

Die kritische Schubspannung kubischer Kristalle mit Fehlstellen tetragonaler Symmetrie

I. Zur kurzreichenden Wechselwirkung von Versetzungen mit elastischen Dipolen *

WERNER FRANK

Institut für Physik am Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart,
und Institut für Theoretische und Angewandte Physik der Technischen Hochschule Stuttgart

(Z. Naturforschg. **22 a**, 365—376 [1967]; eingegangen am 31. Oktober 1966)

In kubischen Kristallen treten Fehlstellen mit Deformationsfeldern tetragonaler Symmetrie in starke elastische Wechselwirkungen mit den Versetzungen. In der vorliegenden Arbeit wird der Beitrag zur kritischen Schubspannung berechnet, welcher von den *kurzreichenden* Wechselwirkungskräften zwischen Versetzungen und tetragonalen Fehlstellen herrührt, die auf Gleitebenen oder in unmittelbarer Nähe von solchen liegen. Dabei wird berücksichtigt, daß beim Vorbeigleiten von Versetzungen an solchen elastischen Dipolen diese ihre Orientierungen ändern können. Ferner können gewisse Dipole, z. B. kleine scheibenförmige Ausscheidungen, von den Versetzungen durchschnitten werden.

1. Einleitung

In kubischen Kristallen sind häufig Fehlstellen eingebaut, die tetragonale Symmetrie besitzen. So enthalten die kubisch-flächenzentrierten Metalle nach Elektronenbestrahlung Zwischengitteratome in der Hantelkonfiguration^{1, 2}. In den leichten kubisch-flächenzentrierten Metallen, wie Aluminium, werden selbst durch Neutronenbestrahlung, welche bei Kupfer zur Bildung verdünnter Zonen führt^{3–6}, neben Leerstellen fast ausschließlich Zwischengitteratome erzeugt^{3, 7–9}. Die in kubisch-raumzentrierten Metallen interstitiell eingebauten Kohlenstoff-, Stickstoff- und Sauerstoffatome verzerren das Gitter tetragonal. In Alkalihalogeniden, wie NaCl und LiF, sind auf den Kation-Plätzen häufig zweiwertige Ionen, z. B. Ca²⁺-Ionen, substituiert. An diese lagern sich Leerstellen des Kationengitters an¹⁰. Solche Verunreinigungsion-Leerstellen-Komplexe stellen ebenfalls Fehlstellen tetragonaler Symmetrie dar. Ferner besitzen scheibenförmige Ausscheidungen von Leerstellen, Zwischengitteratomen oder Fremdatomen tetragonale Symmetrie.

NABARRO¹¹, COCHARDT und Mitarbeiter¹² sowie FLEISCHER¹³ haben gezeigt, daß tetragonale Fehlstellen in kubischen Gittern starke Wechselwirkungskräfte auf Versetzungen ausüben und dadurch die Fließspannung und insbesondere die kritische Schubspannung beeinflussen.

Es ist physikalisch sinnvoll und vom praktischen Standpunkt aus bequem, die Wechselwirkungskräfte zwischen Versetzungen und tetragonalen Verzerrungen (elastischen Dipolen¹⁴) in kurz- und weitreichende aufzuspalten und die Beiträge der beiden Anteile zur Fließspannung getrennt zu diskutieren.

Das Vorbeigleiten von Versetzungen an Dipolen, welche in unmittelbarer Nähe von Gleitebenen liegen, liefert infolge der kurzreichenden Dipol-Versetzungs-Wechselwirkung nach FLEISCHER¹⁵ einen Beitrag τ_A zur Fließspannung. In der vorliegenden Arbeit (Teil I) wird die FLEISCHERSche Theorie weiterentwickelt.

Die weitreichenden Wechselwirkungen bewirken nach SCHÖCK und SEEGER^{16, 17} einen induzierten SNOEK-Effekt¹⁸ der Dipole im Spannungsfeld der Versetzungen, welcher einen Beitrag τ_B zur Fließ-

* Dissertation, Teil I, Technische Hochschule, Stuttgart, 1966.

¹ J. A. BRINKMAN, L. E. DIXON u. J. C. MEECHAN, Acta Met. **2**, 38 [1954].

² A. SEEGER, Radiation Damage in Solids, Internat. Atomic Energy Agency, Vienna 1962, S. 101.

³ J. A. BRINKMAN, J. Appl. Phys. **25**, 961 [1954].

⁴ J. A. BRINKMAN, Amer. J. Phys. **24**, 246 [1956].

⁵ A. SEEGER, Proc. 2nd UN Int. Conf. PUAE **6**, 250 [1958].

⁶ A. SEEGER, Z. Naturforschg. **13 a**, 54 [1958].

⁷ A. W. McREYNOLDS, W. AUGUSTYNIAK, M. McKEOWN u. D. B. ROSENBLATT, Phys. Rev. **98**, 418 [1955].

⁸ J. DIEHL u. W. SCHILLING, Proc. 3rd UN Intern. Conf. PUAE [1964].

⁹ W. FRANK, phys. stat. sol. **18**, 459 [1966].

¹⁰ A. B. LIDIARD, Handbuch der Physik, Band **20**, Springer-Verlag, Berlin 1957, S. 246.

¹¹ F. R. N. NABARRO, Report of a Conference on the Strength of Solids, The Physical Society, London 1958, S. 38.

¹² A. COCHARDT, G. SCHÖCK u. H. WIEDERSICH, Acta Met. **3**, 533 [1955].

¹³ R. L. FLEISCHER, Acta Met. **10**, 835 [1962].

¹⁴ E. KRÖNER, Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, Ziff. 31, Springer-Verlag, Berlin 1958.

¹⁵ R. L. FLEISCHER, J. Appl. Phys. **33**, 3504 [1962].

¹⁶ G. SCHÖCK, Phys. Rev. **102**, 1458 [1956].

¹⁷ G. SCHÖCK u. A. SEEGER, Acta Met. **7**, 469 [1959].

¹⁸ J. SNOEK, Physica **8**, 711 [1941].



spannung liefert. Die SCHÖCK-SEEGERSche Theorie wird in der folgenden Arbeit in diesem Heft (Teil II) weiter ausgebaut.

2. Berechnung der elastischen Wechselwirkungsenergie zwischen Versetzungen und Fehlstellen tetragonaler Symmetrie in kubischen Gittern

Die elastische Wechselwirkungsenergie zwischen einer geradlinigen Versetzung und einem Punktfehler in einem unendlich ausgedehnten Kontinuum ist

$$W(r) = - \iiint \epsilon(r') \cdot \sigma(r - r') dV' \quad (2.1)$$

(ϵ Tensor des Deformationsfeldes des Punktfehlers; σ Tensor des Spannungsfeldes der Versetzung; r Ortsvektor vom Punktfehler zur Versetzungslinie senkrecht zu dieser; r' Ortsvektor vom Punktfehler zum Volumelement dV'). Die Integration hat über den unendlichen Raum zu erfolgen.

Zur näherungsweisen Berechnung von (2.1) im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie nimmt man an, daß $\epsilon(r')$ nur in einer kleinen Umgebung P des Punktfehlers wesentlich von Null verschieden ist und dort den konstanten Wert ϵ_P besitzt^{12, 13}. Ist r_P' der Ortsvektor vom Zentrum des Punktfehlers zu dem am weitesten davon entfernten, noch innerhalb von P liegenden Punkt, so vereinfacht sich Gl. (2.1) für $|r| \gg |r_P'|$ zu

$$W(r) \approx - \epsilon_P \cdot \iiint \sigma(r - r') dV' \quad (2.2 a)$$

$$\approx - \epsilon_P \cdot \sigma(r) \iiint_P dV'. \quad (2.2 b)$$

Mit dem Tensor

$$\lambda = \epsilon_P \cdot \iiint_P dV', \quad (2.3)$$

der nur von den Eigenschaften des Punktfehlers abhängt, läßt sich Gl. (2.2) wie folgt schreiben¹⁴:

$$W(r) \approx - \lambda \cdot \sigma(r). \quad (2.4)$$

Für einen Punktfehler mit tetragonalem Deformationsfeld ist

$$\lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Hiermit läßt sich im Fall von Schraubenversetzungen in kubischen Gittern der Ausdruck (2.4) auf die Form

$$W(r, \varphi) = - \mu b^4 \Delta \lambda F(\varphi) / r \quad (2.6)$$

bringen. $r = |r|$ und φ sind ebene Polarkoordinaten um die Versetzungslinie in der Ebene, zu welcher

die Versetzung Normale ist und welche den Punktfehler enthält. μ ist der Schubmodul, b der Betrag des BURGERS-Vektors, $F(\varphi)$ eine trigonometrische Funktion und $\Delta \lambda = \lambda_{11} - \lambda_{22}$. Bei Stufenversetzungen tritt in (2.6) noch ein zweites Glied derselben Gestalt additiv hinzu, in dem $\Delta \lambda$ durch λ_{11} ersetzt ist. Beispiele, die teilweise auf FLEISCHER¹³ und COCHARDT et al.¹² zurückgehen, sind im Anhang 1 zusammengestellt.

3. Das Fleischersche Modell^{13, 15}

Im folgenden soll das FLEISCHERSche Modell zur Berechnung von τ_A verallgemeinert werden.

Nach SCHÖCK¹⁹ ist die thermisch aufzubringende freie Enthalpie für einen Aktivierungsprozeß bei der Versetzungsbewegung durch

$$\Delta G = \Delta g - v \tau_A \quad (3.1)$$

gegeben, wobei im vorliegenden Fall

$$\Delta g = W[x_S(\tau_A)] - W[x_G(\tau_A)] \quad (3.1 a)$$

und

$$v = l b [x_S(\tau_A) - x_G(\tau_A)] \quad (3.1 b)$$

(v Aktivierungsvolumen) sind. $W(x)$ gewinnt man aus Gl. (2.6) durch Transformation von $W(r, \varphi)$ auf ein rechtwinkliges x, y -Koordinatensystem, dessen Ursprung im Punktfehler liegt, dessen $+x$ -Richtung die Bewegungsrichtung der Versetzung und dessen $+y$ -Richtung die Gleitebenenormale ist. Für y ist der Abstand bd des Punktfehlers von der Gleitebene einzusetzen. $x_G(\tau_A)$ bzw. $x_S(\tau_A)$ sind die Werte von x , welche die stabile Gleichgewichts- bzw. Sattelpunktslage der Versetzung kennzeichnen, welche beim Aktivierungsakt durchlaufen werden (vgl. ¹⁹). Sie ergeben sich aus der Bedingung

$$-\frac{dW(x)}{dx} + l b \tau_A = 0. \quad (3.2)$$

l ist die mittlere Länge der Versetzungsstücke zwischen zwei Punktfehlern, an denen die Versetzung anliegt (Aktivierungslänge). Sie hängt von der (atomaren) Dipolkonzentration c und eventuell auch von τ_A ab.

Die Abgleitgeschwindigkeit \dot{a} ist mit ΔG durch die Beziehung

$$\dot{a} = n b u = n b L \Gamma = n b L \Gamma^0 \exp(-\Delta G/kT) \quad (3.3)$$

verknüpft (n Versetzungsdichte in cm^{-2} ; u mittlere Geschwindigkeit der Versetzungen; L mittlerer Weg, der von einem Aktivierungssegment l pro Aktivierungsakt zurückgelegt wird; Γ Häufigkeit, mit der ein solches Aktivierungssegment thermisch aktiviert wird; Γ^0 „Frequenzfaktor“, welcher die Häufigkeit angibt, mit der ein Aktivierungssegment versucht, ein Hindernis zu überwinden; k BOLTZMANN-Konstante; T Verformungstemperatur). Hieraus folgt mit der Abkürzung

$$\dot{a}_0 = n b L \Gamma^0, \quad (3.4)$$

$$\Delta G = k T \ln(\dot{a}_0 / \dot{a}). \quad (3.5)$$

¹⁹ G. SCHÖCK, phys. stat. sol. **8**, 499 [1965].

Durch Einsetzen von (3.1) in (3.5) erhält man den gesuchten Zusammenhang zwischen τ_A und den bei gegebener Fehlstellenart experimentell variierbaren Größen T , \dot{a} und c .

Als Beispiel geben wir eine Näherung für τ_A für den Fall von Schraubenversetzungen in kubisch-flächenzentrierten (k.f.z.) Metallen (Gleitsysteme $\{111\}/\langle 110 \rangle$) an, welche Dipole enthalten, die sich in $\langle 100 \rangle$ -Richtungen einstellen können:

$$\tau_A = \frac{\Delta G_0}{l b^2 d} \left(1 - \sqrt{\frac{k T}{\Delta G_0} \ln(\dot{a}_0/\dot{a})} \right)^2, \quad (3.6)$$

$$\Delta G_0 = \frac{9 + \sqrt{3}}{24 \sqrt{2} \pi} \frac{\mu b^3 \Delta \lambda^*}{d} \quad (3.6 a)$$

($b d$ Abstand der wirksamen Dipole von den Gleitebenen; $\Delta \lambda^* = \Delta \lambda / \Omega$; Ω Atomvolumen). Im Anhang 2 sind die bei der Herleitung von (3.6) gemachten Näherungen beschrieben und weitere Beispiele angegeben.

4. Berechnung des „Frequenzfaktors“ I^0

Der „Frequenzfaktor“ I^0 geht über \dot{a}_0 [Gl. (3.4)] in den τ_A -Anteil der Fließspannung [Gl. (3.6)] ein. Da in der Literatur die verschiedensten Angaben über den Zahlenwert von I^0 gemacht werden, lohnt es sich, diesen abzuschätzen.

Aus Gl. (3.3) geht hervor, daß I^0 als Proportionalitätsfaktor in dem Ausdruck

$$I = I^0 \exp(-\Delta G/k T) \quad (4.1)$$

definiert ist. Gl. (4.1) kann wegen $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$ (ΔH bzw. ΔS Änderung der Enthalpie bzw. Entropie beim Übergang einer Versetzung aus der stabilen Gleichgewichts- in die Sattelpunktslage) auch als

$$I = I^0 \exp(\Delta S/k) \exp(-\Delta H/k T) \quad (4.2)$$

geschrieben werden.

Im Rahmen des Saitenmodells läßt sich die Versetzung durch einen Satz harmonischer Oszillatoren beschreiben. Nach SEEGER und SCHILLER²⁰ ist dann, falls die Versetzung am Sattelpunkt $N-1$ Schwingungsfreiheitsgrade besitzt,

$$\exp(\Delta S/k) = \exp \left\{ \frac{h}{2 k T} \sum_{i=2}^N \left[\nu_i' \coth \left(\frac{h \nu_i'}{2 k T} \right) - \nu_i \coth \left(\frac{h \nu_i}{2 k T} \right) \right] \right\} \cdot \prod_{i=2}^N \frac{\sinh(h \nu_i/2 k T)}{\sinh(h \nu_i'/2 k T)} \quad (4.3)$$

(h PLANCKSches Wirkungsquantum; ν_i bzw. ν_i' Schwingungsfrequenzen der Versetzung in der stabilen Gleichgewichtslage bzw. am Sattelpunkt).

Andererseits gilt nach VINEYARD²¹ für hohe Temperaturen

$$I^0 \exp(\Delta S/k) = \prod_{i=1}^N \nu_i / \prod_{i=2}^N \nu_i'. \quad (4.4)$$

Somit läßt sich I^0 durch Vergleich von (4.4) mit (4.3) für $T \rightarrow \infty$ ermitteln:

$$I^0 = \nu_1. \quad (4.5)$$

Um diese Aussage zu interpretieren, betrachten wir ein Versetzungsstück der Länge $2l$, das an seinen Enden fest verankert ist und das über ein zwischen diesen Ankerpunkten liegendes Hindernis durch einen thermischen Aktivierungsakt hinweggeführt werden kann. ν_1 bedeutet dann diejenige Schwingungsfrequenz des Versetzungsstücks in der stabilen Gleichgewichtslage, zu der am Sattelpunkt keine entsprechende Schwingung gehört, sondern eine translatorische Bewegung über das Hindernis hinweg. Nach GRANATO et al.²² ist ν_1 somit die zur größten Wellenlänge $4l$ gehörige Frequenz in der stabilen Gleichgewichtslage:

$$\nu_1 = q \frac{c_{\text{Schall}}}{4l} \quad (4.6)$$

(c_{Schall} Schallgeschwindigkeit im Kristall; q Zahlenfaktor, der von der Stärke der Wechselwirkung zwischen der Versetzung und dem zu überwindenden Hindernis schwach abhängt und nach²² Werte zwischen 1,78 und 2 besitzt).

Daß (4.5) auch für tiefe Temperaturen richtig bleibt, solange der Ansatz (4.1) für I gerechtfertigt ist, erkennt man daran, daß bei tiefen Temperaturen sicherlich keine höherfrequenten Schwingungen zu I^0 beitragen als bei hohen Temperaturen. Bei letzteren ist I^0 nach (4.5) aber bereits gleich der niedrigsten Frequenz ν_1 , mit der die Versetzung in der stabilen Gleichgewichtslage schwingen kann.

Mit der Beziehung $c_{\text{Schall}} = 2 b \nu_D$ (ν_D DEBYE-Frequenz) folgt aus (4.5) und (4.6)

$$I^0 = \frac{q b \nu_D}{2l} \approx \frac{b}{l} \nu_D \approx \sqrt{c_{\text{eff}}} \nu_D. \quad (4.7)$$

(Hier tritt an Stelle der wahren Konzentration c eine effektive Konzentration c_{eff} auf. Wir kommen darauf in Abschnitt 5 zurück.) Dieses Ergebnis ist deshalb von Interesse, weil danach die in τ_A eingehende Größe $\ln(\dot{a}_0/\dot{a})$ [vgl. Gl. (3.6)] nicht von der Hinderniskonzentration abhängt, solange man die Näherung $l \approx L \approx b/\sqrt{c_{\text{eff}}}$ macht. Dann ist nämlich nach (3.4) und (4.7)

$$\ln(\dot{a}_0/\dot{a}) = \ln(n b^2 \nu_D/\dot{a}). \quad (4.8)$$

5. Die effektive Dipolkonzentration c_{eff}

Die Aktivierungslänge l hängt vom mittleren Abstand A der Dipole in der Gleitebene ab. Der einfachste Ansatz ist

$$l = A. \quad (5.1)$$

²⁰ A. SEEGER u. P. SCHILLER, Physical Acoustics, Bd. III A, herausgegeben von W. P. MASON, Academic Press, New York-London 1966, S. 361.

²¹ G. H. VINEYARD, J. Phys. Chem. Sol. 3, 121 [1957].

²² A. V. GRANATO, K. LÜCKE, J. SCHLIPF u. L. J. TEUTONICO, J. Appl. Phys. 35, 2732 [1964].

Berücksichtigt man das Ausbauchen der Versetzungen zwischen den Dipolen, so hängt l von τ_A und A ab (vgl. ²³ und ²⁴). Näherungsweise gilt dann

$$l = \frac{2}{5} \sqrt[3]{\frac{12 E_L A^2}{b \tau_A}} \quad (5.2)$$

($E_L \approx \mu b^2/2$ Linienspannung der Versetzung). Da ferner

$$L l = A^2 \quad (5.3)$$

gilt, ist die Kenntnis der Größen l , L und A vermöge

$$A = b/\sqrt{c_{\text{eff}}} \quad (5.4)$$

auf die einer effektiven Konzentration c_{eff} zurückführbar, deren Ermittlung hier diskutiert werden soll.

Die durch die Bewegung der Versetzungen verursachte Umorientierung der Dipole hat zur Folge, daß sich c_{eff} und alle damit zusammenhängenden Größen während der Verformung ändern. Dies wird im folgenden durch den an die betreffenden Symbole angefügten Index i berücksichtigt. i gibt die Zahl der Aktivierungsschritte an, die pro Versetzungsstück $l^{(i)}$ bis zum betrachteten Zeitpunkt ausgeführt worden sind.

Im folgenden Ausdruck für $c_{\text{eff}}^{(i)}$ sind Größen, welche sich auf die verschiedenen möglichen Orientierungen der Dipole im Gitter beziehen, durch verschiedene k -Indizes ²⁵ unterschieden. Die verschiedenen Abstände bd , welche Dipole von den Gleitebenen haben können, werden durch d -Indizes gekennzeichnet. Die Summation über k auf der rechten Seite von

$$c_{\text{eff}}^{(i)} = \sum_d \sum_k {}^{(d)}\alpha_k {}^{(d)}c_k^{(i)} {}^{(d)}\varkappa_k^{(i)} \quad (5.5)$$

erfolgt über alle Orientierungen der Dipole, in denen Wechselwirkungen mit den Versetzungen auftreten, die Summation über d bis zu einer oberen Grenze $d = \hat{d}(k, i)$, bis zu der die zugehörige, noch zu erklärende Größe ${}^{(d)}\varkappa_k^{(i)}$ nicht verschwindet. ${}^{(d)}\alpha_k$ sind geometrische Zahlenfaktoren. Durch sie wird berücksichtigt, daß außer im Fall $d=0$ zu jedem d -Wert zwei Netzebenen parallel zur Gleitebene gehören, daß die Dipole infolge ihrer räumlichen Ausdehnung mehrere Gleitebenen blockieren können und daß die Flächendichte der Atome in den zu den

Gleitebenen parallelen Netzebenen i. allg. nicht exakt gleich b^{-2} ist, was jedoch für die Gültigkeit der Gl. (5.4) vorausgesetzt und somit korrigiert werden muß. ${}^{(d)}c_k^{(i)}$ bedeutet die atomare Konzentration an Dipolen in der Orientierung k im Abstand bd von den Gleitebenen, die nach i Aktivierungsschritten der Versetzungen im Prinzip als „Aufhängepunkte“ in Frage kommen. Die so indizierten Dipole können jedoch nur dann tatsächlich als Versetzungshindernisse wirksam werden, wenn nicht infolge der gleichzeitigen Anwesenheit stärker mit den Versetzungen wechselwirkender Dipole $\tau_A^{(i)}$ so hoch ist, daß die aktivierten Versetzungsstücke $l^{(i)}$ über sie hinwegstreichen, ohne von ihnen aufgehalten zu werden. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß (d, k, i) -Dipole für die Versetzungen nicht „durchlässig“ sind und somit die Versetzungen zum Verweilen bis zu einem thermischen Aktivierungsakt zwingen, bedeuten in Gl. (5.5) die Faktoren ${}^{(d)}\varkappa_k^{(i)}$.

6. Berechnung der Wahrscheinlichkeiten ${}^{(d)}\varkappa_k^{(i)}$

Ist ${}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}$ die Aktivierungsenthalpie, die zum Überwinden eines (d, k, i) -Dipols aufgebracht werden muß, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß an ihm eine Versetzung hängen bleibt,

$$\begin{aligned} {}^{(d)}\varkappa_k^{(i)} &= \frac{\int_0^{{}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}} \exp(-\xi/kT) d\xi}{\int_0^\infty \exp(-\xi/kT) d\xi} \\ &= 1 - \exp(-{}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}/kT). \end{aligned} \quad (6.1)$$

${}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}$ ist nach den Gln. (3.1) zu berechnen:

$$\begin{aligned} {}^{(d)}\Delta G_k^{(i)} &= {}^{(d)}\Delta g_k^{(i)} - {}^{(d)}v_k^{(i)} \tau_A^{(i)} \\ &= {}^{(d)}W_k[{}^{(d)}x_{kS}^{(i)}(\tau_A^{(i)})] - {}^{(d)}W_k[{}^{(d)}x_{kG}^{(i)}(\tau_A^{(i)})] \\ &\quad - l^{(i)} b[{}^{(d)}x_{kS}^{(i)}(\tau_A^{(i)}) - {}^{(d)}x_{kG}^{(i)}(\tau_A^{(i)})]. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Ergibt sich bei vorgegebenem $\tau_A^{(i)}$ aus Gl. (6.2) formal ${}^{(d)}\Delta G_k^{(i)} < 0$, so ist ${}^{(d)}\varkappa_k^{(i)} = 0$ zu setzen.

Nach Gl. (6.1) und (6.2) hängen die Größen ${}^{(d)}\varkappa_k^{(i)}$ von $l^{(i)}$ und damit von $c_{\text{eff}}^{(i)}$ ab. Ferner werden wir im folgenden zeigen, daß die ${}^{(d)}c_k^{(i)}$ über $L^{(i)}$ auch von $c_{\text{eff}}^{(i)}$ abhängig sind. Somit kann $c_{\text{eff}}^{(i)}$ nach Gl. (5.5) nur iterativ ermittelt werden. Wir kommen darauf am Ende von Abschnitt 7 zurück.

²³ J. FRIEDEL, Les dislocations, Gautier Villars, Paris 1956.

²⁴ R. LABUSCH, Z. Physik **167**, 452 [1962].

²⁵ k bedeutet hier nicht die BOLTZMANN-Konstante.

7. Berechnung der Konzentrationen $^{(d)}c_k^{(i)}$

7.1. Physikalische Grundlagen

Wir denken uns ein geradliniges Versetzungsstück der Länge L' ($L' \gg \Lambda^{(i)}$), dessen Lage im Kristall durch eine Koordinate $\xi^{(0)}$ beschrieben wird. Die positive Richtung von $\xi^{(0)}$ möge senkrecht zur Versetzungslinie in deren Bewegungsrichtung weisen. Vor Beginn der Verformung liege die Versetzung am Ort $\xi^{(0)} = 0$. Bei Verformungsbeginn bewege sich die Versetzung praktisch momentan bis zu den ersten Dipolen hin, die mit ihr in kurzreichende Wechselwirkung treten. (Die weitreichenden Wechselwirkungen kommen bei der in I durchgeführten Berechnung von τ_A nur indirekt ins Spiel, indem sie die Konzentrationen $^{(d)}c_k^{(i)}$ einstellen.) Dieser erste Aufenthalt der Versetzung erfolge am Ort $\xi^{(0)} = \eta^{(0)}$. Dabei wird vorausgesetzt, daß das Versetzungsstück L' während seiner Bewegung hinreichend geradlinig bleibt, damit man seine mittlere Lage stets durch die Angabe der einen Koordinate $\xi^{(0)}$ beschreiben kann. Der lokale mittlere Abstand der als Versetzungshindernisse wirksamen Dipole am Ort $\xi^{(0)} = \eta^{(0)}$ sei $\Lambda^{(1)}$; die lokale Aktivierungslänge, auf der die Versetzung zwischen den Hindernissen durchhängt, sei $l^{(1)}$. Die mittlere Verweilzeit an diesen „ersten“ Hindernissen betrage $t^{(1)}$. Nach Ablauf dieser Zeit hat sich die Versetzung durch $L'/l^{(1)}$ elementare Aktivierungsprozesse bis zu den „zweiten“ Hindernissen um das Stück $\eta^{(1)}$ weiterbewegt. An dieser Stelle $\xi^{(0)} = \eta^{(0)} + \eta^{(1)}$, wo $\Lambda = \Lambda^{(2)}$ und $l = l^{(2)}$ ist, verweilt sie bis zur Zeit $t = t^{(1)} + t^{(2)}$, um dann einen Schritt der Länge $\eta^{(2)}$ zu den „dritten“ Hindernissen hin auszuführen. Die Verallgemeinerung für den weiteren Ablauf der Versetzungsbewegung liegt auf der Hand.

7.2. Präzisierung einiger Aussagen;

Zusammenhang zwischen $t^{(i)}$ und $c_{\text{eff}}^{(i)}$

Bisher haben wir nebeneinander zweierlei Bezeichnungen für die „Schrittweite“ eines Aktivierungsaktes gebraucht, nämlich $L^{(i)}$ und $\eta^{(i)}$. Während $L^{(i)}$ die Dimension einer Länge hat, sollen die Koordinate $\xi^{(0)}$ und $\eta^{(i)}$ in Einheiten von b angegeben werden, d. h. es soll

$$\eta^{(i)} = \frac{L^{(i)}}{b} \delta^{(i)} \quad (7.1)$$

gelten. Wir haben in Gl. (7.1) einen Faktor $\delta^{(i)}$ beigefügt, der für $i \neq 0$ gleich 1 sein soll und für $i = 0$

gleich $1/2$. Durch $\delta^{(0)} = 1/2$ wird berücksichtigt, daß vor dem Anlegen einer Spannung an dem Kristall die Versetzungen nicht gegen die Hindernisse gedrückt werden, so daß die Schrittweite $L^{(0)}$ vor den ersten Aktivierungsprozessen im Mittel nur von der Hälfte der Versetzungssegmente $l^{(1)}$ durchlaufen wird.

Außerdem macht man sich leicht klar, daß die Beziehung (5.3) bei Verwendung des Index i genauer

$$L^{(i)} l^{(i)} = \Lambda^{(i)} \cdot \Lambda^{(i+1)} \quad \text{für } i \neq 0 \quad (7.2 \text{ a})$$

$$\text{und } L^{(0)} l^{(1)} = (\Lambda^{(1)})^2 \quad \text{für } i = 0 \quad (7.2 \text{ b})$$

lauten muß. Bei Verwendung der Gl. (5.1) gelten also folgende Beziehungen:

$$l^{(i)} = \Lambda^{(i)}, \quad (7.3 \text{ a})$$

$$L^{(i)} = \Lambda^{(i+1)}. \quad (7.3 \text{ b})$$

In Abschnitt 5 wurde gezeigt, daß die Größen $l^{(i)}$, $L^{(i)}$ bzw. $\eta^{(i)}$ und $\Lambda^{(i)}$ gegeben sind, sobald $c_{\text{eff}}^{(i)}$ bekannt ist. Im Laufe der Diskussion zur Berechnung der $^{(d)}c_k^{(i)}$ wurden jedoch die Verweilzeiten $t^{(i)}$ neu eingeführt. Von diesen wollen wir zeigen, daß sie ebenfalls bekannt sind, sobald man $c_{\text{eff}}^{(i)}$ kennt. Die mittlere Versetzungsgeschwindigkeit ist durch

$$u = b \dot{\xi}^{(0)} \quad (7.4)$$

$$\text{und } \dot{\xi}^{(0)} = \frac{\eta^{(0)} + \eta^{(1)}}{t^{(1)}} = \frac{\eta^{(2)}}{t^{(2)}} = \dots = \frac{\eta^{(i)}}{t^{(i)}} = \dots \quad (7.5)$$

festgelegt. Wegen Gl. (3.3) gilt deshalb

$$t^{(i)} = n b^2 \eta^{(i)} / \dot{a} \quad \text{für } i > 1 \quad (7.6 \text{ a})$$

$$\text{und } t^{(1)} = n b^2 (\eta^{(0)} + \eta^{(1)}) / \dot{a} \quad \text{für } i = 1. \quad (7.6 \text{ b})$$

Die $t^{(i)}$ hängen also tatsächlich über die $\eta^{(i)}$ im wesentlichen nur von den $c_{\text{eff}}^{(i)}$ ab.

7.3. Einführung neuer Koordinaten

Im Laufe der folgenden Rechnung ist es häufig bequem, an Stelle der Koordinate $\xi^{(0)}$ Koordinaten $\xi^{(i)}$ zu verwenden, welche mit $\xi^{(0)}$ durch

$$\xi^{(i)} = \xi^{(0)} - \sum_{j=0}^{i-1} \eta^{(j)} \quad \text{für } i \neq 0 \quad (7.7 \text{ a})$$

$$\text{und } \xi^{(i)} = \xi^{(0)} \quad \text{für } i = 0 \quad (7.7 \text{ b})$$

verknüpft sind. Der Zeitpunkt $\Theta^{(i)}$, zu dem die Versetzungen nach ihrem Start gegen die i -ten Hindernisse schnellen, läßt sich durch die Verweilzeiten $t^{(i)}$ in der Form

$$\Theta^{(i)} = \sum_{j=1}^{i-1} t^{(j)} \quad \text{für } i > 1 \quad (7.8 \text{ a})$$

$$\text{und } \Theta^{(1)} = 0 \quad (7.8 \text{ b})$$

ausdrücken.

7.4. Aufstellung eines Gleichungssystems zur Bestimmung der Größen ${}^{(d)}c_k^{(i)}$

Nach unseren obigen Vorstellungen über die Versetzungsbewegung sind die Konzentrationen ${}^{(d)}c_k^{(i)}$ mit den Bezeichnungen (7.7) und (7.8) in übersichtlicher Weise als Funktionen des Ortes der Versetzung und der zugehörigen Zeit darstellbar:

$${}^{(d)}c_k^{(i)} = {}^{(d)}c_k[\xi^{(i-1)} = \eta^{(i-1)}; t = \Theta^{(i)}]; \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (7.9)$$

Die zu einem festen Index d gehörigen q Größen ${}^{(d)}c_k^{(i)}$ für Dipole mit q Orientierungsmöglichkeiten sind durch die Lösung des folgenden Systems simultaner gewöhnlicher Differentialgleichungen zu bestimmen:

$$\frac{d({}^{(d)}c_k^{(i)})}{dt} = \sum_{l=1}^q \underset{(l \neq k)}{(-({}^{(d)}\omega_{kl}^{(i)} {}^{(d)}c_k^{(i)} + {}^{(d)}\omega_{lk}^{(i)} {}^{(d)}c_l^{(i)})}, \quad k = 1, 2, \dots, q. \quad (7.10)$$

${}^{(d)}\omega_{kl}^{(i)}$ sind die Umklapp-Frequenzen der Dipole aus den Orientierungen k in die Orientierungen l ²⁶. Sie sind nach SCHÖCK und SEEGER¹⁷ folgendermaßen zu berechnen:

$$\begin{aligned} {}^{(d)}\omega_{kl}^{(i)} &= {}^{(d)}\beta_{kl} {}^{(d)}\omega_k^{(i)} \\ &= {}^{(d)}\beta_{kl} \nu \exp[({}^{(d)}W_k(\xi^{(i-1)} = \eta^{(i-1)})/k T] \\ &= {}^{(d)}\beta_{kl} \nu_D \exp(\Delta s/k) \exp(-\Delta h/k T) \\ &\quad \cdot \exp[({}^{(d)}W_k(\xi^{(i-1)} = \eta^{(i-1)})/k T]. \end{aligned} \quad (7.11)$$

${}^{(d)}\beta_{kl}$ sind geometrische Faktoren (vgl. Anhang 1 zu II). ν ist die Umklapp-Frequenz der Dipole in großer Entfernung von Versetzungen. Δs bzw. Δh bedeutet die Entropie bzw. Enthalpie, welche bei einem solchen Umklapp-Prozeß thermisch aufgebracht werden muß.

7.5. Zur Lösung des Gleichungssystems (7.10)

Die Lösung des Gleichungssystems (7.10) ist in voller Allgemeinheit mit Hilfe des Ansatzes

$${}^{(d)}c_k^{(i)} = {}^{(d)}a_{k0}^{(i)} + \sum_{\alpha=1}^{q-1} {}^{(d)}a_{k\alpha}^{(i)} \exp({}^{(d)}K_{\alpha}^{(i)} t) \quad (7.12)$$

möglich, wobei ${}^{(d)}a_{k0}^{(i)}$ die Gleichgewichtslösungen für $t \rightarrow \infty$ bedeuten. Für den Fall $q = 3$ werden die Größen ${}^{(d)}a_{k\alpha}^{(i)}$ und ${}^{(d)}K_{\alpha}^{(i)}$ ($\alpha > 0$) im Anhang 3 angegeben. Hier soll nur der Gang der Rechnung beschrieben werden.

Für $i = 1$ ($t = 0$) haben wir eine Gleichgewichtsverteilung der Dipole über die verschiedenen Orientierungen k , also eine BOLTZMANN-Verteilung, zu erwarten:

$$\begin{aligned} {}^{(d)}c_k^{(1)} &= {}^{(d)}a_{k0}^{(1)} = \\ &= \frac{(\mu_k + 1) \exp[-({}^{(d)}W_k(\xi^{(0)} = \eta^{(0)})/k T]}{\sum_{k'=1}^q (\mu_{k'} + 1) \exp[-({}^{(d)}W_{k'}(\xi^{(0)} = \eta^{(0)})/k T]} \end{aligned} \quad (7.13)$$

(μ_k Entartungsgrad der Orientierung k). Für $i > 1$ muß die Berechnung der ${}^{(d)}c_k^{(i)}$ in i Schritten erfolgen.

Zur Beschreibung dieser und im folgenden vorkommender, ähnlicher Rechnungen gebrauchen wir die Gln. (7.10) manchmal ohne und manchmal mit den Indizes i . Ohne die i sind die ${}^{(d)}c_k$ Funktionen einer Ortsvariablen ξ und der Zeit t ; über die Identifizierung von ξ mit einer der speziellen Variablen $\xi^{(i)}$ kann noch verfügt werden. Sind dagegen die i -Indizes angefügt, so bedeuten die ${}^{(d)}c_k^{(i)}$ die durch Gl. (7.9) definierten Funktionen, bei denen $\xi \equiv \xi^{(i-1)}$ gleich $\eta^{(i-1)}$ und t gleich $\Theta^{(i)}$ gesetzt ist. Entsprechendes gilt für die in (7.10) auftretenden Frequenzen ${}^{(d)}\omega_{kl}$ bzw. ${}^{(d)}\omega_{kl}^{(i)}$. Allerdings sind diese keine Funktionen der Zeit.

Zunächst berechnet man

$${}^{(d)}c_k(\xi^{(0)} = \sum_{j=0}^{i-1} \eta^{(j)}; t = \Theta^{(1)} = 0).$$

Dies liefert eine BOLTZMANN-Verteilung, in der gegenüber (7.13) $\xi^{(0)} = \eta^{(0)}$ durch $\xi^{(0)} = \sum_{j=0}^{i-1} \eta^{(j)}$ ersetzt ist. Im zweiten Schritt löst man die Gln. (7.10) ohne i -Indizes mit dieser BOLTZMANN-Verteilung als Anfangsbedingungen zur Zeit $t = \Theta^{(1)} = 0$ für

$$\xi^{(1)} = \sum_{j=1}^{i-1} \eta^{(j)} \quad \text{und} \quad t = \Theta^{(2)}.$$

Das Ergebnis dieser Rechnung liefert die Anfangsverteilung zur Zeit $t = \Theta^{(2)}$ für den dritten Rechenschritt, in dem die Verteilung für $\xi^{(2)} = \sum_{j=2}^{i-1} \eta^{(j)}$ zur Zeit $t = \Theta^{(3)}$ ermittelt wird. Dieses Verfahren wird fortgesetzt bis zum i -ten Schritt, der

$${}^{(d)}c_k(\xi^{(i-1)} = \eta^{(i-1)}; t = \Theta^{(i)}) = {}^{(d)}c_k^{(i)}$$

liefert.

Wir wollen am Schluß dieses Abschnittes den Gang der Rechnung zur iterativen Bestimmung von $c_{\text{eff}}^{(i)}$ zusammenstellen. In nullter Näherung ist $c_{\text{eff}}^{(i)}(0) = c$ für alle i . Gl. (5.4) liefert $\mathcal{A}^{(i)}(0)$;

²⁶ Eine Verwechslung mit der Aktivierungslänge ist wohl nicht zu befürchten.

die Gln. (7.3) ergeben $l^{(i)}(0)$ und $L^{(i)}(0)$. Aus dem Gleichungssystem (7.10) lassen sich damit in erster Näherung die ${}^{(d)}c_k^{(i)}(1)$, aus (6.1) und (6.2) die ${}^{(d)}\kappa_k^{(i)}(1)$ ermitteln, so daß mittels Gl. (5.5) eine erste Näherung $c_{\text{eff}}^{(i)}(1)$ für $c_{\text{eff}}^{(i)}$ angegeben werden kann. Die Fortsetzung dieses Iterationsverfahrens erlaubt die Berechnung von $c_{\text{eff}}^{(i)}$ mit beliebiger Genauigkeit.

8. Berechnung der Aktivierungsfrequenzen $\Gamma^{(i)}$ unter Berücksichtigung von Umklapp-Prozessen

In den vorangegangenen Abschnitten sahen wir, daß τ_A über die effektive Konzentration $c_{\text{eff}}^{(i)}$ durch das Umklappen der Dipole während der Verformung beeinflusst wird. Es existiert somit ein von der mittleren Zahl i der Aktivierungsschritte pro Aktivierungssegment $l^{(i)}$ abhängiges $\tau_A^{(i)}$. Die Umklapp-Prozesse wirken sich auf $\tau_A^{(i)}$ außer über $c_{\text{eff}}^{(i)}$ auch direkt über die in (3.3) eingehende Aktivierungsfrequenz Γ aus und machen diese i -abhängig ($\Gamma = \Gamma^{(i)} = 1/t^{(i)}$).

Bei der Berechnung von $\Gamma^{(i)}$ ist zu beachten, daß ein Dipol, der durch kurzreichende Wechselwirkungskräfte die Bewegung einer Versetzung hemmt, von dieser durch zwei verschiedene thermisch aktivierte Alternativprozesse passiert werden kann. Der eine ist das von FLEISCHER^{13, 15} behandelte Vorbeigleiten einer Versetzung an einem seine Orientierung beibehaltenden Dipol – nur dieser Prozeß wurde in Abschnitt 3 besprochen –, der andere das Passieren eines Dipols durch eine Versetzung infolge seiner Umorientierung (Umklapp-Prozeß). Während diese beiden, an ein und demselben Dipol möglichen Alternativprozesse unabhängig voneinander sind, ist das Passieren verschiedener Dipole durch eine Versetzung aus geometrischen Gründen i. allg. eine Folge abhängiger Prozesse²⁷.

Bezeichnet man mit ${}^{(d)}_V\Gamma_k^{(i)}$ bzw. ${}^{(d)}_U\Gamma_{kl}^{(i)}$ die Häufigkeit, mit der eine Versetzung an (d, k, i) -Dipolen durch Vorbeigleiten bzw. durch Umklappen der Dipole in die Orientierung l vorbeikommt, und sind ${}^{(d)}c_k^{(i)}$ geeignete Gewichtungsfaktoren, deren Bedeutung weiter unten angegeben wird, so ist nach obigen Überlegungen $\Gamma^{(i)}$ aus der Gleichung

$$\frac{1}{\Gamma^{(i)}} = \frac{\sum_d \sum_k \left[{}^{(d)}c_k^{(i)'} / \left({}^{(d)}_V\Gamma_k^{(i)} + \sum_{l \neq k} {}^{(d)}_U\Gamma_{kl}^{(i)} \right) \right]}{\sum_d \sum_k {}^{(d)}c_k^{(i)'}} \quad (8.1)$$

zu berechnen. Die Summation über l ist über alle möglichen Dipolorientierungen $l \neq k$ auszuführen, die Summation über k nur über diejenigen, in denen Wechselwirkung mit den Versetzungen auftritt. Die Gewichtungsfaktoren in (8.1) sind näherungsweise durch

$${}^{(d)}c_k^{(i)'} = {}^{(d)}c_k^{(i)*} {}^{(d)}\kappa_k^{(i)} \quad (8.2)$$

gegeben. ${}^{(d)}c_k^{(i)*}$ sind die Lösungen der Gln. (7.10) ohne i -Indizes für $\xi = (1/b) |{}^{(d)}x_{kG}^{(i)}|$ und $t = t^{(i)}$ bei Verwendung der Anfangsbedingung ${}^{(d)}c_k = {}^{(d)}c_k^{(i)}$ für $t=0$. Ersetzt man in Gl. (8.2) ${}^{(d)}c_k^{(i)*}$ durch ${}^{(d)}c_k^{(i)}$, so wird nicht berücksichtigt, daß ein Dipol, an dem eine Versetzung hängt, umklappen kann, ohne daß die Versetzung an ihm vorbeikommt.

Nach (4.1) gilt

$${}^{(d)}_V\Gamma_k^{(i)} = \Gamma^{0(i)} \exp(-{}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}/kT), \quad (8.3)$$

wobei ${}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}$ durch Gl. (6.2) gegeben ist. Bei der Berechnung der Größen ${}^{(d)}_U\Gamma_{kl}^{(i)}$ hat man zu unterscheiden zwischen den Fällen, in denen in der Orientierung l , in die der Dipol hineinklappt, Wechselwirkung mit den Versetzungen auftritt ($l \equiv m$), und den Fällen, in welchen dies nicht zutrifft ($l \equiv n$).

Zunächst soll ${}^{(d)}_U\Gamma_{km}^{(i)}$ ermittelt werden. Da k und m wechselwirkende Dipolorientierungen sind, kann die Versetzung den Dipol nur während des Umklapp-Prozesses passieren (außer durch einen Vorbeigleit-Prozeß). Es ist deshalb

$${}^{(d)}_U\Gamma_{km}^{(i)} = {}^{(d)}\omega_{km} \left(\xi = \frac{1}{b} |{}^{(d)}x_{kG}^{(i)}| \right) \cdot \frac{\Delta t_{km}}{\Delta t_{km} + {}^{(d)}_Vt_{km}^{(i)}}. \quad (8.4)$$

Der erste Faktor auf der rechten Seite bedeutet die Frequenz des betreffenden Umklapp-Prozesses, während der zweite die Wahrscheinlichkeit ist, daß die Versetzung während des Umklappens an dem Dipol vorbeikommt. Denn unter Δt_{km} wollen wir die Dauer des Umklapp-Vorganges und unter $({}^{(d)}_Vt_{km}^{(i)})^{-1}$ die mittlere Vorbeigleitfrequenz der Versetzung an dem Dipol während des Umklappens verstehen. Die Berechnung dieser beiden Größen wird weiter unten durchgeführt.

Bei der Ermittlung von ${}^{(d)}_U\Gamma_{kn}^{(i)}$ muß beachtet werden, daß die Versetzung nicht nur während des Umklappens den Dipol passieren kann, sondern auch im Anschluß daran, da in der Orientierung n der Dipol nicht mit der Versetzung wechselwirkt. Neben einem Beitrag B_1 , den man aus der rechten Seite

²⁷ J. DIEHL, G. P. SEIDEL u. L. NIEMANN, phys. stat. sol. **12**, 405 [1965].

von Gl. (8.4) erhält, indem man m durch n ersetzt, trägt zu ${}^{(d)}\Gamma_{kn}^{(i)}$ noch ein Term

$$B_2 = \frac{\Gamma^{0(i)} \cdot {}^{(d)}\omega_{kn}(\xi = 1/b \cdot |{}^{(d)}x_{kG}^{(i)}|)}{\Gamma^{0(i)} + {}^{(d)}\omega_{kn}(\xi = 1/b \cdot |{}^{(d)}x_{kG}^{(i)}|)} \cdot \frac{\Gamma^{0(i)}}{\Gamma^{0(i)} + \sum_m {}^{(d)}\omega_{nm}} \quad (8.5)$$

bei. Der erste Faktor von B_2 kommt dadurch zustande, daß sich das Passieren eines Dipols durch eine Versetzung nach dessen Umlappen in eine nichtwechselwirkende Orientierung aus zwei abhängigen Folgeprozessen zusammensetzt, nämlich aus dem Umlappen per se als erstem Prozeß [Frequenz ${}^{(d)}\omega_{kn}$ ($\xi = (1/b) |{}^{(d)}x_{kG}^{(i)}|$)] und dem anschließenden Sprung des befreiten Versetzungssegmentes (Frequenz $\Gamma^{0(i)}$). Der zweite Faktor in (8.5) bedeutet die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Versetzungssegment nach dem Umlapp-Prozeß springt, bevor der Dipol die wechselwirkungsfreie Orientierung n wieder verläßt. Um ${}^{(d)}\Gamma_{kn}^{(i)}$ zu erhalten, hat man B_1 und B_2 — versehen mit Gewichtsfaktoren G_1 bzw. G_2 — zu addieren:

$${}^{(d)}\Gamma_{kn}^{(i)} = G_1 B_1 + G_2 B_2. \quad (8.6)$$

Die Bedeutung von

$$G_1 = \frac{\Delta t_{kn}}{\Delta t_{kn} + (\sum_m {}^{(d)}\omega_{nm})^{-1}} \quad (8.7a)$$

bzw.

$$G_2 = \frac{(\sum_m {}^{(d)}\omega_{nm})^{-1}}{\Delta t_{kn} + (\sum_m {}^{(d)}\omega_{nm})^{-1}} \quad (8.7b)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, daß der Dipol während des Umlapp-Vorganges bzw. im Anschluß daran tatsächlich von der Versetzung passiert wird.

Wir wollen die Dauer Δt_{kl} eines Umlapp-Vorganges abschätzen. Dieser Prozeß beruht auf einem Diffusionssprung eines Teilchens. Die mittlere Geschwindigkeit, mit der ein diffundierendes Teilchen seine Gleichgewichtslage verläßt, ist nach SEEGER²⁸

$$\bar{v} = \frac{\int_0^{+\infty} \frac{p}{M} \exp\left(-\frac{p^2}{2 M k T}\right) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{2 M k T}\right) dp} = \sqrt{\frac{k T}{2 \pi M}} \quad (8.8)$$

(p Impulskomponente in Sprungrichtung; M Teilchenmasse). Da das Teilchen bei einem Diffusionssprung ein Wegstück der Größenordnung b zurück-

legt, läßt sich Δt_{kl} näherungsweise aus der Beziehung $\bar{v} \approx b/\Delta t_{kl}$ berechnen. Mit Gl. (8.8) führt dies auf

$$\Delta t_{kl} \approx \sqrt{\frac{2 \pi M}{k T}} b. \quad (8.9)$$

Schließlich müssen wir noch die mittlere Vorbeigleitfrequenz während eines Umlapp-Prozesses ${}^{(d)}\nu_{kl}^{(i)} = {}^{(d)}\Gamma_{kl}^{(i)}$ berechnen. Offenbar ist

$${}^{(d)}\nu_{kl}^{(i)} = \Gamma^{0(i)} \exp(-\Delta G/k T), \quad (8.10)$$

wobei die Mittelwertbildung von $\exp(-\Delta G/k T)$ über den ΔG -Bereich zwischen ${}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}$ und ${}^{(d)}\Delta G_l^{(i)}$ erfolgen muß, der bei dem Umlapp-Prozeß überstrichen wird. Haben die Wechselwirkungsenergien in den Orientierungen k und l gleiches Vorzeichen, so führt die Auswertung von Gl. (8.10) auf

$${}^{(d)}\nu_{kl}^{(i)} = \Gamma^{0(i)} \frac{k T}{({}^{(d)}\Delta G_k^{(i)} - {}^{(d)}\Delta G_l^{(i)})} \cdot [\exp(-{}^{(d)}\Delta G_l^{(i)}/k T) - \exp(-{}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}/k T)], \quad (8.10a)$$

andernfalls ist

$${}^{(d)}\nu_{kl}^{(i)} = \Gamma^{0(i)} \frac{2 k T}{({}^{(d)}\Delta G_k^{(i)} + {}^{(d)}\Delta G_l^{(i)})} \cdot \{1 - \frac{1}{2} [\exp(-{}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}/k T) + \exp(-{}^{(d)}\Delta G_l^{(i)}/k T)]\}. \quad (8.10b)$$

Bedeutet l eine wechselwirkungsfreie Orientierung ($l = n$), so gilt insbesondere

$${}^{(d)}\nu_{kn}^{(i)} = \Gamma^{0(i)} \frac{k T}{({}^{(d)}\Delta G_k^{(i)})} \cdot [1 - \exp(-{}^{(d)}\Delta G_k^{(i)}/k T)]. \quad (8.10c)$$

Damit sind alle Größen bekannt, welche zur Berechnung der effektiven Aktivierungsfrequenz $\Gamma^{(i)}$ nach Gl. (8.1) benötigt werden.

Das in den Abschnitten 5 bis 8 angegebene Verfahren zur Berechnung von $c_{\text{eff}}^{(i)}$ und $\Gamma^{(i)}$ ist unter der Voraussetzung hergeleitet worden, daß während der Umlapp-Prozesse die Dipol-Schwerpunkte in Ruhe bleiben. In allen Fällen, in denen dies nicht der Fall ist, liefert das Verfahren gute Näherungen, falls man für die Abstände bd der Dipole von den Gleitebenen geeignete Mittelwerte über die Lagen der Dipol-Schwerpunkte vor und nach den Umlapp-Prozessen verwendet.

9. Schneidprozesse

Kommt eine Versetzung einem elastischen Dipol sehr nahe, so versagt das in den vorhergegangenen Abschnitten beschriebene Verfahren zur Berechnung

²⁸ A. SEEGER, Handbuch der Physik, Band 7/1, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1955, S. 383.

von τ_A aus mehreren Gründen. Erstens ist in diesem Fall der Gültigkeitsbereich der linearen Elastizitätstheorie, welche zur Berechnung der Wechselwirkungsenergie $W(r)$ [Gl. (2.2 a)] herangezogen wurde, überschritten; zweitens ist die auf Gl. (2.2 b) führende Näherung nicht mehr zu rechtfertigen; drittens kann der Dipol durch die Versetzung zerstört werden. Wir wollen in diesem Abschnitt zeigen, wie man in solchen Fällen häufig dennoch zu brauchbaren Näherungen für τ_A gelangen kann.

Die wichtigsten Fälle, in denen die eben erwähnten Schwierigkeiten auftreten, sind die folgenden:

- a) Ein „punktförmiger“ Dipol (interstitielles C-Atom in α -Fe, Ca^{2+} -Ion-Leerstellen-Dipol in NaCl usw.) liegt exakt in einer Gleitebene ($d=0$);
- b) eine kleine scheibenförmige Ausscheidung blockiert mehrere Gleitebenen.

Als Beispiel für den Fall a) wollen wir das Durchschneiden eines Ca^{2+} -Ion-Leerstellen-Dipols in Steinsalz durch eine Schraubenversetzung diskutieren. Nach Anhang 1 b) tritt in 4 von den 12 möglichen Dipolorientierungen keine Wechselwirkung mit Versetzungen auf. Die restlichen 8 Orientierungen sind je einfach entartet, so daß 4 verschiedene Wechselwirkungsenergien möglich sind:

$${}^{(d)}W_k(x) = \frac{\mu b^4 \Delta\lambda^*}{4\sqrt{2}\pi} \frac{\pm x \pm \sqrt{2} d \cdot b}{x^2 + (d \cdot b)^2} \quad (\text{s. Anm. 29}). \quad (9.1)$$

Für Dipole, die exakt in einer Gleitebene liegen ($d=0$), bleiben schließlich zwei energetisch verschiedene Orientierungen übrig, zu denen die Wechselwirkungsenergien

$${}^{(0)}W_k(x) = \pm \frac{\mu b^4 \Delta\lambda^*}{4\sqrt{2}\pi} \frac{1}{x} \quad (9.2)$$

gehören. Diese Beziehungen sind nach den obigen Überlegungen nur gültig, solange $|x|$ hinreichend groß ist, d. h. solange die betrachtete Versetzung einem bei $x=0$ befindlichen Dipol nicht zu nahe kommt. In Abb. 1 sind die Potentialprofile (9.2) wiedergegeben. Wir wollen voraussetzen, daß sie im Bereich $|x| \geq \Delta b$ wenigstens näherungsweise richtig sind. Über das Gebiet $|x| < \Delta b$, wo der Dipol sich im Versetzungskern befindet, können keine näheren Aussagen gemacht werden.

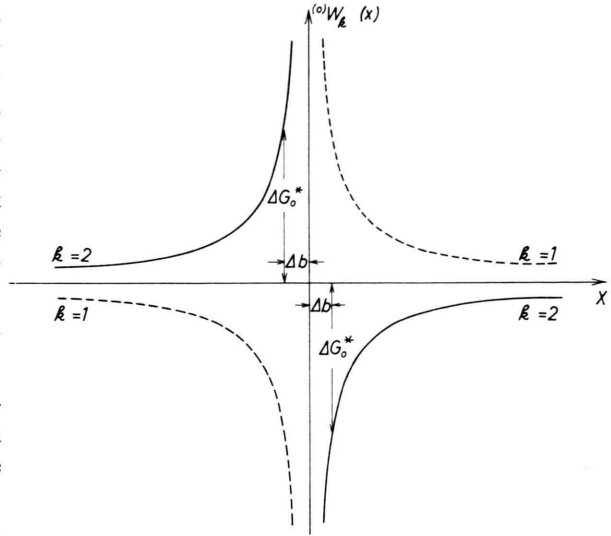


Abb. 1. Wechselwirkungsenergie einer Schraubenversetzung mit einem Ca^{2+} -Ion-Leerstellen-Dipol in der Gleitebene in Steinsalz in Abhängigkeit vom Abstand x zwischen einem Dipol und einer Versetzung [nach Gl. (9.2)].

Eine aus $-x$ -Richtung kommende Versetzung wird vor dem Schneidprozeß von dem Dipol angezogen bzw. abgestoßen, je nachdem, ob dieser sich in einer Orientierung $k=1$ oder $k=2$ befindet. Im Fall der Anziehung läuft die Versetzung in den Dipol hinein. Abgesehen von sehr tiefen Temperaturen und hohen Versetzungsgeschwindigkeiten klappt im Versetzungskern der Dipol in die Orientierung $k=2$ um, damit nach Austritt der Versetzung aus dem Dipol-„Innern“ an der Stelle $x = +\Delta b$ der energetisch günstigste Zustand vorliegt. Von $x = +\Delta b$ an muß die Spannung τ_A Arbeit leisten, um die Versetzung von dem Dipol zu entfernen. Im Fall der Abstoßung der sich dem Dipol nähernden Versetzung muß τ_A solange Arbeit leisten, bis an der Stelle $x = -\Delta b$ der Dipol aufbricht und die Versetzung passieren läßt. ${}^{(0)}\Delta G_k$ ist somit sowohl bei Anziehung als auch bei Abstoßung der Versetzung durch einen Dipol in der Gleitebene aus den Potentialprofilen (9.2) in Verbindung mit den Gln. (3.1) und (3.2) näherungsweise berechenbar. Dabei ist $x_G = +\Delta b$ bzw. $x_s = -\Delta b$ zu setzen. Mit der Abkürzung

$${}^{(0)}W_2(x = -\Delta b) = -{}^{(0)}W_2(x = +\Delta b) = \Delta G_0^*$$

ergibt sich in beiden Fällen

$${}^{(0)}\Delta G_k = \Delta G_0^* - \sqrt{\frac{\mu b^5 l \Delta\lambda^* \tau_A}{\sqrt{2}\pi}} + \tau_A l b^2 \Delta \quad (9.3) \quad (k=1 \text{ und } 2).$$

²⁹ Indizes, die zum Verständnis nicht unbedingt nötig sind, werden im folgenden weggelassen.

Hiermit läßt sich die Häufigkeit der Schneidprozesse

$$^{(0)}_S I_k = I^0 \exp(-^{(0)}\Delta G_k/kT) \quad (9.4)$$

bestimmen, die ohne weiteres in den Formalismus der vorangegangenen Abschnitte eingebaut werden kann.

Als Beispiel für den Fall b) besprechen wir die Behinderung von $\langle 111 \rangle$ -Schraubenversetzungen auf mehreren parallelen benachbarten $\{110\}$ -Gleitebenen durch eine kleine scheibenförmige Ausscheidung parallel zu $\{100\}$ in einem kubisch-raumzentrierten (k.r.z.) Gitter. Die Bewegungsrichtungen dieser Versetzungen sind $\langle 112 \rangle$ -Richtungen. Die Versetzungen können entweder an dem Scheibchen vorbeigleiten oder dieses durchschneiden. Kleine Ausscheidungen verhalten sich insofern einfacher als atomare Dipole, als sie sich i. allg. nicht umorientieren können.

Für den Fall des Vorbeigleitens erfolgt die Berechnung von $^{(d)}\Delta G$ ähnlich wie bei dem im Anhang 2 a) durchgerechneten Beispiel; für die über die verschiedenen abstoßenden bzw. anziehenden Scheibchenorientierungen gemittelten Potentialprofile werden die Näherungen

$$^{(d)}W(x) = \pm \frac{\Delta G_0 (db)^2}{(db-x)^2} \quad (9.5)$$

verwendet. Eine solche Mittelung ist hier deshalb sinnvoll, weil in allen Orientierungen die Wechselwirkungsenergie dem Betrage nach ungefähr gleich groß ist. Auf diese Weise erhält man

$$^{(d)}\Delta G = \Delta G_0 \left\{ 1 - \left(\sqrt[3]{2 + \frac{1}{\sqrt[3]{4}}} \right) \left(\frac{\tau_A b^2 l d}{\Delta G_0} \right)^{2/3} + \frac{\tau_A b^2 l d}{\Delta G_0} \right\}, \quad (9.6)$$

$$\Delta G_0 = \frac{11\sqrt{6}}{81\pi} \frac{\mu b^3}{d} \Delta \lambda^*. \quad (9.6a)$$

Bei der praktischen Rechnung mit Gl. (9.6) taucht die Frage auf, was man bei einer Scheibe endlicher Ausdehnung, für welche die hier durchgeführte Rechnung natürlich nur eine grobe Näherung sein kann, als ihren für die Wechselwirkungsenergie maßgeblichen Abstand bd von der Gleitebene ansieht. Rechnungen über die Wechselwirkungsenergie endlicher Scheibchen mit Versetzungen, die KROUPA³⁰ durchgeführt hat, zeigen, daß die Dipolstärke gewissermaßen im Scheibenrand lokalisiert ist. Da beim Vorbeigleiten einer Versetzung an einem endlichen

Scheibchen die Versetzung sozusagen in atomarem Abstand am Scheibenrand vorbeirutscht, ist

$$d = 1 \quad (9.7)$$

ein größenordnungsmäßig richtiger Wert.

Durch Einsetzen von (9.6) in (3.5) erhält man bei Verwendung der Gln. (5.1) und (4.8) folgende Beziehung für die Temperaturabhängigkeit von τ_A :

$$T = A - B \chi(\tau_A), \quad (9.8)$$

$$\chi(\tau_A) = \tau_A (C/\sqrt[3]{\tau_A} - 1), \quad (9.8a)$$

$$A = \frac{\Delta G_0}{k \ln(n b^2 v_D/d)}, \quad (9.8b)$$

$$B = \frac{b^3 d}{V_{\text{eff}} k \ln(n b^2 v_D/d)}, \quad (9.8c)$$

$$C = \left(\sqrt[3]{2} + \frac{1}{\sqrt[3]{4}} \right)^3 \sqrt{\frac{A}{B}}. \quad (9.8d)$$

Die in Gl. (9.8c) eingehende Größe c_{eff} ist mit der atomaren Konzentration c_S der Scheibchen vermöge

$$c_{\text{eff}} = \alpha c_S \quad (9.9)$$

verknüpft. α ist ein geometrischer Faktor, der angibt, über wieviel parallele Gleitebenen sich ein Scheibchen ausdehnt.

Wir wenden uns nun dem Durchschneiden eines Scheibchens durch eine Versetzung zu. Das Scheibchen möge so orientiert sein, daß eine sich ihm aus $-x$ -Richtung nähernde Versetzung abgestoßen wird. Nach Gl. (9.5) bewegt sich die Versetzung vor dem Schneidprozeß im Bereich $x < -db$ des in Abb. 2 dargestellten Potentialprofils. Befindet sie sich am Ort $x = -db$, so ist in dem System Versetzung –

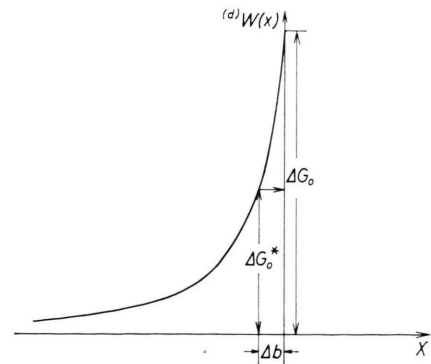


Abb. 2. Wechselwirkungsenergie einer Schraubenversetzung mit einer scheibenförmigen Ausscheidung parallel einer $\{100\}$ -Ebene in einem kubisch-raumzentrierten Gitter in Abhängigkeit vom Abstand x zwischen einer Ausscheidung und einer Versetzung [nach Gl. (9.5)].

³⁰ F. KROUPA, Phil. Mag. 7, 783 [1962].

Scheibchen diejenige Energie in Form von elastischer Wechselwirkungsenergie gespeichert, welche aufgebracht werden muß, um das Scheibchen aufzubrechen. Dies bedeutet, daß die Versetzung quasi durch den Potentialberg hindurchtritt, sobald sie durch Zusammenwirken von τ_A und der thermischen Gitterenergie bis auf die Entfernung Δb an das Scheibchen herangeführt wird. Die Berechnung von $^{(d)}\Delta G$ hat somit im Fall des Durchschneidens des Scheibchens durch die Versetzung genauso zu erfolgen wie im Fall des Vorbeigleitens. Aus den Gln. (9.6) bzw. (9.8) erhält man die entsprechenden Beziehungen für das Durchschneiden, indem man ΔG_0 durch $\Delta G_0^* = \Delta G_0(d/\delta)^2$ und d durch $\delta = d + \Delta$ ersetzt ($\delta \approx 1$).

Für ein anziehend orientiertes Scheibchen führen entsprechende Überlegungen zum selben Ergebnis. Allerdings muß vorausgesetzt werden, daß nach dem Durchschneiden desselben das Potentialprofil in hinreichend großer Entfernung sich nicht wesentlich von dem des unzerschnittenen Scheibchens unterscheidet.

Herzlicher Dank gebührt meinem verehrten Lehrer, Herrn Professor Dr. A. SEEGER, für sein stetiges Interesse am Fortgang dieser Arbeit sowie für zahlreiche anregende Diskussionen und wertvolle Ratschläge.

Anhang

1. Elastische Wechselwirkungsenergie von Versetzungen mit Punktfehlern tetragonaler Symmetrie in kubischen Gittern [nach Gl. (2.6)]^{12, 13}

a) K.f.z. Gitter mit $\langle 110 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 100 \rangle$ -Defekten

$$W_k(r, \varphi) = \pm \frac{\mu b^4 \Delta \lambda^*}{2\sqrt{2}\pi} \frac{\cos \varphi}{r}; \quad k=1, \dots, 4 \quad (\text{A 1.1})$$

$$W_k = 0; \quad k=5, 6 \quad (\text{A 1.2})$$

(r, φ Polarkoordinaten um die Versetzungslinie; k verschiedene Möglichkeiten der Dipolorientierungen).

b) K.f.z. Gitter mit $\langle 110 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 110 \rangle$ -Defekten

$$W_k(r, \varphi) = \frac{\mu b^4 \Delta \lambda^*}{4\pi r} (\pm \sin \varphi \pm \cos \varphi); \quad k=1, \dots, 8 \quad (\text{A 1.3})$$

$$W_k = 0; \quad k=9, \dots, 12. \quad (\text{A 1.4})$$

c) K.f.z. Gitter mit Stufenversetzungen (BURGERS-Vektor $[101]$, Linienrichtung $[010]$) und $\langle 110 \rangle$ -De-

fekten

$$W_k(r, \varphi) = \frac{B \Delta \lambda}{2r} [(3+2\nu) \sin \varphi \pm \cos \varphi \cos 2\varphi] - \frac{2B \lambda_{11}}{r} (1+\nu) \sin \varphi; \quad k=1, \dots, 8 \quad (\text{A 1.5})$$

$$W_k(r, \varphi) = \frac{B \Delta \lambda}{r} (1+2\nu \pm 2 \cos^2 \varphi) \sin \varphi - \frac{2B \lambda_{11}}{r} (1+\nu) \sin \varphi; \quad k=9, \dots, 12 \quad (\text{A 1.6})$$

$$(B = \frac{b}{2\pi} \frac{\mu}{1-\nu}; \quad \nu \text{ Poissonsche Zahl}).$$

d) K.f.z. Gitter mit $\langle 110 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 111 \rangle$ -Defekten

$$W_k(r, \varphi) = \pm \frac{\mu b^4 \Delta \lambda^*}{3\pi} \frac{\sin \varphi}{r}; \quad k=1, \dots, 4 \quad (\text{A 1.7})$$

$$W_k = 0; \quad k=5, \dots, 8. \quad (\text{A 1.8})$$

e) K.r.z. Gitter mit $\langle 111 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 100 \rangle$ -Defekten

$$W_{1,2}(r, \varphi) = \frac{4\sqrt{6}}{27\pi} \frac{\mu b^4 \Delta \lambda^*}{r} \sin \left(\varphi - \frac{2\pi}{3} \right), \quad (\text{A 1.9})$$

$$W_{3,4}(r, \varphi) = \frac{4\sqrt{6}}{27\pi} \frac{\mu b^4 \Delta \lambda^*}{r} \sin \varphi, \quad (\text{A 1.10})$$

$$W_{5,6}(r, \varphi) = \frac{4\sqrt{6}}{27\pi} \frac{\mu b^4 \Delta \lambda^*}{r} \sin \left(\varphi + \frac{2\pi}{3} \right). \quad (\text{A 1.11})$$

2. Berechnung von ΔG [nach den Gln. (3.1)] für das Vorbeigleiten von Versetzungen an Dipolen, welche sich nicht umorientieren

a) K.f.z. Gitter mit $\langle 110 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 100 \rangle$ -Defekten (Gleitebenen $\{111\}$, Bewegungsrichtungen der Versetzungen $\langle 1\bar{2}1 \rangle$)

Führen wir ein x, y -Koordinatensystem ein mit der $+x$ -Richtung in Bewegungsrichtung der Versetzung und der $+y$ -Richtung als Gleitebenennormalenrichtung, dessen Ursprung im Dipolzentrum liegt, so lautet Gl. (A 1.1)

$$W_k(x, \pm db) = \pm \frac{\mu b^4 \Delta \lambda^*}{2\pi\sqrt{6}} \frac{\sqrt{2}x \pm db}{x^2 + (db)^2} \quad (\text{A 2.1})$$

($\pm db$ Abstand der Gleitebene vom Dipolzentrum).

Um einen analytischen Ausdruck für ΔG angeben zu können, verwenden wir zu dessen Berechnung nach (3.1) und (3.2) an Stelle des exakten Ausdrucks (A 2.1)

$$W(x) = \frac{\Delta G_0 db}{db-x}, \quad (\text{A 2.2})$$

$$\Delta G_0 = \frac{9+\sqrt{3}}{24\sqrt{2}\pi} \frac{\mu b^3 \Delta \lambda^*}{d}. \quad (\text{A 2.2 a})$$

Für eine aus $x = -\infty$ kommende Versetzung beschreibt (A 2.2) das Potentialprofil (A 2.1) im Bereich $x \lesssim -d b$ recht gut. Bei $x=0$ („Sattelpunktslage“) hat die Versetzung ein Potentialniveau erreicht, das gleich dem Mittelwert aus den Differenzen zwischen den Maxima und Minima der exakten Potentialprofile (A 2.1) ist. Die weniger gute Übereinstimmung von (A 2.2) mit (A 2.1) für $-d b \lesssim x < 0$ bedeutet, daß für sehr tiefe Temperaturen ($\lesssim 25^\circ\text{K}$) der nach (A 2.2) berechnete τ_A -Beitrag zur Fließspannung nicht die richtige Temperaturabhängigkeit aufweisen kann. Dies wäre jedoch selbst bei Verwendung der Gl. (A 2.1) nicht zu erwarten, da diese mittels Gl. (2.4) berechnet wurde, welche für sehr kleine Abstände zwischen Dipol und Versetzung nicht mehr richtig sein kann.

Die Berechnung von ΔG nach (3.1) und (3.2) unter Verwendung von (A 2.2) führt zu folgendem Ergebnis:

$$\Delta G = \Delta G_0 \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_A b^2 l d}{\Delta G_0}} \right)^2, \quad (\text{A 2.3})$$

wobei ΔG_0 durch (A 2.2 a) definiert ist. Setzt man (A 2.3) in (3.5) ein und löst nach τ_A auf, so liefert dies (3.6).

Für andere Gitter-, Versetzungs- und Dipol-Typen läuft die Rechnung ganz entsprechend, so daß wir lediglich die Ausdrücke für ΔG anzugeben brauchen.

b) K.f.z. Gitter mit $\langle 110 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 110 \rangle$ -Defekten (Gleitebenen $\{\bar{1}01\}$, Bewegungsrichtungen der Versetzungen $\langle 0\bar{1}0 \rangle$).

ΔG ist auch hier durch (A 2.3) gegeben. Jedoch hat ΔG_0 eine andere Bedeutung:

$$\Delta G_0 = \frac{(9 + \sqrt{6})}{48 \sqrt{2} \pi} \frac{\sqrt{3}}{d} \mu b^3 \Delta \lambda^*. \quad (\text{A 2.4})$$

c) K.f.z. Gitter mit $\langle 110 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 111 \rangle$ -Dipolen (Gleitebenen $\{\bar{1}01\}$, Bewegungs-

richtungen der Versetzungen $\langle 0\bar{1}0 \rangle$)

$$\Delta G = \Delta G_0 \left[1 - \left(\sqrt[3]{2 + \frac{1}{\sqrt[3]{4}}} \right) \left(\frac{\tau_A b^2 l d}{\Delta G_0} \right)^{2/3} + \frac{\tau_A b^2 l d}{\Delta G_0} \right], \quad (\text{A 2.5})$$

$$\Delta G_0 = \frac{\mu b^3 \Delta \lambda^*}{3 \pi d}. \quad (\text{A 2.5 a})$$

d) K.r.z. Gitter mit $\langle 111 \rangle$ -Schraubenversetzungen und $\langle 100 \rangle$ -Dipolen (Gleitebenen $\{\bar{1}01\}$, Bewegungsrichtungen der Versetzungen $\langle 1\bar{2}1 \rangle$)

ΔG ist durch (A 2.5) gegeben. Die Bedeutung von ΔG_0 ist hier

$$\Delta G_0 = \frac{4 \sqrt{6}}{27 \pi} \frac{\mu b^3 \Delta \lambda^*}{d}. \quad (\text{A 2.6})$$

3. Lösung des Gleichungssystems (7.10) für $q=3$

Da die $^{(d)}a_{k0}^{(i)}$ die bekannten BOLTZMANN-Verteilungen sind, brauchen nur die Größen $^{(d)}a_{ka}^{(i)}$ und $^{(d)}K_a^{(i)}$ ($\alpha=1, 2$) angegeben zu werden. Nach II, Anhang 1, haben die Frequenzfaktoren in (7.10) die Gestalt $\omega_{kl} = \beta \omega_k$. Beachtet man dies, so folgt (obere Indizes werden weggelassen)

$$a_{2a} = \frac{K_a + 3 \beta \omega_1}{K_a + 3 \beta \omega_2} a_{1a}, \quad (\text{A 3.1})$$

$$a_{3a} = \frac{K_a^2 + 2 \beta (\omega_1 + \omega_2) K_a + 3 \beta^2 \omega_1 \omega_2}{\beta \omega_3 (K_a + 3 \beta \omega_2)} a_{1a}, \quad (\text{A 3.2})$$

$$K_a = -\beta (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \mp \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2 - (\omega_1 \omega_2 + \omega_1 \omega_3 + \omega_2 \omega_3)}. \quad (\text{A 3.3})$$

a_{11} und a_{12} sind die an die Anfangsbedingungen anzupassenden Konstanten.