Punktdefekte im kubischen elastischen Kontinuum

Doctoral Thesis

Author(s):

Muggli, Jürg

Publication date:

1971

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000087824>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. Nr. 4595

Punktdefekte im kubischen elastischen Kontinuum

Abhandlung
zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Naturwissenschaften
der

Eidgenössischen Technischen
Hochschule Zürich

vorgelegt von

Jürg Muggli

Dipl. Phys. ETH

geboren am 4. April 1943

von Küsnacht und Bäretswil, Kanton Zürich

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. W. Känzig, Referent
Prof. Dr. W. Baltensperger, Korreferent

Springer-Verlag
Berlin · Heidelberg · New York
1971

Punktdefekte im kubischen elastischen Kontinuum

JÜRGEN MUGGLI

Laboratorium für Festkörperphysik der ETH Zürich

Eingegangen am 9. November 1970

Point Defects in a Cubic Elastic Continuum

The determination of the displacement and strain fields of a point defect in a cubic crystal requires even in the framework of continuum elasticity theory numerical calculation. These fields of elastic dipoles are expanded in suitable vector and tensor fields. The coefficients of this expansion are calculated up to polynomials of 5th and 4th order in the direction cosines using the ratios of elastic constants as parameters. With this expansion the interaction of elastic dipoles in a cubic medium can be calculated. The results have been applied to the interaction of F-centres and of O_2^- -centres in alkali halides.

Die Auslenkungs- und Verzerrungsfelder von Punktdefekten in einem kubischen Kristall lassen sich auch im Rahmen der Kontinuumsstheorie nur numerisch berechnen. Für elastische Dipole werden diese Felder nach geeigneten Vektor- bzw. Tensorfeldern entwickelt. Die Koeffizienten dieser Entwicklung sind für alle praktisch vorkommenden Verhältnisse der elastischen Konstanten berechnet bis zu Polynomen 5. bzw. 4. Ordnung in den Richtungs cosinus. Damit kann die Wechselwirkung von elastischen Dipolen im kubischen Medium berechnet werden. Die Resultate wurden angewendet auf die Wechselwirkung von O_2^- -Zentren und von F-Zentren in Alkalihalogeniden.

Les champs de déplacement et de déformation produits par de défauts ponctuels dans un cristal cubique ne peuvent être calculés que numériquement même dans la théorie de l'élasticité des milieux continus. Ces champs d'un dipôle élastique sont développés suivants des champs de vecteurs et de tenseurs adaptés à la symétrie. Les coefficients du développement sont calculés jusqu'aux polynômes du cinquième ou quatrième degré du cosinus de direction pour différentes proportions des constantes d'élasticité. On en a déduit l'interaction de dipôles élastiques dans des milieux cubiques. Les résultats ont été appliqués à l'interaction entre des centres F et à l'interaction des centres O_2^- dans les halogénures alcalins.

1. Einleitung

Lokale Störungen im gleichmäßigen Aufbau von Kristallgittern bewirken langreichweitige Verzerrungen des ganzen Gitters. In einer ersten Approximation lassen sich diese Verzerrungen im Rahmen der elastischen Kontinuumsstheorie berechnen. Um die Veränderung des Gitters bei einer vorgegebenen Kraftdichteverteilung berechnen zu können, muß man das Fundamentalintegral (Monopolfeld oder Greenfunktion), d. h. die Veränderung des elastischen Kontinuums durch eine Punktkraft kennen. Im isotropen (siehe z. B. [1]) und im hexagonalen Fall (z. B. [2]) läßt sich das Fundamentalintegral geschlossen angeben. Daten über die Wechselwirkung von Punktdefekten sind aber vor allem für kubische Kristalle bekannt (z. B. O_2^- Moleküle in Alkalihalogeniden [3]).

In der vorliegenden Arbeit wird nun das Fundamentalintegral nach Feldern entwickelt, die der kubischen Symmetrie angepaßt sind und sich als Linearkombi-