

# Allgemeine, gitterstatische Theorie der Versetzungen

Von E. FUES und F. WAHL

Aus dem Institut für theoretische und angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart  
(Z. Naturforsch. 16 a, 385–394 [1961]; eingegangen am 24. Januar 1961)

Zur klassischen, atomistischen Behandlung von Versetzungsstrukturen wird eine verallgemeinerte gitterstatische Methode formuliert, die es gestattet, die Singularitäten im Kern einer Versetzung zu beherrschen. Die Darstellung ist an kein spezielles Modell gebunden, sondern umfaßt gleichermaßen Schrauben- wie Stufenversetzung. Die Anwendung auf gewisse Modelle und die numerische Berechnung ihrer Strukturen werden nur kurz gestreift, da wir auf die schon erfolgte Berechnung einer Stufenversetzung im KCl-Kristall verweisen können<sup>1</sup>. Sieht man von Versetzungsknoten ab, dann läßt sich ohne großen Aufwand eine Erweiterung auf beliebig viele Versetzungslinien im Kristall angeben. Zum Schluß entwickeln wir noch einen leicht zu handhabenden Ausdruck zur Berechnung der Verzerrungsenergie einer Versetzung.

## Entwurf einer allgemeinen, gitterstatischen Theorie der Versetzungen

Störkonfigurationen in Kristallgittern lassen sich mit Hilfe einer linearen Elastizitätstheorie nur unvollkommen beschreiben. Die dabei auftretenden Divergenzen mathematischer Art sind nur vermeidbar durch Berücksichtigung der atomaren Struktur im Versetzungskern, d. h. im Bereich starker Abweichungen von der Idealstruktur. Dies ist zum Beispiel möglich durch eine gesonderte atomistische Berechnung der Kernkonfiguration innerhalb der vorgegebenen elastischen Lösung eines deformierten Kristalls. Bislang gingen auch die meisten Untersuchungen diesen Weg. Es erhebt sich dabei aber die Frage nach den Anschlußbedingungen zwischen den beiden verschiedenen behandelten Bereichen. Die Wechselwirkungskräfte weisen, atomistisch gesehen, eine gewisse Wirkungstiefe auf, so daß für den kontinuums-theoretischen Ansatz im Außenbereich nicht einfach Oberflächenkräfte eingeführt werden dürfen. Umgekehrt ist eine Entscheidung über die Größe des diskret zu behandelnden Bereichs schwer zu fällen. Nicht nur diese Einzelfragen geben den Ausschlag; wir finden weite Problemkreise, die sich trotz atomistischer Zusatzbetrachtungen zur Kontinuumstheorie nicht behandeln lassen. Es scheint uns daher nur eine grundsätzlich atomistische Theorie den Real-kristallstrukturen voll gerecht zu werden.

In diese Richtung zielt die Entwicklung der nicht-linearen, klassischen Gitterstatik, die in ihrem jetzigen Stand jedenfalls bei Ionenkristallen in der Lage ist, beliebige Störungen atomistisch zu behandeln.

<sup>1</sup> E. FUES, H. STUMPF u. F. WAHL, Z. Naturforsch. 13 a, 962 [1958]. — F. WAHL, Z. Naturforsch. 14 a, 902 [1959]. — F. WAHL, Z. Naturforsch. 15 a, 983 [1960].

Nicht nur für nulldimensionale, sondern auch für eindimensionale Störkonfigurationen läßt sie sich mit Erfolg anwenden. Die Einzeluntersuchungen von Schrauben- und Stufenversetzungen, die schon theoretisch und numerisch ausgeführt wurden<sup>1</sup>, lassen sich zusammenfassend verallgemeinern. Eine Beschränkung auf nur eine Versetzung im Kristall ist nicht notwendig. Auch eine Erweiterung für beliebig viele Versetzungen im Kristall läßt sich formulieren.

Unsere Absicht ist es, diese verallgemeinerte Theorie der Versetzungen in den Grundzügen zu entwickeln. Dabei ist es zweckmäßig, zuerst eine einzige Versetzungslinie zu betrachten. In diesem Falle bleibt die mathematische Formulierung sehr durchsichtig. In der vorliegenden Arbeit sollen dabei ausschließlich die Gesichtspunkte der theoretischen Formulierung von Versetzungsstrukturen zur Geltung kommen. Für die numerische Rechnung selbst geben wir zwar Hinweise, doch liegen schon Rechnungen für die Stufenversetzung vor, die genügend Einblick in die Verfahrensweise gewähren.

Für die nachfolgenden Untersuchungen setzen wir hier voraus, daß sich die Bindungs- und Abstoßungskräfte zwischen den Gitterbausteinen in genügend guter Näherung durch klassische Punktpotentiale zwischen Teilchenpaaren beschreiben lassen. Beides ist sicher bei Ionenkristallen der Fall. Die Einbeziehung quantenhafter Effekte ist zwar möglich, soll aber an dieser Stelle nicht weiter in Betracht gezogen werden.

## § 1. Das Ausgangssystem

Als Ausgangspunkt aller Formulierungen nehmen wir einen idealen Kristall, dessen Atome, den Ideal-gitterorten  $\mathfrak{R}_i$  entsprechend, die (dreikomponenti-



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

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

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

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

gen) Nummern  $i$  behalten sollen, auch wenn sie aus diesen durch die Verschiebungen  $\delta_i$  in die Lagen  $r_i = \mathfrak{R}_i + \delta_i$  entfernt werden. Die Wechselwirkungs Kräfte zwischen Atompaaren sind voraussetzungsgemäß Funktionen des vektoriellen Abstands der Partner, z. B. ist die Kraft, die das Atom  $m$  auf  $i$  ausübt

$$\mathbf{f}(r_{im}) = \mathbf{f}(\mathfrak{R}_m + \delta_m - \mathfrak{R}_i - \delta_i) = -\mathbf{f}(r_{mi}). \quad (1)$$

Das innere, statische Kräftegleichgewicht verlangt für das beliebige Atom  $i$ , wenn wir von Fremdeinwirkungen absehen,

$$\sum_m' \mathbf{f}(\mathfrak{R}_{im} + \delta_{im}) = 0, \quad \left( \sum_m' = \sum_{m \neq i} \right). \quad (2)$$

Da die Idealabstände  $\mathfrak{R}_{im} = \mathfrak{R}_m - \mathfrak{R}_i$  festgehalten werden sollen, sind die  $\delta_{im} = \delta_m - \delta_i$  die einzige variablen Argumente. Daher lässt sich das System (2) auch in der verkürzten Form schreiben

$$\sum_m' \mathbf{f}_{im} (\delta_m - \delta_i) = 0. \quad (3)$$

Diese Gleichungen können als nichtlineares System zur Bestimmung der Atomruhelagen  $\mathfrak{R}_i + \delta_i$  in irgendwelchen stabilen Atomanordnungen angesehen werden. Sie besitzen eine ungeheure Mannigfaltigkeit von Lösungen, nämlich außer den trivialen Lösungen für den Idealkristall  $\delta_{im} = 0$ , für die (2) zu

$$\sum_m' \mathbf{f}_{im}(0) = \sum_m' \mathbf{f}_{im}^0 = 0 \quad (4)$$

degeneriert, eine Fülle nichttrivialer Lösungen für alle stabilen Kristallkonfigurationen mit Gitterstörungen. Die mathematische Behandlung dieses nichtlinearen Gleichungssystems stößt zunächst auf unüberwindliche Schwierigkeiten. Die unmittelbare Linearisierung durch TAYLOR-Entwicklung der Funktionen  $\mathbf{f}_{im}$  an den Stellen  $\mathfrak{R}_{im}$  führt lediglich auf die triviale Lösung. Erst nach einer, dem besonderen Zweck angepaßten, mathematischen Vorbehandlung gelingt eine Entwicklung, welche die Nichtlinearitäten auf eng begrenzte Kristallbereiche einschränkt und im übrigen ein lineares Gleichungssystem stehen lässt, das in vorzüglicher Näherung eine ganz bestimmte Lösung aus der Lösungsmannigfaltigkeit unseres nichtlinearen Systems (3) ausblendet. Der Leitgedanke dabei ist, daß die Gitterstörungen nur innerhalb ganz bestimmter, ausgezeichneter Bereiche große Abweichungen  $\delta_m - \delta_i$  von den Idealabständen und entsprechend stark veränderte Kräfte aufweisen, daß dagegen im ganzen übrigen Gitter lediglich schwache Deformationen mit kleinen  $|\delta_m - \delta_i| / |\mathfrak{R}_m - \mathfrak{R}_i|$

bestehen. Im ganzen Gitter außerhalb der eigentlichen Störungsbereiche muß es daher möglich sein, die Funktion (1) zu linearisieren, indem man an den Stellen  $\mathfrak{R}_m - \mathfrak{R}_i$  der idealen Relativabstände nach den Auslenkungen  $\delta_m - \delta_i$  entwickelt

$$\mathbf{f}_{im} (\delta_m - \delta_i) = \mathbf{f}_{im}^{(0)} + \nabla \mathbf{f}_{im} \cdot [\delta_m - \delta_i] + \mathbf{f}_{im}^h (\delta_m - \delta_i) \quad (5)$$

und die in  $\mathbf{f}_{im}^h$  zusammengefaßten nichtlinearen Glieder vernachlässigt. Führt man für die Tensorgrößen  $\nabla \mathbf{f}_{im} (\mathfrak{R}_m - \mathfrak{R}_i)$  die Bezeichnung  $\mathbf{A}_{im}$  ein, so schreibt sich für Stellen  $i$  im Bereich linearen Kraftgesetzes die Kraft von  $m$  auf  $i$  wie folgt:

$$\mathbf{f}_{im} = \mathbf{f}_{im}^{(0)} + \mathbf{A}_{im} [\delta_m - \delta_i]. \quad (6)$$

In den ausgezeichneten Störungsbereichen dagegen sind auch die nichtlinearen Glieder zu berücksichtigen

$$\mathbf{f}_{im} = \mathbf{f}_{im}^{(0)} + \mathbf{A}_{im} \cdot [\delta_m - \delta_i] + \mathbf{f}_{im}^h (\delta_m - \delta_i). \quad (7)$$

Welche Teile des Kristalls wir als Störungsbereiche ansehen müssen, werden wir in den folgenden Paragraphen untersuchen. Keinesfalls beschränken sich diese auf die unmittelbare Umgebung der Versetzungslinien, wie wir bald sehen werden.

Es ist zweckmäßig, schon hier darauf aufmerksam zu machen, daß die Summe (2) zwar im Prinzip stets über sämtliche Atome  $m \neq i$  zu erstrecken ist, daß aber bei allen Gittern, gleich welcher Bindungsart, nur Wechselwirkungskräfte  $\mathbf{f}_{im}$  in einer begrenzten Umgebung von  $i$  wesentlich zur Gesamtkraft beitragen. Das beruht bei nichtpolarer Bindung auf dem exponentiellen Abfall der Kräfte mit wachsender Entfernung, bei Ionenbindung auf der in allen Gitterbereichen gewahrten Ladungsneutralität, oder anders ausgedrückt: auf dem alternierenden Charakter der Summenglieder, die zwar einzeln langsam abfallen, sich aber gegenseitig rasch kompensieren.

Wie groß dieser direkte Einflußbereich ist, ist eine Genauigkeitsfrage. Bei vorgegebenen Genauigkeitsansprüchen läßt er sich im voraus angeben und muß auch für die folgenden Überlegungen spätestens bei Durchführung der numerischen Rechnung ermittelt werden.

Jenseits des effektiven Wechselwirkungsbereichs tragen also die Summenglieder in (2) praktisch nichts mehr bei, die Matrix  $\mathbf{A}_{im}$  hat daher Diagonalstreifencharakter (s. Abb. 1). Die Breite des Streifens hängt dabei von der Genauigkeit ab. Zur späteren Berechnung der Umkehrmatrix  $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$  wird



Abb. 1.

man von dieser besonderen Eigenschaft von  $A_{im}$  keinen Gebrauch machen, sie liegt jedoch der Diskussion der Modellvorstellung in § 2 zugrunde.

## § 2. Die Modellvorstellung

Der Zusammenhang zwischen den mathematischen Lösungen des Systems (2) und den möglichen stabilen Störkonfigurationen des Gitters lässt sich umkehren. Um eine nichttriviale Lösung von (2) aufzufinden, benutzen wir als leitende Vorstellung ein Modell der zugehörigen Versetzung und einen möglichen Erzeugungsvorgang für sie. Versetzungen im Gitter entstehen durch unregelmäßiges Wachstum der Kristalle – Korngrenzen enthalten angehäufte Versetzungslinien –, oder durch plastische Verformung. Wir sehen von Fragen der Kornbegrenzung als von 2-dimensionalen Gitterstörungen ab und beschränken uns vorerst, um die Probleme mehrerer Versetzungslinien sowie ihrer Verzweigungen und Verknotungen noch zu verschieben, auf die Entstehung einer Versetzungslinie im Idealkristall durch plastische Verformung. Eine solche einfache Versetzung können wir uns vorstellungsmäßig dadurch erzeugt denken, daß man durch einen von der Versetzungslinie  $\mathfrak{L}$  (und falls diese auf der Kristalloberfläche beginnt und endigt, von dort verlaufenden Spur  $\mathfrak{L}'$ ) umrandeten, flächenhaften Schnitt S die atomaren Querverbindungen löst, die Gitterbereiche zu beiden Seiten von S um den BURGERS-Vektor  $b$  gegeneinander verschiebt und sie in dieser Lage wieder atomar zusammenwachsen lässt. Damit letzteres möglich ist, müssen die Gitterbereiche beiderseits des Schnittes – abgesehen von der nächsten Umgebung der Randlinie – im verschobenen Zustand wieder aufeinander passen. Deshalb muß

1...  $b$  längs des ganzen Schnitts, also auch längs der Versetzungslinie, konstant sein nach Betrag und Richtung. (Eine Aufteilung von S in Bereiche verschiedener BURGERS-Vektoren kann stets durch Einführen mehrerer Versetzungslinien als Bereichsränder beschrieben werden.)

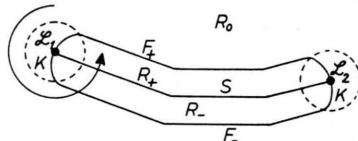
<sup>2</sup> A. SEEGER, Theorie der Gitterfehlstellen, Handbuch der Physik VII, 1, Ziff. 37, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1956.

2.  $b$  ein Gittervektor sein. (Für stabile Versetzungen kommen nur äußerst wenige Gittervektoren in Betracht <sup>2</sup>.)

3.  $b$  überall parallel zur Schnittfläche S sein, damit bei der Verschiebung auf S keine Gitterlücken oder Stauungen entstehen. Das heißt unser Schnitt S spielt die Rolle einer Gleitfläche, an der die Abgleitung der beiden Gitterbereiche auch physikalisch erfolgt sein könnte. (Daß die Gleitung nicht flächenhaft vor sich geht, sondern durch Gleiten der Versetzungslinie längs S, und daß letzteres wahrscheinlich von thermischen Energieschwankungen begünstigt und nur sukzessive in kleinsten Bereichen verläuft, braucht uns hier nicht zu kümmern.) Wir stellen uns S vor als zusammengesetzte Gleitebenenstreifen, die sich alle parallel  $b$  erstrecken, wobei für die Bereiche von  $\mathfrak{L}$  mit Stufenversetzungscharakter nur wenige Netzebenenrichtungen in Frage kommen, während bei überwiegender Schraubenversetzung die Mannigfaltigkeit der möglichen Flächen groß ist. Wenn wir  $b$  auf eine parallele Lage zum gedachten Schnitt S beschränken, so bedeutet das allerdings, daß wir ein Klettern der Versetzungslinie in ihre Endlage längs S ausschließen. In Wirklichkeit kann ein Klettern natürlich vorkommen. Doch lassen sich die nachfolgenden Rechnungen auch auf diesen Fall erweitern.

## § 3. Die Linearisierung der Kräfte längs des Hauptteils der Schnittfläche

In Abb. 2 sei senkrecht zum BURGERS-Vektor  $b$  ein Querschnitt durch den Kristall dargestellt. Die in § 2 definierte Schnittfläche erscheint dann als

Abb. 2. Querschnitt durch den Kristall senkrecht zum BURGERS-Vektor  $b$ .

stückweise gerade Linie zwischen den Durchstoßpunkten  $\mathfrak{L}_1$  und  $\mathfrak{L}_2$  der Versetzungslinie. Im Falle eines reinen Stufencharakters der Versetzung liegt die Versetzungslinie in der Papierebene und  $\mathfrak{L}_1$  bzw.  $\mathfrak{L}_2$  sind nicht mehr definiert. Andernfalls durchdringt die Versetzungslinie irgendwie schief, oder bei reiner Schraubenversetzung senkrecht, die Papierebene. Wir schreiben  $\mathfrak{L}$  eine Richtung zu [z. B. in (1) nach vorn, bei (2) nach hinten weisend] und

erhalten mit Hilfe der Rechtsschraubenregel eine Normalenrichtung der Fläche S vom negativen zum positiven Schnittufer hin. Oder auch anders ausgedrückt: Die Richtung des BURGERS-Umlaufs weist nach Festlegung der Versetzungslinienrichtung immer vom negativen zum positiven Ufer von S. Der durch diesen Umlauf definierte BURGERS-Vektor beschreibt jetzt eine Versetzung, die dadurch entsteht, daß wir das negative Ufer gegen das positive Ufer von S um  $b$  verschieben. In Abb. 2 wird daher je nach Richtungssinn des BURGERS-Vektors der obere oder der untere Gitterbereich senkrecht heraus verschoben.

Wir grenzen durch zwei im wesentlichen zu S parallelen Flächen  $F_+$  und  $F_-$  die beiden in § 1 erwähnten Wechselwirkungsbereiche  $R_+$  und  $R_-$  ab und vergegenwärtigen uns, daß in ihnen alle Gitterpunkte liegen, die mit den Partnern  $m$  auf der Gegenseite von S in Wechselwirkung stehen. Die Flächen wollen wir so führen, daß sie keine Gitterpunkte durchstoßen, so daß jeder Punkt eindeutig zu einem der nun entstandenen drei Kristallbereiche  $R_0$ ,  $R_+$  und  $R_-$  gezählt werden kann. Im übrigen sollen  $F_+$  und  $F_-$  in der Umgebung der Versetzungslinie ihren parallelen Verlauf aufgeben und in dieser münden. Punktpaare, deren Vertreter in  $R_+$  und  $R_-$  liegen, jedoch durch den Schnitt S getrennt sind, kennzeichnen wir durch  $i/m$ , während  $i/m$  bedeuten soll, daß beide Punkte auf derselben Seite des Schnitts liegen. Wir stellen fest, daß – abgesehen von der nächsten Umgebung der Versetzungslinie, auf die wir in § 4 zu sprechen kommen – längs des Hauptteils von S nach der Verformung wieder eine neue, fast ideale Gitterordnung entstanden ist. Daher gilt für Punkte

1.  $i$  in  $R_+$ :  $\hat{s}_{im}$  klein, aber  $\hat{s}_{i/m} = \hat{s}_m - \hat{s}_i = b + \hat{s}'_{i/m}$ , wobei  $\hat{s}'_{i/m}$  eine kleine Zusatzauslenkung bedeutet. Dagegen für

2.  $i$  in  $R_-$ :  $\hat{s}_{im}$  klein, aber  $\hat{s}_{i/m} = \hat{s}_m - \hat{s}_i = -b + \hat{s}'_{i/m}$  wiederum mit kleinem  $\hat{s}'_{i/m}$

3. Für  $i$  in  $R_0$  bleibt stets  $\hat{s}_{im}$  innerhalb des Wechselwirkungsbereiches klein, gleichgültig, in welchem der drei Bereiche  $m$  liegt.

Will man die Wechselwirkungs Kräfte der Punktpaare  $i/m$ , also der durch S getrennten Paare, linearisieren, so hat man nicht nach Potenzen von  $\hat{s}_{i/m}$ , sondern von  $\hat{s}'_{i/m} = \hat{s}_{i/m} \pm b$  zu entwickeln. Dann aber

<sup>3</sup> Der Einfachheit halber schreiben wir für das Indextripel der ganzzahligen Koeffizienten  $a_1, a_2, a_3$ , die den BURGERS-

sind die Entwicklungsstellen nicht mehr die alten Idealabstände  $\hat{R}_{im}$ , von denen wir ursprünglich ausgingen waren, sondern die neuen, verschobenen Abstände  $\hat{R}_{im} \pm b$ , die auf Grund der Kleinheit unserer Variablen  $\hat{s}_{i/m}$  folgende Entwicklung zulassen

$$\hat{k}_{i/m} (\pm b + \hat{s}'_{i/m}) = \hat{k} (\hat{R}_{im} - \hat{R}_i \pm b + \hat{s}'_{i/m}) \quad (8)$$

$$= \hat{k} (\hat{R}_{im} \pm b) + \nabla \hat{k} (\hat{R}_{im} \pm b) \cdot \hat{s}'_{i/m} + \dots$$

Berücksichtigt man, daß ganz allgemein die Beziehung<sup>3</sup>

$$\hat{k}_{i/m} (\pm b + \hat{s}'_{i/m}) = \hat{k}_{i,m \pm b} (\hat{s}'_{i/m}) \quad (9)$$

gilt, die wir aus der Translation der Entwicklungsorte in den Kräften ableiten können:

$$\hat{k} (\hat{R}_{im} \pm b + \hat{s}'_{i/m}) = \hat{k} (\hat{R}_{i,m \pm b} + \hat{s}'_{i/m}), \quad (10)$$

so entsteht zunächst aus (8)

$$\hat{k}_{i/m} (\hat{s}_{i/m}) = \hat{k}_{i,m \pm b} (\hat{s}'_{i/m}) = \hat{k}_{i,m \pm b}^{(0)} + \mathbf{A}_{i,m \pm b} \cdot \hat{s}'_{i/m} + \dots : \quad (11)$$

Da voraussetzungsgemäß  $\hat{s}'_{i/m}$  klein bleibt, brauchen wir die höheren Glieder in (11) nicht zu berücksichtigen.

Durch Addition von Identitäten können wir Gl. (11) so umformen, daß sie mit dem Ausdruck (6) in den beiden ersten Gliedern übereinstimmt. Führen wir für  $\hat{s}'_{i/m}$  wieder die ursprüngliche Variable  $\hat{s}_{i/m}$  ein, so ergibt sich für (11)

$$\begin{aligned} \hat{k}_{i/m} (\hat{s}_{i/m}) &= \hat{k}_{im}^{(0)} + \mathbf{A}_{im} \cdot \hat{s}_{im} \mp \mathbf{A}_{i,m \pm b} \cdot b \\ &\quad + (\hat{k}_{i,m \pm b}^{(0)} - \hat{k}_{im}^{(0)}) + (\mathbf{A}_{i,m \pm b} - \mathbf{A}_{im}) \cdot \hat{s}_{im}. \end{aligned} \quad (12)$$

#### § 4. Abgrenzung des Versetzungskerns

Es ist einleuchtend, daß nach der in § 2 beschriebenen Verformung nur im „Hauptteil“ von S eine neue, nahezu ideale Gitterstruktur wiederhergestellt sein kann, daß dagegen in der Umgebung von  $\mathcal{L}$  starke Abweichungen von einer Idealordnung bleiben müssen. Wir grenzen deshalb um  $\mathcal{L}$  einen röhrenförmigen Bereich, den Versetzungskern, ab, in welchem die Verschiebungsdifferenzen  $\hat{s}_m - \hat{s}_i$  auf keine Weise klein gehalten werden können und daher der volle Ausdruck (7) für die Kräfte benutzt werden muß. Die Größe des Versetzungskerns ist geradezu dadurch bestimmt, daß innerhalb seines Querschnitts nur Punkte  $i$  liegen dürfen, für die (mindestens einem  $m$  gegenüber) im Rahmen der

Vektor  $\sum_i a_i d_i e_i$  bestimmen, auch deutsches  $b$ .  $d_i$  sind die Gitterkonstanten.

erstrebten Genauigkeit nichtlineare Kraftglieder in die Rechnung einbezogen werden müssen. Diese Festsetzung zieht sofort die Folgerung nach sich, daß alle außerhalb des Kerns gelegenen Atome  $i$  mit ihren in Betracht kommenden Partnern nur durch solche Wechselwirkungskräfte verbunden sind, welche eine lineare Darstellung, sei es (6) oder (12) erlauben. Wie man sieht, ist der Versetzungskern nicht schon vor der Rechnung eindeutig definierbar, sondern ergibt sich erst im Zusammenhang mit den einzelnen Iterationsschritten, die wir zur endgültigen Ermittlung der Versetzungskonfiguration später durchführen müssen, und zwar so, daß jeweils vor Ausführung des nächsten Schrittes eine Entscheidung über die Ausdehnung des Versetzungskerns getroffen werden muß.

Nun reichen, wie Abb. 2 andeutet, der Schnitt  $S$  und die Räume  $R_+$  und  $R_-$  bis in den Versetzungskern hinein. Es könnte daher für einzelne Paare  $i/m$  innerhalb des Kerns zweckmäßig sein, auf die Darstellung des § 3 zurückzugreifen. Dies wird sich insbesondere dann empfehlen, wenn sich zum Zwecke einer ersten Näherung auch für Punktpaare innerhalb des Kerns eine Linearisierung rechtfertigen läßt. Im allgemeinen wird man aber für die Wechselwirkung innerhalb des Kerns wirklich nichtlineare Kräfte ansetzen und diese, wie in § 5 angedeutet, durch Iteration lösen müssen. In diesem Fall ist es aber gleichgültig, ob man die ursprüngliche Form (7) oder die transformierte Form (12), die wir noch durch das Glied  $\mathbf{f}_{i,m \pm b}^h (\hat{s}_m \mp b)$  zu ergänzen haben, wählt. Andererseits stehen viele Atome des Versetzungskerns noch mit Punkten  $m$  außerhalb von  $K$  in Wechselwirkung und dabei wird es, wenn es sich um zweiseitige Paare  $i/m$  handelt, notwendig sein, von der Darstellung (12) Gebrauch zu machen.

## § 5. Die Gleichgewichtsbedingungen eines gestörten Kristallgitters und ihre iterative Auflösung

Wollen wir jetzt die Gleichgewichtsbedingungen (2) für den Kristall mit Versetzung anschreiben, so müssen wir die Wechselwirkungskräfte der einzelnen Punktpaare in folgender Form verwenden:

1. Für Punkte  $i$  im Versetzungskern nach (7)

$$\mathbf{f}_{im} = \mathbf{f}_{im}^{(0)} + \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] + \mathbf{f}_{im}^h.$$

2. Für Punkte  $i$  in  $R_+$  nach (6) oder (12) entweder

$\mathbf{f}_{im} = \mathbf{f}_{im}^{(0)} + \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i]$  wenn  $m$  in  $R_0$  oder  $R_+$  liegt,  
oder

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{im} = \mathbf{f}_{im}^{(0)} + \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] &+ \{(\mathbf{f}_{i,m+b}^{(0)} - \mathbf{f}_{im}^{(0)}) \\ &+ (\mathbf{A}_{i,m+b} - \mathbf{A}_{im}) \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] - \mathbf{A}_{i,m+b} \cdot b\} \\ &\quad \text{wenn } m \text{ in } R_- \text{ liegt.} \end{aligned}$$

Für  $i$  in  $R_-$ ,  $m$  in  $R_0$  und  $R_+$ , gilt ein ähnliches Formelpaar. Wir erhalten es aus dem angeschriebenen durch Änderung des Vorzeichens von  $b$  in  $-b$ . Schließlich gilt

3. Für Punkte  $i$  in  $R_0$  und  $m$  beliebig nach (6)

$$\mathbf{f}_{im} = \mathbf{f}_{im}^{(0)} + \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i]$$

Das Gittergleichungssystem (2) läßt sich nun nicht mehr ohne Fallunterscheidungen in geschlossener Form anschreiben. Wir sind gezwungen, an den Summen die Lage der Punktpaare anzugeben, über die summiert werden soll. Da es vom formalen Standpunkt aus wesentlich einfacher ist, auch den Kernbereich in die drei Bereiche  $R_0$ ,  $R_+$  und  $R_-$  mit einzubeziehen, verzichten wir auf die Darstellung (7) und greifen auf die am Schluß von § 4 erwähnte Darstellung zurück. Dann haben wir nur noch drei Teile des Gleichungssystems zu unterscheiden, die wir im folgenden ausführlich anschreiben wollen. Offensichtlich verschwindet bei der Summation das erste Glied  $\sum_m' \mathbf{f}_{im}^{(0)}$  völlig. Wir haben dann:

1. Für  $i$  in  $R_0$

$$0 = \sum_m' \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] + \sum_{m'}' \mathbf{f}_{im}^h \left( \sum_i' \delta_{i',i} \right). \quad (13 \text{ a})$$

2. Für  $i$  in  $R_+$

$$\begin{aligned} 0 = \sum_m' \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] &+ \sum_{m \in R_+}' \{(\mathbf{f}_{i,m+b}^{(0)} - \mathbf{f}_{im}^{(0)}) \\ &+ (\mathbf{A}_{i,m+b} - \mathbf{A}_{im}) \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] - \mathbf{A}_{i,m+b} \cdot b\} \\ &+ \left\{ \left( \sum_{m' \in R_0} + \sum_{m' \in R_+} \right) \mathbf{f}_{im}^h (\hat{s}_m - \hat{s}_i) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m' \in R_-}' \mathbf{f}_{i,m+b}^h (\hat{s}_m - \hat{s}_i - b) \right\} \left( \sum_i' \delta_{i',i} \right). \quad (13 \text{ b}) \end{aligned}$$

3. Für  $i$  in  $R_-$

$$\begin{aligned} 0 = \sum_m' \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] &+ \sum_{m \in R_-}' \{(\mathbf{f}_{i,m-b}^{(0)} - \mathbf{f}_{im}^{(0)}) \\ &+ (\mathbf{A}_{i,m-b} - \mathbf{A}_{im}) \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] + \mathbf{A}_{i,m+b} \cdot b\} \\ &+ \left\{ \left( \sum_{m' \in R_0} + \sum_{m' \in R_-} \right) \mathbf{f}_{im}^h (\hat{s}_i - \hat{s}_m) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m' \in R_+}' \mathbf{f}_{i,m-b}^h (\hat{s}_m - \hat{s}_i + b) \right\} \left( \sum_i' \delta_{i',i} \right). \quad (13 \text{ c}) \end{aligned}$$

Alle gestrichenen Größen  $i'$  und  $m'$  sind dabei nur über den Kern zu erstrecken. Das Symbol  $\sum_{i'} \delta_{i', i}$  bedeutet die Summe der Delta-Funktionen, die uns im System (13) gerade die Punkte  $i'$  des Kerns ausblendet. Bringen wir in (13 a) bis (13 c) das erste Glied unter Benutzung von  $A_{ii} = -\sum_{m'} A_{im'}$

auf die andere Seite, so ergibt sich schließlich

$$\sum_m A_{im} \cdot [\dot{s}_m - \dot{s}_i] = \sum_m A_{im} \cdot \dot{s}_m = \mathfrak{R}_i^S + \mathfrak{R}_i^K = \mathfrak{R}_i. \quad (14)$$

Die Kraftglieder höherer Ordnung  $-\mathfrak{R}_i^K$  im Kern und die Kraftglieder  $-\mathfrak{R}_i^S$ , die entlang des Schnitts entstehen, lassen sich leicht aus den Untersystemen von (13) ablesen. Wir wollen sie an dieser Stelle noch etwas näher betrachten. In

$$\mathfrak{R}_i^S = - \sum_{m \in \{R_-, R_+\}} \{(\mathfrak{k}_{i,m \pm b}^{(0)} - \mathfrak{k}_{im}^{(0)}) + (A_{i,m \pm b} - A_{im}) \cdot [\dot{s}_m - \dot{s}_i] \mp A_{i,m \pm b} \cdot b\} \quad (15)$$

verschwindet die erste Klammer bis auf wenige Glieder, die wir dem Kern der Versetzung zurechnen können. Genau das gleiche gilt für die mit  $\dot{s}_i$  behafteten Ausdrücke im zweiten Glied. Es verbleibt daher außerhalb des Kerns entlang des Schnitts nur noch

$$\sum_{m \in \{R_-, R_+\}} \{ (A_{i,m \pm b} - A_{im}) \cdot \dot{s}_m \mp A_{i,m \pm b} \cdot b \}. \quad (16)$$

Da aber außerhalb des Kerns die  $\dot{s}_m$  nur sehr wenig variieren, läßt sich auch die erste Klammer in (16) vernachlässigen. Es verbleibt ein konstantes Glied, das wir als eine vom andern Ufer von S herüberwirkende Kraft ansehen können, die um so größer ist, je näher  $i$  dem Schnitt liegt. Wir können sie leicht durch eine Summation über die noch im Wechselwirkungsbereich liegenden Netzebenen angeben.

Für eine reine Schraubenversetzung verschwinden übrigens die ersten beiden Glieder in (15) exakt, auch im Kern. Hat die Versetzung gemischten Charakter, so verschwinden die Beiträge des Schraubenanteils aus (15) ganz. Für die Stufenanteile gilt das eben Gesagte. Hier dürfen wir also auf die Beiträge von (15) im Kern nicht verzichten.  $\mathfrak{R}_i^K$  ist eine für die verschiedenen  $i$  im Kern sehr individuelle nicht-

lineare Funktion der  $\dot{s}_m$  in K, wodurch (14) immer noch den Charakter eines nichtlinearen Gleichungssystems für die  $\dot{s}_m$  behält. Nach einem Vorschlag von STUMPF<sup>4</sup> läßt sich jedoch die Kehrmatrix  $B = A^{-1}$  angeben und der Zusammenhang (14) umkehren in

$$\dot{s}_m = \sum_i \mathbf{B}_{mi} \cdot [\mathfrak{R}_i^K + \mathfrak{R}_i^S], \quad (17)$$

wobei für die Punkte des Kerns auch rechts noch Funktionen der  $\dot{s}_i$  aller Atome  $f$  im Kernbereich stehen. Für die Auslenkungen  $\dot{s}_i$  stellt also (17) ein in sich abgeschlossenes, nichtlineares System von Bestimmungsgleichungen dar, das gegenüber Gl. (2) nur wenig Unbekannte verknüpft, so daß man die Lösungen durch Iteration finden kann.

## § 6. Bemerkungen zur numerischen Rechnung

Zur Auflösung unseres Gleichungssystems benötigen wir die Kehrmatrix  $\mathbf{B}_{mi}$ . Ihre Aufstellung erfolgt am einfachsten mit Hilfe einer Transformation auf das Fundamentalintegral der Kontinuumstheorie und einer entsprechenden Korrektur für die Umgebung der Singularität. Diese Korrektur muß durch eine diskrete Rechnung erfolgen, die es gestattet, die Singularitäten völlig zu vermeiden und die Genauigkeit der Näherung abzuschätzen. Wir wollen hier nicht näher darauf eingehen, da die Ermittlung der Kehrmatrix schon mehrfach behandelt wurde<sup>5</sup>.

In der Wahl der Bereiche  $R_0$ ,  $R_+$  und  $R_-$  hat man noch große Freiheit. In der vorliegenden Arbeit wählten wir die „maximale“ Möglichkeit, indem wir sie in Übereinstimmung mit den Wechselwirkungsbereichen festlegten. Das ist nicht nötig. Zum Beispiel läßt sich die Begrenzungsfläche  $F_-$  so wählen, daß sie stets senkrecht zur Gleitfläche steht, d. h. so, daß ihr Normalenvektor parallel der Gleitfläche liegt. Ebenso bei  $F_+$ , die wir eventuell auch mit der Fortsetzung der Gleitfläche auf der anderen Seite der Versetzungslinie zusammenlegen können. In vielen Fällen wird es für die numerische Rechnung praktisch sein, solche Bereichseinteilung in Blöcke vorzunehmen, wie wir sie zur Berechnung einer Stufenversetzung gewählt hatten<sup>6</sup>. Andererseits ist auch das Herstellungsverfahren für eine Versetzung, wie wir es in § 2 ausgeführt hatten, nicht bindend, wenn es auch das einfachste und allgemeinste ist. Eine Stufenversetzung läßt sich zum Beispiel herstellen durch Entfernen einer Halbebene und Schließung

<sup>4</sup> E. FUES u. H. STUMPF, Z. Naturforschg. 10 a, 136 [1955].

<sup>5</sup> H. GROSS u. F. WAHL, Z. Naturforschg. 14 a, 285 [1959], sowie Anm.<sup>1, 4</sup>.

des entstandenen Schnittes. Durch eine einfache Variablentransformation kommt man sofort von der einen Darstellungsweise zur anderen, also von der in § 3 vorgeschlagenen zu derjenigen, die zur Berechnung der oben erwähnten Stufenversetzung verwendet wurde<sup>6</sup>.

Es braucht hier wohl erwähnt zu werden, daß durch die vorliegende Theorie die Verzerrungssingularitäten im Kern der Versetzung, wie sie sich durch die Kontinuumstheorie ergeben, eliminiert werden. Die charakteristischen Singularitäten, die an der Oberfläche beliebig ausgedehnter Kristalle auftreten, entstehen auch hier in gleicher Weise. Dies ist zu erwarten, da wir die Kristalloberflächen nicht in die Betrachtungen einbezogen haben.

Wir haben noch eine Bemerkung zu machen über eine Art von Singularitäten, die mit den eben erwähnten eng zusammenhängt. Faßt man bei geraden Versetzungslinien und beliebig ausgedehnten Kristallen die jeweils translationsvarianten Glieder  $\mathbf{B}_{mi} \cdot \mathfrak{B}_i$  aus (17) zusammen und summiert über sie, dann entstehen teilweise nichtkonvergierende Ausdrücke. Man beherrscht diese Schwierigkeit in einigen Fällen durch Bildung von Dipolkräften. Dies erfordert aber eine Symmetrisierung des mathematisch unsymmetrischen Systems (13), die wir dadurch erreichen, daß wir den Schnitt S in Abb. 2 auf der entgegengesetzten Seite von  $\mathfrak{L}$  führen und die beiden Gleichungssysteme dann linear kombinieren. Diejenige Singularität aber, die ihrem Wesen nach mit der Elastizitätstheoretischen Singularität an der Oberfläche des Kristalls zusammenhängt, wird auf diese Weise nicht beseitigt werden können. An dieser Stelle ausführlich darauf einzugehen, würde den Rahmen dieser Arbeit überschreiten. Wir verweisen wieder auf die Berechnung der Stufenversetzung<sup>6</sup>.

## § 7. Verallgemeinerung auf viele Versetzungen im Kristall

Mit den §§ 1 – 5 besitzen wir den Abriß einer Versetzungstheorie, die für eine einzige Versetzungslinie im Kristall allgemeine Gültigkeit beanspruchen kann. Wir haben gesehen, daß es unumgänglich notwendig ist, den Kristall in drei Bereiche aufzuteilen und die dazugehörigen Gittergleichungssysteme einzeln zu untersuchen und umzuformen. Es ist prinzipiell nicht schwierig, das ganze Verfahren auf beliebig viele Versetzungen im betrachteten Kristall auszudehnen. Allerdings ist dazu nötig, einige Schritte

in den vorgehenden Paragraphen zu systematisieren, da in dem komplexen Gebilde vieler Versetzungen die Anordnung der Bereiche R und die Vorwahl der Entwicklungsorte für unsere Kräfte nicht mehr überschaubar sind. Im folgenden müssen wir Regeln aufstellen, die solches ermöglichen. Bevor wir uns jedoch mit der Bereichseinteilung im Falle vieler Versetzungen beschäftigen, wollen wir die wesentlichen Schritte unseres Verfahrens von den erwähnten Gesichtspunkten aus betrachten und strenger fassen.

Als ersten und wichtigsten Schritt benutzen wir in § 3 (9) die Möglichkeit einer Translation der Entwicklungsorte für die Wechselwirkungskräfte  $\mathfrak{k}_{im}$ . Dieses Theorem, das wir jetzt in der allgemein gültigen Form<sup>7</sup>

$$\mathfrak{k}_{im} (\mathfrak{s}_m - \mathfrak{s}_i) = \mathfrak{k}_{i,m-w_{im}} (\mathfrak{s}_m - \mathfrak{s}_i + w_{im}) \quad (18)$$

verwenden wollen, behält auch im folgenden seine zentrale Stellung bei. Offensichtlich ist es gleichgültig, wie  $w_{im}$  gewählt wird, damit (18) erfüllt bleibt. Für unsere Zwecke ist allerdings nur die Festlegung von  $w_{im}$  als Gittervektor sinnvoll. Der Zusammenhang mit den verschiedenen BURGERS-Vektoren  $b_i$  (in § 3 konnten wir unmittelbar  $w_{im} = \pm b$  setzen) ist der Inhalt der Ausführungen im folgenden Paragraphen.

Zuvor aber noch die Zusammenstellung und Kurzfassung der übrigen Schritte. Ganz analog zur Einteilung des Kristalls in drei Bereiche zerfällt das Gittergleichungssystem (2) in drei Untersysteme, die wir in § 5 (13) explizit angeschrieben hatten. Wir werden im folgenden stets schon das Ausgangssystem (2) nach den noch zu bestimmenden Bereichen aufspalten und vor einer Entwicklung der einzelnen Glieder jedes Teilsystems einer Translation (18) unterwerfen müssen, derart, daß außerhalb der Kernbereiche das Argument

$$\mathfrak{s}_m - \mathfrak{s}_i - w_{im} = \mathfrak{s}'_{im} \quad (19)$$

klein bleibt und sich als EntwicklungsvARIABLE eignet. Dieser leitende Gesichtspunkt wird uns dazu dienen, die  $w_{im}$  für die einzelnen Teilbereiche aus dem vorgeschriebenen Versetzungsmodell herzuleiten. Haben wir  $N$  Bereiche, und laufen  $\mu$  und  $\lambda$  von  $1, \dots, N$ , so erhält das Gittergleichungssystem (2) jetzt die Form

$$\sum_{\lambda=1}^N \sum_{m_\lambda} \mathfrak{k}_{i_\mu m - w_{im}} (\mathfrak{s}_m - \mathfrak{s}_{i_\mu} + w_{im}) = 0 \quad (20)$$

für  $\mu = 1, \dots, N$ .

<sup>6</sup> F. WAHL, Z. Naturforsch. 14 a, 902 [1959].

<sup>7</sup> Für  $w_{im}$  gilt das in Anm. <sup>3</sup> Gesagte.

Es ist zweckmäßig, den Kernbereichen im Unterschied zu § 4 keine Sonderrolle mehr einzuräumen, sondern ihre drei Teile, wie schon in (13), den benachbarten Translationsbereichen anzugliedern. Wie erwähnt, fügen sich dann auch die Kernglieder zwanglos in die formale Theorie ein, und wir können die Entwicklung von (20) jetzt allgemein anschreiben:

$$\sum_{\lambda=1}^N \left\{ \sum_{m_\lambda} \mathbf{f}_{i_\mu m - w_{im}}^{(0)} + \mathbf{A}_{i_\mu m - w_{im}} \cdot [\bar{s}_m - \bar{s}_{i_\mu} + w_{im}] \right. \\ \left. + \left[ \sum_{m_\lambda} \mathbf{f}_{i_\mu m - w_{im}}^h (\bar{s}_m - \bar{s}_{i_\mu} + w_{im}) \right] \left( \sum_i \delta_{i', i} \right) \right\} = 0, \\ (\mu = 1, \dots, N) \quad (21)$$

wobei  $i'_\mu$  und  $m'_\lambda$  nur über die Kernbereiche zu erstrecken sind. Die Auflösung des Gleichungssystems (21) fordert wie im einfachen Fall (12) die Addition von Identitäten. Wir erhalten danach das System

$$\sum_m \mathbf{A}_{i_\mu m} [\bar{s}_m - \bar{s}_{i_\mu}] = - \sum_{\lambda=1}^N \left\{ \sum_{m_\lambda} \left\{ \left( \mathbf{f}_{i_\mu m - w_{im}}^{(0)} - \mathbf{f}_{i_\mu m}^{(0)} \right) \right. \right. \\ \left. + (\mathbf{A}_{i_\mu m - w_{im}} - \mathbf{A}_{i_\mu m}) \cdot [\bar{s}_m - \bar{s}_{i_\mu}] + \mathbf{A}_{i_\mu m - w_{im}} \cdot w_{im} \right\} \\ \left. + \left\{ \sum_{m_\lambda} \mathbf{f}_{i_\mu m - w_{im}}^h (\bar{s}_m - \bar{s}_{i_\mu} + w_{im}) \right\} \left( \sum_i \delta_{i', i} \right) \right\}. \quad (22)$$

dessen Auflösung in der schon beschriebenen iterativen Form erfolgen kann.

In dieser formalen Theorie konzentriert sich jetzt die Fragestellung auf die Bestimmung der Translationsvektoren  $w_{im}$  und ihrer Geltungsbereiche. Wir lassen uns dabei vom Beispiel einer einzigen Versetzung leiten und versuchen im folgenden eine verbindliche Regel zur Bestimmung der  $w_{im}$  anzugeben.

### § 8. Bereichseinteilung und Bestimmung der Translationsvektoren

In § 3 teilten wir den Kristall, d. h. den idealen Bildkristall, von dem wir stets auszugehen haben, nach Abzug einer Zylinderumgebung um die Versetzungslinie, in drei Bereiche  $R_0$ ,  $R_+$  und  $R_-$ . Sie werden begrenzt durch die Gleitfläche  $S$  und die beiden Begrenzungsflächen  $F_+$  und  $F_-$ , die die Reichweite der Wechselwirkung zwischen den Punkten des Bereichs  $R_+$  nach  $R_-$ , bzw. umgekehrt, angaben. Eine äquivalente Aufteilung streben wir auch für den wesentlich komplizierteren Fall vieler Versetzungen im Kristall an. Die Versetzungslinien  $\mathcal{L}_i$  und die BURGERS-Vektoren  $b_i$  spannen jeweils die Gleitflächen  $S_i$  auf, die sich natürlich überschneiden und

durchdringen können. Nur wollen wir hier Versetzungsnoten ausschließen, da sie etwas schwieriger zu behandeln sind. Damit beschränken wir uns auf geschlossene, oder an der Oberfläche endende Linien, denen jeweils eine Gleitfläche zugeordnet werden kann, die wir aus eventuell mehreren Möglichkeiten auswählen und danach festhalten wollen.  $S_i$ ,  $F_+$  und  $F_-$  sind die Begrenzungsflächen der Bereiche  $R_0^i$ ,  $R_+^i$ ,  $R_-^i$  für die Versetzung  $i$ . Sie mögen in der Versetzungslinie münden, oder sich auf den freien Seiten bis zu den Oberflächen erstrecken. Ist  $M$  die Anzahl der Versetzungen, so haben wir durch die getroffenen Vereinbarungen den Bildkristall in  $3M$  sich gegenseitig überdeckende Bereiche aufgeteilt, wenn wir die Kernbereiche, die wir jetzt wieder durch Zylinderumgebungen abgrenzen müssen, ebenfalls in jeweils drei Teile aufgliedern und den benachbarten Bereichen zurechnen wollen.

Die einbeschriebenen Flächen teilen den Kristall aber auch lückenlos in  $N$  sich gegenseitig nicht überdeckende Bereiche, die wir mit den griechischen Buchstaben  $\lambda$  bzw.  $\mu$  durchnumerieren wollen, und die wir jetzt für alle weiteren Betrachtungen heranziehen müssen. Offensichtlich ist  $N$  auch die Anzahl der Teilsysteme unseres aufgespaltenen Gittergleichungssystems (20), die wir eindeutig auf die Anzahl der Bereiche  $B_i$  im geometrischen Modell abbilden und somit jedem Punkt das zugehörige  $\lambda$  begeben können.

Aus dem einfachen Fall in § 3 wissen wir, daß für ein  $i$  in  $R_-$  und ein  $m$  in  $R_+$  der Verschiebungsvektor  $w_{im} = b$ , für  $i$  in  $R_+$  und  $m$  in  $R_-$   $w_{im} = -b$  wird. Das läßt sich einfach überlegen mit Hilfe des BURGERS-Umlaufs, den wir im mathematisch positiven Sinn um die Versetzungslinie  $\mathcal{L}$  führen wollen und der Beziehung (19), in der wir kleines  $\bar{s}_{i'm}$  fordern. Für alle anderen Punktpaare  $(i, m)$  bleibt  $w_{im} = 0$ . Wir halten hier ausdrücklich fest, daß  $w_{im}$  nicht von der Lage der einzelnen Punkte in bestimmten Bereichen abhängt, sondern eine Funktion der Zuordnung von Punktpaaren ist. Oder auch anders ausgedrückt: Entscheidend ist die Zuordnung der Bereiche, in denen die beiden Punkte des Punktpaares liegen.

Wir können zur Bestimmung des Verschiebungsvektors  $w_{im}$  eine Regel ableiten, die an Hand des eben festgehaltenen Ergebnisses für den einfachen Fall sofort nachkontrolliert werden kann. Legen wir die Gleitfläche  $S$  als Doppelfläche fest und zeichnen wir einen Weg  $W$  vom Punkt  $i$  nach dem Punkt  $m$ ,

der die Versetzungslinie nicht schneiden soll, sonst aber beliebig verlaufen darf, so gilt (Abb. 3):

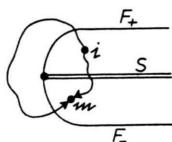


Abb. 3.

**1.** Durchstößt W eine ungerade Zahl von Flächen ( $F_+$ ,  $F_-$  einfach, S doppelt gerechnet), dann ist stets  $w_{im} = 0$ .

**2.** Bewegt sich W von  $\mathfrak{L}$  aus gesehen im Rechtschraubensinn und durchstößt eine gerade Anzahl von Flächen, dann ist  $w_{im} = +b$  oder  $w_{im} = -b$ , je nachdem ob S oder das Paar der Flächen  $F_+$  und  $F_-$  durchstoßen wird. Im umgekehrten Dreh Sinn wechseln die Vorzeichen. Mehrfache Umläufe führen immer wieder auf das gleiche Ergebnis, da sich die Werte der gegensätzlichen Paare S und  $F_+$ ,  $F_-$  aufheben.

Damit haben wir jetzt eine Regel, die sich in gleicher Weise auch auf eine größere Anzahl von Versetzungen anwenden läßt. Wir brauchen nur einen Weg vom Punkt  $i$  im Bereich  $B_\mu$  zum Punkt  $m$  im Bereich  $B_\lambda$  führen und die Durchstoßpunkte durch sämtliche Flächen  $S_i$  bzw.  $F_+^i$  und  $F_-^i$  zu markieren. Beim Durchstoßen der Doppelfläche  $S_i$  erhält unser Translationsvektor den Zuwachs  $b_i$ , beim Durchstoßen des Flächenpaares  $F_+^i$ ,  $F_-^i$  den Zuwachs  $-b_i$ , vorausgesetzt, daß wir die in Betracht stehende Versetzungslinie  $\mathfrak{L}_i$  im Rechtsschraubensinne umfahren. Wie wir sehen, gilt also für jede einzelne Versetzung, die wir auf dem Wege von  $B_\mu$  nach  $B_\lambda$  passieren, die obige Regel.  $w_{im}$  ergibt sich dann als Gesamtsumme der Werte  $\pm b_i$ , die wir bei den einzelnen Flächedurchdringungen erhalten, oder anders gesagt:  $w_{im}$  ist die Summe aller  $w_{im}^i$ , die wir nach der obigen Regel für die Versetzung  $i$  erhalten

$$w_{im} = \sum_{i \in W} w_{im}^i. \quad (23)$$

$i \in W$  an der Summe heißt, daß wir über alle diejenigen Versetzungen summieren müssen, die in mindestens einer ihrer Flächen  $S_i$ ,  $F_+^i$  oder  $F_-^i$  von W durchstoßen werden.

Daß unser Translationsvektor  $w_{im}$  für jedes

Punktpaar  $(i_\mu, m_\lambda)$  eindeutig bestimmt ist, läßt sich daran erkennen, daß die beiden Bereiche  $B_\mu$  und  $B_\lambda$  in einer jeweils genau definierten Auswahl von Überbereichen  $R_+^i$ ,  $R_-^i$  oder  $R_0^i$  eingebettet liegen. Innerhalb eines solchen Überbereichstriplets  $R_0^i$ ,  $R_+^i$ ,  $R_-^i$  ist aber auf Grund der Regel unserer Translationsvektor für ein zugeordnetes Punktpaar stets eindeutig. In (23) liegt eine reine Superposition von endlich vielen eindeutigen Operationen vor. Daher haben wir wieder Eindeutigkeit.

### § 9. Energie einer Versetzung

Störungen im idealen Aufbau eines Gitters sind stets verknüpft mit einer höheren potentiellen Energie des Gesamtkristalls. Wir wollen im Falle gittereigener Störungen die Differenz zwischen potentieller Energie eines Realkristalls und eines Idealkristalls, die beide die gleiche Anzahl Gitterbausteine besitzen, als Verzerrungsenergie bezeichnen. Die Berechnung der Verzerrungsenergie einer Versetzung ist möglich, ohne daß wir dabei das gesamte Verschiebungsfeld der Störung berücksichtigen müssen. Wir ziehen dazu die Kräfte  $\mathfrak{F}_i$  (14) heran, mit deren Hilfe wir den Beitrag des Fernfeldes zur Gesamtenergie reduzieren können. Die Verzerrungsenergie ist in entwickelter Form angeschrieben<sup>8</sup>

$$\begin{aligned} \Delta U &= \frac{1}{2} \sum'_{i, m} \{P_{im}(\hat{s}_m - \hat{s}_i) - P_{im}^0\} \\ &= \frac{1}{2} \sum'_{i, m} \left\{ \frac{1}{2} [\hat{s}_i - \hat{s}_m] \cdot \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] + P_{im}^h(\hat{s}_m - \hat{s}_i) \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Dabei ist  $P_{im}(\hat{s}_m - \hat{s}_i)$  das Wechselwirkungspotential zweier Gitterbausteine  $i$  und  $m$ ,  $P_{im}^{(0)}$  das Glied nullter Ordnung,  $P_{im}^h(\hat{s}_m - \hat{s}_i)$  die Gesamtheit der Glieder höher als zweiter Ordnung in der Entwicklung (24).

Die Kräfte  $\mathfrak{F}_i$  in (14) müssen den Bereichen  $R_+$ ,  $R_-$  und  $R_0$  entsprechend unterschieden werden. Wir wollen dem Punkt  $i$  (bzw.  $m$ ) den Index I, II oder III geben, je nachdem, ob er im Bereich  $R_+$ ,  $R_-$  oder  $R_0$  liegt. Dann läßt sich aus (14) folgende Beziehung ableiten:

$$\begin{aligned} \sum'_{i, m} \hat{s}_i \cdot \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] &= \sum_{i_I} \hat{s}_{i_I} \cdot \mathfrak{F}_{i_I} \\ &\quad + \sum_{i_{II}} \hat{s}_{i_{II}} \mathfrak{F}_{i_{II}} + \sum_{i_{III}} \hat{s}_{i_{III}} \mathfrak{F}_{i_{III}}. \end{aligned} \quad (25)$$

Die linke Seite von (25) läßt sich umordnen in folgender Weise:

$$\sum'_{i, m} \hat{s}_i \cdot \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i] = \frac{1}{2} \sum'_{i, m} [\hat{s}_i - \hat{s}_m] \cdot \mathbf{A}_{im} \cdot [\hat{s}_m - \hat{s}_i]. \quad (26)$$

<sup>8</sup> F. WAHL, Z. Naturforschg. 15 a, 616 [1960].

Damit können wir in (24) das quadratische Glied durch (25) ersetzen. Für Bereiche, die außerhalb des Versetzungskerns liegen, lassen sich „im allgemeinen“ die Glieder  $P_{im}^h (\xi_m - \xi_i)$  vernachlässigen. Wir erkennen, daß durch eine solche Ersetzung das Fernfeld eliminiert werden kann. Seine Kenntnis ist nicht erforderlich. Wir müssen jedoch eine wesentliche Einschränkung machen: In den Wechselwirkungsbereichen parallel der Gleitebene lassen sich die  $P_{im}^h$  keineswegs vernachlässigen. Erst eine Translation entsprechend § 6 führt auch hier zum Ziel. Wir wollen die Einzelschritte dazu aufzeigen.

Sehen wir einmal ab von den Gliedern im Versetzungskern selbst, so sind in der Summe (24) in jedem Falle noch die nichtlinearen Beiträge

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left\{ \sum_{i_I, m_{II}} P_{im}^h (\xi_m - \xi_i) + \sum_{i_{II}, m_I} P_{im}^h (\xi_m - \xi_i) \right\} & \quad (27) \\ = \sum_{i_I, m_{II}} P_{im}^h (\xi_m - \xi_i) \end{aligned}$$

zu berücksichtigen. Die rechte Seite von (27) kommt dadurch zustande, daß wir am zweiten Glied auf der linken Seite die Indizes vertauschen und bei Beachtung von

$$P_{mi}^h (\xi_i - \xi_m) = P_{im}^h (\xi_m - \xi_i) \quad (28)$$

dieses Glied mit dem ersten zusammenfassen.

In allen  $P_{im}^h$  von (27) sind die Argumente  $\xi_m - \xi_i$  groß, d. h. ungefähr gleich dem BURGERS-Vektor. Durch Translation der Entwicklungsorte lassen sich diese Argumente verkleinern. Das ist aber nur am ursprünglichen Potential und nicht an den höheren Gliedern ausführbar. Schreiben wir also

$$\begin{aligned} P_{im}^h (\xi_m - \xi_i) &= \left\{ P_{im} (\xi_m - \xi_i) - P_{im}^{(0)} - f_{im}^{(0)} \cdot [\xi_i - \xi_m] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} [\xi_i - \xi_m] \cdot A_{im} \cdot [\xi_m - \xi_i] \right\}, \quad (29) \end{aligned}$$

so können wir jetzt das erste Glied auf der rechten Seite von (29) der Translation unterwerfen:

$$\begin{aligned} P_{im} (\xi_m - \xi_i) &= P_{i,m+b} (\xi_m - \xi_i - b) \\ &= P_{i+b,m} (\xi_m - \xi_i + b). \end{aligned} \quad (30)$$

Entwickeln wir auch (30) und setzen wir in (29) ein, so wird (27) schließlich zu

$$\begin{aligned} \sum_{i_I} \sum_{m_{II}} P_{im}^h (\xi_m - \xi_i) &= \sum_{i_I} \sum_{m_{II}} \left\{ P_{i,m+b}^{(0)} - P_{im}^{(0)} \right. \\ &\quad \left. + (f_{i,m+b}^{(0)} - f_{im}^{(0)}) \cdot [\xi_i - \xi_m] + f_{i,m+b}^{(0)} \cdot b + \frac{1}{2} [\xi_i - \xi_m] \right. \\ &\quad \cdot (A_{i,m+b} - A_{im}) \cdot [\xi_m - \xi_i] + b \cdot A_{i,m+b} \cdot [\xi_m - \xi_i] \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} b \cdot A_{i,m+b} \cdot b + P_{i,m+b}^h (\xi_m - \xi_i - b) \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

In (31) ist sicher außerhalb des Kerns das letzte Glied vernachlässigbar.

Setzen wir weiterhin in (25) die expliziten Ausdrücke (15) ein und fassen wir mit Hilfe der Indizesvertauschung und den Beziehungen

$$f_{im}^{(0)} = -f_{mi}^{(0)}, \quad A_{im} = A_{mi} \quad (32)$$

zusammen, so erhalten wir nach Vernachlässigung der höheren Kraftglieder:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i_I} \sum_{m_{II}} \frac{1}{2} [\xi_i - \xi_m] \cdot A_{im} \cdot [\xi_m - \xi_i] & \quad (33) \\ = \frac{1}{2} \sum_{i_I} \sum_{m_{II}} \left\{ (f_{i,m}^{(0)} - f_{i,m+b}^{(0)}) \cdot [\xi_i - \xi_m] + [\xi_i - \xi_m] \right. \\ \cdot (A_{i,m} - A_{i,m+b}) \cdot [\xi_m - \xi_i] + [\xi_i - \xi_m] \cdot A_{i,m+b} \cdot b \}. \end{aligned}$$

Durch Einsetzen von (31) und (33) in (24) kommen wir schließlich zur Schlußformel für die Energieberechnung<sup>9</sup>:

$$\begin{aligned} \Delta U &= \sum_{i_I} \sum_{\substack{m_{II} \\ \# i_I \\ m_{II}}} \left\{ P_{i,m+b}^{(0)} - P_{i,m}^{(0)} + \frac{1}{2} (f_{i,m+b}^{(0)} - f_{im}^{(0)}) \cdot [\xi_m - \xi_i] \right. \\ &\quad \left. + f_{i,m+b}^{(0)} \cdot b + \frac{1}{2} b \cdot A_{i,m+b} \cdot [\xi_m - \xi_i - b] \right\} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i_I} \xi_i f_i^h (\xi_i - \xi_t) + \frac{1}{2} \sum_{i_I} P_{ti}^h (\xi_i - \xi_t). \end{aligned} \quad (34)$$

Die letzten beiden Glieder in (34) berücksichtigen die Tatsache, daß wir für den Kern der Versetzung noch nichtlineare Anteile hinzufügen müssen.

Es ist hier nicht der Ort, die einzelnen Glieder in (34) zu diskutieren. Wir wollen jedoch kurz darauf hinweisen, daß alle Glieder in der geschweiften Klammer nur in den Wechselwirkungsbereichen entlang der Gleitebene, also zwischen Bereich  $R_+$  und  $R_-$  von Null verschieden sind. Eine genauere Untersuchung<sup>10</sup> zeigt in Übereinstimmung mit der linearen Elastizitätstheorie einen logarithmischen Anstieg der Summe

$$\frac{1}{2} \sum_{i_I} \sum_{m_{II}} b \cdot A_{i,m+b} \cdot [\xi_m - \xi_i - b].$$

Die Übertragung der Energieberechnung auf beliebig viele Versetzungen im Kristall macht keine prinzipiellen Schwierigkeiten und ist nach der obigen Ausführung für den Einzelfall leicht zu überschauen.

Die Verfasser danken Herrn Prof. Dr. SEEGER und Herrn PFLEIDERER für eine kritische Durchsicht des Manuskripts.

<sup>9</sup> Die Bezeichnung  $\# f, i$  an den Summenzeichen bedeutet, daß die zu den Kernindizes  $f, i$  gehörenden Glieder nur dann weggelassen werden, wenn sich  $i$  und  $m$  beide im Kern der Versetzung befinden, also wenn  $i_I = f$ ,  $m_{II} = i$  bzw.  $i_I = I$ ,  $m_{II} = f$  ist.

<sup>10</sup> F. WAHL, Z. Naturforsch. 15 a, 983 [1960].