

Über verschiedene Methoden zur Bestimmung der mittleren Verschiebungskoeffizienten der Gitteratome am Beispiel des Eisens und Nickels

PHILIPP DÜNNER UND NORBERT SCHMITZ-PRANGHE

Institut für Theoretische Physik der Universität Köln,
Abteilung für Metallphysik

(Z. Naturforsch. 23 a, 1679—1681 [1968]; eingegangen am 16. August 1968)

Eine Möglichkeit, Aussagen über die Größe der mittleren Verschiebungskoeffizienten der im Kristallgitter schwingenden Atome zu gewinnen, besteht darin, den Einfluß der Gitterschwingungen auf die Intensität gebeugter Röntgen-Strahlen zu untersuchen. Der formale Zusammenhang zwischen dieser bei einem Beugungs- experiment gemessenen Streuintensität und den mittleren Verschiebungskoeffizienten ist für kubische Kristalle nach WALLER¹ durch die Beziehungen:

$$I_T = I_0 \cdot \exp \left\{ -2 B \left(\frac{\sin \vartheta_T}{\lambda} \right)^2 \right\} \quad (1)$$

und $B = 8 \pi^2 \cdot \overline{u_s^2}$ gegeben. (2)

Hierbei bedeuten:

I_T = Intensität der gebeugten Röntgen-Strahlung bei der Temperatur T ,

I_0 = Intensität der gebeugten Röntgen-Strahlung bei $T = 0^\circ\text{K}$,

ϑ_T = Glanzwinkel bei der Temperatur T ,

λ = Wellenlänge der charakteristischen Primärstrahlung.

Der Zusammenhang zwischen $\overline{u_s^2}$ und einem beliebigen Intensitätsverhältnis I_{T_1}/I_{T_2} (mit T_1 variabel und T_2 z. B. = 295°K) wird, wie JAMES² im einzelnen ausführt, durch die Beziehungen:

$$\overline{u_s^2} = \beta T + \frac{\gamma}{T} + \frac{\delta}{T^3} + \dots \quad (3)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \ln(I_{T_1}/I_{T_2}) &= \beta(c_2 T_2 - c_1 T_1) \\ &\quad + \gamma \left(\frac{c_2}{T_2} - \frac{c_1}{T_1} \right) + \delta \left(\frac{c_2}{T_2^3} - \frac{c_1}{T_1^3} \right) + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

mit

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{12} \cdot \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \cdot \frac{1}{m_a k}; \\ \delta &= -\frac{1}{1200} \cdot \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \frac{\Theta_m}{m_a k}; \\ c_1 &= 8\pi^2 \left(\frac{\sin \vartheta_1}{\lambda} \right)^2 \quad \text{und} \quad c_2 = 8\pi^2 \left(\frac{\sin \vartheta_2}{\lambda} \right)^2 \end{aligned}$$

gegeben, wobei Θ_m eine mittlere charakteristische Temperatur, h das Plancksche Wirkungsquantum, k die Boltzmann-Konstante und m_a die Atommasse bedeuten.

Auf der Grundlage dieser Gln. (3) und (4) haben DÜNNER und KOHLHAAS³ durch Messung der Tempera-

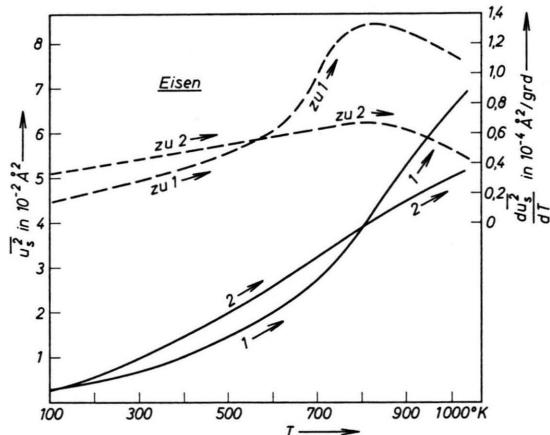


Abb. 1. Temperaturverlauf der mittleren Verschiebungskoeffizienten des Eisens. Kurve 1: u_s^2 berechnet aus Beugungsintensität und Gitterparameter; Kurve 2: u_s^2 berechnet aus dem Gitterparameter; gestrichelt gezeichnet: die Ableitungen zu den Kurven 1 und 2.

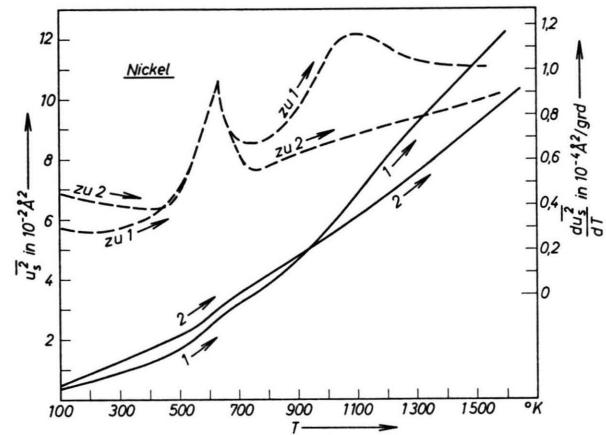


Abb. 2. Temperaturverlauf der mittleren Verschiebungskoeffizienten des Nickels. Kurve 1: u_s^2 berechnet aus Beugungsintensität und Gitterparameter; Kurve 2: u_s^2 berechnet aus dem Gitterparameter; gestrichelt gezeichnet: die Ableitungen zu den Kurven 1 und 2.

turabhängigkeit der Intensität von Röntgen-Interferenzlinien sowie der temperaturbedingten Änderung der Glanzwinkel ϑ (und damit des Gitterparameters) den Temperaturverlauf der mittleren Schwingungsamplituden bzw. der Verschiebungskoeffizienten u_s^2 an Eisen- und Nickeleinkristallen ermittelt. Die Ergebnisse sind aus Abb. 1 und 2 (jeweils Kurve 1) zu ersehen und in Tab. 1 zahlenmäßig aufgeführt.

Einen anderen Weg, aus röntgenographischen Messungen die mittleren Verschiebungskoeffizienten der Gitteratome zu ermitteln, geben HOUSKA und STEIN⁴ an. Da-

¹ J. WALLER, Z. Phys. 17, 398 [1923].

² R. W. JAMES, Optical Principles of the Diffraction of X-Rays, Vol. II, Capetown 1954.

³ Ph. DÜNNER u. R. KOHLHAAS, Z. Metallk. 59, 567 [1968].

⁴ C. R. HOUSKA u. B. A. STEIN, Acta Cryst. 21, 611 [1966].



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.

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.

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

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.

Temperatur in °K	$\overline{u_s^2}$ in 10^{-2} \AA^2	$\overline{u_s^2}$ in 10^{-2} \AA^2
	berechnet aus Intensitäts- und Gitterparameterwerten	berechnet aus Gitterparameterwerten
Eisen		
100	0,27	0,24
200	0,46	0,58
300	0,67	1,02
430	1,15	1,52
550	1,69	2,30
650	2,31	2,92
725	2,98	3,40
800	3,92	3,88
900	5,29	4,49
1000	6,55	5,04
Nickel		
100	0,36	0,42
300	0,92	1,29
500	1,69	2,16
600	2,40	2,69
650	2,92	3,15
700	3,20	3,58
750	3,53	3,87
800	3,92	4,17
900	4,62	4,81
1000	5,66	5,47
1100	6,86	6,17
1200	8,18	6,89
1300	9,25	7,63
1400	10,24	8,39
1600	12,39	9,95

Tab. 1. Die mittleren Verschiebungskoeffizienten von Eisen und Nickel.

nach lässt sich mit Hilfe der aus der Grüneisen'schen Theorie über den Zusammenhang zwischen Schwingungsamplituden und thermischer Ausdehnung gefolgerten Beziehung

$$\overline{u_s^2} = \frac{9 r_0^2}{8 \pi^2 \gamma Z^2} \cdot \frac{\alpha_T - \alpha_0}{\alpha_0} \quad (5)$$

das mittlere Verschiebungskoeffizient allein aus Messungen der Temperaturabhängigkeit des Gitterparameters ermitteln. In Gl. (5) bedeuten: α_T der Gitterparameter bei einer beliebigen Temperatur T , α_0 der Gitterparameter bei 0°K , r_0^2 ein Maß für die vom Atom eingenommene Fläche (dieser Wert lässt sich aus dem Atomvolumen berechnen) und γZ^2 eine charakteristische Konstante, die nach Houska und Stein⁴ für kubische Stoffe im Mittel mit 0,145 gegeben ist.

Um einen Vergleich zwischen den nach Beziehung (3) und (4) aus $I(T)$ und $a(T)$ gewonnenen Werten für die mittleren Verschiebungskoeffizienten und den nach Gl. (5) lediglich aus $a(T)$ errechneten $\overline{u_s^2}$ -Werten durchzuführen, wurden die von Dünner und Kohlhaas³ an Eisen- und Nickeleinkristallen gemessenen Gitterpara-

meterwerte in Gl. (5) eingesetzt. Mit $\alpha_0 = 2,8602$ (extrapoliert), $r_0^2 = 5,71 \text{ \AA}^2$ für Eisen und $\alpha_0 = 3,5130 \text{ \AA}^2$ (extrapoliert), $r_0^2 = 4,83 \text{ \AA}^2$ für Nickel ergibt sich der in Abb. 1 und 2 eingezeichnete Verlauf (jeweils Kurve 2) der mittleren Verschiebungskoeffizienten. Die genauen Zahlenwerte sind aus Tab. 1 zu ersehen.

Ein Vergleich der aus Intensitäts- und Gitterparamettermessungen gewonnenen $\overline{u_s^2}(T)$ -Werte mit den ausschließlich aus Gitterparameterdaten nach Gl. (5) ermittelten Werten zeigt gemäß Tab. 1 bei Eisen bis etwa 900°K , bei Nickel bis etwa 1100°K eine zahlenmäßig recht befriedigende Übereinstimmung.

Der Temperaturverlauf zeigt zunächst, wie aus den Ableitungen der Kurven 1 und 2 in Abb. 1 und 2 zu ersehen ist, eine Übereinstimmung in seinen charakteristischen Merkmalen, wie sie vor allem an den Curie-Punkten zum Ausdruck kommen. So strebt die Ableitung der $\overline{u_s^2}(T)$ -Kurve des Eisens am Curie-Punkt bei etwa 1040°K in beiden Fällen einem Minimalwert zu (mit vorhergehendem Maximum), während am Curie-Punkt des Nickels bei etwa 630°K ein Maximum auftritt. Ein gleichartiger Temperaturverlauf in der Umgebung der Curie-Punkte wurde von KOHLHAAS, DÜNNER und SCHMITZ-PRANGHE⁵ für die Gitterparameter bzw. die daraus ermittelten Ausdehnungskoeffizienten *polykristalliner* Eisen- und Nickelproben gefunden und mit den magnetostriktiven Eigenschaften dieser beiden Ferromagnetica erklärt.

Da als Variable in Gl. (5) ausschließlich Gitterparameterwerte eingehen, ist eine Übereinstimmung im Temperaturverlauf des Gitterparameters und dem hieraus berechneten $\overline{u_s^2}(T)$ -Verlauf in diesem Fall zwingend. Der aus den $I(T)$ -, $a(T)$ -Messungen nach Gln. (3) und (4) für Nickel ermittelte Temperaturverlauf von $\overline{u_s^2}$ (Abb. 2, Kurve 1) zeigt ab 1100°K eine merkliche Abnahme im Anstieg der Kurve, wie aus einem breiten, aber ausgeprägten Maximum der Ableitung deutlich hervorgeht. Eine derartige Erscheinung konnte im Gitterparameterverlauf nicht gefunden werden und zeigt sich folglich auch nicht in dem nach Gl. (5) errechneten Temperaturverlauf von $\overline{u_s^2}$ (Kurve 2 in Abb. 2).

Magnetische Messungen u. a. von ARAJS und COLVIN⁶ sowie KOHLHAAS⁷ an Nickel erbrachten um 1100°K ebenfalls ein anomales Verhalten der magnetischen Suszeptibilität. Die hierbei vermuteten magnetischen Umwandlungen und damit verbundene Auswirkungen auf die Bindungskräfte der Gitteratome spiegeln sich im Verlauf der Beugungsintensität als unmittelbar beeinflusster Meßgröße und nicht im Verlauf des Gitterparameters als mehr indirekter Größe wieder. Der Temperaturverlauf von $\overline{u_s^2}$ ergibt folglich nur dann ein tatsächliches Bild der im Kristall herrschenden Bindungsverhältnisse und ihrer temperaturbedingten Änderung, wenn zur Berechnung der mittleren Verschiebungskoeffizienten neben dem Gitterparameter bzw. Glanzwinkel auch die Beugungsintensität [nach Gln. (3) und (4)]

⁵ R. KOHLHAAS, PH. DÜNNER U. N. SCHMITZ-PRANGHE, Z. Angew. Phys. **23**, 245 [1967].

⁶ S. ARAJS U. R. V. COLVIN, J. Phys. Chem. Solids **24**, 1233 [1963].

⁷ R. KOHLHAAS, Arch. Eisenhüttenwes. **36**, 437 [1965].

herangezogen wird. Daraus ist zu ersehen, daß nach dem Vorschlag von HOUSKA und STEIN⁴ Gitterparametermessungen allein zwar durchaus brauchbare Werte für die mittleren Verschiebungskoeffizienten erbringen, andererseits aber Intensitäts- und Gitterparametermessungen zusammen, wie sie von DÜNNER und KOHLHAAS³ durch-

geführt wurden, umfassendere Aussagen über den Temperaturverlauf von u_s^2 zulassen.

Für sein Interesse und die Förderung dieser Arbeit möchten wir Herrn Priv.-Doz. Dr. RUDOLF KOHLHAAS herzlich danken.

Bruchfrontbegradiung nach Störung durch eingelagerte Teilchen und Blasen im Glas

K. PETER

Physikalisches Laboratorium Mosbach *

(Z. Naturforsch. **23 a**, 1681—1682 [1968]; eingeg. am 5. September 1968)

Schallfraktographie¹ ermöglicht Sichtbarmachung von Fronten eines spröden Bruches durch schwache periodische Ablenkungen aus der Bruchrichtung. Bruchfronten sind dabei Linien gleicher Beschallungsphasen, die bis zu einem Abstand von einigen hundert Å herab aufgelöst werden konnten². Die Experimente sind so durchführbar, daß keine wesentlichen Störungen des Bruchverlaufes durch diesen Eingriff erfolgen³.

Im einachsigen Zugversuch, dem ein homogenes Material mit seitlichem Anriß unterworfen wird, sind die Bruchfronten im genügenden Abstand vom Rand Geraden. Das stimmt um so besser, je kleiner der beobachtete Bereich im Vergleich zur Probe ist. Die Bruchfront wird durch eingelagerte Teilchen oder auch leere Zwischenräume beeinflußt⁴, doch stellt sich unabhängig von Größe und Art der Störung nach kurzer Laufstrecke die Geradlinigkeit der Bruchfront wieder her. Abb. 1 ** zeigt den Bruchdurchgang durch ein größeres Fluoridteilchen in Glas, die kleineren brauchen nicht beachtet zu werden. Hinter dem Teilchen ist der Bruch gegenüber dem Nachbarbereich etwas weiter vorangekommen, läuft nun aber langsamer, so daß nach wenigen μ sec (ein Linienabstand $\cong 1 \mu$ sec) wieder eine gerade Front entstanden ist: Der Bruch hat die Störung „vergessen“. In Abb. 2 bewirkt eine Vielzahl von Kieselsglaspartikeln in Glasmatrix Abweichungen von der Art, daß hinter jedem Teilchen der Bruch gegenüber dem Nachbarbereich zurückbleibt, danach aber den Rückstand durch erhöhte Geschwindigkeit einholt. An diesem Verhalten ändert sich nichts, wenn ein bisher spontaner Bruch auf Grund der Nichterfüllung der Griffith-Bedingung⁵ kurzzeitig in einen thermisch bedingten Bruch übergeht. Dieser Bereich ist in Abb. 3 am Verschwinden der regelmäßigen Modulation erkennbar. Die Wirkung der hier gezeigten „Störstellen“ erstreckt sich nur wenig in Richtung der Bruchausbrei-

tung, wohl aber weit senkrecht dazu. Die Bruchfronten haben eine gewisse Steifigkeit.

Zum Verständnis dieser Erscheinungen können Überlegungen zur spezifischen Bruchenergie (= „Rißausbreitungskraft“) G bzw. zum Spannungsverstärkungsfaktor β bei gekrümmter Bruchfront in einem sich unendlich erstreckenden Körper unter einachsiger Zugspannung herangezogen werden, wobei $G \sim \beta^2$ ist. Nach⁶ muß dann ein elliptischer Innenriß in einen Kreis übergehen, d. h. G und damit auch die Bruchgeschwindigkeit³ ist um so größer, je schwächer die Bruchfrontkrümmung ist. G als Funktion der Krümmung allein darzustellen, ist allerdings selbst in diesem einfachen Modell nicht möglich, doch läßt sich das Bruchverhalten nun qualitativ verstehen. Für negative Krümmungen wie in Abb. 2 ist das Modell eines ringsum angekerb-

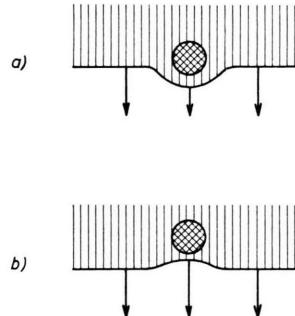


Abb. 4. Schema der Bruchfronten nach Durchgang durch eine Störung. Die Größe der Pfeile ist ein Maß für die Rißausbreitungskraft an dieser Stelle. a) entspricht Abb. 1; b) entspricht Abb. 2 (und Abb. 3).

ten Stabes brauchbar (vgl. Abb. 4). In⁷ ist für den reduzierten Spannungsverstärkungsfaktor

$$\chi = \beta/\sigma \sqrt{a}$$

(σ =äußere Zugspannung, a =Kerbänge) eine Formel zu entnehmen, die in Abb. 5 (Kurve I) aufgetragen ist. $\chi=1$ bedeutet geradlinige Bruchfront. Mit wachsendem a (stärkere negative Krümmung) nimmt somit die Bruchgeschwindigkeit zu, was analog den Verhältnissen in Abb. 2 bzw. Abb. 4 b ist. Der Einfluß des lokalen zu-

⁴ K. PETER, Z. Angew. Phys., im Druck.

^{**} Abb. 1 bis 3 auf Tafel S. 1682 a.

⁵ A. A. GRIFFITH, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **221**, 163 [1920].

⁶ G. R. IRWIN, Trans. ASME **29 E**, 651 [1962].

⁷ P. C. PARIS u. G. C. SIEH, ASTM Spec. Techn. Publ. No. **381**, 30 [1965].

* Angeschlossen der Arbeitsgemeinschaft Industrieller Forschungsvereinigungen (AIF) und der Universität Karlsruhe (V 124/68).

¹ F. KERKHOF, Tagungsbuch über die mechanischen Eigenschaften des Glases, Symposium Florenz 1961, S. 799.

² K. PETER, Z. Naturforsch. **20 a**, 168 [1965].

³ H. KÜPPERS, Wiss. Ber. Nr. 4/66 d. Ernst-Mach-Institutes Freiburg i. Br. 1966.