Zur Berechnung des Torsionsmoduls quasiisotroper Vielkristalle aus den Einkristallkonstanten

Autor(en): **Boas, W.**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **8 (1935)**

Heft VIII

PDF erstellt am: **28.03.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-110549

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.
Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.
Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Ein Dienst der *ETH-Bibliothek*
ETH Zürich, Rämistrasse 101, 8092 Zürich, Schweiz, www.library.ethz.ch

http://www.e-periodica.ch

Zur Berechnung des Torsionsmoduls quasiisotroper Vielkristalle aus den Einkristallkonstanten

von **W. Boas.**

(30. XI. 35.)

Zusammenfassung. Der Torsionsmodul quasiisotroper Vielkristalle war aus dem Einkristallverhalten durch Mittelwertbildung über den gesamten Orientierungsbereich unter der Annahme berechnet worden, dass sich die Vorgänge in den einzelnen Kristalliten unabhängig voneinander abspielen. Der gegenseitigen Beeinflussung der Kristalle im vielkristallinen Aggregat wird nun dadurch Rechnung getragen, dass die Verhinderung der bei freien Kristallen mit der Torsion gekoppelten Biegung berücksichtigt wird. Die so korrigierten Torsionsmoduln stimmen gut mit den Beobachtungsergebnissen überein.

Bei der Bestimmung der elastischen Eigenschaften durch Mittelung, die von HUBER und SCHMID angegeben worden ist[1]), wird völlige Unabhängigkeit der Kristallite voneinander vorausgesetzt, wobei diese zylindrisch angenommen werden und Kräfte nur auf die Grundflächen wirken sollen. Während nun die Übereinstimmung mit den Beobachtungsergebnissen beim E-Modul durchaus befriedigend ist, ist der so berechnete G-Modul systematisch kleiner als der experimentelle Wert[2]). In der vorliegenden Mitteilung, die sich aufs Engste an die früheren Arbeiten anschliesst, soll für den Torsionsmodul eine Korrektur angebracht werden, die die gegenseitige Beeinflussung der Kristallite berücksichtigt.

Gerade bei der Drillung tritt die Bedeutung des kristallinen Aufbaus stark hervor. Nach der Theorie der Kristallelastizität ist die Torsion eines zylindrischen Kristallstabs mit einer Biegung gekoppelt, die um so grösser ist, je grösser die Anisotropie des Kristalls. Wird diese Biegung verhindert, so ist die Drillung durch ein gegebenes Moment kleiner als bei frei zugelassener Biegung[3]); der Torsionsmodul wächst also entsprechend. Das im Vielkristall eingebettete Korn wird nun diese Biegung bestimmt nicht frei

[1]) A. HUBER und E. SCHMID, Helv. Phys. Acta **7**, 620, 1934. Im folgenden als I zitiert.

[2]) W. BOAS und E. SCHMID, Helv. Phys. Acta **7**, 628, 1934. — W. BOAS, Helv. Phys. Acta **7**, 878, 1934.

[3]) W. VOIGT, Lehrb. d. Kristallphysik, § 316—317. — E. GOENS, Ann. d. Phys. [5] **15**, 455, 1932.

ausführen können. Es wird deshalb eine Erhöhung des G-Moduls des Aggregats verursachen. Im folgenden soll die Mittelung des G-Moduls für das quasiisotrope Aggregat durchgeführt werden, wobei völlige Verhinderung der Biegung vorausgesetzt sei. In diesem Fall wird der reziproke Torsionsmodul statt durch $\frac{1}{2}(s'_{44} + s'_{55})$ durch die Gleichung

$$\frac{1}{G} = \tfrac{1}{2}(s'_{44} + s'_{55}) - \frac{\frac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35})}{s'_{33}} \tag{1}$$

dargestellt. Die durch das zweite Glied bewirkte Korrektur nimmt bei Metallkristallen beträchtliche Werte an, die z. B. bei Zink bis zu 16% gehen[1]). G ist nun über die gesamte Orientierungsmannigfaltigkeit zu integrieren.

I. Quasiisotropes Aggregat kubischer Kristalle.

Die Orientierungsabhängigkeit der in G auftretenden Grössen hat hier folgende Form:

$$\begin{aligned} s'_{33} &= s_{11} - 2\,s\cdot\Gamma \\ \tfrac{1}{2}(s'_{44} + s'_{55}) &= s_{44} + 4\,s\cdot\Gamma \\ \tfrac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35}) &= 2\,s^2\cdot[(\gamma_1^6 + \gamma_2^6 + \gamma_3^6) - (\gamma_1^4 + \gamma_2^4 + \gamma_3^4)^2] \\ &= 2\,s^2\cdot[\Gamma - 4\,\Gamma^2 + 3\,\chi], \end{aligned}$$

wobei

$$s = s_{11} - s_{12} - \tfrac{1}{2}s_{44}, \quad \Gamma = \gamma_1^2\gamma_2^2 + \gamma_2^2\gamma_3^2 + \gamma_3^2\gamma_1^2, \quad \chi = \gamma_1^2\gamma_2^2\gamma_3^2$$

und $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ die Richtungscos der Kristallstabachse zu den drei Würfelachsen sind. Damit wird

$$\frac{1}{G} = s_{44} + 4\,s\,\Gamma - \frac{2\,s^2(\Gamma - 4\,\Gamma^2 + 3\,\chi)}{s_{11} - 2\,s\,\Gamma}$$

oder

$$G = \frac{\frac{1}{s_{44}} - \frac{2\,s}{s_{11}\cdot s_{44}}\cdot\Gamma}{1 + M\cdot\Gamma + N\cdot\chi},$$

wenn

$$M = \frac{2\,s\,(s + 2\,s_{12})}{s_{11}\cdot s_{44}} \quad \text{und} \quad N = -\frac{6\,s^2}{s_{11}\cdot s_{44}}.$$

---

[1]) E. Goens, Ann d. Phys. [5] **16**, 793, 1933. Fig. 4, S. 804, wo

$$\frac{\frac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35})}{s'_{33}\cdot\frac{1}{2}(s'_{44} + s'_{55})}$$

mit χ bezeichnet ist.

Die Integration über den gesamten Orientierungsbereich erfordert nun die Auswertung der Integrale

$$J = \frac{1}{4\pi} \int \frac{df}{1 + M \cdot \Gamma + N \cdot \chi} \quad \text{und} \quad L = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\Gamma \cdot df}{1 + M \cdot \Gamma + N \cdot \chi},$$

die bereits von BRUGGEMAN durch Reihenentwicklung durchgeführt ist[1]). Man erhält also für den Torsionsmodul

$$\bar{G} = \frac{1}{s_{44}} \cdot J - \frac{2s}{s_{11} \cdot s_{44}} \cdot L. \tag{2}$$

Die numerische Berechnung der bestimmten Integrale J und L ist recht umständlich. Es wurde deshalb eine Näherungslösung auf folgendem Wege gefunden. In (I) war $\frac{1}{g} = \frac{1}{2}(s'_{44} + s'_{55})$ gesetzt und $\bar{g}$ berechnet worden. Wir setzen hier nun entsprechend Gl. (1):

$$\frac{1}{\bar{G}} = \frac{1}{\bar{g}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\frac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35})}{s'_{33}} df \tag{3a}$$

und bestimmen das Integral

$$F = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\frac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35})}{s'_{33}} df. \tag{3b}$$

Es wird

$$\frac{\frac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35})}{s'_{33}} = 4s \cdot \Gamma + (2s_{11} - s) + \frac{s_{11}(2s_{11} - s) - 6s^2\chi}{2s \cdot \Gamma - s_{11}},$$

also, da

$$\frac{1}{4\pi} \int \Gamma \cdot df = 0{,}2,$$

$$F = 2s_{11} - 0{,}2s - (2s_{11} - s) \cdot \frac{1}{4\pi} \int \frac{df}{1 - \frac{2s}{s_{11}} \cdot \Gamma} + \frac{6s^2}{s_{11}} \cdot \frac{1}{4\pi} \int \frac{\chi \cdot df}{1 - \frac{2s}{s_{11}} \cdot \Gamma}.$$

Die Reihenentwicklung für diese Integrale ist recht einfach, und

[1]) D. A. G. BRUGGEMAN, Dissertation Utrecht 1930, S. 66—67.

man kann unter Benutzung der BRUGGEMAN'schen Berechnungen schreiben:

$$F = 2\,s_{11} - 0{,}2\,s -$$

$$\left(2\,s_{11} - s - \frac{6\,s^2}{s_{11}} \cdot \frac{1}{54}\right) \cdot \frac{1}{1 - \frac{s}{3\,s_{11}}} \cdot [P_0 + m\,P_1 + m^2 P_2 + m^3 P_3 + \cdots]$$

$$- \frac{6\,s^2}{s_{11}} \cdot \frac{1}{1 - \frac{s}{3\,s_{11}}} \cdot [Q_0 + m\,Q_1 + m^2 Q_2 + m^3 Q_3 + \cdots], \quad (4)$$

worin

$$m = \frac{1}{\frac{1}{6} - \frac{s_{11}}{2\,s}}$$

ist und die P_i und Q_i nach BRUGGEMAN folgende Zahlenwerte besitzen:

i	0	1	2	3
P_i	1,0000	$-3{,}3333 \cdot 10^{-2}$	$8{,}730 \cdot 10^{-3}$	$-4{,}16 \cdot 10^{-4}$
Q_i	$8{,}9947 \cdot 10^{-3}$	$3{,}928 \cdot 10^{-4}$	$3{,}031 \cdot 10^{-5}$	$9{,}71 \cdot 10^{-6}$
i	4	5	6	7
P_i	$1{,}348 \cdot 10^{-4}$	$-6{,}8 \cdot 10^{-6}$	$2{,}57 \cdot 10^{-6}$	$-1{,}3 \cdot 10^{-7}$
Q_i	$4 \cdot 10^{-8}$	$2{,}0 \cdot 10^{-7}$	$-1{,}1 \cdot 10^{-8}$	

Um die Zulässigkeit dieser Näherungslösung zu prüfen, wurde für Silber $\overline{G}$ auf dem exakten Wege (Gl. 2) und mittels der Näherung (Gl. 3 und 4) berechnet: der nach (2) berechnete Torsionsmodul ist um 0,25% grösser als der nach (3), (4) berechnete. Es lässt sich ferner ganz allgemein, unabhängig vom Kristallsystem, zeigen, dass stets der exakt berechnete Torsionsmodul grösser ist als der auf dem Näherungswege berechnete. Da nun der Unterschied beider Wege sehr gering ist und die Korrektur des G-Moduls keinesfalls zu gross werden kann, wurde die numerische Rechnung stets mit den einfachen Formeln (3), (4) ausgeführt.

II. Quasiisotropes Aggregat hexagonaler Kristalle.

Bei den hexagonalen Kristallen hängen die elastischen Eigenschaften nur vom Richtungscos γ des Winkels zur hexagonalen Achse ab. Die exakte Lösung führt hier, ebenso wie in (I), auf geschlossene Ausdrücke, die ln und arctg enthalten; die Rechnung ist hier jedoch gegenüber der in (I) dadurch komplizierter, dass

im Nenner ein Polynom 6. Grades von γ auftritt. Aus den oben angegebenen Gründen haben wir uns hier auf die Berechnung der Näherungslösung beschränkt, die ähnlich der in (I) angegebenen verläuft und die mit denselben Bezeichnungen und Abkürzungen durchgeführt werden soll, da dann bei der numerischen Rechnung schon früher benutzte Werte verwendet werden können.

Die beim Integral F in (3b) auftretenden Grössen haben folgende Orientierungsabhängigkeit:

$$s'_{33} = A \cdot \gamma^4 + B \cdot \gamma^2 + C,$$

$$\tfrac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35}) = 2\gamma^2 \cdot (1-\gamma^2) \cdot [s_{11}(1-\gamma^2) - (s_{13} + \tfrac{1}{2} s_{44}) \cdot (1-2\gamma^2) - s_{33} \cdot \gamma^2]^2 = 2 \cdot (\gamma^2 - \gamma^4) \cdot [A \cdot \gamma^2 + \tfrac{1}{2} B]^2,$$

worin wie in (I)

$$A = s_{11} + s_{33} - (2 s_{13} + s_{44}); \quad B = -2 s_{11} + 2 s_{13} + s_{44}; \quad C = s_{11}$$

bedeuten. Dann wird

$$\frac{\tfrac{1}{2}(s'^{\,2}_{34} + s'^{\,2}_{35})}{s'_{33}} = -\gamma^4 \cdot 2A + \gamma^2 \cdot 2A + 2C - \frac{B^2}{2A} + \frac{\gamma^2\left(-2AC - 2BC + \frac{B^2}{2} + \frac{B^3}{2A}\right) - \left(2C^2 - \frac{B^2 \cdot C}{2A}\right)}{\gamma^4 \cdot A + \gamma^2 \cdot B + C},$$

und mit

$$D = 2C - \frac{B^2}{2A}$$

$$F = \frac{4}{15} \cdot A + D - C \cdot D \cdot \bar{E} - (A+B) \cdot D \cdot \int_0^1 \frac{\gamma^2 \cdot d\gamma}{\gamma^4 \cdot A + \gamma^2 \cdot B + C}, \quad (5)$$

worin $\bar{E}$ der in (I) berechnete Mittelwert des E-Moduls ist. Die Berechnung des Integrals

$$\int_0^1 \frac{\gamma^2 \cdot d\gamma}{\gamma^4 \cdot A + \gamma^2 \cdot B + C}$$

erfolgt nun analog wie in (I) verschieden, je nachdem, ob A positiv oder negativ, ist aber in allen Einzelheiten der dort durchgeführten so ähnlich, dass sie hier nur angedeutet zu werden braucht.

1. A positiv.

Bezeichnungen:

$$\varrho = \sqrt{\frac{C}{A}}; \quad \operatorname{tg}\alpha = -\frac{1}{B}\cdot\sqrt{4AC-B^2}; \quad \sigma = \sqrt{\varrho}\cdot\cos\frac{\alpha}{2}.$$

Die Partialbruchzerlegung liefert hier:

$$\frac{\gamma^2}{\gamma^4\cdot A+\gamma^2\cdot B+C} = \frac{1}{A\cdot 4\sigma}\left\{\frac{\gamma}{\gamma^2-2\sigma\gamma+\varrho}-\frac{\gamma}{\gamma^2+2\sigma\gamma+\varrho}\right\},$$

und die Integration mit den entsprechenden Umformungen:

$$\int_0^1 \frac{\gamma^2\cdot d\gamma}{\gamma^4\cdot A+\gamma^2\cdot B+C} = -\frac{1}{A\cdot 8\sqrt{\varrho}\cos\frac{\alpha}{2}} \tag{5a}$$

$$\cdot\ln\left(1+\frac{4\sqrt{\varrho}\cos\frac{\alpha}{2}}{1-2\sqrt{\varrho}\cos\frac{\alpha}{2}+\varrho}\right)+\frac{1}{A\cdot 4\sqrt{\varrho}\sin\frac{\alpha}{2}}\cdot\operatorname{arctg}\left(\frac{2\sqrt{\varrho}\sin\frac{\alpha}{2}}{\varrho-1}\right).$$

Die Argumente von ln und arctg sind identisch mit den bei der Berechnung von $\bar{E}$ in (I) Gl. (3) auftretenden, wodurch die Zahlenrechnung hier sehr einfach wird.

2. A negativ.

Bezeichnungen:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sqrt{B^2+4A'C}+B}{2A'}} \quad \text{und} \quad \beta = \sqrt{\frac{\sqrt{B^2+4A'C}-B}{2A'}}.$$

Die Partialbruchzerlegung lautet:

$$\frac{\gamma^2}{-\gamma^4\cdot A'+\gamma^2\cdot B+C} =$$

$$-\frac{1}{A'}\cdot\left\{\frac{\alpha^2}{2\alpha(\alpha^2+\beta^2)}\left[\frac{1}{\gamma-\alpha}-\frac{1}{\gamma+\alpha}\right]+\frac{\beta^2}{\alpha^2+\beta^2}\cdot\frac{1}{\gamma^2+\beta^2}\right\},$$

die Integration liefert:

$$\int_0^1 \frac{\gamma^2\cdot d\gamma}{-\gamma^4\cdot A'+\gamma^2\cdot B+C} = \frac{1}{\sqrt{B^2+4A'C}}\cdot\left\{\frac{\alpha}{2}\cdot\ln\frac{\alpha+1}{\alpha-1}-\beta\cdot\operatorname{arctg}\frac{1}{\beta}\right\}. \tag{5b}$$

Auch hier sind wieder die Argumente von ln und arctg identisch mit denen in (I) Gl. (5).

III. Vergleich mit den beobachteten Torsionsmoduln.

Mit Hilfe der Gleichungen (3), (4) und (5) und den Einkristallkonstanten, die schon seinerzeit[1]) die Grundlage der Berechnung gebildet hatten, wurden nun die Torsionsmoduln ermittelt („korrigiert") der Tabelle 1. Aus der Gegenüberstellung mit den früher angegebenen Werten (HUBER-SCHMID) sieht man die Erhöhung des Torsionsmoduls, die besonders bei starker Anisotropie des Einkristalls ins Gewicht fällt. Die experimentellen Werte stammen zum grössten Teil aus Messungen von GRÜNEISEN[2]), aus denen BRUGGEMAN[3])[4]) die dem quasiisotropen Aggregat wahrscheinlich zukommenden Werte ausgewählt hat.

Mit alleiniger Ausnahme des Cadmiums, bei dem der Beobachtungswert besonders unsicher ist, kommt stets der durch Berücksichtigung der Verhinderung der Biegung der Kristallite korrigierte Torsionsmodul dem experimentellen Wert erheblich näher als der unkorrigierte Torsionsmodul. In einigen Fällen tritt sogar völlige Übereinstimmung auf.

Tabelle 1.

Berechnete und beobachtete Torsionsmoduln.

Metall	Torsionsmodul (10^{11} Dyn/cm^2)			
	berechnet		beobachtet	berechnet Bruggeman
	Huber-Schmid	korrigiert		
Aluminium . .	2,61	2,61	2,69	2,61
Kupfer . . .	4,21	4,54	4,55	4,78
Silber	2,59	2,77	2,88	2,90
Gold	2,60	2,78	2,77	2,89
α-Messing . .	3,49	3,89	4,0	4,24
α-Eisen . . .	7,62	7,94	$<8{,}3$	8,21
Magnesium . .	1,74	1,74	1,8	—
Zink.	3,55	3,79	3,95	4,01
Cadmium . .	2,09	2,17	1,93	2,27

Die Tabelle enthält schliesslich noch die Werte, die mit einer völlig anderen Methode von BRUGGEMAN berechnet worden sind[3])[4]). In diesem Verfahren werden von vornherein Bedingungen für die

[1]) W. BOAS und E. SCHMID, Helv. Phys. Acta **7**, 628, 1934.
[2]) E. GRÜNEISEN, Ann. d. Phys. **22**, 801, 1907; **25**, 825, 1908.
[3]) D. A. G. BRUGGEMAN, Dissertation Utrecht 1930.
[4]) D. A. G. BRUGGEMAN, ZS. f. Phys. **92**, 561, 1934.

an den Grenzen der Kristallite sich abspielenden Vorgänge eingeführt und so die Wechselwirkung der Körner berücksichtigt. Für die Durchführung der Rechnung werden dann allerdings besondere Annahmen über die zu mittelnde Funktion und die Kornform nötig. Wie die Tabelle zeigt, ist die Annäherung der Messwerte durch die BRUGGEMAN'sche Methode und die hier berechneten, korrigierten Torsionsmoduln gleich gut[1]).

Physikal. Institut der Universität Freiburg.

---

[1]) Ein näherer Vergleich der beiden Verfahren wird an anderem Orte erfolgen.