

Institut für Reaktorwerkstoffe
KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
des Landes Nordrhein-Westfalen

DIE DIREKTE MESSUNG
VON STAPELFEHLERENERGIEN

von

R. Siems, P. Delavignette und S. Amelinckx

Jül - 41 - RW

Februar 1962

Sonderdruck

aus der Zeitschrift für Physik 165, 502–532 (1961) Springer-Verlag, Berlin · Göttingen · Heidelberg



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 41

Institut für Reaktorwerkstoffe Jül - 41 - RW

Dok.: CRYSTALS - METHODS OF MEASUREMENT * DK 548.0 : 53

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Zeitschrift für Physik 165, 502—532 (1961)

Aus dem Institut für Reaktorwerkstoffe, Kernforschungsanlage Jülich
und dem Centre d'Études de l'Énergie Nucléaire, Mol, Belgien

Die direkte Messung von Stapelfehlerenergien

Von

R. SIEMS*, P. DELAVIGNETTE** und S. AMELINCKX**

Mit 21 Figuren im Text

(Eingegangen am 19. Juli 1961)

* Jülich.

** Mol.

Different methods for determining stacking fault energies from dislocation configurations observed in the electron microscope are discussed. Configurations discussed are simple, threefold, and fourfold ribbons, arrays of many parallel ribbons, and dislocation nodes. The latter are treated taking the mutual interaction of the partials approximately into account. Results are given for measurements in graphite, MoS₂, AlN, and talc.

1. Einleitung

Die Stapelfehlerenergie ist eine Größe, die weder experimentell noch rein theoretisch leicht zu bestimmen ist. In letzter Zeit sind jedoch, Dank der Möglichkeit, Versetzungsanordnungen im Detail im Elektronenmikroskop zu beobachten, Verfahren entwickelt worden, die eine Ermittlung der Stapelfehlerenergie aus geometrischen Daten gestatten. Es ist das Ziel dieser Arbeit, diese Verfahren zu beschreiben und ihre Güte durch Anwendung auf beobachtete Anordnungen im Graphit, Molybdänsulfid, Talk und Aluminiumnitrid zu erproben.

Im folgenden wird eine Anzahl dafür geeigneter geometrischer Strukturen untersucht und ihre Anwendung an beobachteten Beispielen erläutert.

Bei Versetzungen in der hexagonalen Basisebene, deren Burgers-Vektoren ebenfalls in dieser Ebene liegen, ist man in der glücklichen Lage, die Rechnungen wie im isotropen Material mit zwei elastischen Moduln durchführen zu können, die dem Schubmodul μ und der Größe $\mu/1 - \nu$ im isotropen Material entsprechen (ν = Querkontraktionszahl).

Im anisotropen Material läßt sich das Spannungsfeld σ_{ik} einer geraden Versetzungslinie mit Hilfe von zwei Funktionen F und Φ darstellen (vgl. für das folgende SEEGER und SCHÖCK¹). Es gilt für eine

¹ SEEGER, A., u. G. SCHÖCK: Acta metallurgica 1, 519 (1953).

parallel zur x -Achse liegende Versetzung

$$\sigma_{yy} = \frac{\partial^2 F(y, z)}{\partial z^2}, \quad \sigma_{yz} = -\frac{\partial^2 F(y, z)}{\partial y \partial z}, \quad \sigma_{zz} = \frac{\partial^2 F(y, z)}{\partial y^2}$$

$$\sigma_{zx} = -\frac{\partial \Phi}{\partial y}, \quad \sigma_{yx} = \frac{\partial \Phi}{\partial z}.$$

Damit werden die Gleichgewichtsbedingungen automatisch erfüllt. Die Funktionen F und Φ müssen den Kompatibilitätsbedingungen genügen. Mit dem Ansatz

$$F = A(\alpha) e^{i\alpha y + i\alpha x z},$$

$$\Phi = i\alpha B(\alpha) e^{i\alpha y + i\alpha x z}$$

erhält man als Lösbarkeitsbedingung eine Gleichung 6. Grades in κ , die jedoch für Versetzungen in der hexagonalen Basisebene in eine quadratische und eine lineare Gleichung für κ^2 aufspaltet. Die Gleichungen für F und Φ sind in diesem Fall separiert und die Stufen- und Schraubenanteile der Versetzungen können unabhängig voneinander behandelt werden. Es ergibt sich für die Spannungen in der Ebene, in der die Versetzung liegt,

$$\sigma_{zy} = \frac{1}{2\pi K_1} \frac{b_y}{y}, \quad \sigma_{zx} = \frac{1}{2\pi K_2} \frac{b_x}{y}$$

mit

$$K_1 = \frac{S_{22}}{s_{11}} (\kappa_1'' + \kappa_2''), \quad K_2 = \sqrt{s_{44} s_{66}}.$$

Dabei sind die s_{ik} die elastischen Koeffizienten, die sich in folgendem Schema schreiben lassen:

$$\begin{array}{cccccc} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & s_{44} & 0 & 0 \\ & & & & s_{44} & 0 \\ & & & & & s_{66} \end{array} \quad \text{mit } s_{66} = 2(s_{11} - s_{12}).$$

$\mathfrak{b} = (b_x, b_y, 0)$ ist der Burgers-Vektor der Versetzung.

Die S_{ik} sind gegeben durch $S_{ik} = s_{ik} s_{11} - s_{i1} s_{k1}$. Die κ_i'' schließlich sind die Imaginärteile der Lösungen $\kappa_1 = \kappa_1' \pm i\kappa_1''$ und $\kappa_2 = \kappa_2' \pm i\kappa_2''$ der Gleichung

$$S_{22} \kappa^4 + (2S_{23} + S_{41}) \kappa^2 + S_{33} = 0 \quad (\kappa_i'' > 0).$$

Den Gleichungen für σ_{zy} und σ_{zx} entsprechen im isotropen Material die Gleichungen

$$\sigma_{zy} = \frac{\mu}{2(1-\nu)\pi} \cdot \frac{b_y}{y}, \quad \sigma_{zx} = \frac{\mu}{2\pi} \cdot \frac{b_x}{y}.$$

Für Versetzungen in der hexagonalen Basisebene können wir also einen „Schubmodul“ μ und eine „Querkontraktionszahl“ ν einführen durch

$$\mu = \frac{1}{K_2}, \quad \frac{\mu}{1-\nu} = \frac{1}{K_1}, \quad 1-\nu = \frac{K_1}{K_2}.$$

Mit den Daten für Graphit von BOWMAN und KRUMHANSL²:

$$c_{44} = 2,3 \cdot 10^{10} \text{ dyn cm}^{-2}$$

$$c_{11} = 1,13 \cdot 10^{13} \text{ dyn cm}^{-2}$$

$$c_{12} = 0,25 \cdot c_{11}$$

ergibt sich unter Verwendung der Umrechnungsformeln

$$s_{44} = \frac{1}{c_{44}} \quad \text{und} \quad s_{66} = \frac{1}{c_{66}} = \frac{2}{c_{11} - c_{12}};$$

$$\mu = 3,12 \cdot 10^{11} \text{ dyn cm}^{-2}.$$

In den folgenden Rechnungen benutzen wir die Abkürzungen μ und ν . Für numerische Berechnungen wird für μ der aus den elastischen Konstanten folgende Wert verwendet. Der Wert von ν wird aus unseren Messungen ermittelt werden.

Zur Auswertung werden die für das unendlich ausgedehnte Material gültigen Ausdrücke für die Kraft zwischen Versetzungen benutzt. Eine Berücksichtigung der endlichen Schichtdicke führt zu dem Ergebnis, daß z.B. bei Graphit Abweichungen von der für das unendliche Material gültigen Formel auftreten, wenn der Abstand der betrachteten Versetzungen mehr als zehnmal so groß ist wie ihr Abstand von der Oberfläche.

2. Messung an isolierten, einfach aufgespaltenen Versetzungen

Spaltet eine vollständige Versetzung in zwei Teilversetzungen auf, so wird deren Abstand d durch die Abstoßung zwischen den Teilversetzungen und die Anziehung durch den Stapelfehler bedingt:

$$d = d_0 \left(1 - \frac{2\nu}{2-\nu} \cos 2\Phi \right). \quad (1)$$

Dabei ist Φ der Winkel zwischen dem Gesamt-Burgers-Vektor und der Richtung der Versetzung; ν ist die Querkontraktionszahl und d_0 die Breite einer 45° -Versetzung. Die Stapelfehlerenergie γ ist

$$\gamma = \frac{\mu b^2}{8\pi d_0} \frac{2-\nu}{1-\nu}, \quad (2)$$

² BOWMAN, J.C., u. J.A. KRUMHANSL: J. Phys. Chem. Solids **6**, 367 (1958).

wobei μ der Schubmodul und \mathfrak{b} der Burgers-Vektor der Teilversetzungen ist. Falls μ nicht bekannt ist, kann nur das Verhältnis γ/μ bestimmt werden.

Die extremen Werte von d werden bei Winkeln $\Phi = 0$ und $\Phi = 90^\circ$ erreicht:

$$d(\Phi = 0^\circ) = \frac{\alpha}{4\gamma} (2 - 3\nu)$$

$$d(\Phi = 90^\circ) = \frac{\alpha}{4\gamma} (2 + \nu)$$

mit

$$\alpha = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}.$$

Für die hier untersuchten Materialien liegt der ν -Wert bei etwa $1/3$.

Die extremen Werte von $d\gamma/\alpha$ sind dann $1/4$ für $\Phi = 0$ bzw. $7/12$ für $\Phi = 90^\circ$. Die Abstände unterscheiden sich also in den extremen Fällen etwa um einen Faktor 2.

Die Auswertung dieser Formeln zur Bestimmung von γ und ν geschah folgendermaßen:

a) Bestimmung von Φ und \mathfrak{b} . Zur Ermittlung von Φ ist es nötig, die Burgers-Vektoren der Teilversetzungen zu bestimmen. Dazu wird die Tatsache benutzt, daß der Kontrast verschwindet, falls $\mathfrak{g} \cdot \mathfrak{b} = 0$ (dabei ist \mathfrak{g} der Laue-Vektor des Reflexes, der für den Kontrast verantwortlich ist).

Die Probe wird geneigt bis der Kontrast der interessierenden Teilversetzung verschwindet, während die anderen Versetzungen sichtbar bleiben. Ohne Änderung der Orientierung der Probe wird dann ein Feinbereichsbeugungsbild von der Nachbarschaft der Versetzung aufgenommen, für das ein Gebiet nicht zu nahe an einer Extinktionskontur ausgewählt wird.

Im Beugungsbild wird ein Punkt intensiver sein als die anderen; dieser stammt von dem Bragg-Reflex, der für den Kontrast verantwortlich ist. Damit ist \mathfrak{g} bestimmt. Dies gilt natürlich nur, wenn ein einziger Reflex für den Kontrast verantwortlich ist.

Im allgemeinen sind zwei zu Extinktionen führende Reflexe nötig, um die Richtung des Burgers-Vektors als Schnittlinie der beiden Ebenen zu bestimmen. Da man jedoch weiß, daß in Schichtstrukturen, wie z. B. in Graphit, die Gleitebene parallel zur Spaltebene ist, die ebenfalls die Ebene der Folie darstellt, genügt die Kenntnis *einer* weiteren Ebene, in der der Burgers-Vektor liegt. Es ist klar, daß der Betrag des Vektors auf diese Weise nicht bestimmt werden kann. Falls die Kristallstruktur bekannt ist, kann man jedoch den Betrag erraten.

Die Fig. 1 bringt ein Beispiel für eine solche Bestimmung der Burgers-Vektoren aller Teilversetzungen eines hexagonalen Netzwerks. Die Figur zeigt vier verschiedene Kontraste desselben Gebietes; a) zeigt

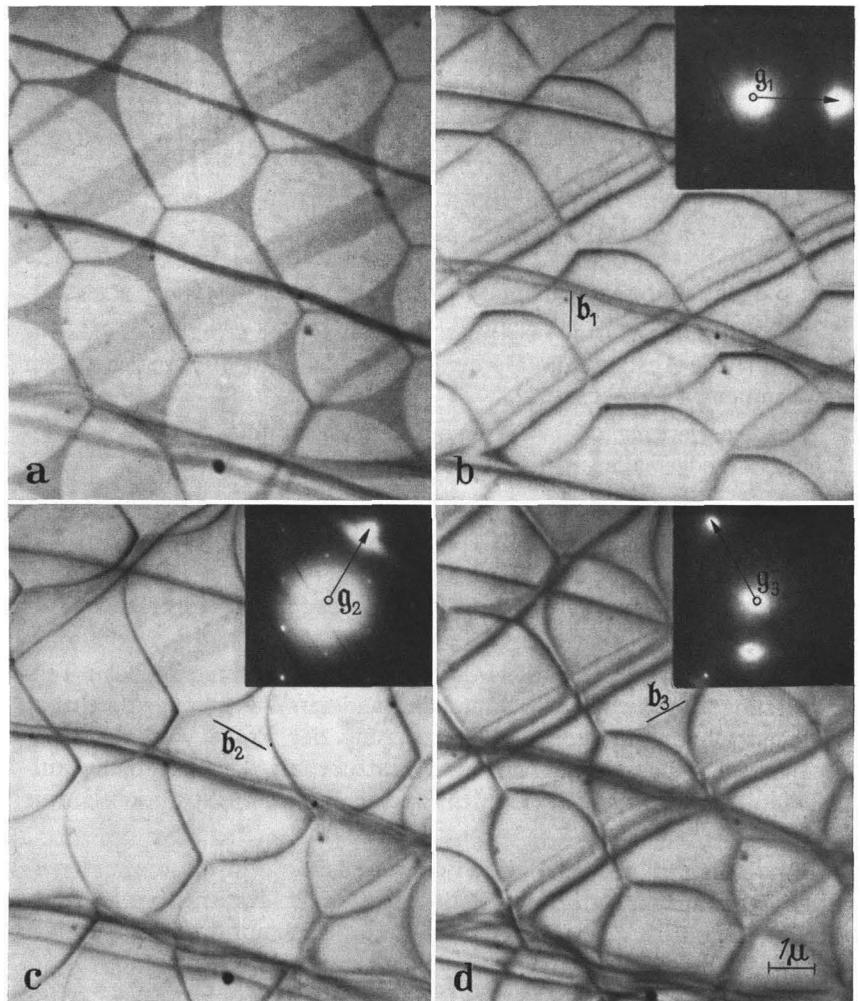


Fig. 1 a—d. Hexagonales Netzwerk unter verschiedenen Kontrastbedingungen. a) Stapelfehlerkontrast; b, c, d) Dasselbe Gebiet in solchen Probenorientierungen, daß der Kontrast jeweils einer Teilversetzungsart verschwindet. Die eingesetzten Photos zeigen die entsprechenden Beugungsbilder mit den Beugungsvektoren g_1 , g_2 und g_3 .

den Stapelfehlerkontrast, in b), c) und d) verschwinden nacheinander die Kontraste je einer Teilversetzungsart. Die Vektoren g_1 , g_2 und g_3 sind auf den eingesetzten Photos der entsprechenden Beugungsbilder angegeben.

b) Messung von d_0 , γ und ν . Nach (1) trägt man das gemessene d gegen $\cos 2\Phi$ auf. Der Schnittpunkt dieser Geraden mit der d -Achse

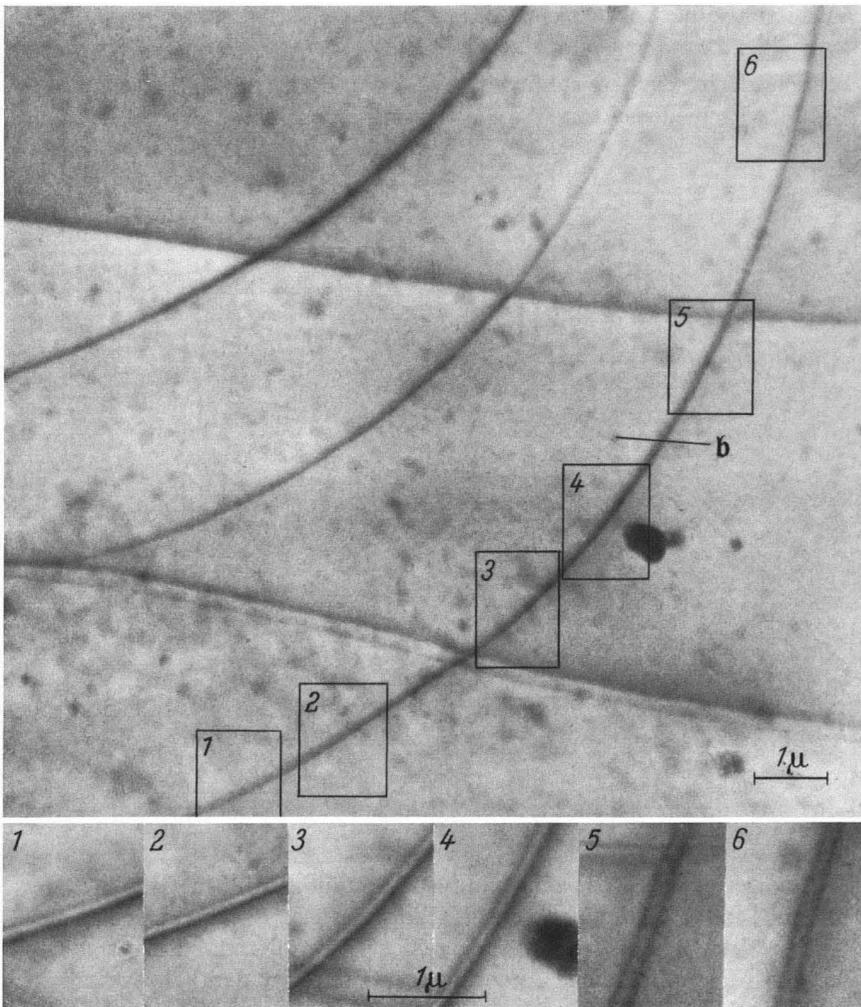


Fig. 2. Gekrümmtes Versetzungsband in Graphit. Gemessen wurde die Breite d als Funktion des Winkels Φ zwischen dem Gesamt-Burgers-Vektor und der Richtung des Bandes. Die eingesetzten Bilder stellen vergrößerte Ausschnittsphotos dar, die im Mittelpunkt des Bildschirms aufgenommen wurden. Man erkennt die allmähliche Änderung der Breite mit der Orientierung. Der Gesamt-Burgers-Vektor des Bandes ist angegeben

ergibt d_0 und die Steigung m der Geraden liefert $\nu = 2m/(2 - m)$. Aus Gl. (2) folgt dann γ/μ bzw. γ . Man muß einige Vorsicht walten lassen, um verlässliche Resultate zu bekommen. Die sphärische Aberration

des Mikroskops macht es erforderlich, daß Messungen nur in der Mitte der Photographie gemacht werden. Weiterhin sollte man die seitliche Verschiebung des Versetzungsbildes relativ zur wirklichen Lage der Versetzungslinie berücksichtigen.

Eine einfache Methode, die alle diese Schwierigkeiten vermeidet, besteht darin, ein langes, etwas gebogenes Band zu benutzen und die Breite verschiedener seiner Teilabschnitte zu messen. Es wird immer dafür gesorgt, daß an dem jeweiligen Teilabschnitt dieselben Kontrastbedingungen herrschen. Der von der Verschiebung des Bildes herrührende Fehler beeinflußt dann nur d_0 und nicht ν . Die Benutzung eines

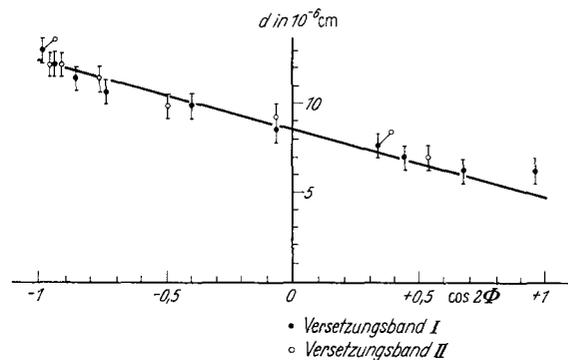


Fig. 3. Die Breite d von Versetzungsbändern in Graphit als Funktion von $\cos 2\Phi$

langen, gebogenen Versetzungsbandes ist auch deshalb vorteilhaft, weil dann nur eine einzige Bestimmung des Burgers-Vektors für eine große Anzahl von Beobachtungen nötig ist.

c) Beobachtungen. In Graphit, Molybdänsulfid und Aluminiumnitrid wird eine Dissoziation in Teilversetzungen beobachtet; das eben erwähnte Verfahren ist hier also anwendbar.

Fig. 2 zeigt z. B. ein gekrümmtes Versetzungsband in Graphit. Der untere Teil der Abbildung enthält Ausschnitte, die an verschiedenen Stellen des Bandes, alle mit derselben Vergrößerung, aufgenommen wurden. Die allmähliche Änderung der Breite ist deutlich erkennbar.

Die Ergebnisse der Auswertung an diesem und weiteren Bändern sind in Fig. 3 dargestellt. Man sieht, daß die Beziehung (1) in guter Näherung erfüllt ist. Die Werte der Konstanten sind $d_0 = 10^{-5}$ cm und $\nu = 0,24 \pm 0,04$. Daraus folgt die Stapelfehlerenergie nach Gl. (2):

$$\gamma/\mu = 1,85 \cdot 10^{-12} \text{ cm}, \quad \gamma = 0,58 \text{ erg/cm}^2.$$

In Molybdänsulfid ist die Situation komplizierter. Hier kommen nämlich drei Arten von Versetzungen vor. Eine dissoziiert gar nicht. Die

beiden anderen dissoziieren in zwei Teilversetzungen vom Shockley-Typ (zur Definition des Shockley-Typs vgl. z. B. ³), wegen der verschiedenen Stapelfehlerenergien sind die Abstände jedoch verschieden. In einem Fall ist die Stapelfehlerenergie so klein, daß keine genügend isolierten Bänder gefunden werden, an denen ν hätte bestimmt werden können. Im Abschnitt 6 wird jedoch die Stapelfehlerenergie aus einer Anordnung

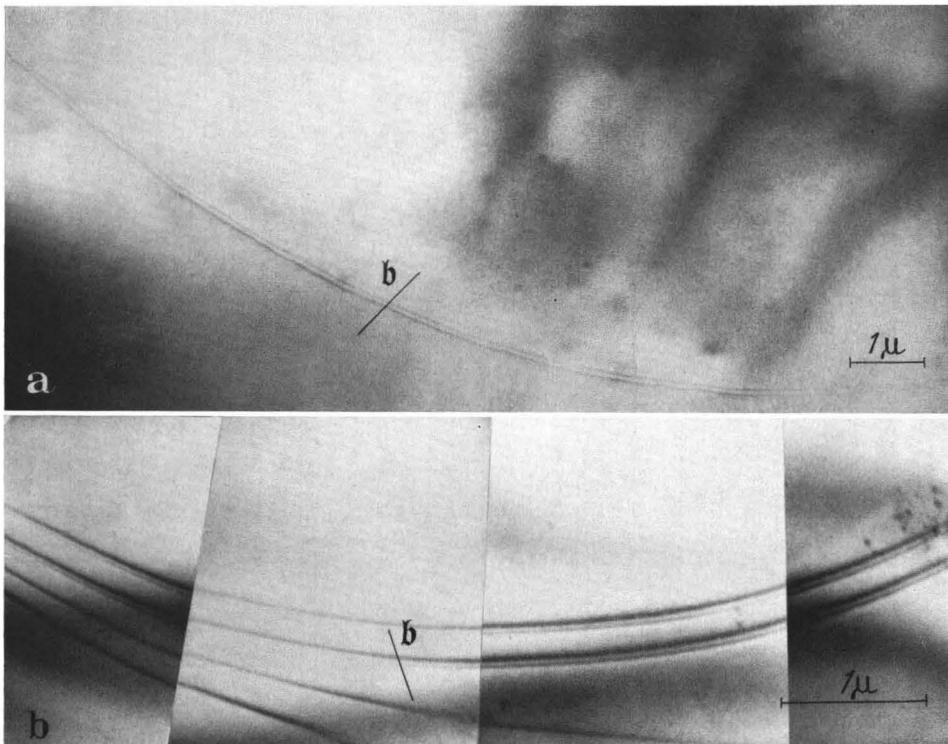


Fig. 4 a u. b. Gekrümmte Versetzungsbänder in MoS_2 (a) und AlN (b), an denen die Abhängigkeit der Breite d vom Winkel Φ gemessen wurde. Bei a war die Änderung der Breite des Bandes unmeßbar klein

paralleler Versetzungsbänder ermittelt. Im anderen Fall hat die Stapelfehlerenergie einen mittleren Wert. Die Beobachtungen wurden auf dieselbe Weise wie für Graphit durchgeführt und Fig. 4a zeigt, daß die Bandbreite für alle Orientierungen praktisch konstant ist ($d_0 = 0,066 \cdot 10^{-4}$ cm). Das ν ist also sehr klein ($\nu < 0,2$). Für das Verhältnis γ/μ ergibt sich $\gamma/\mu = 3,8 \cdot 10^{-12}$ cm.

Fig. 4b zeigt einige gekrümmte Versetzungsbänder in Aluminiumnitrid. Aus der Änderung der Breite mit der Orientierung wurde ν

³ SEEGER, A.: Handbuch der Physik, Bd. VII/1. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1955.

bestimmt. Es ergab sich $0,3 < \nu < 0,5$. Die Messung liefert nur einen Näherungswert, da der Bereich der vorkommenden Φ -Werte verhältnismäßig klein ist und die Bänder nicht gut isoliert sind. Für das Verhältnis γ/μ ergibt sich $\gamma/\mu \approx 9,5 \cdot 10^{-12}$ cm. Weiterhin wurde die Breite der

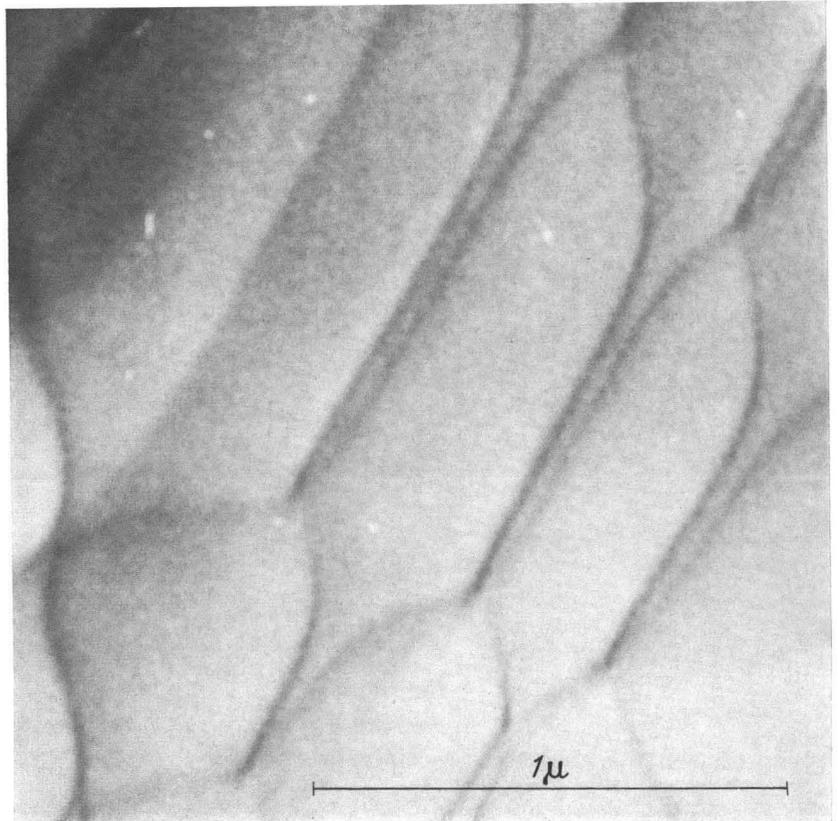


Fig. 5. Ausgedehnte Versetzungen in AlN, an denen zur Bestimmung der Stapelfehlerenergie die Breite d gemessen wurde

Bänder in Fig. 5 gemessen und daraus ebenso wie vorher γ/μ bestimmt; man findet $3,4 \cdot 10^{-12}$ cm $< \gamma/\mu < 10,3 \cdot 10^{-12}$ cm ($d = 0,05 \cdot 10^{-4}$ cm), je nachdem, ob es sich um Stufen- oder Schraubenversetzungen handelt.

3. Messung an dreifachen Bändern

Es wurde gezeigt, daß in Graphit zwei einfach aufgespaltene Versetzungen zu einem stabilen dreifachen „Band“ (ribbon) zusammenlaufen können⁴, dessen drei Teilversetzungen denselben Burgers-Vektor

⁴ AMELINCKX, S., u. P. DELAVIGNETTE: J. Appl. Phys. **31**, 2126 (1960).

haben. Ein Beispiel dafür zeigt Fig. 6, aus der man auch entnehmen kann, daß die drei Teilversetzungen gleichzeitig ihren Kontrast ver-

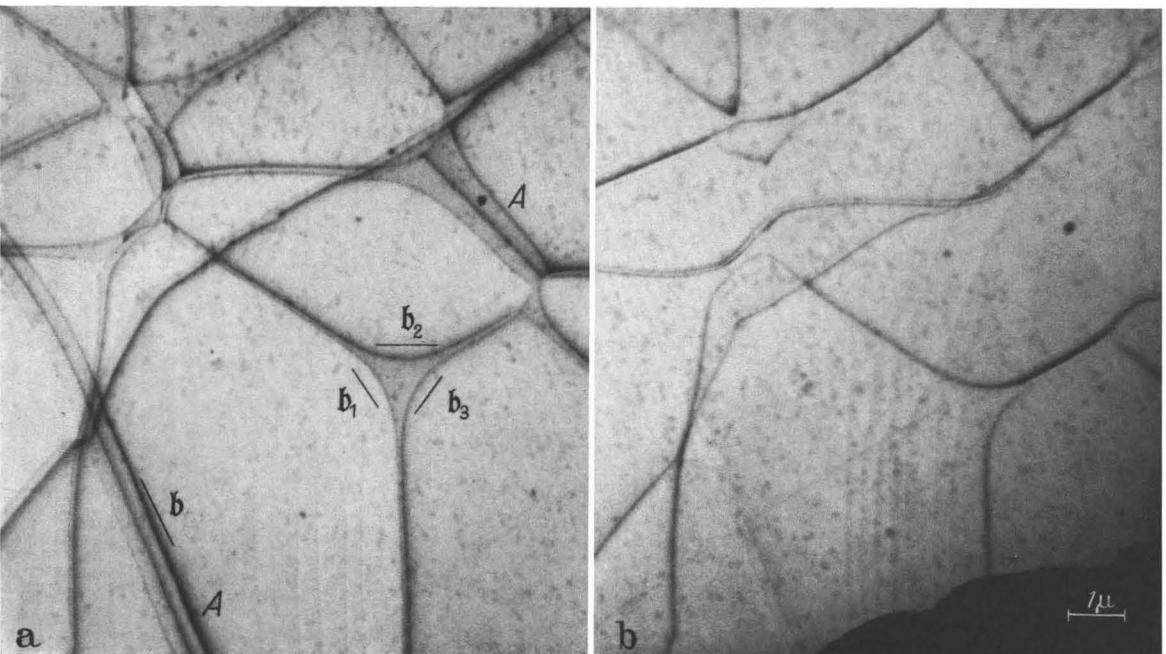


Fig. 6a u. b. Versetzungsnetzwerk in Graphit mit dreifachen Versetzungen bei *A* und einem Schraubenversetzungsknoten. a Linienkontrast, b dasselbe Gebiet unter solchen Kontrastbedingungen, daß Teilversetzungen eines bestimmten Burgers-Vektors keinen Kontrast mehr zeigen. Damit sind der Burgers-Vektor dieser Teilversetzungen und auch die Burgers-Vektoren der anderen Versetzungen bestimmt, und gleichzeitig ist bewiesen, daß die Teilversetzungen der dreifachen Bänder alle denselben Burgers-Vektor haben

lieren, d.h., parallele Burgers-Vektoren besitzen. Dasselbe Verhalten stellt man in Fig. 1 fest.

Einige Bänder sind symmetrisch (*A*), andere unsymmetrisch (*B*), wie z.B. in Fig. 7. Es kommen also zwei Typen solcher Bänder vor. In



Fig. 7. Dreifache Bänder in Stapelfehlerkontrast. *A* Dreifache Bänder mit zwei gleichartigen Stapelfehlern. *B* Dreifaches Band mit zwei verschiedenen Stapelfehlern

der folgenden Behandlung werden wir die Burgers-Vektoren in Anlehnung an Fig. 8 kennzeichnen.

Das symmetrische Band entsteht aus der Verschmelzung eines Bandes mit dem Burgers-Vektor $(A\sigma + \sigma B)$ und eines Bandes mit dem Vektor $(\sigma C + A\sigma)$. Die Reaktion kann folgendermaßen formuliert

werden:

$$(A\sigma + \sigma B) + (\sigma C + A\sigma) \rightarrow [A\sigma + (\sigma B + \sigma C) + A\sigma] \\ \rightarrow (A\sigma + A\sigma + A\sigma).$$

In Fig. 9a ist ein Modell der Struktur dieses dreifachen Bandes dargestellt. Es ist klar, daß die zwei Teilbänder in benachbarten Gitter-

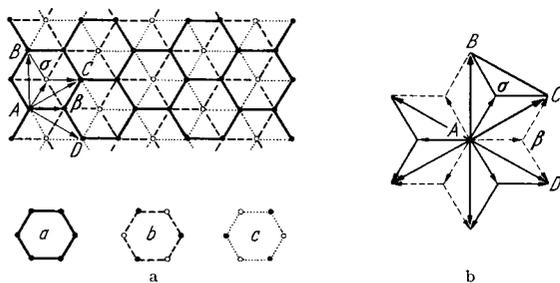


Fig. 8. a Schematische Darstellung der Graphitstruktur in Projektion auf die hexagonale Ebene, mit Angabe der Burgers-Vektoren. b Bezugssystem zur Kennzeichnung der Burgers-Vektoren. Die vollkommenen Versetzungen haben Burgers-Vektoren AB, AC, AD ; sie können aufspalten nach dem Schema: $AB \rightarrow A\sigma + \sigma B$

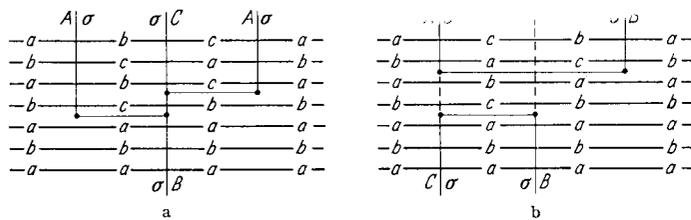


Fig. 9a-c. Modelle für die in Graphit beobachteten dreifachen Versetzungsbänder. Die Querschnitte zeigen die Aufeinanderfolge der Schichten (vgl. Fig. 8). a Querschnitt des symmetrischen Bandes. b Querschnitt des unsymmetrischen Bandes. c Projektion auf die hexagonale Ebene mit Angabe der benutzten Bezeichnungsweise

ebenen liegen oder in Gitterebenen, deren Abstand ein ungeradzahliges Vielfaches des Abstandes benachbarter Gitterebenen ist.

Das asymmetrische Band entsteht durch die Reaktion

$$(C\sigma + \sigma B) + (A\sigma + \sigma B) \rightarrow [(C\sigma + A\sigma) + \sigma B + \sigma B] \\ \rightarrow (\sigma B + \sigma B + \sigma B).$$

Fig. 9b zeigt einen Querschnitt durch ein solches Band. Die beiden Stapelfehler liegen in diesem Fall in Ebenen, deren Abstand ein ganzzahliges Vielfaches des Abstandes benachbarter Ebenen ist. Zur Bildung eines Bandes dieses Typs ist ein „Überkreuzen“ nötig. Fig. 7 zeigt bei B ein Beispiel.

In beiden Fällen sind die Stapelfehler auf den beiden Seiten des Bandes verschiedenartig; das spiegelt sich auch in der Verschiedenheit des Streukontrastes wieder. Für das symmetrische Band haben die beiden Stapelfehler jedoch dieselbe Energie, da sie, bis auf eine Symmetrioperation, äquivalent sind. Im asymmetrischen Band enthält der eine Stapelfehler zwei Verletzungen der Stapelfolge, der andere dagegen vier, wie man aus dem Querschnitt in Fig. 9b sieht. Das ist der Grund für die Asymmetrie.

Mit der in Fig. 9c erläuterten Schreibweise kann man leicht die Gleichgewichtsbedingungen für ein dreifaches Band angeben. Man setzt die Kräfte auf jede Versetzung gleich null und erhält

$$A \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{x+y} \right) = \gamma_1, \quad (3)$$

$$A \left(\frac{1}{y} + \frac{1}{x+y} \right) = \gamma_2, \quad (4)$$

$$A \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{y} \right) = \gamma_1 - \gamma_2, \quad (5)$$

wobei

$$A = \alpha \sin^2 \Phi + \beta \cos^2 \Phi, \quad (6)$$

$$\alpha = \mu b^2 / 2\pi (1 - \nu), \quad \beta = \mu b^2 / 2\pi. \quad (7)$$

Gl. (5) ist eine Linearkombination der Gln. (3) und (4). Die Lösung des Gleichungssystems ist

$$x = 3A / [(2\gamma_1 - \gamma_2) + g], \quad (8)$$

$$y = 3A / [(2\gamma_2 - \gamma_1) + g] \quad (9)$$

mit

$$g = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2 - \gamma_1 \gamma_2}. \quad (10)$$

Im symmetrischen Fall ($\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$) ergibt sich $x = y = 3A/2\gamma$ und die Gesamtbreite

$$w = x + y = 3A/\gamma. \quad (11)$$

Man kann den Ausdruck (11) etwas umformen, um die Ähnlichkeit mit dem einfachen Band bezüglich der Abhängigkeit $d(\Phi)$ zu betonen. Es ergibt sich

$$w = w_0 \left(1 - \frac{\nu}{2-\nu} \cos 2\Phi \right),$$

wobei

$$w_0 = \frac{3\mu b^2}{4\pi\gamma} \frac{2-\nu}{1-\nu}.$$

Auch im unsymmetrischen Fall ist die durch Gl. (1) gegebene funktionelle Abhängigkeit noch gültig, nur ist w_0 jetzt gegeben durch

$$w_0 = \frac{3\mu b^2}{4\pi} \frac{2-\nu}{1-\nu} \cdot f(\gamma_1, \gamma_2),$$

wobei

$$f(\gamma_1, \gamma_2) \equiv \frac{\gamma_1 + \gamma_2 + 2g}{4\gamma_1\gamma_2 - \gamma_1^2 - \gamma_2^2 + (\gamma_1 + \gamma_2)g}.$$

Für $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$ wird $f(\gamma_1, \gamma_2) = 1/\gamma$.

Speziell für

$$\Phi = 0 \quad \text{folgt} \quad w = 3\beta/\gamma \quad (12)$$

und für

$$\Phi = 90^\circ \quad w = 3\alpha/\gamma. \quad (13)$$

Da die Breite dreifacher Bänder größer und daher genauer meßbar ist, kann in diesem Fall die Stapelfehlerenergie γ genauer bestimmt werden. Weiterhin stört hier die Bildverschiebung nicht, da wegen der Gleichheit der drei Burgers-Vektoren die Verschiebung für die drei Teilversetzungen gleich ist und daher die Breite nicht beeinflußt. Speziell für die dreifachen Bänder der Fig. 1 ist $w = 0,75 \cdot 10^{-4}$ cm und $\Phi = 60^\circ$. Damit ergibt sich $\gamma/\mu = 1,6 \cdot 10^{-12}$ cm, d. h. $\gamma = 0,5$ erg/cm².

Das Verhältnis der Breiten dreifacher und einfacher Bänder desselben Charakters hängt nur von ν ab. Daraus kann man also auch ν bestimmen:

$$\frac{w}{d} = \frac{12}{2+\nu} \quad \text{für Stufenbänder,} \quad (14)$$

$$\frac{w}{d} = \frac{12(1-\nu)}{2-3\nu} \quad \text{für Schraubenbänder.} \quad (15)$$

In Fig. 6 und 7 sind sowohl dreifache als auch einfache Schraubenbänder zu sehen. Das Verhältnis ihrer Breiten beträgt unter Berücksichtigung der Bildverschiebung $w/d \approx 7$. Damit ergibt sich aus Gl. (15) $\nu \approx 0,22$ in Übereinstimmung mit dem Wert aus § 2c.

Im asymmetrischen Fall kann das Verhältnis der Stapelfehlerenergien der beiden Teile des Bandes als eine Funktion von $r = y/x$ ausgedrückt werden. Es ergibt sich aus Gl. (3) und (4)

$$\frac{\gamma_1}{\gamma_2} = \frac{r(2+\nu)}{2r+1}. \quad (16)$$

Bei dem Band B in Fig. 7 ist näherungsweise $r = 2$, womit sich $\gamma_1/\gamma_2 = 8/5$ ergibt.

4. Messung an vierfachen Bändern

Es ist schon früher gezeigt worden, daß Versetzungen in Talk in vier Teilversetzungen aufspalten. In Fig. 10a ist ein Modell für solch ein Band dargestellt. Übernächste Teilversetzungen haben denselben

Burgers-Vektor. Dieses Modell wurde durch Kontrasteffekte verifiziert⁵. A priori muß man mit drei Stapelfehlern verschiedener Energien γ_1 , γ_2 und γ_3 rechnen. Die Gleichgewichtsbedingungen, die man erhält,

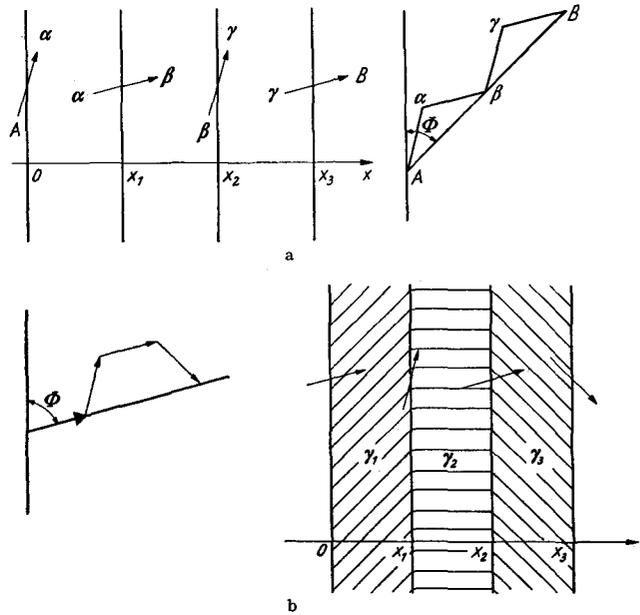


Fig. 10. a Modell für die in Talk beobachteten vierfachen Versetzungsbänder. b Modell für die in Aluminiumoxyd zu erwartenden vierfachen Versetzungsbänder

indem man die Kraft auf jede Versetzung gleich null setzt, lauten:

$$B \left(\frac{1}{x_1} + \frac{1}{x_3} \right) - C \frac{1}{x_2} + \gamma_1 = 0, \quad (17)$$

$$-B \left(\frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2 - x_1} \right) - D \frac{1}{x_3 - x_1} + \gamma_2 - \gamma_1 = 0, \quad (18)$$

$$-B \left(\frac{1}{x_2 - x_1} - \frac{1}{x_3 - x_2} \right) + C \frac{1}{x_2} + \gamma_3 - \gamma_2 = 0, \quad (19)$$

$$-B \left(\frac{1}{x_3} + \frac{1}{x_3 - x_2} \right) + D \frac{1}{x_3 - x_2} - \gamma_3 = 0. \quad (20)$$

Dabei sind die folgenden Abkürzungen benutzt worden

$$B = -\frac{1}{4}(\alpha + \beta) + \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \cos 2\Phi, \quad (21)$$

$$C = \beta \cos^2(\Phi - 30^\circ) + \alpha \sin^2(\Phi - 30^\circ), \quad (22)$$

$$D = \beta \cos^2(\Phi + 30^\circ) + \alpha \sin^2(\Phi + 30^\circ). \quad (23)$$

⁵ AMELINCKX, S., u. P. DELAVIGNETTE: Phil. Mag. 5, 533 (1960).

Wenn Φ bekannt ist, kann man mit Hilfe der Gln. (17) bis (23) aus den gemessenen x_i die γ_j bestimmen. Auf diese Weise erhält man aus Messun-

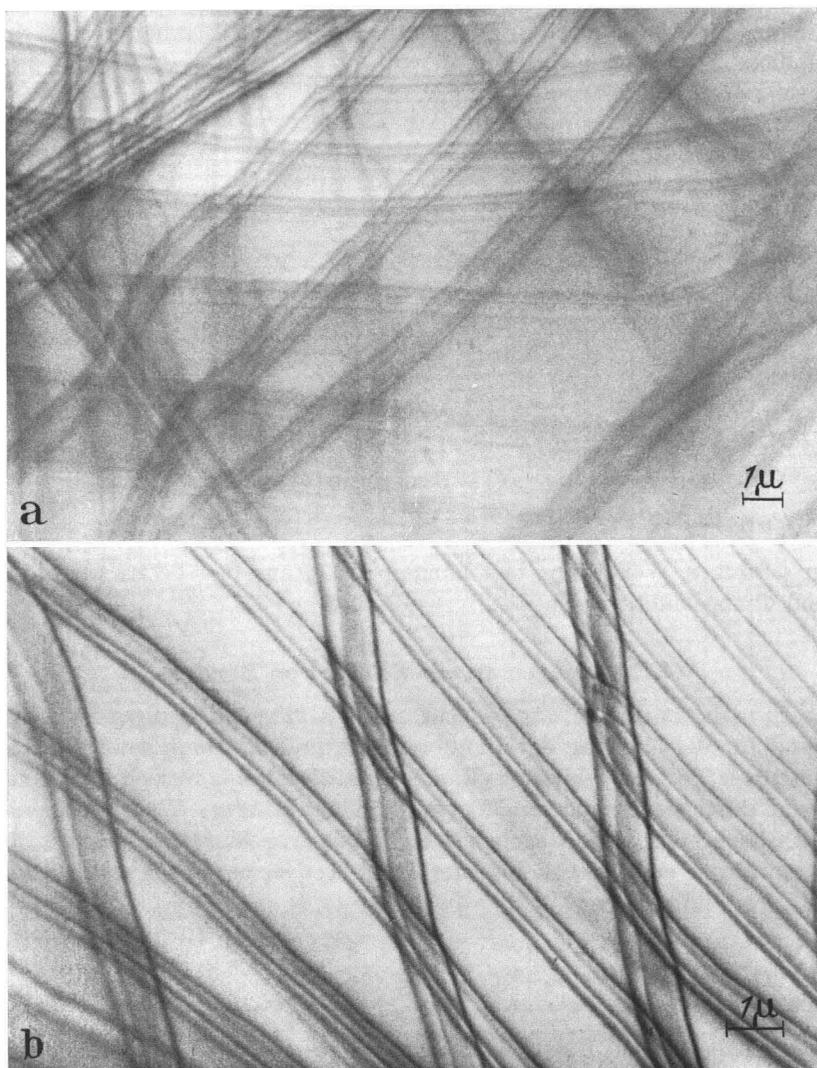


Fig. 11. Vierfache Versetzungsbänder in Talk. Man erkennt die vier Teilversetzungen

gen an mehreren Bändern in Talk den Wert $3 \cdot 10^{-12} \text{ cm} < \frac{\gamma_i}{\mu} < 6 \cdot 10^{-12} \text{ cm}$ (für alle i). Vierfache Bänder sieht man z.B. in Fig. 11. Einzelheiten sind an anderer Stelle veröffentlicht worden⁶.

⁶ AMELINCKX, S., u. P. DELAVIGNETTE: J. Appl. Phys. **32**, 341 (1961).

In Aluminiumoxyd⁷ und ähnlichen Strukturen⁸ sind vierfache Bänder mit Burgers-Vektoren wie in Fig. 10b zu erwarten. Bis jetzt sind noch keine Beobachtungen verfügbar. Die Gleichgewichtsbedingungen für ein solches Band sind den für Talk erhaltenen recht ähnlich. Sie lauten in diesem Fall:

$$\begin{aligned}\gamma_1 - \frac{A_1}{x_1} - \frac{B_1}{x_2} - \frac{C_1}{x_3} &= 0 \\ \gamma_2 - \gamma_1 + \frac{A_1}{x_1} - \frac{A_1}{x_2 - x_1} - \frac{D_1}{x_3 - x_1} &= 0 \\ \gamma_3 - \gamma_2 + \frac{B_1}{x_2} + \frac{A_1}{x_2 - x_1} - \frac{C_1}{x_3 - x_2} &= 0 \\ -\gamma_3 + \frac{C_1}{x_3} + \frac{D_1}{x_3 - x_1} + \frac{C_1}{x_3 - x_2} &= 0,\end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned}A_1 &= \alpha \sin \Phi \sin (\Phi - 60^\circ) + \beta \cos \Phi \cos (\Phi - 60^\circ) \\ B_1 &= \alpha \sin^2 \Phi + \beta \cos^2 \Phi \\ C_1 &= \alpha \sin \Phi \cos (\Phi - 30^\circ) - \beta \cos \Phi \sin (\Phi - 30^\circ) \\ D_1 &= \alpha \sin (\Phi - 60^\circ) \cos (\Phi - 30^\circ) - \beta \cos (\Phi - 60^\circ) \sin (\Phi - 30^\circ).\end{aligned}$$

In derselben Weise wie oben können die γ_i aus den beobachteten x_i und Φ abgeleitet werden.

5. Messungen an einer Folge von Bändern

In manchen Fällen war es nicht möglich, ein genügend gut isoliertes Band für die Messung der Bandbreite zu finden. Dann muß die Anwesenheit der benachbarten Bänder berücksichtigt werden. Dies ist leicht durchführbar für eine Folge paralleler Bänder. Wir formulieren die Gleichgewichtsbedingungen für die Folge in Fig. 12 indem wir die Gesamtkraft auf eine beliebige der linken Teilversetzungen, z.B. die bei x_k , gleich null setzen:

$$C \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^N \frac{1}{x_k - x_i} - B \sum_{i=1}^N \frac{1}{y_i - x_k} + \gamma = 0. \quad (24)$$

Dabei haben C und B dieselbe Bedeutung wie in den Gln. (21) und (22). Für die folgende Rechnung ist es zweckmäßig, den Koordinatenursprung in die herausgegriffene Versetzung zu legen. Wir bezeichnen die Absolutwerte der Abstände zu den verschiedenen Teilversetzungen mit x_j bzw. y_j . Für Abstände zu Teilversetzungen links vom Ursprung benutzen

⁷ KRONBERG, M.L.: Acta Met. **5**, 507 (1957).

⁸ HORNSTRA, J.: J. Phys. Chem. Solids **15**, 311 (1960).

wir negative Indizes, für solche rechts vom Ursprung positive. Weiterhin nehmen wir an, daß die herausgegriffene Versetzung die linke Teilversetzung des Bandes in der Mitte ist.

Zunächst sei die Zahl der Bänder endlich und zwar gleich $N = 2n + 1$, d.h., auf jeder Seite des Ursprungs liegen n Bänder. Es ergibt sich

$$C \sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{x_{-j}} - \frac{1}{x_j} \right) - B \sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{y_j} - \frac{1}{y_{-j}} \right) - B \frac{1}{y_0} + \gamma = 0. \quad (25)$$

Mittels dieser Gleichung kann man die Stapelfehlerenergie γ aus den beobachteten x_i und y_i berechnen. Für einen angenäherten Wert von γ braucht man unter Umständen die Kräfte nur eines Teils der benachbarten Versetzungen zu summieren. Das Ergebnis wird um so genauer, je mehr Nachbarn man berücksichtigt, d.h., je größer man das n in Gl. (25) wählt.

Der Einfluß der Nachbarbänder bewirkt ein Zusammenrücken der beiden Teilversetzungen des herausgegriffenen Bandes; wenn man die

sen Einfluß nicht voll berücksichtigt, wird also ein zu großer Wert von γ vorgetäuscht. Der so erhaltene Wert von γ stellt daher eine obere Schranke dar, die durch Hinzunahme weiterer Nachbarn heruntergedrückt werden kann.

Andererseits kann man auch von einer unendlichen Folge ausgehen. In diesem Fall ist der Bandabstand konstant. Das stimmt z.B. für die Folge in Fig. 13 recht gut. Dann kann man die unendliche Reihe in Gl. (25) aufsummieren und erhält wahrscheinlich eine untere Schranke für γ . Die Summierung wird folgendermaßen durchgeführt: Mit der Bandbreite d und dem Bandabstand w ergibt sich

$$x_j = x_{-j} = j(d + w); \quad y_j = j(d + w) + d; \quad y_{-j} = j(d + w) - d; \quad y_0 = d.$$

Einsetzen in Gl. (25) führt zu

$$B \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{2d}{j^2 (d + w)^2 - d^2} - \frac{1}{d} \right\} + \gamma = 0. \quad (26)$$

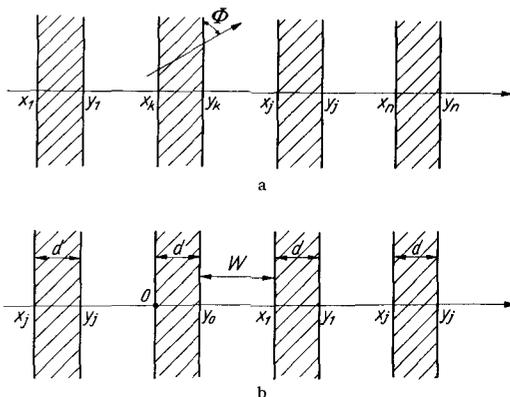


Fig. 12. Schematische Darstellung einer Folge paralleler ausgedehnter Versetzungen zur Illustration der benutzten Bezeichnungsweise

Wir benutzen die Partialbruchzerlegung des Kotangens:

$$\frac{\pi}{q} \operatorname{ctg} \pi q = \frac{1}{q^2} + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{q^2 - j^2},$$

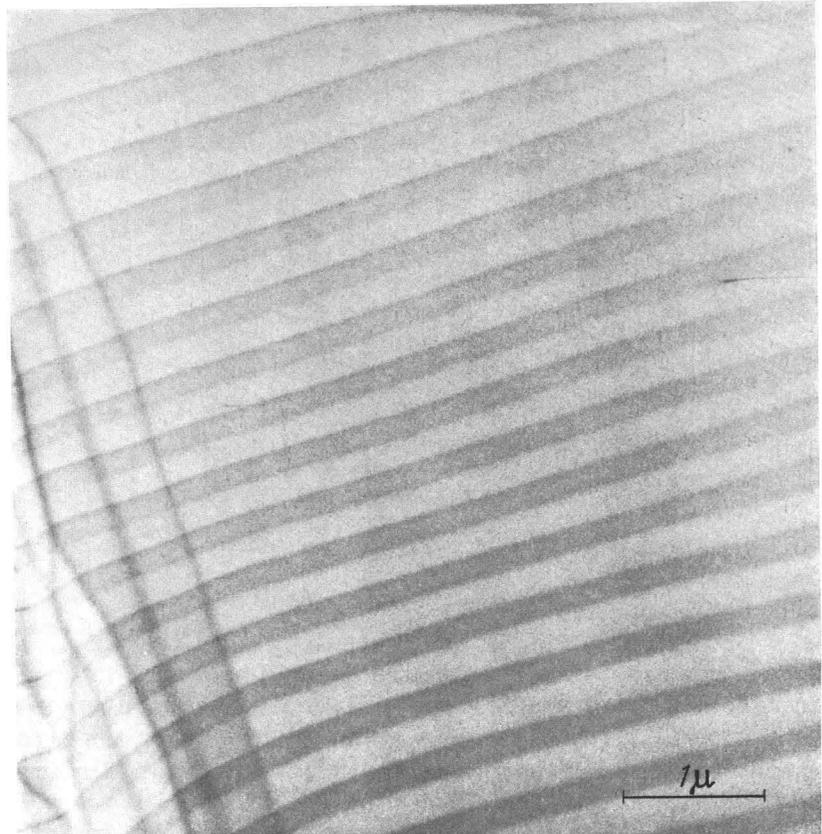


Fig. 13. Folge paralleler Versetzungsbänder in MoS_2 . Man beachte den Stapelfehlerkontrast

identifizieren q mit $d/d+w$ und erhalten

$$\gamma = B \frac{\pi}{d+w} \operatorname{ctg} \frac{d\pi}{d+w}. \quad (27)$$

Die obigen Formeln werden auf die Folge paralleler Bänder in Fig. 13 angewandt. Die Ergebnisse sind in Fig. 14 dargestellt. Der Wert von γ/μ ist gegen den Kehrwert der Zahl der Nachbarn aufgetragen. Man sieht, daß γ mit der Zahl der Nachbarn abnimmt. Der Wert für $n = \infty$ wurde nach Gl. (27) berechnet und stimmt gut mit dem extrapolierten Wert

überein. Da für diese Folge der Charakter der Bänder leider nicht bestimmt wurde, haben wir die zwei Extremfälle dargestellt; die obere Kurve entspricht Stufen-, die untere Schraubenbändern. Man kann schließen, daß unter der Annahme von

Schraubenbändern:

$$2,6 \cdot 10^{-12} \text{ cm} <$$

$$< \frac{\gamma}{\mu} < 3,3 \cdot 10^{-12} \text{ cm}$$

Stufenbändern:

$$6,0 \cdot 10^{-12} \text{ cm} <$$

$$< \frac{\gamma}{\mu} < 7,5 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^*$$

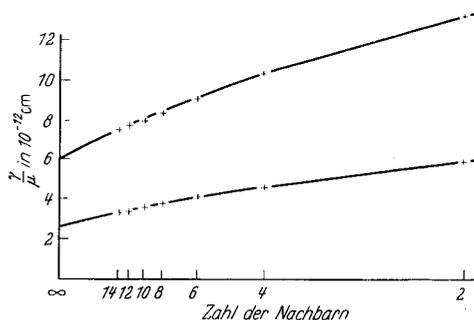


Fig. 14. Bestimmung von γ/μ aus Messungen an einer Folge von parallelen Versetzungsbändern. Das Verhältnis γ/μ ist als Funktion der reziproken Zahl der berücksichtigten Nachbarn dargestellt. Die obere Kurve entspricht dem Fall, daß die Bänder Stufencharakter, die untere dem, daß sie Schraubencharakter haben

6. Messung an einem ausgedehnten Versetzungsknoten

Die Stapelfehlerenergie kann auch aus der Gestalt ausgedehnter Knoten bestimmt werden. Vorausgesetzt, daß die Stapelfehlerenergie weder zu groß noch zu klein ist, können Knoten, die eine Gestalt wie in Fig. 15 haben, leicht im Elektronenmikroskop sichtbar gemacht werden. Für weit ausgedehnte Knoten kann man in erster Näherung die Teilversetzungen als unabhängig voneinander ansehen. Dann ist der Krümmungsradius am Punkt P in Fig. 15 gegeben durch⁹

$$R = \mu b^2 / 2\gamma. \quad (28)$$

Diese Gleichung gibt den Gleichgewichtswert der Krümmung einer Versetzung mit

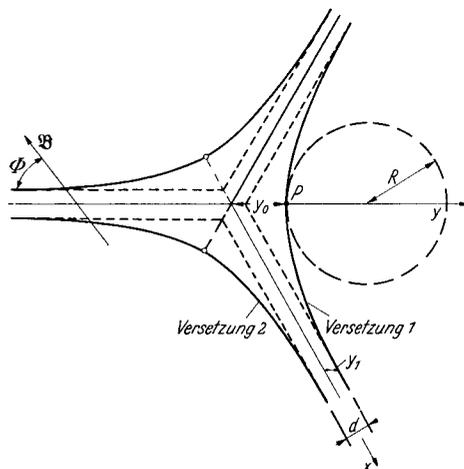


Fig. 15. Ausgedehnter Versetzungsknoten an einer Stelle, an der drei Versetzungsbänder zusammenlaufen. Es sind die im Text benutzten Bezeichnungen angegeben

* Diese Werte wurden unter der Annahme $\nu = \frac{1}{3}$ erhalten. Nach den Messungen an gekrümmten Versetzungsbändern (§ 2c) scheint der Wert von ν für MoS_2 sehr klein zu sein. Für $\nu = 0$ ergibt sich die Abschätzung $3,5 \cdot 10^{-12} \text{ cm} < \gamma/\mu < 4,4 \cdot 10^{-12} \text{ cm}$.

⁹ WHELAN, M. J.: Proc. Roy. Soc. **249**, 114 (1959).

der Linienspannung $1/2\mu b^2$ wieder, die unter einer Schubspannung γ/b steht. In dieser Gleichung ist weder der Charakter der

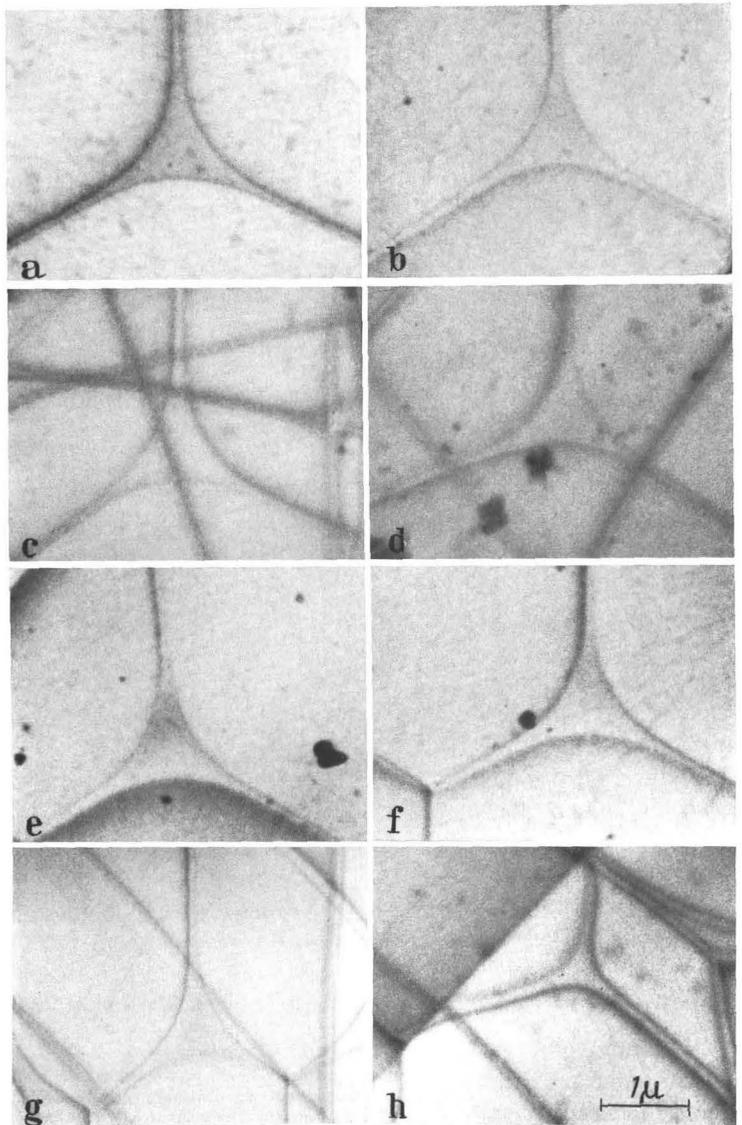


Fig. 16 a—h. Versetzungsknoten in Graphit, an denen die Stapelfehlerenergie gemessen wurde

Versetzungen noch die Wechselwirkung zwischen den Teilversetzungen berücksichtigt. Ob eine Berücksichtigung dieser beiden Punkte wesentlich ist, kann experimentell festgestellt werden. Wir haben drei Sub-

stanzen daraufhin untersucht, bei denen sowohl dissoziierte Bänder als auch ausgedehnte Knoten beobachtet werden können, und zwar Graphit, Molybdänsulfid und Aluminiumnitrid (Fig. 16 und 17).

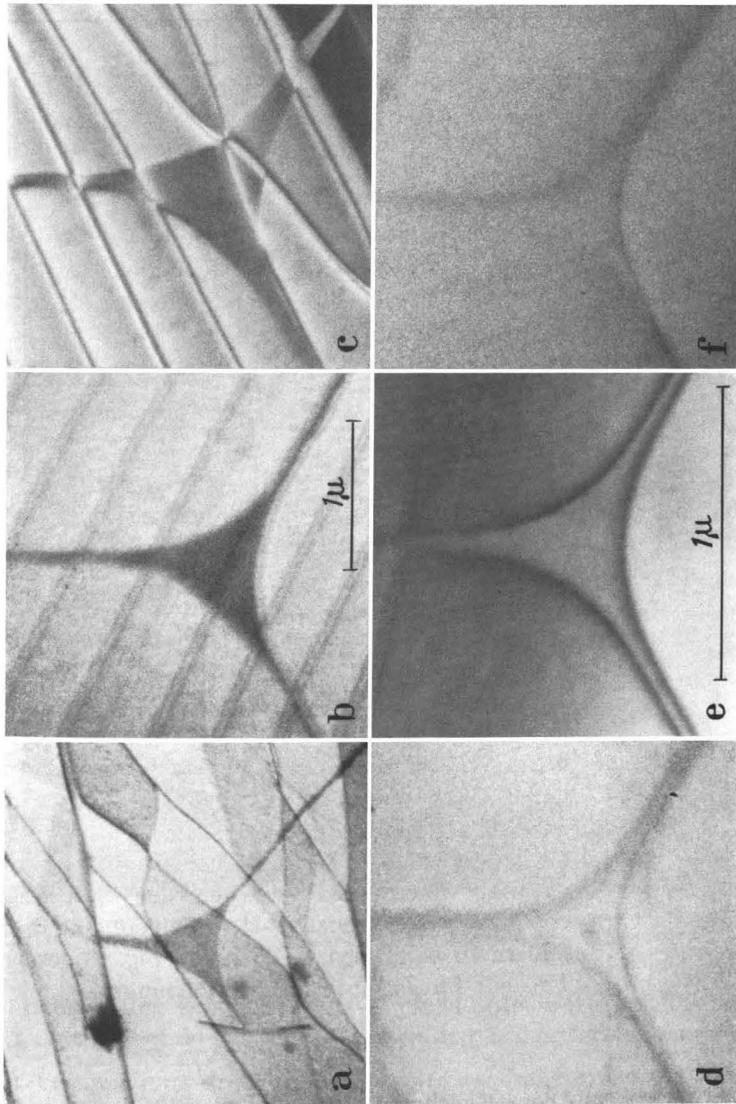


Fig. 17 a-f. Versetzungsknoten in MoS_2 (a, b, c) und in AlN (d, e, f)

Wir sehen die Gln. (1) und (2) als korrekt an und vergleichen in der Tabelle die daraus gewonnenen Werte von γ/μ mit den aus Gl. (28) gewonnenen.

Tabelle. Werte von γ/μ in 10^{-12} cm

Fig.	Aus der Breite der Bänder [Gl. (2)]			Aus dem Krümmungsradius nach Gl. (28)*	Nach Gl. (40)	
	Annahme: Stufenversetzung	wirklicher Charakter (falls bekannt)	Annahme: Schraubenversetzung		Annahme: Stufenversetzung	Annahme: Schraubenversetzung
16a	(2,6)	1,5	(1,5)	0,8	2,0	1,5
16b	2,1	—	1,2	1,1	2,0	1,5
16c	2,1	—	1,2	1,1	1,8	1,4
16d	2,6	—	1,5	1,0	2,1	1,6
16e	2,1	—	1,2	1,2	2,0	1,5
16f	1,9	—	1,1	1,3	1,8	1,4
16g	3,3	—	2,0	1,0	2,3	1,7
16h	(1,8)	1,6	(1,1)	3,7	3,4	2,6
17a	11	—	4,4	2,5	6,8	3,8
17b	5,9	—	2,5	1,6	4,5	2,5
17c	5,1	4,5	2,2	1,5	4,0	2,2
17d	9,2	—	3,1	4,8	13,2	5,7
17e	(10,3)	9,9	(3,4)	3,5	9,1	3,9
17f	10,3	—	3,4	4,5	10,6	4,5

Fig. 16a—h: Knoten in Graphit; Fig. 17a—c: Knoten in MoS_2 ; Fig. 17d—f: Knoten in AlN

Man sieht, daß die Abweichung zwischen den Werten, die sich aus der Breite der Bänder ergeben und denen, die aus dem Krümmungsradius berechnet werden, größer und größer wird, je größer die Werte von γ/μ , d.h., je kleiner die Knoten werden. Das ist auch zu erwarten, da für kleine Knoten die Wechselwirkung zwischen den Teilversetzungen nicht mehr vernachlässigt werden kann. Aus diesem Grunde erschien es wünschenswert, den Versetzungsknoten unter Berücksichtigung dieser Wechselwirkung zu behandeln. Dies wird im Abschnitt 7 durchgeführt.

Dieselbe Gl. (28) kann auch benutzt werden, um den Unterschied zwischen den Stapelfehlerenergien zweier benachbarter Gebiete mit Stapelfehlern zu berechnen. Für den in Fig. 18 gezeigten Fall gilt für $d \ll D$ folgende Beziehung:

$$\gamma_2 - \gamma_1 = 4\mu b^2 \frac{d}{D^2}. \quad (29)$$

Diese Gleichung wurde auf die in Fig. 19 gezeigte Struktur im Graphit angewandt. Zwei von uns

Fig. 18. Eine gekrümmte Teilversetzung, die zwei Gebiete mit verschiedenen Stapelfehlern trennt. Die im Text benutzten Bezeichnungen sind angegeben

* Die Messung des Krümmungsradius ist subjektiv. Man muß mit Unterschieden in der Abschätzung bis zu 50% rechnen.

haben gezeigt⁶, daß die Gebiete *B* und *A* verschiedene Stapelfehler enthalten; während im ersten Fall zwei Verletzungen der Stapelregel vorkommen, sind es im zweiten vier. Nach Gl. (29) ergibt sich aus Fig. 19:

$$\frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\mu} = 0,8 \cdot 10^{-12} \text{ cm}; \quad \gamma_2 - \gamma_1 = 0,25 \text{ erg/cm}^2.$$

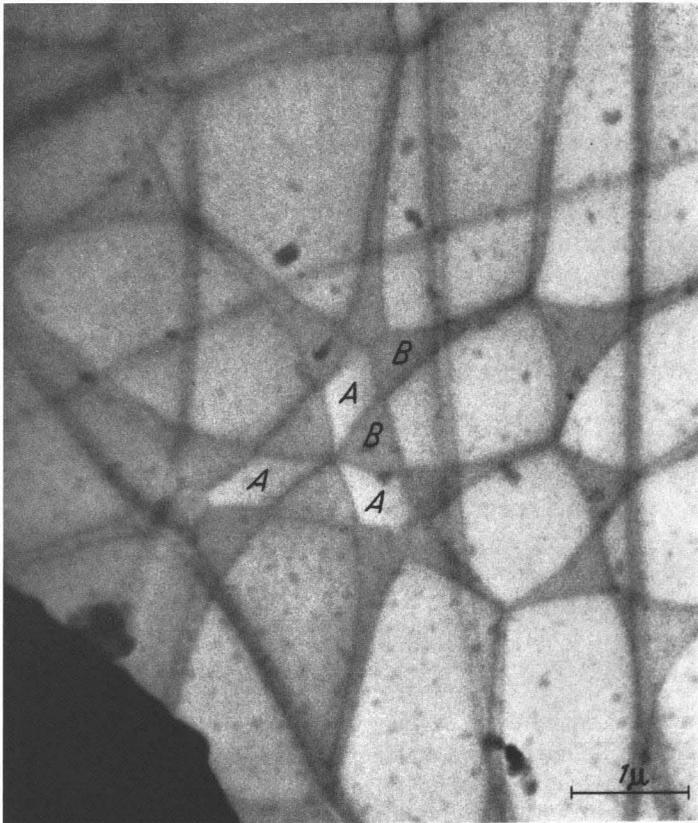


Fig. 19. Kompliziertes Sternmuster, an dem die Differenz der Stapelfehlerenergien in zwei durch eine Teilversetzung getrennten Gebieten nach Gl. (29) gemessen wurde (Graphit)

7. Behandlung des Versetzungsknotens unter Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Teilversetzungen

a) Formulierung des Variationsproblems. Zur Beschreibung des in Fig. 15 dargestellten Versetzungsknotens benutzen wir schiefwinklige Koordinaten. In diesem Koordinatensystem ist das Element der Bogenlänge gegeben durch

$$ds = \sqrt{1 + y' + y'^2} dx$$

und das Flächenelement durch

$$dF = \frac{1}{2} \sqrt{3} y dx.$$

Zur Berechnung der Gleichgewichtsform des Versetzungsknotens setzen wir Isotropie in der xy -Ebene voraus (vgl. Einleitung).

Für die *Wechselwirkungsenergie*, die auf die Versetzung 1 im Gebiet $x, y > 0$ entfällt, wird nur die Wechselwirkung zwischen 1 und 2 berücksichtigt. Die Burgers-Vektoren der beiden unvollkommenen Versetzungen 1 und 2 sind \mathfrak{b}^1 und \mathfrak{b}^2 . Es ist $|\mathfrak{b}^1| = |\mathfrak{b}^2| = b$. Die vollkommene Versetzung hat der Burgers-Vektor $\mathfrak{B} = \mathfrak{b}^1 + \mathfrak{b}^2$. Die Fig. 8 zeigt die Basisebene des hexagonalen Gitters mit den Burgers-Vektoren $AB = \mathfrak{B}$, $A\sigma = \mathfrak{b}_1$, $\sigma B = \mathfrak{b}_2$.

Es wird angenommen, daß die Wechselwirkungsenergie ε pro cm der Versetzung 1 in x -Richtung gegeben ist durch die Wechselwirkungsenergie pro cm zweier paralleler Versetzungen im jeweiligen Abstand $2r$. Diese Annahme wird im Anhang I begründet. Die Wechselwirkungsenergie* zweier paralleler Versetzungen, deren Burgers-Vektoren in der gemeinsamen Ebene liegen, ergibt sich (vgl. ¹⁰) zu

$$2\varepsilon^{12} = b_1^1 b_1^2 m_{11} + b_1^1 b_3^2 m_{13} + b_3^1 b_1^2 m_{31} + b_3^1 b_3^2 m_{33}.$$

Dabei ist b_k^i die k -te Komponente des Vektors \mathfrak{b}^i in cartesianischen Koordinaten x_1, x_2 (senkrecht zur Basisebene), x_3 (in Richtung der Versetzungslinie).

Wenn alles auf den in Fig. 15 gestrichelt gezeichneten Ausgangszustand bezogen wird, so ist

$$m_{11} = -\frac{\mu}{2\pi} \frac{1}{1-\nu} \ln \frac{y}{y_1}, \quad m_{33} = -\frac{\mu}{2\pi} \ln \frac{y}{y_1}.$$

Die Terme mit m_{13} und m_{31} können weggelassen werden (vgl. Anhang I). Falls die vollkommenen Versetzungen in großer Entfernung vom Knoten Stufencharakter haben, so gilt

$$b_1^1 = b_1^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} b, \quad b_3^1 = -b_3^2 = \frac{1}{2} b.$$

Sind die vollkommenen Versetzungen dagegen Schraubenversetzungen, so gilt

$$b_1^1 = -b_1^2 = \frac{1}{2} b, \quad b_3^1 = b_3^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} b.$$

* Hier ist die Wechselwirkungsenergie pro cm der Versetzung 1 in der (cartesischen) x_3 -Richtung gemeint.

¹⁰ KRÖNER, E.: Kontinuumsstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer 1958.

Es ist also

$$2\varepsilon^{12} = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{4} b^2 \{3 m_{11} - m_{33}\} & \text{für Stufenversetzungen} \\ \frac{1}{4} b^2 \{-m_{11} + 3 m_{33}\} & \text{für Schraubenversetzungen,} \end{array} \right\} \quad (30)$$

d. h.

$$2\varepsilon^{12} = \left\{ \begin{array}{ll} -\frac{\mu b^2}{8\pi} \frac{2+\nu}{1-\nu} \ln \frac{y}{y_1} & \text{für Stufenversetzungen} \\ -\frac{\mu b^2}{8\pi} \frac{2-3\nu}{1-\nu} \ln \frac{y}{y_1} & \text{für Schraubenversetzungen.} \end{array} \right.$$

Davon kann man die Hälfte der Versetzung 1 im Gebiet $x, y > 0$ zurechnen. Man erhält also für die Wechselwirkungsenergie im Gebiet $x, y > 0$

$$E^{12} = -\frac{K}{2} \int_0^\infty \ln \frac{y}{y_1} dx - \frac{K}{4} \int_{y_0}^{y_1} \ln \frac{y}{y_1} dy^*, \quad (31)$$

wobei

$$K = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\mu b^2}{8\pi} \frac{2+\nu}{1-\nu} & \text{für Stufenversetzungen} \\ \frac{\mu b^2}{8\pi} \frac{2-3\nu}{1-\nu} & \text{für Schraubenversetzungen.} \end{array} \right\} \quad (32)$$

Die *Stapelfehlerenergie* ist im Gebiet $x, y > 0$, wieder bezogen auf den in Fig. 15 gestrichelt gezeichneten Ausgangszustand

$$E^\nu = \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma \int_0^\infty (y - y_1) dx.$$

Die *Linienenergie* schließlich ist (vgl. Anhang II)

$$E^\varepsilon = \varepsilon \int_0^\infty \sqrt{1 + y' + y'^2} dx - \varepsilon \int_0^\infty dx$$

mit

$$\varepsilon = \mu b^2 \cdot \left\{ \begin{array}{ll} \alpha_E & \text{für Stufenversetzungen} \\ \alpha_S & \text{für Schraubenversetzungen.} \end{array} \right\} \quad (33)$$

Damit ergibt sich für die Gesamtenergie

$$E = E^{12} + E^\nu + E^\varepsilon = \int_0^\infty V(y, y') dx$$

mit

$$V = -\frac{K}{2} \ln \frac{y}{y_1} + \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma (y - y_1) + \varepsilon \sqrt{1 + y' + y'^2} - \varepsilon.$$

* Es ist nämlich (vgl. Fig. 15): $dx_3 = dx + 1/2 dy$. Das 2. Glied in der Gl. (31) ist unabhängig vom Verlauf von $y(x)$ und braucht daher bei der Variationsrechnung nicht berücksichtigt zu werden.

Diese Energie soll zum Minimum gemacht werden mit den Randbedingungen $y = y_1$ bei $x = \infty$; $y' = -1/2$ bei $x = 0$. Der Kurvenverlauf zwischen $x = 0$ und $x = \infty$ ist dann durch die Eulerschen Gleichungen bestimmt, deren Lösung durch die Endpunkte $x = 0$, $y = y_0$ und $x = \infty$, $y = y_1$ gehen muß:

$$\frac{\partial V}{\partial y} = \frac{d}{dx} \frac{\partial V}{\partial y'}, \quad (34)$$

d. h.

$$-\frac{K}{y} + \sqrt{3} \gamma - \varepsilon \frac{\frac{3}{2}}{(1 + y' + y'^2)^{\frac{3}{2}}} y'' = 0. \quad (35)$$

Da das V nicht explizit von x abhängt, können wir sofort ein erstes Integral von Gl. (34) angeben*:

$$V - y' \frac{\partial V}{\partial y'} = \text{const.}$$

Die Konstante wird aus der Forderung $x = y_1$ für $y' = 0$ bestimmt, und wir erhalten

$$-K \ln \frac{y}{y_1} + \sqrt{3} \gamma (y - y_1) + \varepsilon \frac{2 + y'}{(1 + y' + y'^2)^{\frac{3}{2}}} - 2\varepsilon = 0. \quad (36)$$

b) Berechnung von y_1 , y_0 und Krümmungsradius R . Durch Gleichsetzen der abstoßenden Kraft zwischen den Versetzungen 1 und 2 mit der anziehenden Kraft auf Grund des Stapelfehlers erhält man

$$y_1 = \frac{K}{\sqrt{3} \gamma}. \quad (37)$$

Aus Gl. (36) können wir jetzt $y_{x=0} = y_0$ bestimmen; bei $x = 0$ muß nämlich $y' = -1/2$ sein, d. h.:

$$-K \ln \frac{y_0}{y_1} + \sqrt{3} \gamma (y_0 - y_1) = 0,267 \varepsilon.$$

Wir führen eine dimensionslose Konstante $\Psi := y/y_1$ ein:

$$-K \ln \Psi_0 + \sqrt{3} \gamma y_1 (\Psi_0 - 1) = 0,267 \varepsilon.$$

Mit $y_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{K}{\gamma}$ ergibt sich

$$\ln \Psi_0 = \Psi_0 - 1 - 0,267 \frac{\varepsilon}{K}. \quad (38)$$

* Es gilt nämlich

$$\frac{dV}{dx} = y' \frac{\partial V}{\partial y} + y'' \frac{\partial V}{\partial y'} = y'' \frac{\partial V}{\partial y'} + y' \frac{d}{dx} \frac{\partial V}{\partial y'} = \frac{d}{dx} \left(y' \frac{\partial V}{\partial y'} \right)$$

[wegen Gl. (34)], d. h.

$$\frac{d}{dx} \left(V - y' \frac{\partial V}{\partial y'} \right) = 0.$$

Mit den in Anhang II abgeleiteten Werten von α_E und α_S ergibt sich

$$\frac{\varepsilon}{K} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1-\nu}{2+\nu} 8\pi\alpha_E = \frac{8\pi \cdot 0,712}{2+\nu} = \frac{8,95}{1+\frac{\nu}{2}} \\ \text{für Stufenversetzungen} \\ \frac{1-\nu}{2-3\nu} 8\pi\alpha_S = \frac{8\pi(1-\nu)}{2-3\nu} \cdot 0,712 = 8,95 \frac{1-\nu}{1-\frac{3}{2}\nu} \\ \text{für Schraubenversetzungen.} \end{array} \right. \quad (39)$$

Die Lösungen der Gl. (38) sind in Fig. 20 als Funktion von ν dargestellt. Mit diesen Werten von Ψ_0 ergibt sich das γ aus den gemessenen Werten von y_0 nach der Gleichung

$$y_0 = \Psi_0 y_1 = \frac{K \Psi_0}{\sqrt{3}\gamma}, \quad \text{d.h.} \quad \gamma = \frac{K \Psi_0}{\sqrt{3}y_0}. \quad (40)$$

In der Tabelle werden die nach Gl. (40) berechneten Werte von γ/μ mit den aus den früher erwähnten Messungen erhaltenen verglichen. Man sieht, daß die Werte innerhalb der Meßgenauigkeit übereinstimmen.

Wenn man andererseits auch die Aufspaltung $d = y_1 \cdot \sqrt{3}$ genau messen kann, hat man das Ψ_0 experimentell bestimmt und kann damit aus dem Experiment auch die Linienenergie ε ermitteln. Dazu wäre allerdings eine genauere Abschätzung des durch die Annahme der Gl. (31) für die Wechselwirkungsenergie entstehenden Fehlers sowie, zum Vergleich des experimentellen ε mit der Theorie, eine Berücksichtigung des Einflusses der umgebenden Versetzungen wünschenswert.

Der Krümmungsradius R ist das Reziproke der Krümmung κ . Bezeichnen wir mit

die Ableitung nach der Bogenlänge, mit ' die Ableitung nach x , mit e_y und e_x Einheitsvektoren parallel zur y - bzw. x -Achse, so gilt

$$|\kappa| = |\dot{\mathbf{r}} \times \ddot{\mathbf{r}}|, \quad \mathbf{r} = y e_y + e_x$$

$$|\kappa| = |\dot{y}\ddot{x} - \dot{x}\ddot{y}| \cdot |e_y \times e_x| = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{y''}{(1+y'+y'^2)^{\frac{3}{2}}}$$

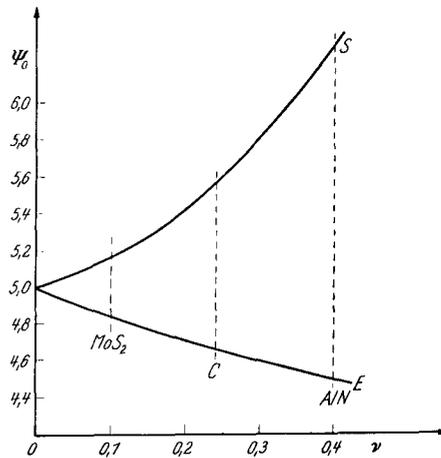


Fig. 20. Verlauf von $\Psi_0 = y_0/y_1$ als Funktion von ν für Schrauben- bzw. Stufenversetzungen (S bzw. E) (vgl. Fig. 15). Die ν -Werte für MoS_2 , Graphit und AlN sind angedeutet

$$\text{d.h.} \quad R = \frac{1}{|\kappa|} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{(1 + y' + y'^2)^{\frac{3}{2}}}{y''}.$$

Nach Gl. (35) ergibt sich mit $\gamma = \frac{K}{\sqrt{3} y_1}$ und $\frac{y_0}{y_1} = \Psi_0$:

$$R = y_1 \frac{\varepsilon}{K} \frac{\Psi_0 \sqrt{3}}{\Psi_0 - 1}.$$

Unter Berücksichtigung von Gl. (39) erhält man

$$R = \begin{cases} y_1 \frac{15,5}{1 + \frac{\nu}{2}} \cdot \frac{\Psi_0}{\Psi_0 - 1} & \text{für Stufenversetzungen} \\ y_1 \frac{15,5}{1 - \frac{3}{2}\nu} \cdot \frac{\Psi_0}{\Psi_0 - 1} (1 - \nu) & \text{für Schraubenversetzungen.} \end{cases}$$

c) **Einmündung in die Gerade $y = y_1$.** Nach Gl. (36) gilt für $y \rightarrow y_1$ und $y' \rightarrow 0$:

$$-K \left\{ \frac{y - y_1}{y_1} - \frac{(y - y_1)^2}{2y_1^2} \right\} + \sqrt{3} \gamma (y - y_1) - \varepsilon \cdot \frac{3}{4} y'^2 = 0,$$

d.h.

$$y'^2 = \frac{2}{3} \frac{K}{\varepsilon} \frac{(y - y_1)^2}{y_1^2}$$

$$\frac{dy}{y - y_1} = -\frac{1}{y_1} \sqrt{\frac{2K}{3\varepsilon}} dx.$$

Integration ergibt

$$y - y_1 = \bar{y} e^{-\sqrt{\frac{2K}{3\varepsilon}} \frac{x}{y_1}},$$

oder in anderer Darstellung:

$$y - y_1 = y_1 e^{-\sqrt{\frac{2K}{3\varepsilon}} \frac{x - \bar{x}}{y_1}}.$$

Dabei sind \bar{y} bzw. \bar{x} Integrationskonstanten. Die Abfallbreite beträgt:

$$\sqrt{\frac{3\varepsilon}{2K}} y_1 = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{2} \alpha_E} \sqrt{8\pi \frac{1-\nu}{2+\nu}} y_1 & \text{für Stufenversetzungen} \\ \sqrt{\frac{3}{2} \alpha_S} \sqrt{8\pi \frac{1-\nu}{2-3\nu}} y_1 & \text{für Schraubenversetzungen.} \end{cases}$$

d) **Numerische Integration.** Die Gl. (36) wurde für den Fall des Graphits numerisch integriert. Es ergeben sich für Stufen- bzw. Schraubenversetzungen die beiden Kurven der Fig. 21. Die in derselben Abbildung wiedergegebenen Meßergebnisse stimmen gut mit dem theoretischen Verlauf überein. Der Knoten 16a ist ein Schraubenknoten, der Charakter des Knotens 16g ist nicht bekannt.

Wir danken Herrn Prof. G. LEIBFRIED für anregende Diskussionen.

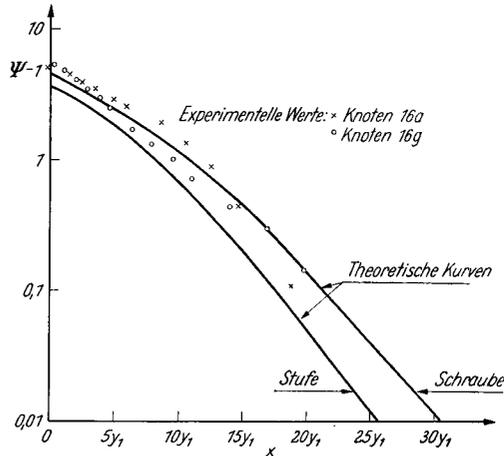


Fig. 21. Vergleich der theoretischen mit der beobachteten Gestalt von Versetzungsknoten in Graphit. Aufgetragen wurde $\Psi-1 = \frac{y-y_1}{y_1}$ als Funktion von x (vgl. Fig. 15). Der Knoten 16a war ein Schraubenknoten. Für Knoten 16g war der Charakter nicht bekannt

Anhang I: Begründung der Gl. (31) für die Wechselwirkungsenergie

Die Wechselwirkungsenergie zwischen einer zur x_3 -Achse parallelen Versetzung 2 und einer anderen Versetzung 1, deren Linien und Burgers-Vektoren in der x_2 -Ebene liegen, ist (vgl. ¹⁰) gegeben durch

$$2E^{12} = \sum b_i^1 b_q^2 M_{iq}$$

mit

$$M_{11} = \frac{-\mu}{2\pi} \frac{1}{1-\nu} \int_{L^1} \ln \frac{x_1}{d} dx_3$$

$$M_{22} = \frac{-\mu}{2\pi} \frac{1}{1-\nu} \int_{L^1} \ln \frac{x_1}{d} dx_3$$

$$M_{33} = \frac{-\mu}{2\pi} \int_{L^1} \ln \frac{x_1}{d} dx_3$$

$$M_{13} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\nu} - 1 \right) M_{31} = \frac{\mu}{2\pi} \int_{L^1} \left\{ \ln \frac{x_1}{L} + \frac{1}{2} \right\} dx_1; \quad M_{23} = M_{32} = M_{12} = M_{21} = 0.$$

Die Integration ist über die Versetzungslinie 1 zu erstrecken. Die Wechselwirkungsenergie wird von dem Zustand aus gezählt, in dem die beiden Versetzungen im Abstand d parallel zueinander liegen. Das Integral in den Formeln für M_{13} bzw. M_{31} hängt nur von den Werten von x_1 bei $x_3 = -\infty$ und bei $x_3 = +\infty$ ab, nicht aber vom Verlauf von $x_1(x_3)$ dazwischen. [Falls $x_1(-\infty) = x_1(+\infty)$, verschwindet M_{13} .] Es hat also keinen Einfluß auf das Variationsverfahren. Die übrigen Terme ergeben für die beiden von uns betrachteten Fälle [vgl. Gl. (30)]

mit $y/y_1 = x_1/d$:

$$E^{12} = -\frac{1}{2} \frac{\mu b^2}{2\pi} \int \ln \frac{y}{y_1} dx_3 \cdot \begin{cases} \frac{2+\nu}{1-\nu} & \text{für Stufenversetzungen} \\ \frac{2-3\nu}{1-\nu} & \text{für Schraubenversetzungen} \end{cases}$$

in Übereinstimmung mit den Gln. (31), (32).

Nachdem wir so gezeigt haben, daß die Gl. (31) für eine gerade und eine in der x_2 -Ebene beliebig verlaufende Versetzung korrekt ist, ist anzunehmen, daß sie auch für zwei in der x_2 -Ebene verlaufende Versetzungen, die beide nicht geradlinig sind, die Wechselwirkungsenergie in guter Näherung wiedergibt.

Anhang II: Die Linienenergie ϵ

Die Linienenergie ϵ in der Nähe eines Knotens ist abhängig von der Versetzungsstruktur in der Umgebung. STROH¹¹ hat folgenden Ausdruck für die Linienenergie an einem Punkt P angegeben:

$$\epsilon = \frac{\mu b^2}{8\pi} \cdot \frac{1-\nu \sin^2 \varphi}{1-\nu} \left[\oint \frac{dt}{r} - \frac{\nu \sin 2\varphi}{2(1-\nu \sin^2 \varphi)} \oint \frac{dn}{dt} \cdot \frac{dt}{dr} \right]. \quad (\text{A } 1)$$

Die Integrale sind über die ganze Versetzungslinie zu erstrecken. Dabei ist die unmittelbare Umgebung von P bis zu einem Abschneideradius r_0 auszulassen. Die Versetzungslinie soll in einer Ebene liegen. n und t sind cartesische Koordinaten in dieser Ebene; t ist durch die Richtung der Tangente im Ursprung gegeben. φ wird null für Stufenversetzungen, 90° für Schraubenversetzungen. Wenn die Versetzungslinie symmetrisch zur n -Achse liegt, verschwindet das zweite Integral in Gl. (A 1).

Für einen kreisförmigen Versetzungsring gilt:

$$J = \oint \frac{dt}{r} = 2 \int_{r_0}^R \frac{dt}{\sqrt{2R} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{t^2}{R^2}}\right)^{\frac{1}{2}}} + 2 \int_0^R \frac{dt}{\sqrt{2R} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{t^2}{R^2}}\right)^{\frac{1}{2}}}.$$

Die Durchführung der Integration ergibt:

$$J = 2 \left(\ln \frac{R}{r_0} + 2 \ln 2 - 2 \right).$$

Damit erhält man nach Gl. (A 1):

$$\epsilon = \begin{cases} \mu b^2 \alpha_E = \frac{\mu b^2}{4\pi} \frac{1}{1-\nu} \cdot \left(\ln \frac{R}{r_0} - 0,61 \right) & \text{für Stufenversetzungen} \\ \mu b^2 \alpha_S = \frac{\mu b^2}{4\pi} \cdot \left(\ln \frac{R}{r_0} - 0,61 \right) & \text{für Schraubenversetzungen.} \end{cases}$$

Nehmen wir für r_0 den Burgers-Vektor der Halbversetzungen im Graphit (1,42 Å) und für R (nach Fig. 6) einen mittleren Halbmesser der dem Knoten benachbarten versetzungsfreien Gebiete von 2μ , so ergibt sich

$$\alpha_E = \frac{1}{1-\nu} 0,712, \quad \alpha_S = 0,712.$$

¹¹ STROH, A. N.: Proc. Phys. Soc. B **67**, 427 (1954).