei die Streuung der Phononen durch die nichtlinearen Wechselwirkungsglieder zwischen den statischen und dynamischen Verschiebungen zustande kommt. Wie beim elektrischen Widerstand erhält man für den Wärmewiderstand von Versetzungen einen endlichen — nicht von einem äußeren Abschneideradius abhängigen — Wert, wenn man die Streuung mit BORNScher Näherung 1. Ordnung behandelt. Es ist zu vermuten, daß bei Anwendung von BORNScher Näherung 2. Ordnung logarithmische Divergenzen von der in Ziff. 3 d und Ziff. 4 c behandelten Art auftreten werden.

Die vorstehenden Ausführungen scheinen den Ergebnissen von CARRUTHERS³⁰ zu widersprechen, der — ohne die oben erwähnte Gleichung der nichtlinearen Elastizitätstheorie zu lösen — eine logarithmische Abhängigkeit des Wärmewiderstands von Stufenversetzungen von einem äußeren Abschneideradius gefunden hat (vgl. § 5 b). Dieses Resultat beruht jedoch auf dem Übergang von CARRUTHERS Gl. (33) zu Gl. (38). Dieser ist in einem endlichen Kristall unzulässig, da man an Stelle von ebenen Wellen Wellenpakete zu betrachten hat; wie Herr CARRUTHERS brieflich freundlicherweise bestätigte, ergibt die korrekte Durchrechnung in der von ihm benutzten Näherung ein vom Abschneideradius unabhängiges Ergebnis.

³³ Die Annahmen über die Stapelfehlerbreiten entsprechen den Ergebnissen von SEEGER, BERNER und WOLF³⁴, jene über den mittleren Reflexionskoeffizienten denjenigen von SEEGER³⁵. Die letzteren sind im wesentlichen im Einklang mit einer noch unveröffentlichten verbesserten Berechnung des Stapelfehlerwiderstands, die keinen Gebrauch von der Störungsrechnung macht.

³⁴ A. SEEGER, R. BERNER u. H. WOLF, Z. Phys. **155**, 247 [1959].

³⁵ A. SEEGER, Can. J. Phys. **34**, 1219 [1956].

³⁶ A. SEEGER, Handbuch der Physik, Bd. VII/1, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1955, S. 383.

³⁷ J. N. LOMER u. H. M. ROSENBERG, Phil. Mag. **4**, 467 [1959].

³⁸ A. SEEGER u. G. SCHÖCK, Acta Met. **1**, 519 [1953].

³⁹ M. WINTENBERGER, Acta Met. **7**, 549 [1959].

Die Verfasser möchten der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Förderung ihrer Arbeiten über Transportvorgänge in Kristallen bestens danken.

Anhang A

Dilatationsfeld einer Stufenversetzung nach der Elastizitätstheorie 2. Ordnung

Zur Berechnung des elektrischen Potentials in der Umgebung einer geradlinigen Stufenversetzung [Gl. (2.9 a)] wird die Kenntnis der Dilatation Θ in den

Koordinaten des verformten Zustandes („Endkoordinaten“) benötigt, und zwar in sog. quadratischer Näherung. Ausgehend von der von KRÖNER und SEEGER¹¹ gegebenen Formulierung der nichtlinearen Elastizitätstheorie wird das Spannungsfeld einer in der Achse eines hohlen Kreiszylinders verlaufenden Versetzungslinie in der genannten Näherung an anderer Stelle abgeleitet¹². (Die Lösung des entsprechenden Problems für eine Schraubenversetzung findet man bereits in der Literatur¹⁰.) Wir geben hier lediglich das Ergebnis für die Dilatation einer Stufenversetzung in einem unendlich ausgedehnten Medium an. In Zylinderkoordinaten lautet diese:

$$\Theta = \frac{C_0}{2\pi} \frac{b}{\varrho} \sin \varphi + \frac{b^2}{4\pi^2 \varrho^2} \left[C_e + \left(C_2 + C_3 \ln \frac{\varrho}{\varrho_i} \right) \right] \cos 2\varphi. \quad (\text{A. 1})$$

Hier bedeuten

$$C_0 = -(1-2\nu)/(1+\nu), \quad (\text{A. 2})$$

$$C_e = + \frac{1}{8G} \left(\frac{1-2\nu}{1+\nu} \right) \cdot \frac{1}{(1-\nu)^3} \left[+12(1-2\nu)^3 l' - (1-2\nu)(-14\nu^2 + 15\nu - 3) m' - 2\nu(1-\nu)^2 n' \right] \quad (\text{A. 3})$$

$$+ \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu} \right)^2 \frac{K'}{4} - \frac{1-\nu+\nu^2}{(1-\nu)^2} \frac{G'}{3} - \frac{3}{4} \frac{1-2\nu}{1-\nu^2} - \frac{1}{8} \frac{1-2\nu}{(1-\nu)^2} (12\nu^3 + 10\nu^2 - 25\nu + 9),$$

$$C_2 = \frac{1}{8G} \frac{1-2\nu}{(1-\nu)^2(1+\nu)} \left[-6(1-2\nu)^3 l' + (1-2\nu)(-6\nu^2 + 8\nu - 3) m' - (1-2\nu+\nu^2) n' \right] \quad (\text{A. 4})$$

$$+ \frac{1}{(1-\nu)^2} \left[-\frac{K'}{4} (1-2\nu)^2 + \frac{G'}{6} (1+2\nu-2\nu^2) - \frac{\nu}{4} \left(\frac{1-2\nu}{1+\nu} \right) (3+8\nu) \right],$$

$$C_3 = -\frac{1}{8G} \frac{1-2\nu}{(1-\nu)^2(1+\nu)} ((1-2\nu) m' + (5-8\nu) G). \quad (\text{A. 5})$$

Es wurden folgende Abkürzungen verwandt: ϱ_i = innerer Abschneideradius (vgl. § 2); ν = Poissonsche Querkontraktionszahl; G = Schubmodul; K = Kompressionsmodul; $G' \equiv dG/dp$, $K' \equiv dK/dp$ = Druckabhängigkeiten der Moduln G bzw. K .

$$l' = \frac{l+2m}{3} + 2(\lambda+2\mu),$$

$$m' = -2(m+2\lambda+6\mu), \quad (\text{s. Anm. }^{40}) \quad (\text{A. 6})$$

$$n' = n + 12\mu,$$

λ, μ = LAMÉsche elastische Konstanten (2. Ordnung), l, m, n = MURNAGHANSche elastische Konstante (3. Ordnung), die z. B. bei SEEGER und MANN¹⁰ definiert sind.

Anhang B

Einige bei der Berechnung der Streuamplitude auftretende Integrale

1. Bei der Durchführung der Störungsrechnung muß das Integral

$$I_{\nu_l} = \int_0^{x_0} J_{\nu_{l+1}}(x) J_{\nu_l}(x) dx \quad (\text{B. 1})$$

für große Werte von x_0 ausgewertet werden. Zur Abkürzung der Bezeichnung setzen wir $\nu_l = \nu$ und $\nu_{l+1} = \mu$. Wie man sich leicht durch Einsetzen der asymptotischen Entwicklung der BESSEL-Funktionen überzeugen kann, divergiert das Integral logarithmisch. Wenn wir nun vom obigen Integral den divergenten Anteil

$$\frac{1}{\pi} \cos \frac{\mu-\nu}{2} \pi \ln x_0$$

abziehen, so können wir im verbleibenden Ausdruck die obere Grenze gegen Unendlich gehen lassen. Benützen wir noch die Integraldarstellung des Logarithmus⁴¹, so wird

$$\int_0^{x_0} J_{\mu}(x) J_{\nu}(x) dx - \frac{1}{\pi} \cos \frac{\mu-\nu}{2} \pi \ln x_0 = \int_0^{\infty} J_{\mu}(x) J_{\nu}(x) dx + \frac{1}{\pi} \cos \frac{\mu-\nu}{2} \pi \int_0^{\infty} \frac{e^{-x}-1}{x} dx; \quad (\text{B. 2})$$

⁴⁰ Die Beziehungen (A. 6) sind in ¹⁰ (s. Anm. ¹⁹) leider unrichtig wiedergegeben.

⁴¹ F. LÖSCH u. F. SCHÖBLIK, Die Fakultät. Teubner-Verlag, Leipzig 1951.

hierbei haben wir schon auf der linken Seite den Grenzübergang $x_0 \rightarrow \infty$ gemacht. Um die beiden Integrale, deren Singularitäten sich gegenseitig wegheben, getrennt auswerten zu können, ändern wir sie etwas ab. Es ist

(s. Anm. 42, 43)

$$\int_0^{\infty} \frac{e^{-x}-1}{x^{\lambda+1}} dx = \Gamma(-\lambda), \quad 0 < \lambda < 1, \quad (\text{B. 3})$$

$$\int_0^{\infty} \frac{J_{\mu}(x) J_{\nu}(x)}{x^{\lambda}} dx = \frac{\Gamma(\lambda) \Gamma\left(\frac{\nu+\mu+1-\lambda}{2}\right)}{2^{\lambda} \Gamma\left(\frac{\mu-\nu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu-\mu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu+\mu+\lambda+1}{2}\right)}, \quad -1 < \lambda < \mu+\nu+1. \quad (\text{B. 4})$$

Wenn wir diese beiden Integrale in Gl. (B. 2) einsetzen, so heben sich die beiden singulären Glieder $1/\lambda$ gegenseitig weg⁴⁴. Der danach mögliche Grenzübergang $\lambda \rightarrow 0$ liefert das endgültige Ergebnis

$$I_{\nu_l} = a_l \ln \frac{x_0}{2} + b_l, \quad (\text{B. 5})$$

wobei

$$a_l = \frac{1}{\pi} \cos \frac{\mu-\nu}{2} \pi, \quad (\text{B. 5 a})$$

$$b_l = \frac{1}{2} \sin \frac{\mu-\nu}{2} \pi - \frac{1}{\pi} \cos \frac{\mu-\nu}{2} \pi \cdot \left[2C + \psi\left(\frac{\nu+\mu+1}{2}\right) + \psi\left(\frac{\mu-\nu+1}{2}\right) \right].$$

Zur Berechnung des Integrals

$$d_l = \int_0^{\infty} J_{\mu}(x) J_{\nu}(x) \ln \left(\frac{x}{2} \right) \frac{1}{x} dx \quad \text{mit} \quad \begin{matrix} \nu \equiv \nu_l, \\ \mu = \nu_{l+2}, \end{matrix} \quad (\text{B. 6})$$

benützen wir die Produktdarstellung der BESSEL-Funktionen⁴⁶. Wenn wir diese in (B. 6) einführen, läßt sich die Integration über x ausführen⁴⁷.

$$\begin{aligned} \int \frac{S(\tilde{f}, \tilde{f}') S(\tilde{f}'', \tilde{f}'')}{\tilde{f}^2 - \tilde{f}'^2} d\tau_{\tilde{f}'} = & - \frac{1}{(2\pi)^2} \beta^2 k_F^2 \int_{k_0''=0}^{\infty} \int_{\varphi'=0}^{2\pi} \frac{k_0 \sin \varphi - k_0'' \sin \varphi''}{k_0^2 + k_0''^2 - 2 k_0 k_0'' \cos(\varphi - \varphi'')} \frac{k_0 \sin \varphi' - k_0'' \sin \varphi''}{k_0^2 + k_0''^2 - 2 k_0 k_0'' \cos(\varphi' - \varphi'')} \\ & \times \frac{[1 - J_0(R\sqrt{k_0^2 + k_0''^2 - 2 k_0 k_0'' \cos(\varphi - \varphi'')})] [1 - J_0(R\sqrt{k_0^2 + k_0''^2 - 2 k_0 k_0'' \cos(\varphi' - \varphi'')})]}{k_0''^2 - k_0^2} k_0'' dk_0'' d\varphi'', \end{aligned} \quad (\text{B. 10})$$

soll unter der Annahme berechnet werden, daß $k_0 R$ sehr groß ist und daher alle Glieder der Form $J_0(k_0 R)$ bzw. $(k_0 R)^{-n}$ mit $n \geq 1$ vernachlässigt werden können. Bei der Integration können wir daher die beiden

BESSEL-Funktionen vernachlässigen, wenn nicht die beiden Wurzeln gerade Null sind. Dies ist der Fall, wenn

$$k_0'' = k_0 \cdot e^{\pm i(\varphi - \varphi'')} \quad \text{bzw.} \quad k_0'' = k_0 \cdot e^{\pm i(\varphi' - \varphi'')} \quad (\text{B. 11})$$

⁴² A. ERDÉLYI, W. MAGNUS, F. OBERHETTINGER u. F. G. TRICOMI, *Tables of Integral Transforms*, Vol. 1, 313, McGraw-Hill, New York-Toronto-London 1954.

⁴³ A. ERDÉLYI, W. MAGNUS, F. OBERHETTINGER u. F. G. TRICOMI, *Tables of Integral Transforms*, Vol. 2, S. 48, McGraw-Hill, New York-Toronto-London 1954.

⁴⁴ Um dies zu zeigen, benütze man die Funktionalgleichung der Fakultät⁴⁵

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + z\right) \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2} - z\right) = \frac{\pi}{\cos \pi z}.$$

⁴⁵ W. MAGNUS u. F. OBERHETTINGER, *Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der mathematischen Physik*, S. 1, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1948.

⁴⁶ A. ERDÉLYI, W. MAGNUS, F. OBERHETTINGER u. F. G. TRICOMI, *Higher Transcendental Functions*, Vol. 2, S. 47, McGraw-Hill, New York-Toronto-London 1953.

⁴⁷ l. c. ⁴³, S. 32.

⁴⁸ l. c. ⁴⁵, S. 212.

ist. Wir zerlegen daher die Integration über k_ϱ'' in die Bereiche

$$0 < k_\varrho'' < k_\varrho(1-\varepsilon); \quad k_\varrho(1-\varepsilon) < k_\varrho'' < k_\varrho(1+\varepsilon); \\ k_\varrho(1+\varepsilon) < k_\varrho'' < \infty.$$

Im ersten und dritten Bereich, wo wir die BESSEL-Funktionen vernachlässigen können, fällt der Integrationsweg mit der reellen k_ϱ'' -Achse zusammen. Im zweiten Bereich weichen wir dem Pol $k_\varrho'' = k_\varrho$ durch einen halbkreisförmigen Weg mit positivem Umlaufsinn aus.

Die Integrale im ersten und dritten Bereich lassen sich ohne weitere prinzipielle Schwierigkeiten ausführen. Nach einer etwas längeren Zwischenrechnung ergibt sich für ihre Summe

$$J^{(1)} + J^{(3)} = - \frac{\pi}{4 k_\varrho^2} \quad (\text{B. 12})$$

$$\cdot \{2[1 + \cos(\varphi + \varphi')] \ln 2\varepsilon - \ln[2 - 2\cos(\varphi' - \varphi)]\}.$$

Zur Berechnung des Integrals im Bereich 2, wo die BESSEL-Funktionen nicht vernachlässigt werden dürfen, führen wir eine neue dimensionslose Integrationsvariable ein

$$k_\varrho'' = k_\varrho(1 + \delta). \quad (\text{B. 13})$$

Da $\delta \leq \varepsilon$ und $\varepsilon \leq 1$ ist, können wir die Größe δ gegen die Zahl 1 vernachlässigen, jedoch nicht bei den Gliedern der Form $(\sin \varphi'' - \sin \varphi) + \delta \sin \varphi''$, da u. a. $\varphi'' = \varphi$ sein kann.

Wenn wir im Zähler nach Potenzen von δ ordnen, läßt sich das Integral $J^{(2)}$ in folgende Teilintegrale aufspalten

$$2 k_\varrho^2 J_1^{(2)} = \int_{\delta=-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{\varphi''=0}^{2\pi} \quad (\text{B. 14 a})$$

$$\frac{(\sin \varphi'' - \sin \varphi)(\sin \varphi'' - \sin \varphi') \{1 - J_0(R k_\varrho \sqrt{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)])\} \{1 - J_0(R k_\varrho \sqrt{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi')])\}}{\{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)]\} \{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi' - \varphi)]\}} d\delta d\varphi''$$

$$2 k_\varrho^2 J_2^{(2)} = \int_{\delta=-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{\varphi''=0}^{2\pi} \quad (\text{B. 14 b})$$

$$\frac{\sin \varphi'' [2 \sin \varphi'' - \sin \varphi - \sin \varphi'] \{1 - J_0(R k_\varrho \sqrt{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)])\} \{1 - J_0(R k_\varrho \sqrt{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi')])\}}{\{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)]\} \{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi' - \varphi)]\}} d\delta d\varphi''.$$

Ein weiteres Integral, das proportional zu δ ist, haben wir vernachlässigt, weil dieses beim Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ verschwindet. Das Integral $J_1^{(2)}$ ist eine gerade Funktion von δ . Durch die Substitution $z = \delta^2/\varepsilon^2$ geht daher der Integrationsweg in den Einheitskreis über. Das Integral läßt sich dann mit dem Residuensatz berechnen, wobei als singuläre Stelle nur $z=0$ auftritt. Man erhält

$$8 k_\varrho^2 J_1^{(2)} \quad (\text{B. 15})$$

$$= \pi i \int_{\varphi''=0}^{2\pi} \frac{(\sin \varphi'' - \sin \varphi)(\sin \varphi' - \sin \varphi) \{1 - J_0(R k_\varrho \sqrt{2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)])\} \{1 - J_0(R k_\varrho \sqrt{2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi')])\}}{[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)][1 - \cos(\varphi'' - \varphi')]} d\varphi''.$$

Bei der nun anschließenden Integration über φ'' brauchen wir die BESSEL-Funktionen nur dann zu berücksichtigen, wenn $\varphi'' \sim \varphi$ bzw. $\varphi'' \sim \varphi'$ ist, weil $R k_\varrho$ voraussetzungsgemäß sehr groß ist. Es liegt nahe, den Integrationsweg in folgender Weise aufzuspalten

$$0 < \varphi'' < \varphi - \gamma; \quad \varphi - \gamma < \varphi'' < \varphi + \gamma; \quad \varphi + \gamma < \varphi'' < \varphi' - \gamma; \quad \varphi' - \gamma < \varphi'' < \varphi' + \gamma; \quad \varphi' + \gamma < \varphi < 2\pi,$$

wobei γ eine sehr kleine Größe ist und in den wenig veränderlichen Größen gleich Null gesetzt werden kann. Das Integral für den Bereich 2 wird dann

$$\pi i \frac{\sin \varphi - \sin \varphi'}{1 - \cos(\varphi - \varphi')} \int_{\varphi''=\varphi-\gamma}^{\varphi+\gamma} \frac{\sin \varphi'' - \sin \varphi}{1 - \cos(\varphi'' - \varphi)} [1 - J_0(R k_\varrho \sqrt{2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)])}] d\varphi''$$

Da der Integrand beschränkt bleibt, verschwindet sowohl dieses Integral als auch das vom Bereich 4 herrührende Integral beim Grenzübergang $\gamma \rightarrow 0$. Die übrigen drei Integrale lassen sich dann durch den Hauptwert von folgendem Integral darstellen

$$8 k_\varrho^2 J_1^{(2)} = \pi i \int_{\varphi''=0}^{2\pi} \frac{(\sin \varphi'' - \sin \varphi)(\sin \varphi'' - \sin \varphi')}{[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)][1 - \cos(\varphi'' - \varphi')]} d\varphi''. \quad (\text{B. 16})$$

Die Auswertung des obigen Integrals erfolgt am besten mit dem Residuensatz und liefert

$$J_1^{(2)} = -i \frac{\pi^2}{4 k_\rho^2} \cos(\varphi + \varphi'). \quad (\text{B. 17})$$

Wie man sich leicht überzeugen kann, konvergiert das Integral $J_2^{(2)}$ auch an der Stelle $\delta=0$. Wir können daher bei der Integration über δ einen Weg längs der reellen Achse benützen. Wie bei der Berechnung des Integrals $J_1^{(2)}$ zerlegen wir den Integrationsweg über φ'' in die dort angegebenen fünf Bereiche, wobei wieder im ersten, dritten und fünften Bereich die BESSEL-Funktionen vernachlässigt werden können. Das erste Integral besitzt die Form

$$\int_{\delta=-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{\varphi''=0}^{\varphi-\gamma} \frac{\sin \varphi'' (2 \sin \varphi'' - \sin \varphi - \sin \varphi')}{\{2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi)] + \delta^2\} \{2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi')] + \delta^2\}} d\delta d\varphi''.$$

Wählen wir nun die Grenze γ so, daß $\delta < \gamma$ ist, dann können wir im Nenner die Glieder mit δ^2 vernachlässigen. Die Integration über δ liefert dann ein Glied proportional zu ε , was beim Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ verschwindet. Zum Integral $J_2^{(2)}$ kommen also nur Beiträge vom zweiten und vierten Bereich.

Bei der Berechnung des Beitrages vom zweiten Bereich $J_{2,2}^{(2)}$ nehmen wir nun weiter an, daß $|\varphi' - \varphi| > \gamma$ ist, was immer der Fall sein wird. Dies hat zur Folge, daß die BESSEL-Funktion $J_0[R k_\rho \sqrt{2 - 2 \cos(\varphi'' - \varphi') + \delta^2}]$ vernachlässigt werden kann. Da $|\varphi'' - \varphi| \ll 1$ ist, erhalten wir

$$2 k_\rho^2 J_{2,2}^{(2)} = \int_{\delta=-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{\varphi''=\varphi-\gamma}^{\varphi+\gamma} \frac{\sin \varphi'' [2 \sin \varphi'' - \sin \varphi - \sin \varphi'] \{1 - J_0[R k_\rho \sqrt{\delta^2 + (\varphi'' - \varphi)^2}]\}}{[\delta^2 + (\varphi - \varphi'')^2] \{\delta^2 + 2[1 - \cos(\varphi'' - \varphi')]\}} d\varphi'' d\delta. \quad (\text{B. 18})$$

Mit der Substitution $x = R k_\rho (\varphi'' - \varphi)$, (B. 19 a)

$$y = R k_\rho \delta, \quad (\text{B. 19 b})$$

geht (B. 18) über in
$$2 k_\rho^2 J_{2,2}^{(2)} = \frac{\sin \varphi (\sin \varphi - \sin \varphi')}{2[1 - \cos(\varphi - \varphi')]} \int_{-R k_\rho \varepsilon}^{R k_\rho \varepsilon} \int_{-R k_\rho \gamma}^{R k_\rho \gamma} \frac{1 - J_0(\sqrt{x^2 + y^2})}{x^2 + y^2} dx dy, \quad (\text{B. 19 c})$$

wenn wir Glieder der Form $x/R k_\rho$ und $y/R k_\rho$ vernachlässigen. Das Integral $J_{2,2}^{(2)}$ bekommen wir in gleicher Weise, wenn wir nur φ und φ' miteinander vertauschen. Es wird deshalb

$$J_2^{(2)} = \frac{1}{4 k_\rho^2} [1 + \cos(\varphi + \varphi')] \int_{-k_\rho R \varepsilon}^{k_\rho R \varepsilon} \int_{-k_\rho R \gamma}^{k_\rho R \gamma} \frac{1 - J_0(\sqrt{x^2 + y^2})}{x^2 + y^2} dx dy. \quad (\text{B. 20})$$

Von der Größe $\gamma k_\rho R$ wissen wir nur, daß $J_0(\gamma k_\rho R) \sim 0$ und $\gamma > \varepsilon$ sein muß. Da diese Größe sonst nirgends mehr vorkommt, lassen wir $\gamma k_\rho R \rightarrow \infty$ gehen. Das Integrationsgebiet von dem Doppelintegral (B. 19 c) geht dann in einen Streifen der Breite $2 k_\rho R \varepsilon$ über, der von $-\infty$ bis $+\infty$ reicht. Durch Einführen von Polarkoordinaten läßt sich dann die Integration über die Winkelabhängigkeit sofort ausführen und ergibt

$$J_2^{(2)} = \frac{1}{4 k_\rho^2} [1 + \cos(\varphi + \varphi')] \left\{ 2\pi \int_0^{\varepsilon k_\rho R} \frac{1 - J_0(\varrho)}{\varrho} d\varrho + 4 \int_{\varepsilon k_\rho R}^{\infty} \frac{1}{\varrho} \arcsin \frac{R k_\rho \varepsilon}{\varrho} d\varrho \right\}, \quad (\text{B. 21})$$

wenn wir im zweiten Integral das Glied $J_0(\varrho)$ vernachlässigen, weil dort $\varrho > \varepsilon k_\rho R \gg 1$ ist.

Das zweite Integral ist tabelliert⁴⁹.

$$\int_{\varepsilon k_\rho R}^{\infty} \frac{1}{\varrho} \arcsin \frac{R k_\rho \varepsilon}{\varrho} d\varrho = \int_0^1 \frac{1}{x} \arcsin x dx = \frac{\pi}{2} \log 2. \quad (\text{B. 22})$$

Zur Berechnung des ersten Integrals benützen wir dieselbe Methode wie im Anhang B. 1. Zunächst sieht man sofort, daß das Integral logarithmisch von der oberen Grenze abhängig ist. Wenn wir nun vom ersten Integral den divergenten Bestandteil $\ln \varepsilon k_\rho R$ abziehen, können wir im verbleibenden Ausdruck die obere Grenze gegen unendlich gehen lassen. Benützen wir wieder die Integraldarstellung, des Logarithmus, so wird

$$\int_0^{\varepsilon k_\rho R} \frac{1 - J_0(\varrho)}{\varrho} d\varrho = \ln(\varepsilon k_\rho R) + \int_0^{\infty} \frac{e^{-\varrho} - J_0(\varrho)}{\varrho} d\varrho, \quad (\text{B. 23})$$

⁴⁹ W. GRÖBNER u. N. HOFREITER, Integraltafel, II, S. 153, Springer-Verlag, Wien-Innsbruck 1957.

hierbei haben wir schon auf der linken Seite den Grenzübergang $\varepsilon k_\rho R \rightarrow \infty$ gemacht. Um die beiden Integrale, deren Singularitäten sich gegenseitig wegheben, getrennt auswerten zu können, ändern wir sie etwas ab. Es ist ^{50, 51}

$$\int_0^\infty \frac{e^{-\varrho}}{\varrho^{1-\lambda}} d\varrho = \Gamma(\lambda) = \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\lambda}, \quad \lambda > 0, \quad (\text{B. 24})$$

$$\int_0^\infty \frac{J_\lambda(\varrho)}{\varrho} d\varrho = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}\lambda)}{\Gamma(\frac{1}{2}\lambda+1)} = \frac{1}{\lambda}, \quad \lambda > 0, \quad (\text{B. 25})$$

Wenn wir diese beiden Integrale in Gl. (B. 23) einsetzen, so heben sich die beiden singulären Glieder $1/\lambda$ gegenseitig weg. Der danach mögliche Grenzübergang $\lambda \rightarrow 0$ liefert

$$J_2^{(2)} = -\frac{\pi}{2k_\rho^2} [1 + \cos(\varphi + \varphi')] \ln \frac{2\varepsilon k_\rho R}{\gamma_0}. \quad (\text{B. 26})$$

Anhang C

Einige bei der Lösung der Transportgleichung auftretende Integrale

1. Bei der Integration über k_z treten die beiden Integrale

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^n [\ln(1-x^2)]^2 dx \quad \text{mit } n=0 \text{ und } n=1$$

auf. Durch partielle Integration läßt sich das Integral mit $n=1$ auf das Integral mit $n=0$ zurückführen ⁵².

Wenn man in dem noch zu berechnenden Integral den logarithmischen Ausdruck in folgender Weise aufspaltet,

$$\int_{-1}^1 [\ln(1-x^2)]^2 dx = \int_{-1}^1 \ln^2(1-x) dx + 2 \int_{-1}^1 \ln(1+x) \ln(1-x) dx + \int_{-1}^1 \ln^2(1+x) dx, \quad (\text{C. 1})$$

lassen sich das erste und dritte Integral sofort berechnen. Im verbleibenden Integral entwickeln wir noch $\ln(1+x)$ nach Potenzen von $(1-x)$ und können dann die Integration gliedweise ausführen ⁵³.

$$\int_{-1}^1 \ln(1-x) \ln(1+x) dx = -2 \ln 2 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2^l} \frac{1}{l} \frac{1}{(l+1)^2}. \quad (\text{C. 2})$$

Die hierbei auftretende unendliche Summe läßt sich durch Partialbruchzerlegung mit Hilfe der Summendarstellungen ⁵⁴

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2^l} \frac{1}{l} = \ln 2, \quad (\text{C. 3 a}) \quad \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2^l} \frac{1}{l^2} = \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \ln^2 2 \quad (\text{C. 3 b})$$

in geschlossener Form ausdrücken. Nach Zusammenfassung erhalten wir schließlich

$$\int_{-1}^1 \ln^2 \frac{1-x^2}{4} dx = 8 \left(2 - \frac{\pi^2}{12} \right), \quad \int_{-1}^1 (1-x^2) \ln^2 \frac{1-x^2}{4} dx = \frac{4}{9} \left(\frac{56}{3} - \pi^2 \right). \quad (\text{C. 4, 5})$$

2. Bei der Integration des Ausdrucks $\sum_{\beta^2 \beta'^2}^m m'$ treten Integrale der Form $\int_{-1+\varepsilon}^{1-\varepsilon} \frac{\ln^m(1-x^2)}{1-x^2} dx$ mit $m=0, 1, 2$

auf, wobei die Größe ε zur Vermeidung von Divergenzen eingeführt wurde. Diese divergenten Anteile können wir in folgender Weise erhalten:

⁵¹ l. c. ⁴³, S. 22.

⁵⁰ l. c. ⁴², S. 137.

⁵² $\int_{-1}^1 (1-x^2) [\ln(1-x^2)]^2 dx = \frac{3}{8} \int_{-1}^1 [\ln(1-x^2)]^2 dx + \frac{1}{9} \ln 2 - \frac{6}{7}$

⁵³ W. MEYER ZUR CAPELLEN, Integraltafeln, S. 230, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1950.

⁵⁴ l. c. ²², S. 9.

$$\int_{-1+\varepsilon}^{1-\varepsilon} \frac{\ln^m(1-x^2)}{1-x^2} dx = 2 \int_0^{1-\varepsilon} \frac{\ln^m(1-x^2)}{1+x} dx + 2 \int_0^{1-\varepsilon} x \frac{\ln^m(1-x^2)}{1-x^2} dx = 2 \int_0^1 \frac{\ln^m(1-x^2)}{1+x} dx - \frac{1}{m+1} \ln^{m+1}(2\varepsilon). \quad (\text{C. 6})$$

Dabei haben wir quadratische Glieder in ε vernachlässigt und in allen konvergenten Ausdrücken ε gleich Null gesetzt. Die Berechnung des zweiten Integrals erfolgt in ähnlicher Weise wie bei den Ausdrücken (C 4) und (C 5).

Zunächst wird wieder der logarithmische Ausdruck zerlegt. Die Integrale der Form $\int_0^1 \frac{\ln^n(1+x)}{1+x} dx$ lassen sich so fort angeben. Bei den übrigen Integralen entwickeln wir $\ln(1-x)$ nach Potenzen von $(1+x)$ und führen dann die Integration gliedweise durch. Die dabei auftretenden unendlichen Summen lassen sich noch durch folgende transzendente Ausdrücke

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^2} = \frac{\pi^2}{6}, \quad \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^3} = \zeta(3), \quad (\text{C. 7 a})$$

$$\text{mit } \zeta(3) = 1,20\,205\,690, \quad (\text{C. 7 b})$$

zusammenfassen⁵⁵. Für die gesuchten Integrale ergibt sich schließlich

$$\int_{-1+\varepsilon}^{1-\varepsilon} \frac{\ln(1-x^2)}{1-x^2} dx = -\frac{1}{2} (\ln 2\varepsilon)^2 - \frac{\pi^2}{6} + 2(\ln 2)^2, \quad (\text{C. 8})$$

$$\int_{-1+\varepsilon}^{1-\varepsilon} \frac{\ln^2(1-x^2)}{1-x^2} dx = -\frac{1}{3} (\ln 2\varepsilon)^2 - \frac{2\pi^2}{3} \ln 2 + \frac{8}{3} (\ln 2)^3 + 4\zeta(3). \quad (\text{C. 9})$$

⁵⁵ l. c. ²², S. 7, 9 und 413.

Die Temperatur- und Geschwindigkeitsabhängigkeit der Verfestigung kubisch-flächenzentrierter Metalleinkristalle*

Von ROLF BERNER

Aus dem Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart,
und dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart
(Z. Naturforschg. 15 a, 689—706 [1960]; eingegangen am 20. Mai 1960)

In der vorliegenden Arbeit wurden Kupfer-, Gold- und Aluminiumeinkristalle gleicher Orientierung im Zugversuch verformt. Hierbei wurde die Temperaturabhängigkeit — bei Kupfer außerdem die Geschwindigkeitsabhängigkeit — des Verfestigungsverhaltens dieser Metalle untersucht. Aus der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Spannung τ_{III} , die für den Beginn der Quergleitung von Schraubenversetzungen charakteristisch ist, konnte nach einem von SEEGER, BERNER und WOLF angegebenen Verfahren die Stapelfehlerenergie für Kupfer ermittelt werden. Außerdem wurde durch diese Untersuchungen nachgewiesen, daß die für die Quergleitung zugrunde gelegte Theorie mit einem einzigen thermisch aktivierten Prozeß näherungsweise beschrieben werden kann. Durch Vergleich der Temperaturabhängigkeit von τ_{III} für Aluminium und Gold mit derjenigen von Kupfer konnte ferner auch die Stapelfehlerenergie für jene Metalle bestimmt werden.

An Gold wurden die Verfestigungsuntersuchungen noch durch Gleitlinienbeobachtungen ergänzt. Im Gegensatz zu Kupfer zeigten sich hierbei bereits im Bereich II Gleitlinien sehr unterschiedlicher Stärke. Die Stufenhöhen der relativ dicksten Gleitlinien konnten mit der Latex-Kügelchen-Methode, die ausführlich beschrieben wurde, gemessen werden; diese Messungen waren im Einklang mit dem theoretisch aus τ_{III} ermittelten Wert.

1. Einleitung und Problemstellung

Bei den Untersuchungen des Verfestigungsverhaltens von Einkristallen geht man in den meisten Fällen von der Messung der sog. Verfestigungskurve im Zugversuch aus. Bei kubisch-flächenzentrierten

Metalleinkristallen zeigt eine solche Kurve im allgemeinen drei unterscheidbare Bereiche¹, deren Charakterisierung wir durch die in Abb. 1 eingezeichneten Verfestigungskenngrößen darstellen wol-

* Dissertation, TH Stuttgart 1960.