

Dynamik der plastischen Deformation von Kristallen

Aufbau einer Feldtheorie im Lagrangeformalismus
unter Berücksichtigung der dissipativen
Dynamik von Versetzungsklassen

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
vorgelegt dem
Department Physik der Fakultät für Naturwissenschaften
der Universität Paderborn

Martin Schargott

Paderborn, 2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Das Modell	3
1.3	Aufbau der Theorie und das Inverse Problem	4
1.4	Gliederung	6
2	Grundlagen	7
2.1	Lagrangeformalismus	7
2.1.1	Punktmechanik	7
2.1.2	Feldtheorie	8
2.1.3	Noethertheorem	9
2.1.4	Die ideale Flüssigkeit als Modellsystem	11
2.2	Nichteuklidische Geometrie	14
2.2.1	Einführung	14
2.2.2	Tensoren und Tensordichten	15
2.2.3	Holonome und anholonome Basissysteme	16
2.2.4	Die geometrischen Objekte der nichteuklidischen Geometrie	16
2.2.5	Substantielle Mitführung materieller Objekte	19
3	Plastizitätstheorie	23
3.1	Verallgemeinertes Cosserat–Kontinuum	23
3.1.1	Übersicht	23
3.1.2	Aufbau der Cosserat–Geometrie	26
3.1.3	Wichtige Definitionen und Rechenregeln	33
3.2	Der deformierbare Kristall im Lagrangeformalismus	36
3.2.1	Aufbau aus der idealen Flüssigkeit	36
3.2.2	Anpassung der Noether–Bilanzen	41
3.2.3	Die plastische Deformation	44

3.2.4	Der Cosserat–Driftstrom als Versetzungsstrom	45
3.3	Theorie der Versetzungsclassen	46
3.3.1	Motivation	46
3.3.2	Einführung der Klassenvektoren	47
3.3.3	Klassentheorie im Lagrangeformalismus	55
3.4	Einbettung der Klassen in das Hintergrundmedium	58
3.4.1	Fundamentalgleichung der Klassentheorie	59
3.4.2	Geometrische Eigenschaften des Modells	61
3.4.3	Konsistenzbedingung für den Cosserat–Driftstrom	66
3.4.4	Ansatz für den Cosserat–Driftstrom	67
3.4.5	Separation der Energiedichte des Gesamtsystems	75
3.5	Aufbau der Lagrangedichte	78
3.6	Modellsystem mit einer Versetzungsclassen	79
3.7	Die Nyesche Strukturkrümmung	86
3.8	Homogene plastische Deformation	96
4	Dissipation im Lagrangeformalismus	99
4.1	Thermodynamik irreversibler Prozesse im Lagrangeformalismus	99
4.2	Dissipative Prozesse im Lagrangeformalismus	102
4.2.1	Aufbau der Lagrangedichte	102
4.2.2	Einbau der Dissipationsrate	105
4.2.3	Modell zweier Flüssigkeiten mit Reibung	105
4.3	Dissipative Versetzungsdynamik	113
4.3.1	Veränderlicher Reibungskoeffizient	114
4.3.2	Lagrangedichte für die dissipative Versetzungsdynamik	116
5	Zusammenfassung und Ausblick	119
A	Anhang	121
A.1	Berechnung der Konstanten q_0	121
A.2	Konsistenzbedingung für den Cosserat–Strom J_i^κ	122
A.3	Dissipative Systeme in der Punktmechanik	124
B	Literaturverzeichnis	131
	Danksagung	137

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Die plastische Deformation von Materialien spielt eine große Rolle in den Anwendungen der Ingenieurwissenschaften. Bei der bleibenden Deformation von Stoffen in eine gewünschte Form ist die (kontrollierte) plastische Deformation erwünscht, ebenso bei der Berücksichtigung einer “Knautschzone” bei der Herstellung von Autos. Bei Gebäuden oder Brücken etwa muß sie hingegen vermieden werden. Dazu werden Sicherheitsbereiche bei der Auslegung von Trägern oder Materialien definiert. Eine Verkleinerung dieser Sicherheitsbereiche kann zur Einsparung von Material führen, setzt aber eine genauere Kenntnis der Vorgänge während oder vor Einsetzen der plastischen Deformation voraus.

Speziell in kristallinen Materialien ist der Mechanismus der plastischen Deformation seit langem bekannt. Es wurde bereits von *Orowan* (1934), *Polanyi* (1934) und *Taylor* (1934) entdeckt, daß Versetzungen, die topologische Defekte in Kristallen darstellen, und ihre Bewegungen im Kristall die Ursache makroskopischer plastischer Deformation sind. Das mikroskopische Bild der Versetzungen läßt jedoch kaum Berechnungen der makroskopischen Eigenschaften zu.

In der Kontinuumstheorie hingegen können die Auswirkungen von Versetzungen auf das sie umgebende elastische Kontinuum berechnet werden, wenn ein mikroskopischer Bereich, der sog. Versetzungskern, aus der Beschreibung ausgenommen wird. Für die Beschreibung kontinuierlicher Versetzungsverteilungen wurden insbesondere die Methoden der Differentialgeometrie verwendet (die z.B. auch in der allgemeinen Relativitätstheorie von Einstein Anwendung fanden). Die statische Theorie geht u.a. auf Arbeiten von *Kröner* (1958), *Kondo* (1955) und *Bilby, Bullough, Smith* (1955) zurück. Dazu mußten die diskreten Eigenschaften von Versetzungen mit geometrischen Größen verknüpft werden. Zentrale Idee war es, *kontinuierliche* Umläufe in Differentialgeometrien, über die die sog. *Torsion* bestimmt wird, mit entsprechenden *diskreten* Umläufen um Versetzungslinien in einem Kristallgitter zu verknüpfen, die den **Burgersvektor** (als Maß für die Größe des topologischen Defekts dieser Versetzung) definiert.

Dies führt zu dem kontinuumstheoretischen **Tensor der Versetzungsdichte**. Über diesen können die Auswirkungen von Versetzungen auf die elastischen Größen be-

schrieben werden. Sie führen zu den von Kröner beschriebenen *Eigenspannungen*.

Bei der Anwendung dieser Theorie auf reale Materialien tauchen jedoch zwei große Probleme auf:

Der Versetzungsdichtetensor ist ein makroskopisches Maß für den Burgersvektor eines Flächenelements. Auf makroskopischen Längenskalen verschwindet dieser meist, da sich gleichartige Versetzungen mit entgegengesetzten Burgersvektoren auf großen Skalen aufheben, auch wenn diese mikroskopisch nicht annihilieren.

Kröner (2001) sagte dazu:

The conventional tensor of dislocation density counts only excess dislocations of one sign, whereas the observed hardening and softening is due to the dislocations of two signs.

Es sind also Wechselwirkungen von Versetzungen auf mikroskopischer Skala relevant, die in die bestehende Kontinuumstheorie integriert werden müssen. Dazu müssen zusätzliche Freiheitsgrade berücksichtigt werden.

Diese Freiheitsgrade können zum einen über die Methoden der **Eichfeldtheorie** eingebettet werden (siehe dazu z.B. *Popov, Kröner (1999)*, *Marqués-Lopéz (2002)*, *Kleinert (1989)*).

Zum anderen – und dieser Weg soll hier beschrrieben werden – können diese zusätzlichen Freiheitsgrade als Subkontinua in die Theorie eingebaut werden, wenn diese mit den diskreten Eigenschaften der Versetzungen in Verbindung gebracht werden, basierend auf *Anthony (1989)* und *Anthony, Azirhi (1998)*. Dieser Weg hat den Vorteil, daß er weitestgehend auf die physikalischen Informationen zurückgreift, die über die Versetzungen im Kristall bekannt sind. Damit wird auch verhindert, experimentelle Ergebnisse durch schiere Erhöhung der Zahl der inneren Freiheitsgrade zu “fitten” und den Anschluß an die physikalischen Interpretationen zu verlieren.

Das zweite große Problem entsteht aus der Tatsache, daß die die plastische Deformation hervorrufenden Versetzungsbewegungen materielle Zusammenhänge im Kristall zerstören können: benachbarte materielle Punkte können sich beliebig weit voneinander entfernen. Damit ist der Kristall aber mathematisch nicht mehr mit einer materiellen Mannigfaltigkeit zu identifizieren.

Kröner drückte dies so aus:

The motion of the typical defects in the crystalline structure destroys the particles that constitute the body whose particles, therefore, do not persist during the elastoplastic motion. For this reason, the elastoplastic crystalline solid is not a differentiable material manifold.

Der Kristall zeigt während des plastischen Fließens typische Verhaltensmerkmale einer Flüssigkeit. Diese Eigenschaften sollen in dieser Arbeit berücksichtigt werden und führen zu einer Beschreibung des Kristalls aus etwas anderer Sicht:

1.2 Das Modell

Der Kristall als strukturierte Flüssigkeit

Ein Kristall wird üblicherweise als Festkörper beschrieben, der in der Elastizitätstheorie über eine materielle Mannigfaltigkeit modelliert wird. Wenn nun *plastische* Deformationen beschrieben werden sollen, müssen Fließeigenschaften *nachträglich* in die Theorie integriert werden (dies kann z.B. über die oben erwähnte Eichfeldtheorie geschehen).

In dieser Arbeit wird der Kristall hingegen über die Feldtheorie der Flüssigkeiten modelliert, in die Ordnungsstrukturen vermöge des **verallgemeinerten Cosserat-Kontinuums** eingearbeitet werden, die ein plastisches Fließen im rein *elastischen* Fall verhindern. Die Beschreibung des ideal-elastischen Kristalls in dieser Theorie ist dann äquivalent zu der bekannten Elastizitätstheorie.

Plastisches Fließen hingegen ist über das Modell der Flüssigkeit bereits vollständig in dieser Beschreibung eingebettet. Dazu müssen lediglich an bestimmten Stellen die für elastisches Verhalten sorgenden Ordnungsstrukturen nach bestimmten Gesetzmäßigkeiten aufgegeben werden. Diese Gesetzmäßigkeiten sollen entsprechend modelliert und an die Träger der Plastizität, die Versetzungen, geknüpft werden.

Versetzungsklassen

Die **Versetzungsklassen** sind Subkontinua, die Verteilungen von Versetzungen und ihre Dynamik modellieren. Diese Kontinua werden aufgrund *diskreter* Eigenschaften der Versetzungen in Klassen unterteilt, sodaß differenziertere Beschreibungen von Versetzungen möglich sind, in der auch lokale Wechselwirkungen, beispielsweise von Versetzungen entgegengesetzten Vorzeichens, enthalten sind. Dabei wird es in dieser Arbeit um den grundlegenden Aufbau dieser Theorie gehen. Daher werden nur nicht-reagierende Versetzungsklassen berücksichtigt. Es werden aber Vorschläge gemacht, wie die Theorie um die Beschreibung von Versetzungsreaktionen erweitert werden kann und wo Einschränkungen und Voraussetzungen fallengelassen werden müssen.

Der Lagrangeformalismus

Das Modell der Versetzungsklassen soll komplett im **Lagrangeformalismus** der Felder aufgebaut werden, d.h. unter Berücksichtigung des **Hamiltonschen Variationsprinzips** der kleinsten Wirkung: Dieses ist ein universelles Prinzip, das auf vielen Gebieten der Physik eine entscheidende Rolle spielt. Es findet Anwendung in klassischen Theorien wie der Elastizitätstheorie, Elektrodynamik, aber auch in Bereichen der Quantenmechanik. Die Quantenfeldtheorie ist ohne den Lagrangeformalismus nicht denkbar.

Ein großer Vorteil ist die Kompaktheit einer Theorie im Lagrangeformalismus: *eine* skalare Größe, die Lagrangefunktion, liefert über das systemunabhängige und damit universelle Hamiltonsche Variationsprinzip die für das System relevanten Gleichungen. Darüberhinaus bietet das **Noethertheorem** die Möglichkeit, Erhaltungsgrößen auf *systemübergreifende* methodische Forderungen zurückzuführen. Beispielsweise

führt die Forderung, daß eine Theorie invariant gegenüber raum–zeitlichen Translationen sein soll (was der methodischen Forderung nach Reproduzierbarkeit von Experimenten in Raum und Zeit entspricht) zu den Definitionen von Impuls und Energie sowie den zugehörigen Bilanzgleichungen.

Weiterhin läßt sich eine bestehende Theorie *numerisch* behandeln. Dies geschieht über Minimierungsverfahren auf Ebene der Lagrangedichte, wie z.B. das Ritzsche Verfahren. Es werden Lösungsansätze für die Variablen gemacht, die nach Basisfunktionen entwickelt werden. Die Suche nach dem Minimum des Wirkungsfunktionals führt dann auf algebraische, durch numerische Verfahren lösbare Gleichungen. Die Genauigkeit dieses Verfahrens hängt im Prinzip nur von der Größe der gewählten Basis und damit letztendlich von der Rechenkapazität der verwendeten Computer ab, was gerade für die Zukunft auch für komplexere Systeme – und ein solches ist der plastisch deformierbare Kristall unter Einbeziehung der Versetzungsdynamik – eine gute Perspektive für deren Lösung bietet.

Zu den Theorien, die lange Zeit nicht in den Lagrangeformalismus integrierbar schienen, gehört die Thermodynamik, insbesondere die Thermodynamik irreversibler Prozesse. Die Lücke wurde von *Anthony* (1989) geschlossen. So wurde es möglich, Systeme der Thermodynamik irreversibler Prozesse – wozu beispielsweise Wärmeleitung, Diffusion und chemische Reaktionen gehören – in den Lagrangeformalismus zu integrieren. Darüber hinaus gelang es *Anthony*, über Stabilitätsbetrachtungen dieser Systeme zu *inhomogenen* Bilanzgleichungen von *Observablen* zu gelangen, von denen besonders die *Entropie* als thermodynamisch relevante Größe zu erwähnen ist: Ihre *inhomogene* Bilanz mit einer positiv definiten Entropieerzeugungsrate wird also auch auf *universelle* Mechanismen – hier über die Stabilität – mit Hilfe des Lagrangeformalismus definiert (in Analogie zum Noethertheorem, in dem es um *homogene* Bilanzen geht). Dies unterstreicht den vereinheitlichenden Aspekt des Lagrangeformalismus.

Aus diesen Gründen wird die Theorie der Versetzungsklassen in dieser Arbeit im Lagrangeformalismus aufgebaut. Dies erfordert jedoch die Integration der **Dissipation** mechanischer Energie in den Formalismus, da Versetzungsbewegung immer dissipativ ist.

1.3 Aufbau der Theorie und das Inverse Problem

Es gibt nun verschiedene Möglichkeiten, eine Kontinuums– oder Feldtheorie in Verbindung mit einem Variationsprinzip aufzubauen (der Begriff *Feldtheorie* ist wohl passender: Es werden diskrete Objekte (Versetzen) mit Feldern beschrieben):

Ausgehend von experimentellen Beobachtungen werden meist Gleichungssysteme aufgestellt, die die Dynamik des beobachteten Systems beschreiben sollen. Dann muß ein Weg gesucht werden, diese Gleichungen als Ergebnis eines Variationsprinzips zu deuten.

Für den Lagrangeformalismus und das zugehörige Hamiltonsche Variationsprinzip stellt sich die Frage, ob das Gleichungssystem der Felder den Euler–Lagrange–Gleichungen eines gesuchten Lagrangefunktionals entspricht. In einer lokalen Theorie, und eine solche wird in dieser Arbeit ausschließlich betrachtet, bedeutet das die Suche nach einer geeigneten *Lagrangedichte*. Notwendig und hinreichend für die Existenz

dieser Lagrangedichte für ein vorgegebenes Gleichungssystem ist dessen *Selbstadjungiertheit*, die sich eindeutig nachweisen läßt (siehe dazu z.B. Santili (1977, 1978)).

Leider ist in den meisten Fällen das System nicht selbstadjungiert. Es kann jedoch einen *äquivalenten* Satz von Gleichungen geben, der diese Eigenschaft besitzt. Das Problem ist, bei vorgegebenen Gleichungen (die wohlgerne aus einer bestehenden Theorie entnommen werden), diesen Satz zu finden, wobei neben Einführung von integrierenden Faktoren auch die Möglichkeit besteht, mit Potentialen zu arbeiten. Da es dafür kein Rezept und keine allgemein gültige Vorschrift gibt, ist dies nur für einfache Systeme möglich, und auch hier ergeben sich Fragen hinsichtlich der echten Äquivalenz der Gleichungen. Als Beispiel sei hier die **ideale Flüssigkeit** genannt, zu der eine ausführliche Betrachtung hinsichtlich dieser Fragen und dissipativer Systeme bei Wagner (1997) zu finden ist.

Das Problem, eine Lagrangedichte zu finden, die einen äquivalenten Gleichungssatz liefert, nennt man **Inverses Problem erster Art**.

Es besteht weiter die Möglichkeit, die Lagrangedichte – unter Beibehaltung der Euler–Lagrange–Gleichungen – so umzuändern, daß die oben erwähnten Noetherschen Erhaltungsgrößen mit den aus der ursprünglichen Theorie verknüpften übereinstimmen. Dies nennt man das **Inverse Problem zweiter Art**.

Der Aufbau einer Plastizitätstheorie für Einkristalle (unter Berücksichtigung der Versetzungsdynamik) im Lagrangeformalismus wird in dieser Arbeit etwas anders vollzogen:

Die Theorie wird unter Berücksichtigung der wichtigsten experimentellen Beobachtungen mit Hilfe bekannter, bereits gelöster inverser Probleme (im wesentlichen das Variationsproblem der idealen Flüssigkeit) direkt in einer Lagrangedichte aufgebaut. Die das System beschreibenden Gleichungen sind dann die Euler–Lagrange–Gleichungen, die die Dynamik des Systems vollständig festlegen. Diese Dynamik ist das eigentliche Modell, das mit Experimenten zu vergleichen ist.

Es zeigt sich, daß auf diese Weise die bekannten Gleichungen der (nicht-)linearen Elastizitätstheorie sowie der elastoplastischen Theorie reproduziert werden können, darüber hinaus aber auch mikro- und mesoskopische Betrachtungen einfließen, die eine differenziertere Beschreibung des Einkristalls mit Versetzungen ermöglichen.

Die unverzichtbaren Gleichungen werden hier mittels Lagrange–Multiplikatoren eingebaut. Dazu gehören elementare Bilanzgleichungen wie die Kontinuitätsgleichung, die beim Gleiten von Versetzungen erfüllt sein muß, und geometrische Zusammenhänge, wie die Definition des Versetzungsdichtetensors über die Torsion der Cosserat–Vektoren. Es ist aber möglich, diesen Multiplikatoren Bedeutungen zuzuordnen. In einfachen Fällen können sie in eine Potentialdarstellung umgewandelt werden, wie dies in der Theorie der idealen Flüssigkeit geschieht, oder sie stellen Reaktionen des Systems auf innere Bindungen dar. Dies ist der Fall, wenn es nicht möglich ist, das System von diesen inneren Bindungen (Zwangsbedingungen) zu befreien. Dies wird hier der Fall sein, wenn es um die Bewegung von Versetzungslinien geht: Da der Aufbau dieser Theorie sich auf Systeme beschränkt, in denen Versetzungen nicht miteinander reagieren, muß es innere Kräfte geben, die Versetzungslinien als linienhafte Objekte zusammenhalten, da ein Abknicken einer Versetzungslinie in dieser Beschreibung eine Versetzungsreaktion darstellt. Genau diese inneren Kräfte können mit einem Lagrange–Multiplikator in Verbindung gebracht werden.

1.4 Gliederung

Die Arbeit ist in drei wesentliche Teile gegliedert:

Zu Beginn wird in Kapitel 2 eine kurze Einführung in die Begriffe des Lagrangeformalismus der Felder gegeben, wobei ein Schwerpunkt auf der Diskussion des Modells der idealen Flüssigkeit liegt, das ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit ist. Weiterhin werden die Grundlagen der nicht-euklidischen Geometrie erläutert, mit einem Schwerpunkt auf der Darstellung wichtiger geometrischer Objekte wie Metrik, Konnexion, Torsion und dem anholonomen Objekt.

Das folgende Kapitel 3 beinhaltet den Aufbau der nicht-dissipativen Theorie der plastischen Deformation, zunächst im verallgemeinerten Cosserat-Kontinuum, dann erweitert um die Theorie der Versetzungsklassen. Am Schluß dieses Kapitels werden Lösungen der linearisierten Gleichungen für eine Versetzungsklasse am Beispiel der Nyeschen Strukturkrümmung präsentiert.

Im Kapitel 4 wird ein Modell erstellt, welches dissipative Prozesse im Lagrangeformalismus beschreibt. Dazu wird die dissipative Bewegung zweier sich durchdringender Flüssigkeiten betrachtet. Dieses Modell wird dann mit den Ergebnissen aus Kapitel 3 zu einer Lagrangedichte verknüpft, die sowohl Elastizität von Kristallen als auch deren Plastizität über dissipative Versetzungsdynamik beschreibt. Weiterhin wird eine Möglichkeit aufgezeigt, die Fließgrenze in das Modell einzubringen.

Kapitel 5 enthält die Zusammenfassung und Ausblicke auf Auswertungs- und Erweiterungsmöglichkeiten der Theorie.

Die Anhänge enthalten neben längeren Rechnungen wie in Anhang A1 und A2 auch Vorschläge, dissipative Prozesse in den Lagrangeformalismus der Punktmechanik zu integrieren (A3). Der letzte Teil ist zwar losgelöst vom restlichen Inhalt dieser Arbeit, gleichwohl mit aufgeführt, um als Diskussionsvorlage zu dienen und Anregungen für zukünftige Forschung zu bieten.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Lagrangeformalismus

In diesem Abschnitt wird eine kurze Übersicht über den Lagrangeformalismus in der Punktmechanik und der Feldtheorie gegeben. Ausführliche Betrachtungen dazu finden sich in vielen Lehrbüchern der Mechanik und Kontinuumsmechanik (z.B. *Landau, Lifschitz (1997)*, *Goldstein (1972)*).

In dieser Arbeit wird nur der **Lagrangeformalismus erster Ordnung** betrachtet, d.h. es kommen nur Variable und ihre ersten Ableitungen in der Lagrangefunktion vor. Dies ist aber keine echte Einschränkung, da durch Hinzunahme weiterer Variablen die Lagrangefunktion immer auf die erste Ordnung reduziert werden kann.

Des weiteren erfolgt eine Beschränkung auf abgeschlossene Systeme. Dadurch wird es möglich, die für diese Systeme geltenden Erhaltungssätze über das Noethertheorem zu erhalten. Eine Erweiterung auf offene Systeme ist aber möglich: Steht ein System in Wechselwirkung mit anderen (z.B. durch Einwirken einer Gravitationskraft), so kann das Gesamtsystem als abgeschlossen betrachtet werden, wenn diese Einwirkung durch entsprechende Erweiterung der Lagrangefunktion berücksichtigt wird. Im Fall der Gravitation ist das Gravitationspotential zu berücksichtigen, wodurch das Gesamtsystem wieder abgeschlossen ist, da es nun die Gravitation mit einschließt.

2.1.1 Punktmechanik

Die physikalische Größe **Wirkung** A (engl. *action*) eines Systems von N Massenpunkten, die durch ihre (generalisierten) Koordinaten x_i gegeben sind, ist definiert als

$$A := \int_{t_1}^{t_2} L(x_i, \dot{x}_i, t) dt, \quad (2.1)$$

wobei L die **Lagrangefunktion** des Systems darstellt.

Wenn die explizite Zeitabhängigkeit fallengelassen wird, so folgt aus dem Noethertheorem, daß das System energetisch abgeschlossen ist¹:

$$A := \int_{t_1}^{t_2} L(x_i, \dot{x}_i) dt. \quad (2.2)$$

Das **Hamiltonsche Prinzip** besagt nun, daß reale Prozesse dadurch ausgezeichnet sind, daß bei ihnen die Wirkung extremal wird.

Anwendung des Hamiltonschen Prinzips führt bei *freier* Variation aller Koordinaten zu den N Euler–Lagrange–Gleichungen:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1..N. \quad (2.3)$$

Die Variationen in den Anfangs– und End–Zeitpunkten t_1 bzw. t_2 verschwinden.

2.1.2 Feldtheorie

In der Feldtheorie wird das Wirkungsintegral zu einem Funktional der unabhängigen Felder. In der hier betrachteten lokalen Theorie hängt die Lagrangedichte von den N Feldern $\Psi_i(\mathbf{x}, t)$ sowie ihren räumlichen und zeitlichen Ableitungen $\nabla\Psi_i, \partial_t\Psi_i$ ab, mit

$$\partial_t := \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.4)$$

$$\nabla := \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \quad (2.5)$$

$$\mathbf{x} := (x_1, x_2, x_3). \quad (2.6)$$

Das *Hamiltonsche Prinzip* besagt nun, daß die im Zeitintervall $[t_1, t_2]$ stattfindenden realen Prozesse sich durch ein *extremales Wirkungsfunktional*

$$A[\Psi_i] := \int_{t_1}^{t_2} \int_{V(t)} \ell(\Psi_i(\mathbf{x}, t), \nabla\Psi_i(\mathbf{x}, t), \mathbf{x}, t) dV dt \quad (2.7)$$

auszeichnen, sodaß bei *freier* Variation aller Felder dessen Variation verschwindet:

$$\delta A[\Psi_i] = 0. \quad (2.8)$$

Auch hier wird vorausgesetzt, daß die Felder in den Zeitpunkten t_1 und t_2 fest vorgegeben sind. Zudem muß die räumliche Grenze ∂V beachtet werden: entweder, alle oder einige Felder sind auf dem Rand fest vorgegeben, dann hat man es mit einem offenen System zu tun, oder die Felder werden auf dem Rand ebenfalls frei variiert, was abgeschlossenen Systemen entspricht.

¹Der Umkehrschluß gilt jedoch nicht, es gibt sehr wohl abgeschlossene System, die dennoch explizit von der Zeit abhängen können. Beispiele finden sich bei *Scholle* (1999).

Es ist dabei zu beachten, daß das Volumen $V(t)$ selbst zeitlich veränderlich sein kann, was bei der Variation zu beachten ist. Für elastische Körper endlicher Ausdehnung ist es sinnvoll, diese Änderung des Systemvolumens zuzulassen.

Freie Variation im Volumen führt zu den Euler–Lagrange–Gleichungen:

$$\partial_t \left(\frac{\partial \ell}{\partial (\partial_t \Psi_i)} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \ell}{\partial (\nabla \Psi_i)} \right) - \frac{\partial \ell}{\partial \Psi_i} = 0, \quad i = 1..N. \quad (2.9)$$

Dies sind N Gleichungen für die N Felder Ψ_i .

Des weiteren folgen aus der Bedingung der Abgeschlossenheit bei frei veränderlichem Systemvolumen die Randbedingungen:

$$\mathbf{e}^N \cdot \left[\frac{\partial \ell}{\partial (\nabla \Psi_i)} - \frac{\partial \ell}{\partial (\partial_t \Psi_i)} \mathbf{v} \right] = 0, \quad i = 1..N, \quad \mathbf{x} \in \partial V. \quad (2.10)$$

Dabei ist \mathbf{e}^N der Normalenvektor auf der Oberfläche und \mathbf{v} das Geschwindigkeitsfeld des Mediums. Die Herleitung findet sich bei *Scholle* (1999).

Es ist anzumerken, daß dieser Ausdruck für Terme in der Lagrangedichte, die substantielle Ableitungen der Form

$$\partial_t \Psi + \mathbf{v} \cdot \nabla \Psi \quad (2.11)$$

enthalten, verschwindet. Physikalisch ist das klar, da substantielle Mitführung mit dem Medium keine Ströme durch die Oberfläche zur Folge haben kann. Wenn also alle zeitlichen Ableitungen in substantieller Form geschrieben werden, reduziert sich der Oberflächenterm auf die Bedingung

$$\mathbf{e}^N \cdot \frac{\partial \ell}{\partial (\nabla \Psi_i)} = 0, \quad i = 1..N, \quad (2.12)$$

wobei hier nur *die* Gradienten zu berücksichtigen, die *nicht* Teil der substantiellen Ableitungen sind, wie dies z.B. bei einem Wärmestrom $\mathbf{j}_q = -\lambda \nabla T$ der Fall ist.

2.1.3 Noethertheorem

Die Mathematikerin Emmy *Noether* (1918) formulierte das später nach ihr benannte **Noethertheorem**, für das *Bessel-Hagen* (1921) erste physikalische Anwendungen fand (siehe dazu auch die Übersicht in *Schmutzer* (1972)): Parametrisierbare, kontinuierliche Symmetrien (Liesche Symmetrien) der Lagrangedichte werden mit homogenen Bilanzgleichungen verknüpft, die als Erhaltungssätze gedeutet werden können. Dabei wird jedem Symmetrieparameter ε eine Dichte ρ_ε und eine zugehörige Stromdichte \mathbf{j}_ε zugeordnet, die der Gleichung

$$\partial_t \rho_\varepsilon + \nabla \cdot \mathbf{j}_\varepsilon = 0 \quad (2.13)$$

genügen.

Dabei werden unter Symmetrien sowohl raum–zeitliche Deformationen

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t; \varepsilon_x) \quad (2.14)$$

$$t \longrightarrow t' = f_0(\mathbf{x}, t; \varepsilon_t) \quad (2.15)$$

als auch Prozeßtransformationen

$$\Psi_i \longrightarrow \Psi'_i = F_i(\Psi, \mathbf{x}, t; \varepsilon) \quad (2.16)$$

verstanden.

Die wichtigsten Symmetrien sind die zeitlichen und räumlichen Translationen, weil aus ihnen die Energie– und Impulsbilanz des Systems folgen. Dies ist deshalb so bedeutend, weil auf diese Art und Weise die Begriffe Energie und Impuls an *methodische Forderungen* geknüpft werden. Die Translationsinvarianz der Theorie eines physikalischen Systems in Raum und Zeit ist verknüpft mit der methodischen Forderung der Reproduzierbarkeit von Meßergebnissen in Raum und Zeit, die ein wesentlicher Kern aller Physik ist.

Diese beiden Symmetrien sind mit den raum–zeitlichen Translationen

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \varepsilon \quad (2.17)$$

$$t \longrightarrow t' = t + \varepsilon_0 \quad (2.18)$$

$$\Psi_i \longrightarrow \Psi'_i = F_i(\Psi_i, \mathbf{x}, t, \varepsilon, \varepsilon_0) \quad (2.19)$$

verknüpft, wobei meist die Transformationsvorschrift F_i über

$$\Psi_i =: F_i(\Psi_i, \mathbf{x}, t, \varepsilon, \varepsilon_0) \quad (2.20)$$

definiert wird, was bedeutet, daß sich die Felder durch die raum–zeitlichen Translationen nicht ändern².

Es ergeben sich dann die folgenden Bilanzgleichungen (*Schmutzer (1972)*):

Die **Noethersche Energiebilanz**

$$\partial_t e^N(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}_e^N(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.21)$$

und die **Noethersche Impulsbilanz**

$$\partial_t \mathbf{p}^N(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \underline{\sigma}^N(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.22)$$

die mit der Lagrangedichte über

$$e^N = \frac{\partial \ell}{\partial_t \Psi_i} \partial_t \Psi_i - \ell \quad (2.23)$$

$$\mathbf{j}_e^N = \frac{\partial \ell}{\nabla \Psi_i} \partial_t \Psi_i \quad (2.24)$$

$$\mathbf{p}^N = - \frac{\partial \ell}{\partial_t \Psi_i} \nabla \Psi_i \quad (2.25)$$

$$\underline{\sigma}^N = \ell \underline{1} - \frac{\partial \ell}{\nabla \Psi_i} \otimes \nabla \Psi_i \quad (2.26)$$

²Diese Möglichkeit ist allerdings nicht zwingend, wie *Scholle (1999)* aufzeigt.

als die Noetherschen Ausdrücke für die **Energiedichte**, **Energiestromdichte**, **Impulsdichte** und Impulsstromdichte (= **Spannungstensor**) verknüpft sind. $\underline{1}$ ist der Einheitstensor, für den Index der Felder gilt die Einsteinsche Summenkonvention.

2.1.4 Die ideale Flüssigkeit als Modellsystem

Die Beschreibung der Plastizität im Lagrangeformalismus soll auf möglichst elementaren und einfachen Bausteinen aufgebaut werden. *Einfach* ist hier natürlich ein relativer Begriff. Er soll andeuten, daß auf einer feldtheoretischen Beschreibung eines Systems mit wenigen Systemvariablen aufgebaut werden soll, für die das inverse Problem gelöst ist.

Dieses Modellsystem ist die ideale Flüssigkeit, die hier in ihrer Entstehung und ihren Gleichungen dargestellt werden soll. Zur Geschichte des inversen Problems der Eulerschen Gleichungen und der Analyse der Literatur gibt es eine ausgezeichnete Darstellung von *Wagner* (1997).

Die Gleichungen der idealen Flüssigkeit bestehen zum einen aus der Kontinuitätsgleichung, die die lokale Massenerhaltung des Systems beschreibt, und der Eulergleichung, die die Impulsbilanz der Flüssigkeit darstellt.

Ab hier wird eine indexbasierte Darstellung aller Gleichungen gewählt. Es gilt die Einsteinsche Summenkonvention: über gleiche Indizes verschiedener Varianz wird summiert. Dabei sind in dieser Darstellung kontra- und kovariante Komponenten noch identisch.

Dann lauten **Kontinuitäts-** und **Eulergleichung**:

$$\partial_t \varrho + \partial_i (\varrho v^i) = 0 \quad (2.27)$$

$$\varrho D_t^{(v)} v_i + \partial_i p = 0. \quad (2.28)$$

Dabei bezeichnet $\varrho(\mathbf{x}, t)$ die **Massendichte**, $v^i(\mathbf{x}, t)$ das **Strömungsfeld** in Eulerschen Koordinaten,

$$D_t^{(v)} := \partial_t + v^i \partial_i \quad (2.29)$$

die **substantielle Zeitableitung** und $p(\mathbf{x}, t)$ den **hydroelastischen Druck**.

Für eine vollständige Beschreibung der idealen Flüssigkeit in einem hier abgeschlossenen System muß der Druck eine Funktion der Systemvariablen sein. Dazu wird unter Vernachlässigung der thermischen Effekte von den Aussagen der Thermodynamik des Lokalen Gleichgewichts Gebrauch gemacht (Literatur dazu findet sich z.B. in *Meixner, Reik* (1959)), sodaß der Druck über

$$p = p(\varrho) := \varrho^2 \frac{\partial W(\varrho)}{\partial \varrho} \quad (2.30)$$

mit der *spezifischen elastischen Energiedichte* W des Mediums zusammenhängt, die hier nur eine Funktion der Massendichte ϱ ist.

Es stellt sich nun die Frage, ob diese Gleichungen Euler–Lagrange–Gleichungen einer Lagrangedichte sein können. Diese Frage ist sofort zu verneinen, da das System der Gleichungen (2.27,2.28) nicht selbstadjungiert ist.

Es gibt nun zwei Strategien, wie man dennoch zu einer Lagrangedichte gelangen kann: Entweder sucht man eine Transformation in ein selbstadjungiertes Gleichungssystem, oder man geht von bekannten Lagrangedichten aus und erweitert diese, um zu einem äquivalenten Satz von Gleichungen zu gelangen. Dazu finden sich Arbeiten bei *Clebsch* (1857, 1859), *Bateman* (1929), *Lin* (1963), sowie bei *Seliger und Whitham* (1968) mit einer Erweiterung auf linear–elastische Festkörper.

Beispielsweise kann die aus der Mechanik für viele (aber bei weitem nicht alle) Systeme zutreffende Merkregel

Lagrangefunktion = kinetische Energie — potentielle Energie

als Ansatz verwendet werden.

Die kinetische Energiedichte ist hier $\frac{1}{2}\varrho v^2$, statt der potentiellen Energie wird die elastische Energiedichte $\varrho W(\varrho)$ angesetzt:

$$\ell := \frac{1}{2}\varrho v^2 - \varrho W(\varrho). \quad (2.31)$$

Man erkennt sofort, daß die Euler–Lagrange–Gleichungen unbefriedigend sind, denn sie liefern

$$\delta\varrho : \frac{1}{2}v^2 - W(\varrho) + \varrho \frac{\partial W(\varrho)}{\partial \varrho} = 0 \quad (2.32)$$

$$\delta v^i : \varrho v_i = 0. \quad (2.33)$$

Dieser Ansatz ist deswegen unzureichend, weil weitere Nebenbedingungen erfüllt sein müssen. So fehlt die Massenerhaltung (2.27), die gleichzeitig einen Zusammenhang zwischen der Dichte und dem Geschwindigkeitsfeld herstellt, indem durch ϱv^i die Massenstromdichte definiert wird. Diese Gleichung kann über einen Lagrangemultiplikator Φ erzwungen werden:

$$\ell := \frac{1}{2}\varrho v^2 - \varrho W(\varrho) + \Phi (\partial_t \varrho + v^i \partial_i \varrho + \varrho \partial_i v^i) \quad (2.34)$$

liefert nun folgende Euler–Lagrange–Gleichungen:

$$\delta\Phi : \partial_t \varrho + \partial_i (\varrho v^i) = 0 \quad (2.35)$$

$$\delta\varrho : \partial_t \Phi + v^i \partial_i \Phi + \frac{1}{2}v^2 + W(\varrho) + \varrho \frac{\partial W(\varrho)}{\partial \varrho} = 0 \quad (2.36)$$

$$\delta v^i : \varrho v_i - \varrho \partial_i \Phi = 0. \quad (2.37)$$

Dieses Gleichungssystem beschreibt nun eine echte Dynamik einer idealen Flüssigkeit, die allerdings auf Potentialströmungen beschränkt ist, wie aus der Potentialdarstellung (2.37) hervorgeht, sodaß keine wirbelbehafteten Geschwindigkeitsfelder darge-

stellt werden können. Das Wirbelfeld \mathbf{w} , das über die Rotation³ von \mathbf{v} definiert wird, verschwindet wegen

$$w^i := \varepsilon^{ijk} \partial_j v_k \stackrel{(2.37)}{=} \varepsilon^{ijk} \partial_j \partial_k \Phi = 0. \quad (2.38)$$

Die Gl.(2.36) ist die dynamische Bernoulli–Gleichung für Potentialströmungen, wie man nach Einsetzen von $p(\varrho)$ und v^i sehen kann:

$$\partial_t \Phi + \frac{1}{2} (\nabla \Phi)^2 + W(\varrho) + \frac{p(\varrho)}{\varrho} = 0. \quad (2.39)$$

Wie läßt sich nun die Einschränkung auf Potentialströmungen umgehen? Die Idee von *Lin* (1963) war es, die substantielle Mitführung der Lagrangen Koordinaten $X^i(\mathbf{x}, t)$, also möglicher Markierungen, die als im Volumen angebracht zu denken sind, mitzunehmen:

$$\ell := \frac{1}{2} \varrho v^2 - \varrho W(\varrho) + \Phi (\partial_t \varrho + v^i \partial_i \varrho + \varrho \partial_i v^i) - \varrho \alpha_i (\partial_t X^i + v^j \partial_j X^i). \quad (2.40)$$

Das Vorzeichen und der Faktor ϱ vor dem Lagrangemultiplikator sind Konvention. Allerdings ist der Faktor ϱ hier physikalisch sinnvoll, da diese Nebenbedingung nur dort Sinn macht, wo die Dichte der Flüssigkeit nicht verschwindet.

Variation nach der Geschwindigkeit führt nun zu der Potentialdarstellung

$$v_i = \partial_i \Phi + \alpha_j \partial_i X^j, \quad (2.41)$$

die auch wirbelbehaftete Geschwindigkeitsfelder möglich macht:

$$w^i := \varepsilon^{ijk} \partial_j v_k = \varepsilon^{ijk} \partial_j \alpha_l \partial_k X^l \neq 0. \quad (2.42)$$

Es stellt sich nun die Frage, wie viele Potentiale mindestens nötig sind, um eine zu den Eulerschen Gleichungen äquivalente Darstellung zu bekommen. Es kann gezeigt werden, daß fünf Potentiale in der Form

$$v_i := \partial_i \Phi + \alpha_1 \partial_i \beta_1 + \alpha_2 \partial_i \beta_2 \quad (2.43)$$

immer ausreichen.

Mit dem Ansatz von *Clebsch* (1859),

$$v_i := \partial_i \Phi + \alpha \partial_i \beta, \quad (2.44)$$

der mit drei Potentialen auskommt, ist eine *lokale* Darstellung immer möglich⁴.

³Der hier benutzte vollständig antisymmetrische Tensor ist bekanntlich definiert über

$$\varepsilon^{ijk} := \begin{cases} 1 & \text{für } i, j, k = \text{gerade Permutation von } 1, 2, 3 \\ -1 & \text{für } i, j, k = \text{ungerade Permutation von } 1, 2, 3 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

⁴Es gibt Vektorfelder, die mit dem Clebsch–Ansatz *global* nicht darstellbar sind (vergleiche dazu *Moffat* (1969)). Dies sind insbesondere solche Vektorfelder, deren *Feldlinien* in einem Volumen Knoten bilden (man denke hier z.B. an ineinander verschlungene Ringe wie bei den bekannten Olympischen Ringen).

Die Lagrangedichte für die ideale Flüssigkeit lautet nun:

$$\ell = \frac{1}{2}\varrho v^2 - \varrho W(\varrho) + \Phi (\partial_t \varrho + v^i \partial_i \varrho + \varrho \partial_i v^i) - \varrho \alpha (\partial_t \beta + v^j \partial_j \beta). \quad (2.45)$$

Nach Abziehen einer Viererdivergenz $\partial_t (\varrho \Phi) + \partial_i (\varrho v^i \Phi)$, die an den Euler–Lagrange–Gleichungen nichts ändert, erhält man die Lagrangedichte für die ideale Flüssigkeit:

$$\ell = -\varrho \left(D_t^{(v)} \Phi + \alpha D_t^{(v)} \beta - \frac{1}{2} v^2 + W(\varrho) \right), \quad (2.46)$$

mit der Abkürzung für die substantielle Zeitableitung

$$D_t^{(v)} := \partial_t + v^i \partial_i. \quad (2.47)$$

In dieser Darstellung wurde das Geschwindigkeitsfeld v^i immer explizit als Variable geführt. Wenn die Potentialdarstellung von v^i jedoch in die Lagrangedichte eingesetzt wird, erhält man eine Darstellung mit nur vier Größen: den drei Clebsch–Potentialen und der Massendichte:

$$\tilde{\ell} = -\varrho \left(\partial \Phi + \alpha \partial_t \beta + \frac{1}{2} (\partial_i \Phi + \alpha \partial_i \beta)^2 + W(\varrho) \right). \quad (2.48)$$

In komplexeren Situationen muß man jedoch mit verallgemeinerten Potentialdarstellungen für das Strömungsfeld arbeiten, die nicht immer explizit nach v^i auflösbar sind. Außerdem können sich durch Einsetzen der Potentialform Lagrangedichten mit Ableitungen zweiten oder höheren Grades ergeben, wenn bereits Ableitungen der Geschwindigkeit vorhanden waren. Daher wird auch hier schon das Geschwindigkeitsfeld immer als eigenständige Variable mitgenommen. Auch für verallgemeinerte Potentialdarstellungen gilt aber, daß Variation nach dem Geschwindigkeitsfeld die Potentialdarstellung als Euler–Lagrange–Gleichung zur Folge hat.

2.2 Nichteuklidische Geometrie

Die Beschreibung des elastischen Einkristalls mit Versetzungen wird mit Hilfe der nichteuklidischen Differentialgeometrie aufgebaut. Dazu sollen hier die wesentlichen Grundbegriffe zusammengefaßt werden, die im weiteren Verlauf eine Rolle spielen. Insbesondere werden die Objekte der nichteuklidischen Geometrie definiert. Eine ausführliche Betrachtung findet man z.B. bei *Schouten* (1954, 1989), *Anthony* (1974) oder *Eringen* (1971).

2.2.1 Einführung

In dieser Arbeit werden Tensortransformationen und Basissysteme eine große Rolle spielen. Als Beispiel für Tensoren seien Vektoren, also Tensoren erster Stufe, genannt. Der Vektor⁵ $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ ist unabhängig von einem Basissystem und wird deshalb *invariant*

⁵Genauer handelt es sich hier um ein Vektorfeld, das im Ort veränderlich ist. Die hier vorkommenden Vektorfelder werden als stetig und hinreichend oft differenzierbar angenommen.

gegenüber Basistransformation genannt. Es stellt sich die Frage, wie sich die Komponenten dieses Vektors bezüglich verschiedener Basissysteme verhalten.

Die physikalische Relevanz erschließt sich sofort, wenn man bedenkt, daß alle physikalischen Größen und Gesetze in ihrem jeweiligen Gültigkeitsbereich natürlich unabhängig von ihrer Darstellung in bestimmten Basissystemen sein müssen.

In zwei lokalen **Basissystemen**⁶, die durch ihre Basisvektoren

$$\mathbf{e}_i(\mathbf{x}) \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{e}_{i'}(\mathbf{x}) \quad i, i' = 1..3 \quad (2.49)$$

gegeben sind, läßt sich der Vektor $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ darstellen als

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = v^i(\mathbf{x})\mathbf{e}_i(\mathbf{x}) = v^{i'}(\mathbf{x})\mathbf{e}_{i'}(\mathbf{x}). \quad (2.50)$$

Beide Basissysteme können nun durch eine *lokale Basistransformation* ineinander überführt werden:

$$\mathbf{e}_i(\mathbf{x}) = A_i^{i'}(\mathbf{x})\mathbf{e}_{i'}(\mathbf{x}), \quad (2.51)$$

wobei stets

$$\text{Det}|A_i^{i'}| \neq 0 \quad (2.52)$$

gilt.

Da diese Transformation eindeutig umkehrbar sein soll, folgen wegen

$$\mathbf{e}_{i'}(\mathbf{x}) = A_{i'}^i(\mathbf{x})\mathbf{e}_i(\mathbf{x}) \quad (2.53)$$

mit der Definition der Kehrmatrix $A_{i'}^i(\mathbf{x})$ die Reziprozitätsbedingungen für die Transformationsmatrizen:

$$A_i^{i'}(\mathbf{x})A_{i'}^j(\mathbf{x}) = \delta_i^j \quad \text{und} \quad A_{i'}^j(\mathbf{x})A_i^{i'}(\mathbf{x}) = \delta_{i'}^{j'}. \quad (2.54)$$

2.2.2 Tensoren und Tensordichten

Die Komponenten eines beliebigen **Tensors** $T_{ij\dots}^{lm\dots}$ transformieren sich gemäß

$$T_{i'j'\dots}^{l'm'\dots} = A_{i'}^i A_{j'}^j A_l^{l'} A_m^{m'} \cdot \dots \cdot T_{ij\dots}^{lm\dots}, \quad (2.55)$$

Tensordichten hingegen enthalten bei Transformation in ein anderes Basissystem daneben noch Potenzen J^w der Jacobi–Determinante

$$J := \text{Det}|A_i^{i'}| \quad (2.56)$$

der Transformation. Den Exponenten w nennt man das *Gewicht* der Tensordichte. Die Komponenten einer beliebigen **Tensordichte vom Gewicht** w , bezeichnet mit $T_{ij\dots}^{(w)lm\dots}$, transformieren sich gemäß

$$T_{i'j'\dots}^{(w)l'm'\dots} = \frac{1}{J^w} A_{i'}^i A_{j'}^j A_l^{l'} A_m^{m'} \cdot \dots \cdot T_{ij\dots}^{(w)lm\dots}. \quad (2.57)$$

⁶Hier wird ein dreidimensionaler Raum angenommen.

2.2.3 Holonome und anholonome Basissysteme

In globalen Koordinatensystemen können die Basisvektoren der oben benutzten Basissysteme aus den globalen Koordinaten abgeleitet werden.

Seien x^i und $x^{i'}$ zwei **globale Koordinatensysteme**, so gilt für die Basistransformation wegen $x^{i'} = x^{i'}(x^i)$

$$\mathbf{e}_i(\mathbf{x}) = \frac{\partial x^{i'}}{\partial x^i}(\mathbf{x}) \mathbf{e}_{i'}(\mathbf{x}). \quad (2.58)$$

Die **Jacobimatrix** der Transformation ist also die gesuchte Transformationsmatrix

$$A_i^{i'}(\mathbf{x}) = \frac{\partial x^{i'}}{\partial x^i}(\mathbf{x}), \quad (2.59)$$

wobei aus dieser Definition die Integrabilitätseigenschaft der Matrix $A_i^{i'}(\mathbf{x})$ folgt:

$$\partial_{[i} A_{j]}^{i'}(\mathbf{x}) := \frac{1}{2} \left(\partial_i A_j^{i'}(\mathbf{x}) - \partial_j A_i^{i'}(\mathbf{x}) \right) = 0. \quad (2.60)$$

Dies bedeutet, daß das Basissystem mit den Basisvektoren \mathbf{e}_i **holonom** ist. Es existiert also, wie angenommen, ein globales Koordinatensystem.

Nimmt man die Gl.(2.51) als Transformationsgleichung, *ohne* auf globalen Koordinatensystemen und der Darstellung (2.59) zu bestehen, so sind auch **anholonome Basissysteme** \mathbf{a}_κ möglich (zur besseren Unterscheidung werden anholonome Basissysteme mit griechischen Buchstaben als Indexklasse gekennzeichnet). Diese müssen aber immer auf einem holonomen Hintergrund definiert werden:

$$\mathbf{a}_\kappa(\mathbf{x}) := A_\kappa^i(\mathbf{x}) \mathbf{e}_i(\mathbf{x}). \quad (2.61)$$

Die Matrizen $A_\kappa^i(\mathbf{x})$ erfüllen jetzt *nicht* mehr die Integrabilitätsbedingung⁷ (2.60):

$$\partial_{[i} A_{j]}^\kappa \neq 0. \quad (2.62)$$

Das bedeutet, daß kein globales Koordinatensystem x^κ existiert. Dies hat weiterhin zur Folge, daß partielle Ableitungen der Form $\frac{\partial}{\partial x^\kappa}$ nicht existieren. Der Operator ∂_κ wird daher über die anholonome Transformation als **anholonome Ableitung** definiert:

$$\partial_\kappa := A_\kappa^i \partial_i. \quad (2.63)$$

2.2.4 Die geometrischen Objekte der nichteuklidischen Geometrie

Metrik

Die **Metrik** $g_{ij}(\mathbf{x})$ führt eine Maßbestimmung in die Geometrie ein. Die Länge ds eines Wegelements dx^i wird über

$$ds^2 := g_{ij} dx^i dx^j \quad (2.64)$$

⁷Die Argumente der Felder werden im folgenden weggelassen, um die Lesbarkeit zu verbessern. Aus dem Zusammenhang geht immer hervor, welche Größen Feldgrößen sind und von \mathbf{x} abhängen.

definiert. Es ist wichtig zu betonen, daß die Metrik ein Tensor ist und auch in anholonomen Systemen definiert werden kann:

$$g_{\kappa\lambda} := A_{\kappa}^i A_{\lambda}^j g_{ij}, \quad (2.65)$$

sodaß ebenfalls gilt:

$$ds^2 := g_{\kappa\lambda} dx^{\kappa} dx^{\lambda}. \quad (2.66)$$

Die Wegelemente sind dann allerdings keine vollständigen Differentiale, sondern analog zur partiellen Ableitung via

$$dx^{\kappa} := A_i^{\kappa} dx^i \quad (2.67)$$

definiert.

In euklidischen Systemen kann die Metrik immer in der einfachen Form

$$g_{ij} = \delta_{ij} \quad (2.68)$$

geschrieben werden, es muß lediglich ein passendes Basissystem gefunden werden. Dabei bezeichnet δ_{ij} das sog. *Kronecker-Symbol*:

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{für } i = j, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.69)$$

In nicht-euklidischen Systemen ist die Transformation der Metrik auf diese Form nicht immer möglich. In Systemen, in denen beispielsweise die Torsion (siehe unten) nicht verschwindet, kann nur ein passendes *anholonomes* Basissystem gefunden werden, in dem dies möglich ist.

Durch Einführung der anholonomen Basen hat man also die Möglichkeit, die Metrik, die anschaulich Längen und Winkel in einem System definiert⁸ global auf die einfache Form (2.68) zu bringen.

Konnexion

Neben Längen und Winkeln spielt die Parallelverschiebung in der nicht-euklidischen Geometrie eine entscheidende Rolle. Dabei stellt sich die Frage, wie sich die Komponenten v^k eines Vektors ändern, wenn er um ein Wegelement dx^i verschoben wird: In krummlinigen Koordinatensystemen ändern sie sich gemäß

$$dv^k = -\Gamma_{ij}^k(\mathbf{x})v^j dx^i \quad (2.70)$$

(die ausführlichen Betrachtungen finden sich in *Schouten* (1954)).

⁸Speziell der rechte Winkel, also Orthogonalität zwischen zwei Vektoren, ist definiert durch $g_{ij}v^i u^j = 0$.

Die Größe Γ_{ij}^k ist ein geometrisches Objekt, das **Konnexion** genannt wird. Während sich jedoch v^k und dx^i jeweils wie Komponenten eines Tensors transformieren, gilt für die Konnexion bei einem Übergang in ein anderes Koordinatensystem:

$$\Gamma_{i'j'}^{k'} := A_{i'}^i A_{j'}^j A_k^{k'} \Gamma_{ij}^k + A_l^{k'} \partial_{i'} A_{j'}^l. \quad (2.71)$$

Dies hat insbesondere zur Folge, daß die Konnexion bei ortsabhängigen Transformationen in einem System verschwinden kann, in einem anderen hingegen von null verschieden ist. Im Gegensatz dazu ist ein Tensor in *allen* Systemen gleichermaßen null, wenn er in *einem* verschwindet.

Die Definition der Konnexion und ihres Transformationsverhaltens ist für holonome und anholonome Basen identisch. Man muß gegebenenfalls darauf achten, die anholonome Ableitung wie oben definiert einzuführen.

Eine Besonderheit stellt die Konnexion dar, die *global* in einem Basissystem verschwindet:

$$\Gamma_{\kappa\lambda}^\mu = 0. \quad (2.72)$$

Dies entspricht einer Parallelverschiebung, wie man sie aus euklidischen Systemen gewohnt ist. In nicht-euklidischen Systemen kann die Konnexion global durch Wahl einer geeigneten Basis verschwinden und *gleichzeitig* die Metrik die einfache Form (2.68) annehmen, wenn anholonome Basissysteme dazu herangezogen werden.

Diese speziellen Basissysteme nennt man **naturalisierende Basen**, da dort Konnexion oder Metrik ihre natürliche bzw. einfachste Form annehmen. Die gleichzeitige Naturalisierung von Metrik und Konnexion funktioniert jedoch nur, solange der **Riemann-Christoffel-Tensor**

$$R_{ijk}^{\dots l} := 2 \left(\partial_i \Gamma_{jk}^l + \Gamma_{ip}^l \Gamma_{jk}^p \right)_{[ij]}, \quad (2.73)$$

der über die Konnexion definiert ist, identisch verschwindet (vgl. *Anthony* (1970a), *Schouten* (1954, 1989)).

Mit Hilfe von (2.70) wird weiterhin die **kovariante Ableitung** bezüglich der Gitterkonnexion Γ eingeführt, die sich im Gegensatz zur partiellen Ableitung wie ein Tensor transformiert. Für einen Tensor beliebiger Stufe lautet sie:

$$\overset{(\Gamma)}{\nabla}_i T_{jk\dots}^{lm\dots} := \partial_i T_{jk\dots}^{lm\dots} + \Gamma_{ip}^l T_{jk\dots}^{pm\dots} + \Gamma_{ip}^m T_{jk\dots}^{lp\dots} + \dots - \Gamma_{ij}^p T_{pk\dots}^{lm\dots} - \Gamma_{ik}^p T_{jp\dots}^{lm\dots} - \dots \quad (2.74)$$

Anholonomes Objekt

Wie bereits gezeigt, gilt die Integrabilitätsbedingung (2.60) nicht, wenn von holonomen zu anholonomen Basissystemen übergegangen wird. Es wird nun ein weiteres geometrisches Objekt (welches ebenfalls kein Tensor ist) definiert, das ein Maß für die Anholonomität ist.

Bezeichnenderweise nennt man es **anholonomes Objekt**:

$$\Omega_{\kappa\lambda}^\mu := A_\kappa^i A_\lambda^j \partial_{[i} A_{j]}^\mu. \quad (2.75)$$

Es ist klar, daß ein Erfüllen der Integrierbarkeitsbedingungen wegen der Antisymmetrie in i und j auch ein Verschwinden des anholonomen Objektes zur Folge hat.

Torsion

In holonomen Systemen wird die **Torsion** als antisymmetrischer Teil der Konnexion definiert:

$$S_{ij}^k := \Gamma_{[ij]}^k. \quad (2.76)$$

Die Torsion ist ein Tensor, auch wenn die Konnexion dies nicht ist. In anholonomen Systemen muß diese Definition korrigiert werden, da das anholonome Objekt hier nicht verschwindet. Die vollständige Definition der Torsion in holonomen und anholonomen Basissystemen lautet:

$$S_{ij}^k := \Gamma_{[ij]}^k + \Omega_{ij}^k. \quad (2.77)$$

Es ist leicht zu sehen, daß diese Korrektur nötig ist, wenn man bedenkt, daß es in anholonomen Basissystemen möglich sein kann, $\Gamma_{\mu\nu}^\kappa = 0$ zu erhalten. Da die Torsion aber ein Tensor ist, darf sie im anholonomen System nicht verschwinden, wenn sie im holonomen System von null verschieden ist.

2.2.5 Substantielle Mitführung materieller Objekte

Da in dieser Arbeit Flüssigkeiten als Basis der Modellierung herangezogen werden, spielt die substantielle Mitführung von Objekten eine entscheidende Rolle. Für skalare Funktionen wurde bereits davon Gebrauch gemacht. Die substantielle Ableitung eines Skalarfeldes $s(x^i, t)$ bezüglich des Geschwindigkeitsfeldes v^i ist über

$$D_t^{(v)} s(x^i, t) := (\partial_t + v^j(x^i, t) \partial_j) s(x^i, t) \quad (2.78)$$

definiert. Substantielle Mitführung bedeutet, daß sich das Skalarfeld nicht ändert, wenn man es relativ zum Strömungsfeld v^i betrachtet. Also gilt hierfür:

$$D_t^{(v)} s(x^i, t) := 0. \quad (2.79)$$

Dies ist folgendermaßen zu sehen:

Wenn sich das Skalarfeld mit der Flüssigkeit um eine kleine Wegstrecke $dx^i = v^i dt$ bewegt, so hat es dort den gleichen Funktionswert wie vorher:

$$s(x^i + v^i dt, t + dt) = s(x^i, t). \quad (2.80)$$

Entwickelt man nun nach Termen in dx^i und dt bis zur ersten Ordnung, so folgt:

$$s(x^i + v^i dt, t + dt) = s(x^i, t) + \partial_t s(x^i, t) dt + \partial_j s(x^i, t) v^j dt + O(dt^2), \quad (2.81)$$

woraus sich für $dt \rightarrow 0$ mit Gl.(2.80) sofort

$$\partial_t s(x^i, t) + v^j \partial_j s(x^i, t) = 0 \quad (2.82)$$

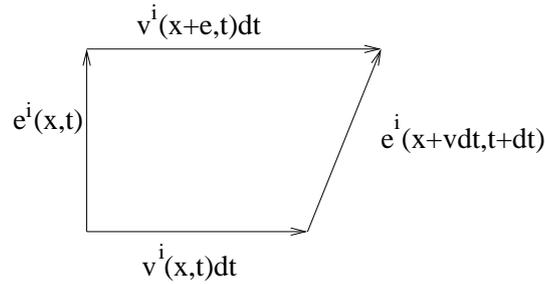


Abbildung 2.1: Verschiebung des Vektors e^i im Strömungsfeld v^i .

ergibt.

Für Tensoren höherer Ordnung jedoch genügt es nicht, nur die Funktionswerte zu vergleichen, sondern man muß – bei Vektoren zum Beispiel – Änderungen der Richtung betrachten. Anschaulich, wenn auch nicht mathematisch korrekt, kann man sich ein längliches Stück Holz auf einer Wasseroberfläche vorstellen. Das Holzstück wird sich drehen, wenn das Wasser einen Geschwindigkeitgradienten in Richtung seiner Längsachse besitzt.

Für ein Vektorfeld gilt somit, daß nach einer Translation um $dx^i = v^i dt$ das entstandene Vektorfeld gleich dem ursprünglichen ist, wobei allerdings eine mögliche Drehung des Vektors noch berücksichtigt werden muß.

In der Skizze (2.1) ist angedeutet, daß sich der Vektor e^i folgendermaßen in der Zeit dt verändert. Es gilt:

$$e^i(x^i + v^i dt, t + dt) = e^i(x^i, t) + v^i(x^i + e^i, t)dt - v^i(x^i, t)dt. \quad (2.83)$$

Nach linearer Entwicklung folgt nun

$$(\partial_t e^i(x^i, t) + v^j(x^i, t)\partial_j e^i(x^i, t)) dt = \partial_j v^i(x^i, t)e^j(x^i, t)dt \quad (2.84)$$

und damit⁹ im linearen Anteil:

$$\mathcal{L} D_t^{(v)} e^i := \partial_t e^i + v^j \partial_j e^i - e^j \partial_j v^i = 0. \quad (2.85)$$

Ist e^i ein Einheitsvektor, so ergibt sich ein beliebiger Vektor $u^i = u e^i$ nach Multiplikation mit einem Skalar u , und da bei substantieller Mitführung $D_t^{(v)} u = 0$ ist, folgt:

$$\mathcal{L} D_t^{(v)} u^i = e^i D_t^{(v)} u + u \mathcal{L} D_t^{(v)} e^i = 0. \quad (2.86)$$

oder entsprechend zusammengefaßt

$$\mathcal{L} D_t^{(v)} u^i = \partial_t u^i + v^j \partial_j u^i - u^j \partial_j v^i. \quad (2.87)$$

⁹Dies ist nur eine anschauliche Herleitung, eine genaue Formulierung findet sich bei Schouten (1954,1989)

Für einen kovarianten Vektor gilt (ohne Herleitung):

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} u_i = \partial_t u_i + v^j \partial_j u_i + u_j \partial_i v^j. \quad (2.88)$$

Die Ableitung $\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)}$ heißt **zeitliche Lie-Ableitung**¹⁰ bezüglich des Vektorfeldes \mathbf{v} , und kann für Tensoren beliebiger Varianz und beliebiger Stufe definiert werden. Allgemein gilt:

$$\begin{aligned} \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} T_{ij\dots}^{lm\dots} &= \partial_t T_{ij\dots}^{lm\dots} + v^k \partial_k T_{ij\dots}^{lm\dots} + T_{kj\dots}^{lm\dots} \partial_i v^k + T_{ik\dots}^{lm\dots} \partial_j v^k + \dots \\ &\quad - T_{ij\dots}^{km\dots} \partial_k v^l - T_{ij\dots}^{lk\dots} \partial_k v^m - \dots \end{aligned} \quad (2.89)$$

¹⁰Der Zusatz *zeitlich* ist wichtig, da die Bezeichnung *Lie-Ableitung* in der Literatur nur für den räumlichen Anteil dieses Ausdrucks gebraucht wird.

Kapitel 3

Plastizitätstheorie

In diesem Kapitel wird eine Theorie der plastischen Deformation von Einkristallen im Lagrangeformalismus aufgebaut. Dazu gehört zum einen die Beschreibung des Hintergrundmediums durch das verallgemeinerte Cosserat–Kontinuum.

Zum anderen werden hier die Subkontinua der Versetzungsklassen eingeführt, da die plastische Deformation von Kristallen auf Versetzungsbewegungen zurückgeführt werden kann, die durch eine nach Klassen differenzierte Beschreibung berücksichtigt werden sollen.

Die in diesem Abschnitt beschriebene Theorie ist zunächst noch nicht–dissipativ: Die Versetzungen können sich im Kristall bewegen, ohne daß mechanische Energie dissipiert wird.

Am Ende dieses Kapitels werden Lösungen der entstehenden Gleichungen vorgestellt, wobei ein dissipativer Term in den Bewegungsgleichungen der Versetzungen nachträglich in die linearisierten Gleichungen integriert wird. Ansätze zur kompletten Integration der Dissipation im Rahmen des Lagrangeformalismus finden sich im Kapitel 4.

3.1 Verallgemeinertes Cosserat–Kontinuum

Das verallgemeinerte Cosserat–Kontinuum bildet die Grundlage der hier aufgebauten Theorie: Es beschreibt das elastische Hintergrundmedium, in das die Versetzungsklassen eingebettet werden. Daher soll hier eine kurze Einführung in die Theorie und die verwendeten Größen gegeben werden. Diese sind insbesondere die Tensoren der elastischen Deformation und der Hyperdeformation sowie der Versetzungsdichtetensor. Außerdem werden wichtige Definitionen und Rechenregeln, die das Cosserat–Kontinuum betreffen, zusammengefaßt.

3.1.1 Übersicht

Das klassische Cosserat–Kontinuum geht auf Ideen der Gebrüder *Cosserat* (1909) zurück, die die Elastizitätstheorie eines flächenhaften Punktkontinuums (Membran) auf die Dynamik von eingebetteten *starren* Dreibeinen zurückführten (siehe dazu auch

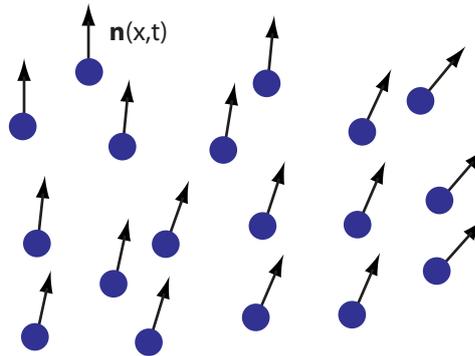


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung von Molekülen eines Flüssigkristalls mit einer Vorzugsachse \mathbf{n} .

Günther (1958)). Dadurch wurde es möglich, neben Verschiebungen auch Drehungen von Volumenelementen relativ zueinander zu beschreiben, sodaß neben Kraftspannungen auch Momentenspannungen beschrieben werden konnten.

Eine Erweiterung dieses Konzeptes ist das sogenannte **verallgemeinerte Cosserat-Kontinuum**, bei dem Felder von *deformierbaren* Cosserat-Vektoren in ein dreidimensionales Kontinuum eingebettet werden. (Näheres findet man bei *Krüner* (1968), *Anthony* (1974).) Dadurch erhält man zusätzliche Freiheitsgrade für das System, denn für jeden Cosserat-Vektor kommen drei neue Freiheitsgrade hinzu.

In den Abb. 3.1 und 3.2 werden zwei Strukturen skizziert, die mit diesen zusätzlichen Freiheitsgraden beschrieben werden können:

Nematische Flüssigkristalle

Für die Beschreibung eines nematischen Flüssigkristalls ist ein normiertes Vektorfeld $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)$ (siehe Bild 3.1) als verallgemeinerter Cosserat-Freiheitsgrad anzusehen. Dieses Vektorfeld repräsentiert die Richtung von länglichen Molekülen in einem nematischen Flüssigkristall und läßt eine Beschreibung der richtungsabhängigen Wechselwirkung dieser Moleküle zu, sofern sich diese Richtung von Molekül zu Molekül nur wenig ändert. Mit Hilfe dieses Vektorfeldes lassen sich die für nematische Flüssigkristalle relevanten Größen beschreiben (siehe dazu auch: *DeGennes* (1974), *Landau, Lifschitz* (1991)):

- **bend** (Längsbiegung) definiert durch $\mathbf{n} \times (\mathbf{rot} \mathbf{n})$,
- **twist** (Torsion) definiert durch $\mathbf{n} \cdot (\mathbf{rot} \mathbf{n})$,
- **splay** (Querbiegung) definiert durch $\mathbf{div} \cdot \mathbf{n}$.

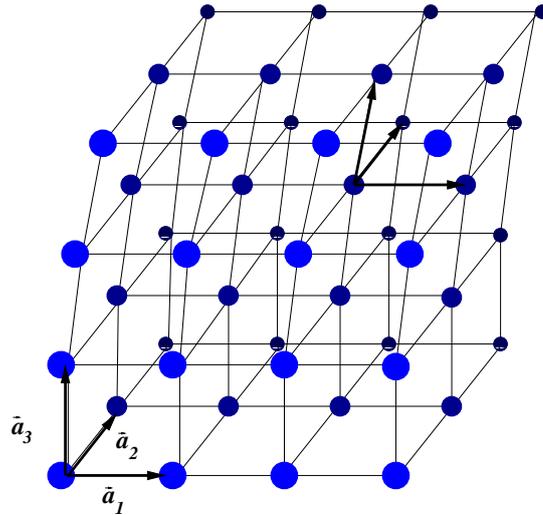


Abbildung 3.2: Skizze eines Bravais–Gitters mit den Cosserat–Vektoren \mathbf{a}_κ .

Einkristalle

Für die Beschreibung von Kristallen können die primitiven Gittervektoren als Cosserat–Vektoren definiert werden, d.h. es existieren drei unabhängige Vektorfelder

$$\mathbf{a}_\kappa(\mathbf{x}, t), \quad \kappa = 1..3, \quad (3.1)$$

die die Struktur des Kristalls repräsentieren.

In Bild 3.2 wird ein Bravaisgitter skizziert, das einen monoatomaren **Punktkristall** beschreibt. Durch das dargestellte Vektor–Dreiein \mathbf{a}_κ sind drei orientierte Vektoren gegeben, die die möglichen Deformationen des Kristalls beschreiben¹. In der Feldtheorie werden diese Vektoren zu den *Vektorfeldern* des Cosserat–Kontinuums.

Im Gegensatz zum klassischen Cosserat–Kontinuum sollen diese Vektorfelder (die weiterhin kurz als Vektoren bezeichnet werden) nun deformierbar sein, d.h. sie sind in ihren Längen und Winkeln zueinander veränderlich. Damit enthalten diese verallgemeinerten Cosserat–Vektoren $3 \times 3 = 9$ Freiheitsgrade. Diese drei Vektoren werden nun in eine Differentialgeometrie eingebettet. Dazu werden sie als **Basisvektoren** betrachtet, die das Gitter- oder Kristallsystem definieren.

Damit hat man es genaugenommen mit zwei Geometrien zu tun:

Die Geometrie der Cosserat–Vektoren definiert das Gitter und die Kristallzusammenhänge und ist damit mit den physikalischen Strukturen verknüpft. Wenn Versetzungen im Kristall vorhanden sind, müssen sich diese in der Beschreibung dieser Geometrie wiederfinden, die daher **Gitter–** oder auch **innere Geometrie** genannt wird. Die Bezeichnung *innere Geometrie* zielt auf die Vorstellung eines *Gitterwesens*

¹Eigentlich hat man es mit einem Vektor 6-Stern zu tun. Da jedoch zumindest in linearer Näherung entgegengesetzte Vektoren gleiche Richtungen und Längen haben, sind diese hier nicht berücksichtigt. Bei der Frage nach Symmetrioperationen muß aber der volle 6-Stern betrachtet werden: Zum Beispiel darf bei Inversion der Vektoren keine Änderung der Energie geschehen, wenn der Kristall ein Inversionszentrum besitzt.

ab, das als imaginäres Wesen im *Inneren* des Kristalls leben würde und die Gittervektoren als Basisvektoren seiner Geometrie ansähe. Es wäre nicht in der Lage, elastische Deformationen zu erkennen, da diese nur im Vergleich mit einer zweiten, äußeren Geometrie zu erkennen sind.

Diese zweite, sog. **Labor–** oder **äußere Geometrie**, ist verknüpft mit dem Standpunkt des Beobachters oder eines Labors: Der Kristall wird *von außen* betrachtet. Diese Geometrie ist euklidisch. Es ist sinnvoll, das äußere Basissystem an die Kristallsymmetrie des idealen ungestörten Kristalls anzupassen, was im nächsten Abschnitt erläutert wird.

3.1.2 Aufbau der Cosserat–Geometrie

Wie bereits angedeutet kann ein imaginäres Gitterwesen keine elastischen Deformationen messen, wenn es nur das *innere* Basissystem \mathbf{a}_κ zur Verfügung hat. Es befindet sich aus seiner Sicht in einem nichtdeformierten System.

Ein äußerer Beobachter sieht jedoch die Veränderungen der Cosserat–Vektoren relativ zu seinem *äußeren* Basissystem und kann diese Änderungen mit Deformationen in Zusammenhang bringen. Voraussetzung ist dabei, daß die Basisvektoren des *undeformierten, idealen* Kristalls mit den Basisvektoren des Laborsystems übereinstimmen. Die Transformation aus dem inneren in das äußere System soll also für den ungestörten Kristall die Einheitstransformation sein. Für die Basisvektoren gilt der Zusammenhang

$$\mathbf{a}_\kappa := A_\kappa^i \mathbf{e}_i \quad (3.2)$$

sowie die Umkehrung

$$\mathbf{e}_i = A_i^\kappa \mathbf{a}_\kappa. \quad (3.3)$$

Es gelten die **Reziprozitätsbeziehungen**

$$A_\kappa^i A_j^\kappa = \delta_j^i \quad (3.4)$$

und

$$A_\lambda^i A_i^\kappa = \delta_\lambda^\kappa \quad (3.5)$$

aufgrund der Umkehrbarkeit der Transformationen.

Da die \mathbf{e}_i fest an das Laborsystem gekoppelt sind, sind die Transformationsmatrizen A_κ^i als Koordinaten (i) des Cosserat–Vektors mit der Nummer (κ) zu deuten. Kennt man die Größen A_κ^i , so sind dadurch die Cosserat–Vektoren \mathbf{a}_κ eindeutig festgelegt. Auch wenn der Sprachgebrauch nicht ganz korrekt ist, werden die Größen A_κ^i der Einfachheit halber als *Cosserat–Vektoren* bezeichnet.

Die Größen A_i^κ , die zu der reziproken Transformation gehören, werden kurz als *reziproke Cosserat–Vektoren* bezeichnet.

Da die A_κ^i und A_i^κ miteinander über die Gl.(3.4) und (3.5) zusammenhängen, reicht eine dieser beiden als unabhängige Größe aus, um Kristalldeformationen zu beschreiben. In dieser Arbeit werden die reziproken Transformationen A_i^κ als primäre Variable benutzt. Im idealen Kristall lassen sie sich nämlich gerade aus den Ableitungen der inneren Koordinaten $X^\kappa(\mathbf{x})$ über $A_i^\kappa = \partial_i X^\kappa$ definieren (diese inneren Koordinaten existieren jedoch nicht global, wenn Versetzungen vorhanden sind). Sie werden ebenfalls meist kurz als Cosserat–Vektoren bezeichnet, auch wenn es sich eigentlich um die reziproken Transformationsmatrizen handelt. Bei dem vereinfachten Sprachgebrauch wird durch die Gleichungen immer deutlich, welche Größen beschrieben werden.

Die Gittermetrik

Der innere Standpunkt des Gitterwesens kommt in der geometrischen Beschreibung dadurch zum Ausdruck, daß die Metrik, die in diesem Gittersystem definiert wird, die Einheitsmetrik ist, bzw. durch Wahl eines geeigneten Basissystems immer zur Einheitsmetrik transformiert werden kann und *unveränderlich* aus der *inneren* Sicht des Gitterwesens ist.

Die mit $a_{\kappa\lambda}$ bezeichnete **Gittermetrik** wird also zu

$$a_{\kappa\lambda} := \delta_{\kappa\lambda} \quad (3.6)$$

im inneren System, welches durchgehend mit griechischen Indizes bezeichnet wird².

Es kann günstiger sein, eine andere Metrik für das Gittersystem zu wählen, wenn man die Cosserat–Vektoren über die primitiven Gittervektoren eines Bravaisgitters definiert. Dann sollte die Metrik des äußeren Systems daran angepaßt werden, damit im Falle verschwindender Deformationen der elastische Deformationstensor verschwindet (siehe folgender Abschnitt). Da die Gittermetrik aber immer auf die Form (3.6) gebracht werden kann, wird diese Form i.a. vorausgesetzt.

Der elastische Deformationstensor

Elastische Deformationen ändern Längen– und Winkelverhältnisse der Gittervektoren aus der Sicht des äußeren Beobachters. Da Längen– und Winkelverhältnisse in die Metrik eingehen, ist diese die geeignete Größe, um elastische Deformationen zu beschreiben. Die Differenz zwischen der konstanten Gittermetrik $a_{\kappa\lambda}$ und der äußeren Metrik g_{ij} des Laborsystems, die mit der Gittermetrik des ungestörten Kristalls identisch ist, ist damit ein Maß für die elastische Deformation. Die Gittermetrik muß allerdings noch in das Laborsystem transformiert werden, damit beide Größen in demselben System verglichen werden. Dies führt zu der Definition des **elastischen Deformationstensors**³ (auch *elastischer Verzerrungstensor* genannt):

$$e_{ij} := \frac{1}{2} (a_{ij} - g_{ij}) = \frac{1}{2} (a_{\lambda\kappa} A_i^\kappa A_j^\lambda - g_{ij}) \stackrel{*}{=} \frac{1}{2} (\delta_{\kappa\lambda} A_i^\kappa A_j^\lambda - \delta_{ij}). \quad (3.7)$$

²Da das Gittersystem anholonom ist, wenn Versetzungen vorhanden sind, ist diese Konvention konsistent mit der in Abschnitt 2.2.3 getroffenen.

³Siehe dazu auch Kröner (1958), Anthony (1970a,b). Das Zeichen $\stackrel{*}{=}$ bedeutet, daß diese Gleichung nur in dem Basissystem gilt, wo die Metrik die Einheitsmatrix ist.

die Parallelität nicht vom Verlauf des Weges (C oder C') ab, obwohl eine Versetzung vorhanden ist.

Voraussetzung für die Gültigkeit von Gleichung (3.9) in Gittern mit Versetzungen ist jedoch ein anholonomes Basissystem, das heißt, die Transformationen zwischen den beiden Geometrien sind nicht integrierbar, der einfache Zusammenhang

$$A_i^\kappa := \frac{\partial X^\kappa}{\partial x^i} \quad (3.10)$$

gilt nicht mehr, denn es existiert kein globales inneres Koordinatensystem X^κ . Auch dies kann in Abb. 3.3 veranschaulicht werden⁵: Eine Koordinatenlinie (rot markiert) bricht an der Versetzung ab. Zudem werden Koordinatenlinien durchgeschnitten, wenn die Versetzung gleitet. Es ist also nicht möglich, ein globales inneres Koordinatensystem anzugeben, ebensowenig ein lokales, welches nicht durch Versetzungsbewegung zerschnitten werden könnte.

Durch das anholonome Basissystem wird allerdings das in Gl.(2.75) definierte *anholonome Objekt* von null verschieden sein:

$$\Omega_{\mu\nu}^\kappa = A_\mu^i A_\nu^j \partial_{[i} A_{j]}^\kappa \neq 0. \quad (3.11)$$

Nun können die Konnexionen miteinander verglichen werden. Zwar kann in jeder der beiden Geometrien die jeweilige Konnexion verschwinden. Um sie zu vergleichen, muß jedoch eine der beiden in das jeweils andere System transformiert werden. Da Konnexionen keine Tensoren sind und ein anderes Transformationsverhalten haben, bleiben sie bei dieser Transformation nicht null.

Der Vergleich liefert eine Größe, die mit den Ableitungen der Cosserat–Vektoren verknüpft ist. Sie wird **Hyperdeformationstensor** genannt:

$$h_{ij}^{\cdot k} := \Gamma_{ij}^k - g_{ij}^k. \quad (3.12)$$

Obwohl hier zwei geometrische Objekte in Zusammenhang gebracht werden, die kein tensorielles Transformationsverhalten zeigen, ist ihre Differenz ein Tensor, denn es gilt:

$$\begin{aligned} h_{\kappa\lambda}^{\cdot\mu} &= \Gamma_{\kappa\lambda}^\mu - g_{\kappa\lambda}^\mu \\ &\stackrel{(3.9),(2.71)}{=} -A_\kappa^i A_\lambda^j A_k^\mu g_{ij}^k + A_\kappa^i A_\lambda^j \partial_i A_j^\mu \\ &\stackrel{(3.8)}{=} A_\kappa^i A_\lambda^j \partial_i A_j^\mu. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Wegen Gl.(2.71) und (3.8) gilt aber auch

$$h_{ij}^{\cdot k} = \Gamma_{ij}^k = A_\nu^k \partial_i A_j^\nu \quad (3.14)$$

⁵Es sei darauf hingewiesen, daß hier nur diskrete Abbildungen gemacht werden können, wobei die Vektoren als lokale Repräsentanten der Cosserat–Felder aufgefaßt werden müssen. Die Felder sind kontinuierlich, sie sind insbesondere auch als stetig differenzierbar angenommen.

und damit

$$\begin{aligned}
 h_{\kappa\lambda}^{\dots\mu} &= A_{\kappa}^i A_{\lambda}^j \partial_i A_j^{\mu} \\
 &\stackrel{(2.54)}{=} A_{\kappa}^i A_{\lambda}^j A_k^{\mu} A_{\nu}^k \partial_i A_j^{\nu} \\
 &= A_{\kappa}^i A_{\lambda}^j A_k^{\mu} h_{ij}^{\dots k},
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

was als echte Tensortransformation erkennbar ist.

Die Massendichte ϱ

Die Massendichte des Kristalls ist nicht konstant, sondern hängt von den Deformationen ab. Im *inneren* System wird jedoch immer die Referenzdichte ϱ_0 gemessen. Es stellt sich die Frage, wie sich diese Größe beim Übergang in das *äußere* System verhält.

Dazu betrachte man in Bild 3.2 das Volumen, daß von einem Cosserat–Dreibein aufgespannt wird. Es wird durch das Spatprodukt

$$V := \varepsilon^{\kappa\lambda\mu} \mathbf{a}_{\kappa} \mathbf{a}_{\lambda} \mathbf{a}_{\mu} \tag{3.16}$$

gegeben, während die Basisvektoren im *äußeren System* ein Referenzvolumen über das Spatprodukt

$$V_0 := \varepsilon^{klm} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l \mathbf{e}_m \tag{3.17}$$

definieren.

Beide Größen hängen über

$$\begin{aligned}
 V &= \varepsilon^{\kappa\lambda\mu} \mathbf{a}_{\kappa} \mathbf{a}_{\lambda} \mathbf{a}_{\mu} \\
 &\stackrel{(3.2)}{=} \varepsilon^{\kappa\lambda\mu} A_{\kappa}^k A_{\lambda}^l A_{\mu}^m \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l \mathbf{e}_m \\
 &\stackrel{(2.57)}{=} (\text{Det}|A_k^{\kappa}|)^{-1} \varepsilon^{klm} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l \mathbf{e}_m \\
 &= (\text{Det}|A_k^{\kappa}|)^{-1} V_0
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

zusammen, da ε^{klm} sich wie eine Tensordichte vom Gewicht (+1) transformiert.

Mit der zu dem Referenzvolumen V_0 gehörenden Referenzmasse M_0 ist die *Referenzdichte* gegeben durch

$$\varrho_0 := \frac{M_0}{V_0}. \tag{3.19}$$

Sie definiert die konstante Dichte des idealen Kristalls.

Im deformierten System hingegen spannen die Vektoren ein verändertes Volumen V auf, das aber die gleiche Referenzmasse M_0 enthält. Damit wird die *Massendichte* des deformierten Kristalls zu

$$\varrho := \frac{M_0}{V} \stackrel{(3.18),(3.19)}{=} \varrho_0 \text{Det}|A_k^{\kappa}|. \tag{3.20}$$

Sie ist daher eine *skalare Dichte vom Gewicht (+1)* und über die Referenzdichte des idealen Kristalls und die Determinante der reziproken Cosserat–Vektoren definiert.

Der Versetzungsdichtetensor

Die Torsion ist ein Tensor und damit eine basisunabhängige Größe. Sie läßt sich mit Versetzungsverteilungen im Kristall verknüpfen (*Kröner (1958), Bilby, Smith (1956)*).

Die Torsion ist damit ein Maß für die Anwesenheit von Versetzungen. Diese erzeugen – im Bild der Cosserat–Vektoren gesprochen – eine nicht-verschwindende Anholonomie der Cosserat–Vektoren, die gerade identisch mit der Torsion ist, und somit Deformationen als Reaktion auf diese Abweichungen von der Ideal–Struktur aufweisen werden. Mit einem Materialgesetz werden diese Deformationen mit Spannungen verknüpft, die *Kröner (1958) Eigenspannungen* nannte.

Die Definition des **Versetzungsdichtetensors** über die Torsion lautet mit Gl.(2.77) im äußeren System

$$\alpha_{ij}^{\cdot k} := S_{ij}^{\cdot k} = A_{\kappa}^k \partial_{[i} A_{j]}^{\kappa} \quad (3.21)$$

bzw. im Gittersystem

$$\alpha_{\mu\nu}^{\cdot\kappa} := S_{\mu\nu}^{\cdot\kappa} = A_{\mu}^i A_{\nu}^j \partial_{[i} A_{j]}^{\kappa}. \quad (3.22)$$

Oftmals wird statt des dreistufigen Tensors die zweistufige Tensordichte⁶ vom Gewicht (+1) verwendet, die man nach Überschieben mit dem ε –Tensor (genauer: Tensordichte) erhält:

$$\alpha^{il} := \varepsilon^{ijk} \alpha_{jk}^{\cdot l} = \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^{\kappa} A_{\kappa}^l. \quad (3.23)$$

Da der dreistufige Versetzungsdichtetensor in den unteren beiden Indizes antisymmetrisch ist, geht durch diesen Darstellungswechsel keine Information verloren, aus der zweistufigen Tensordichte läßt sich der dreistufige Tensor wiederherstellen:

$$\alpha_{jk}^{\cdot l} = \frac{1}{2} \varepsilon_{jkm} \alpha^{ml}, \quad (3.24)$$

wie man nach Einsetzen der Definition unter Berücksichtigung der Identität

$$\varepsilon_{jkm} \varepsilon^{mpq} = \delta_j^p \delta_k^q - \delta_j^q \delta_k^p \quad (3.25)$$

leicht verifiziert.

Gleichzeitig definiert die Torsion, welchen Schließungsfehler man erhält, wenn man versucht, einen Weg in Form eines Parallelogramms um eine Versetzung herum zu verfolgen:

Im diskreten Fall der Stufenversetzung (Abb. 3.4(a)) sieht man, daß in Maßen der inneren Einheitslängen das Parallelogramm eine Breite von drei und eine Höhe von zwei haben sollte, bzw. im Falle der Schraubenversetzung (Abb. 3.4(b)) je vier. Man erkennt aber, daß beide nicht geschlossen sind, was durch die gestörte Topologie aufgrund der Versetzung zu erklären ist. Der Schließungsfehler (der hier gerade ein

⁶Auf die Angabe der Gewichtsindizes wird i.a. verzichtet, es sei denn sie sind für die Rechnungen unentbehrlich.

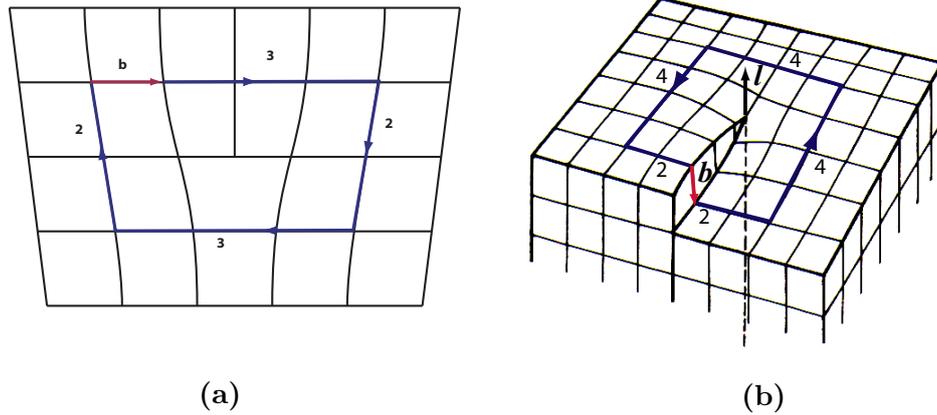


Abbildung 3.4: Ein Umlauf um eine Versetzung mit jeweils gleichen Längeneinheiten in Gitterlängen für entgegengesetzte Teilstücke führt zu einem Schließungsfehler, den man als Burgersvektor definiert.

Gitterabstand ist), ist der sog. **Burgersvektor**⁷ \mathbf{b} . Der Torsionstensor und der daraus folgende Versetzungsdichtetensor sind die feldtheoretischen Verallgemeinerungen dieses diskreten Bildes.

Lineare Elastizitätstheorie

Der in Gl.(3.7) definierte Deformationstensor ist nichtlinear. Geht man von kleinen Abweichungen eines ungestörten Zustandes aus, so werden sie linearisiert, indem man quadratische oder höhere Terme in diesen Abweichungen vernachlässigt.

Der Deformationstensor (3.7) verschwindet, wenn die identische Transformation, nämlich $A_i^\kappa = \delta_i^\kappa$, gewählt wird. Ebenso verschwindet der Hyperdeformationstensor.

Die **linearen Distorsionen** β_i^κ sind die Abweichungen von dieser Einheitstransformation. Sie liefern mit dem Ansatz

$$A_i^\kappa := \delta_i^\kappa + \beta_i^\kappa \quad (3.26)$$

nach Gl.(3.7) sowie unter Annahme kleiner Distorsionen, d.h. Linearisierung in diesen, die folgende elastische Deformation:

$$\begin{aligned} e_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\delta_{\kappa\lambda} (\delta_i^\kappa + \beta_i^\kappa) (\delta_j^\lambda + \beta_j^\lambda) - \delta_{ij} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\beta_i^\kappa \delta_{\kappa j} + \beta_j^\lambda \delta_{\lambda i} + O(\beta^2) \right) \\ &= \frac{1}{2} (\beta_{ij} + \beta_{ji} + O(\beta^2)), \end{aligned} \quad (3.27)$$

⁷Die Orientierung des Burgersvektors ist Konvention. Hier soll \mathbf{b} wie in Abb. 3.4(a) definiert werden, wenn der Linienrichtungsvektor in die Zeichenebene hineinzeigt, sodaß der Umlauf einer Rechtsschraube entspricht. Gleiches gilt für die Schraubenversetzung 3.4(b).

wobei angenommen wurde, daß die Metriken im Idealzustand durch δ_{ij} bzw. $\delta_{\kappa\lambda}$ gegeben sind.

Im versetzungsfreien Fall führt dies unter Berücksichtigung der Kompatibilität (d.h. unter Erfüllung der Integrabilitätsbedingung (2.60)) zum Ansatz

$$\beta_i^\kappa := \partial_i u^\kappa, \quad (3.28)$$

wobei u^κ als *Verschiebungsfeld* der linearen Elastizitätstheorie interpretiert werden kann.

Damit erhält man den *linearen Deformations–* (oder auch *Verzerrungs–*)*tensor*:

$$e_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i). \quad (3.29)$$

Der Hyperdeformationstensor⁸ liefert unter den gleichen Voraussetzungen

$$h_{ijk} = \partial_i \partial_j u_k. \quad (3.30)$$

Überschieben mit dem ε -Tensor führt zur Definition des sog. **linearen Strukturkrümmungstensors**

$$\kappa_n^{\cdot m} := \varepsilon^{mjk} h_{njk} = \partial_n \varepsilon^{mjk} \partial_j u_k, \quad (3.31)$$

der die lokalen Drehungen über den antisymmetrischen **linearen Drehtensor**

$$w_{jk} := \frac{1}{2} (\partial_j u_k - \partial_k u_j) \quad (3.32)$$

enthält.

Ist hingegen die Integrabilitätsbedingung (2.60) nicht erfüllt, so läßt sich der *lineare Versetzungsdichtetensor* über

$$\alpha^{il} = \varepsilon^{ijk} \partial_j \beta_k^l \quad (3.33)$$

einführen, wobei

$$\beta_k^l := \beta_k^\kappa \delta_\kappa^l \quad (3.34)$$

ist. Die Größen der linearen Theorie sind also in der Beschreibung des Kristalls im verallgemeinerten Cosserat–Kontinuum enthalten.

3.1.3 Wichtige Definitionen und Rechenregeln

Die folgenden Gleichungen sind wichtige Beziehungen, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit häufig benutzt werden. Sie sollen daher an dieser Stelle als Übersicht zusammengefaßt werden.

⁸Der letzte Index wurde mit der Gittermetrik gesenkt.

- **Zusammenhang zwischen Dichte und reziproken Cosserat–Vektoren:**

Da die Dichte über die Determinante

$$\varrho := \varrho_0 \text{Det} |A_i^\kappa| \quad (3.35)$$

definiert ist, folgt daraus für das Differential:

$$d\varrho := \varrho_0 \frac{\partial \text{Det} |A_i^\kappa|}{\partial A_i^\kappa} dA_i^\kappa. \quad (3.36)$$

Die Determinante ist aber gerade die Jacobi–Determinante der Transformation, die hier immer das Rechtssystem erhalten soll. In *Schouten* (1954, 1989) findet man folgenden Zusammenhang:

$$\frac{\partial \text{Det} |A_i^\kappa|}{\partial A_i^\kappa} = \text{Det} |A_i^\kappa| A_\kappa^i. \quad (3.37)$$

Die eigentlichen und reziproken Cosserat–Vektoren hängen also über diese Beziehung zusammen, wenn die reziproken Vektoren als unabhängige Freiheitsgrade aufgefaßt werden.

Damit ergibt sich:

$$d\varrho := \varrho_0 \text{Det} |A_i^\kappa| A_\kappa^i dA_i^\kappa = \varrho A_\kappa^i dA_i^\kappa. \quad (3.38)$$

- **Zusammenhang zwischen eigentlichen und reziproken Cosserat–Vektoren:**

Aus Gl.(2.54) folgt das Differential der eigentlichen Cosserat–Vektoren:

$$\begin{aligned} d \left(A_\kappa^j A_j^\lambda \right) &= 0 \\ \Rightarrow A_j^\lambda dA_\kappa^j &= -A_\kappa^j dA_j^\lambda \quad | \cdot A_\lambda^i \\ dA_\kappa^i &= -A_\kappa^j A_\lambda^i dA_j^\lambda. \end{aligned} \quad (3.39)$$

- **Zeitliche Entwicklung der reziproken Cosserat–Vektoren:**

Wenn die Cosserat–Vektoren elastische Deformationen beschreiben, werden sie mit dem Strömungsfeld \mathbf{v} des Körpers substantiell mitgeführt. Das bedeutet, daß ihre *zeitliche Lie–Ableitung* (vgl. (2.89)) verschwindet:

$$\mathcal{L}_t^{(v)} A_i^\kappa = 0. \quad (3.40)$$

Hierbei muß berücksichtigt werden, daß der Index κ die Nummer des reziproken Cosserat–Vektors bedeutet. Diese ändert sich aber nicht, es wird die Änderung eines *Vektors* betrachtet. Daher wirkt die Lie–Ableitung nur auf die lateinischen Indizes, da die griechischen durchgehend für das innere System benutzt werden.

Abweichungen von der substantiellen Mitführung, wie sie bei Versetzungsbewegungen auftreten, werden durch die Gleichung

$$\mathcal{L}_t^{(v)} A_i^\kappa = J_i^\kappa \quad (3.41)$$

definiert, wobei J_i^κ den **Driftstrom** der Cosserat–Vektoren oder kurz **Cosserat–Driftstrom** relativ zur Bewegung des elastischen Mediums darstellt.

- **Zeitliche Entwicklung der *eigentlichen* Cosserat–Vektoren:**

Aus den Gl.(3.39) und (3.41) folgt

$$\begin{aligned}
\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_\kappa^i &= -A_\kappa^j A_\lambda^i \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_j^\lambda \\
&= -A_\kappa^j A_\lambda^i J_j^\lambda \\
\Rightarrow \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_\kappa^i &= -J_\kappa^i.
\end{aligned} \tag{3.42}$$

- **Substantielle Ableitung der Metrik g_{ij} :**

Da die Metrik g_{ij} ein Tensor ist, wird die substantielle Mitführung ebenfalls durch die Liesche Zeitableitung bestimmt:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} g_{ij} = \partial_i v^k g_{kj} + \partial_j v^k g_{ik} = \partial_i v_j + \partial_j v_i. \tag{3.43}$$

Dies ist gerade der symmetrisierte Geschwindigkeitsgradient.

- **Substantielle Ableitung der Konnexion:**

Die Konnexion ist kein Tensor, sondern ein geometrisches Objekt. Über die zeitliche Entwicklung der Cosserat–Vektoren kann aber auch die zeitliche Entwicklung der Gitterkonnexion bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \Gamma_{ij}^k &= \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \left(\partial_i A_j^\kappa A_\kappa^k \right) \\
&= \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \left(\partial_i A_j^\kappa \right) A_\kappa^k + \partial_i A_j^\kappa \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_\kappa^k \\
&= \partial_i \left(\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_j^\kappa \right) A_\kappa^k - \partial_i \partial_j v^l A_l^\kappa A_\kappa^k + \partial_i A_j^\kappa \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_\kappa^k \\
&= \partial_i J_j^\kappa A_\kappa^k - \partial_i \partial_j v^k - \partial_i A_j^\kappa J_\kappa^k \\
&= \partial_i J_j^k - J_j^l A_l^\kappa \partial_i A_\kappa^k - \partial_i \partial_j v^l A_l^\kappa A_\kappa^k - \partial_i A_j^\kappa A_\kappa^l J_l^k \\
&= \partial_i J_j^k - \Gamma_{ij}^l J_l^k + \Gamma_{il}^k J_j^l - \partial_i \partial_j v^k \\
\Rightarrow \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \Gamma_{ij}^k &= \overset{(\Gamma)}{\nabla}_i J_j^k - \partial_i \partial_j v^k,
\end{aligned} \tag{3.44}$$

wobei $\overset{(\Gamma)}{\nabla}_i$ die in (2.74) eingeführte kovariante Ableitung bezüglich der Gitterkonnexion darstellt.

- **Substantielle Ableitung des dreistufigen Versetzungsdichtetensors:**

Der dreistufige Versetzungsdichtetensor kann wegen Gl.(3.21) auch über die Konnexion definiert werden:

$$\alpha_{ij}^k := \frac{1}{2} \left(\Gamma_{ij}^k - \Gamma_{ji}^k \right) = \Gamma_{[ij]}^k. \tag{3.45}$$

Somit folgt für dessen substantielle zeitliche Ableitung:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \alpha_{ij}^k \stackrel{(3.44)}{=} \frac{1}{2} \left(\overset{(\Gamma)}{\nabla}_i J_j^k - \overset{(\Gamma)}{\nabla}_j J_i^k \right). \tag{3.46}$$

Hier wird klar, daß der Cosserat–Driftstrom mit dem Driftstrom des Versetzungsdichtetensors zusammenhängt: Die rechte Seite dieser Gleichung gibt an, wie sich der Versetzungsdichtetensor *unabhängig* vom Strömungsfeld \mathbf{v} ändert. Wenn $J_i^k = 0$ ist, so wird der Tensor der Versetzungsdichte substantiell mit dem Hintergrundmedium mitgeführt.

• **Substantielle Ableitung des ε –Tensors:**

Der Vollständigkeit halber wird auch die substantielle Ableitung des vollständig antisymmetrischen ε –Tensors angegeben, die dann relevant wird, wenn Gl.(3.46) mit diesem überschoben werden soll, um die substantielle Ableitung für den zweistufigen Versetzungsdichtetensor zu erhalten. Nach kurzer Rechnung folgt:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \varepsilon^{ijk} = -\varepsilon^{ijk} \partial_l v^l. \quad (3.47)$$

3.2 Der elastisch und plastisch deformierbare Kristall im Lagrangeformalismus

Nun sollen die geometrischen Betrachtungen in eine feldtheoretische Beschreibung des Kristalls im Rahmen des Lagrangeformalismus eingebettet werden. Dazu wird von der idealen Flüssigkeit als Basismodell ausgegangen, in die die Kristallstruktur durch Hinzunahme der Cosserat–Vektoren eingearbeitet wird.

3.2.1 Aufbau aus der idealen Flüssigkeit

Die Lagrangedichte für die ideale Flüssigkeit lautete:

$$\ell = -\varrho \left(D_t^{(v)} \Phi + \alpha D_t^{(v)} \beta - \frac{1}{2} v^2 + W(\varrho) \right). \quad (3.48)$$

Nimmt man nun eine innere Struktur des Mediums an, die durch Cosserat–Vektoren repräsentiert wird, muß man zum einen deren substantielle Mitführung in Form der zeitlichen Lie–Ableitung (2.89) beachten, die mittels eines Lagrangemultiplikators⁹ ϱt_κ^i in die Lagrangedichte integriert wird.

Zum anderen hängt die Dichte nun von den Cosserat–Vektoren über die Beziehung

$$\varrho := \varrho_0 \text{Det} |A_i^\kappa| \quad (3.49)$$

ab, ist also keine unabhängige Größe mehr.

Auf die explizite Mitnahme der Kontinuitätsgleichung wie in Gl.(2.34) und die Mitführung der Lagrangen Koordinaten in Gl.(2.40) wird hier verzichtet, da beides über die substantielle Mitführung der Cosserat–Vektoren, also die Nebenbedingung

⁹Das Abspalten der Dichte ϱ geschieht aus rein pragmatischen Gründen zur Vereinfachung der Variation. Physikalisch macht sie jedoch ebenfalls Sinn, da die Lagrangedichte identisch null werden sollte, wenn die Dichte verschwindet, da ohne materiellen Hintergrund keine Strömung oder Mitführung vorkommen kann.

$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = 0$, abgedeckt ist. Damit entfallen die Clebsch–Potentiale, die sich aus diesen Nebenbedingungen ergeben, ebenfalls.

Man erhält:

$$\begin{aligned} \ell &= -\varrho(A_i^\kappa) \left(-\frac{1}{2}v^2 + W(\varrho(A_i^\kappa)) \right) \\ &\quad + \varrho t_\kappa^i \left(\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa \right). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Man beachte, daß hier immer noch die Dynamik einer Flüssigkeit beschrieben wird. Das liegt daran, daß die Energie nur von der Dichte abhängt. Die Cosserat–Vektoren *schwimmen* also frei mit der Strömung mit, ohne elastische Scher–Spannungen aufbauen zu können. Außerdem ist die Kontinuitätsgleichung nicht über die Variation $\delta\Phi$, sondern über

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho &\stackrel{(3.38)}{=} \varrho A_\kappa^i \partial_t A_i^\kappa \\ &\stackrel{(3.40)}{=} -\varrho A_\kappa^i v^l \partial_l A_i^\kappa - \varrho A_\kappa^i \partial_i v^l A_l^\kappa \\ &\stackrel{(3.38)}{=} -v^l \partial_l \varrho - \varrho \partial_l v^l \\ &= -\partial_l (\varrho v^l) \end{aligned} \quad (3.51)$$

definiert.

Freie Variation nach allen Feldern liefert:

$$\delta t_\kappa^i : \varrho \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = 0 \quad (3.52)$$

$$\delta v^i : \varrho v_i + \varrho t_\kappa^k \partial_i A_k^\kappa - \partial_k (\varrho t_\kappa^k A_i^\kappa) = 0 \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \delta A_i^\kappa : &\frac{\partial \varrho}{\partial A_i^\kappa} \left(\frac{1}{2}v^2 - W(\varrho) - \varrho \frac{\partial W}{\partial \varrho} + t_\lambda^j \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_j^\lambda \right) \\ &\quad - \partial_t (\varrho t_\kappa^i) - \partial_k (\varrho t_\kappa^i v^k) + \varrho t_\kappa^k \partial_k v^i = 0 \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\Rightarrow \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} t_\kappa^i + \delta_k^i \left(-\frac{1}{2}v^2 + W(\varrho) + \varrho \frac{\partial W}{\partial \varrho} \right) = 0. \quad (3.55)$$

Da hier keine Clebsch–Potentiale mehr verwendet werden, erhält man eine andere, *verallgemeinerte Darstellung* der Geschwindigkeit über Gl.(3.53):

$$v_i = -t_\kappa^k \partial_i A_k^\kappa + \frac{1}{\varrho} \partial_k (\varrho t_\kappa^k). \quad (3.56)$$

Der Lagrange–Multiplikator t_κ^i bestimmt das Geschwindigkeitsfeld, könnte also als *verallgemeinertes Potential* beschrieben werden. Dieser Term weist auch Eichfreiheitsgrade auf: Eine Umeichung

$$t_\kappa^k \rightarrow t_\kappa^k + f(t) A_\kappa^k \quad \text{bzw.} \quad t_i^k \rightarrow t_i^k + f(t) \delta_i^k \quad (3.57)$$

führt in der Bernoulli-Gleichung zu einem Zusatzterm $\partial_t f(t) \delta_i^k$, der wie bei dem Gebrauch der Clebsch-Potentiale (siehe auch Wagner (1997)) bei Anwendung des Gradienten auf die Bernoulli-Gleichung verschwindet.

Ebenso ändert diese Umeichung nichts an der Geschwindigkeit, denn es gilt:

$$v_i \rightarrow v_i + \left(-f(t) A_i^k \partial_i A_k^\kappa + f(t) \frac{1}{\rho} \partial_i \rho \right) \stackrel{(3.38)}{=} v_i. \quad (3.58)$$

Die Euler-Lagrange-Gleichungen können nach kurzer Rechnung in die Gleichungen überführt werden, die die ideale Flüssigkeit beschreiben:

$$\partial_t \rho + \partial_i (\rho v^i) = 0 \quad (3.59)$$

$$\rho D_t^{(v)} v_i + \partial_i p = 0. \quad (3.60)$$

Die Cosserat-Vektoren agieren hier als interne Variablen, deren Eigenschaften nur über ihre Determinante (die im Wesentlichen die Dichte bestimmt) in die Bewegungsgleichungen eingehen.

Ebenso ist in Gl.(3.55) eine *verallgemeinerte Bernoulli-Gleichung* zu erkennen, die nun tensoriellen Charakter hat und bei Anwendung der Divergenz ∂_i auf sie zu der Euler-Gleichung führt.

Von der Flüssigkeit zum Festkörper

Die Energie der oben angegebenen Lagrangedichte enthält keine Scher-Anteile, also Winkeländerung der Cosserat-Vektoren. Dies führt zu dem Verhalten einer Flüssigkeit. Im Gegensatz dazu ist ein Festkörper dadurch ausgezeichnet, daß in ihm Scherspannungen existieren. Das bedeutet, daß die Energie sich bei Scherung des Materials ändert, und zwar gerade so, daß die Antwortgrößen auf diese Deformation, die Spannungen, zu rücktreibenden Kräften in der Bewegungsgleichung für die Geschwindigkeit führen: der Körper reagiert elastisch.

In der Lagrangedichte muß also die Energie durch Abhängigkeiten von der elastischen Deformation ergänzt werden. Der allgemeine Fall würde durch eine Energie

$$W = W(A_i^\kappa, \partial_j A_i^\kappa) \quad (3.61)$$

beschrieben, wobei hier schon Gradienten der Cosserat-Vektoren als energetisch relevant berücksichtigt sind. Da aber schon Tensoren für die elastische Verzerrung und die Hyperdeformation definiert wurden, können diese als energetisch relevante Größen herangezogen werden:

$$W = W(e_{kl}, h_{ij}^{:k}). \quad (3.62)$$

Ob neben der elastischen auch die Hyperdeformation eine Rolle spielt, hängt vom jeweiligen System ab. Im linearen, versetzungsfreien Fall geht sie in räumliche Ableitungen des Distorsionstensors über und liefert somit nur höhere Ordnungen, die z.B.

für Gradiententheorien zum Tragen kommen können. Bei der Beschreibung von Versetzungen ist der Hyperdeformationstensor jedoch unerlässlich, da der antisymmetrische Teil den Versetzungsdichtetensor enthält. Der genaue Zusammenhang wird etwas später deutlich, wenn für die elastischen und Versetzungs-Anteile der Energiedichte ein Ansatz gemacht wird.

Die Dichte ϱ muß nicht explizit in die Energie übernommen werden, denn sie hängt mit der elastischen Deformation zusammen :

$$\text{Det}|2e_{kl} + g_{kl}| \stackrel{(3.7)}{=} \text{Det}|a_{\kappa\lambda}| \text{Det}|A_k^\kappa| \text{Det}|A_l^\lambda| \stackrel{*}{=} \left(\frac{\varrho}{\varrho_0}\right)^2. \quad (3.63)$$

Damit lautet der Ansatz für die Lagrangedichte:

$$\begin{aligned} \ell = & -\varrho(A_i^\kappa) \left(-\frac{1}{2}v^2 + W(e_{kl}, h_{ij}^{\cdot\cdot k}) \right) \\ & + \varrho t_\kappa^i \left(\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa \right). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Nach Variation aller Felder erhält man die Euler-Lagrange-Gleichungen¹⁰ für den elastisch deformierbaren Kristall:

$$\delta v^i : \varrho v_i + \varrho t_\kappa^j \partial_i A_j^\kappa - \partial_k \left(\varrho t_\kappa^k A_i^\kappa \right) = 0 \quad (3.65)$$

$$\delta t_\kappa^i : \varrho \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = 0 \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} \delta A_i^\kappa : & -\varrho \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} t_\kappa^i - \varrho A_i^\kappa \left(-\frac{1}{2}v^2 + W \right) - \varrho \left(\frac{\partial W}{\partial e_{kl}} \frac{\partial e_{kl}}{\partial A_i^\kappa} + \frac{\partial W}{\partial h_{kl}^{\cdot\cdot m}} \frac{\partial h_{kl}^{\cdot\cdot m}}{\partial A_i^\kappa} \right) \\ & + \partial_p \left(\varrho \frac{\partial W}{\partial h_{kl}^{\cdot\cdot m}} \frac{\partial h_{kl}^{\cdot\cdot m}}{\partial (\partial_p A_i^\kappa)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Diese Gleichungen gelten auch für nicht-kristalline Medien, für die folgende Versetzungsdynamik muß das Material aber ein Einkristall sein.

Die letzte Gleichung ist wieder eine verallgemeinerte dynamische Bernoulli-Gleichung (vergleiche mit Gl.(2.36)), jetzt für einen elastischen Festkörper. Ebenso ist der Potentialansatz für das Geschwindigkeitsfeld verallgemeinert. In diesem Fall wird das Geschwindigkeitsfeld aus dem Lagrangemultiplikator t_κ^i hergeleitet. Auf eine Darstellung mit skalaren Feldern wird im nächsten Abschnitt eingegangen.

Die Observablen dieses Systems sind die – prinzipiell beobachtbaren – Cosserat-Vektoren, bzw. die von ihnen beschriebenen Deformationen e_{ij} , $h_{ij}^{\cdot\cdot k}$, und das Geschwindigkeitsfeld $v^i(\mathbf{x}, t)$, das die Bewegung des Kristalls beschreibt. Die Bewegungsgleichung der Cosserat-Vektoren ist bereits eine Euler-Lagrange-Gleichung, die Bewegungsgleichung für v^i ist im rein elastischen Fall identisch mit der Impulsbilanz und folgt entweder aus Bildung der Zeitableitung von Gl.(3.65) unter Benutzung der Gln.(3.67) und (3.66), oder aus der zu der Ortstranslation gehörenden Symmetrie

¹⁰Dabei wurde teilweise schon die zweite Gleichung in die dritte eingesetzt, um die Formeln abzukürzen.

der Lagrangedichte. Die *Noether–Gleichungen* (2.25) und (2.26) liefern (mit Benutzung der Euler–Lagrange–Gleichungen) für den Noetherimpuls und den zugehörigen Noetherschen Spannungstensor:

$$p_i = \varrho v_i - \partial_k \left(\varrho t_i^k \right) \quad (3.68)$$

$$\sigma_{\mathbf{el}_i}^{\cdot j} = \varrho v_i v^j + \sigma_{\mathbf{el}_i}^{\cdot j} + \sigma_{\mathbf{M}_i}^{\cdot j} + \partial_t \left(\varrho t_i^j \right) + \partial_k \left(\varrho t_i^j v^k - \varrho t_i^k v^j \right). \quad (3.69)$$

Dabei wurden als Abkürzungen benutzt:

Elastischer Spannungstensor:

$$\sigma_{\mathbf{el}_i}^{\cdot j} := \varrho \left(\frac{\partial W}{\partial e_{kl}} \frac{\partial e_{kl}}{\partial A_j^\kappa} A_i^\kappa \right) = \frac{\varrho}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial e_{jk}} a_{ik} + \frac{\partial W}{\partial e_{kj}} a_{ki} \right). \quad (3.70)$$

Momenten–Spannungstensor:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbf{M}_i}^{\cdot j} &:= \varrho \frac{\partial W}{\partial h_{kl}^{\cdot m}} \left(\frac{\partial h_{kl}^{\cdot m}}{\partial A_j^\kappa} A_i^\kappa + \frac{\partial h_{kl}^{\cdot m}}{\partial (\partial_j A_p^\kappa)} \partial_i A_p^\kappa + \frac{\partial h_{kl}^{\cdot m}}{\partial (\partial_p A_j^\kappa)} \partial_p A_i^\kappa \right) \\ &\quad - \partial_p \left(\varrho \frac{\partial W}{\partial h_{kl}^{\cdot m}} \frac{\partial h_{kl}^{\cdot m}}{\partial (\partial_p A_j^\kappa)} A_i^\kappa \right) \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$\stackrel{(3.14)}{=} -\varrho \frac{\partial W}{\partial h_{ki}^{\cdot i}} h_{kl}^{\cdot j} + \varrho \frac{\partial W}{\partial h_{jl}^{\cdot m}} h_{il}^{\cdot m} + \varrho \frac{\partial W}{\partial h_{kj}^{\cdot m}} h_{ki}^{\cdot m} - \partial_p \left(\varrho \frac{\partial W}{\partial h_{pj}^{\cdot i}} \right). \quad (3.72)$$

Die Noetherschen Ausdrücke enthalten den Lagrangemultiplikator t_κ^i . Wie man leicht sieht, heben sich jedoch diese Terme teilweise in der Gesamtbilanz identisch auf, da sie der trivialen Identität

$$\partial_t \left(-\partial_k \left(\varrho t_i^k \right) \right) + \partial_j \left(\partial_t \left(\varrho t_i^j \right) \right) = 0 \quad (3.73)$$

genügen, andererseits führt die Anwendung der partiellen Ableitung ∂_j auf den letzten Term des Noetherschen Spannungstensors (3.69) zum Verschwinden des restlichen Terms, da dieser antisymmetrisch in den Indizes j und k ist, unabhängig vom Wert der Größe t_κ^i .

Damit bleibt als Impulsbilanz der Observablen A_i^κ und v_i die Bewegungsgleichung für den elastischen Körper. In substantieller Schreibweise:

$$\varrho D_t^{(v)} v_i + \partial_j \left(\sigma_{\mathbf{el}_i}^{\cdot j} + \sigma_{\mathbf{M}_i}^{\cdot j} \right) = 0. \quad (3.74)$$

Im Vergleich zur Literatur sind die hier mit Spannungstensor bezeichneten Ausdrücke eigentlich Drucktensoren, da hier eine andere Vorzeichenkonvention verwendet wurde. Darauf ist beim Vergleich mit der Literatur zu achten.

Es stellt sich nun die Frage, ob die Anteile in den Noetherschen Termen, die den Lagrangemultiplikator t_κ^i enthalten, durch Veränderung der Lagrangedichte zum Verschwinden gebracht werden können. Dies ist ein Aspekt des sogenannten *Inversen Problems zweiter Art*.

Dies funktioniert in der Tat durch eine Potentialdarstellung der Cosserat-Vektoren im Falle festsitzender Versetzungen, die mit dem materiellen Träger substantiell mitgeführt werden.

3.2.2 Anpassung der Noether-Bilanzen

Es wird nun gezeigt, wie sich der Noethersche Impuls und der Spannungstensor ohne die Zusatzterme im vorigen Abschnitt ergeben können.

Das Problem liegt in der Lieschen Zeitableitung. Wären alle zeitlichen Ableitungen in der Lagrangedichte reine substantielle Ableitungen und die kinetische Energie der einzige Term, in dem das Geschwindigkeitsfeld sonst vorkommt, so würde der Noethersche Impuls exakt der Definition für ϱv_i entsprechen¹¹. Hier tritt jedoch ein zusätzlicher Geschwindigkeitsterm in der Lieschen Ableitung auf, der diesen einfachen Zusammenhang zerstört.

Falls jedoch die Cosserat-Vektoren substantiell mitgeführt werden (und dies soll hier der Fall sein, da ein Cosserat-Driftstrom noch ausgeschlossen wird), so kann ein *Potentialansatz* für die Cosserat-Vektoren weiterhelfen:

Im Falle einer im gesamten Medium verschwindenden Versetzungsdichte können die Cosserat-Vektoren aus der Koordinaten-Transformation des inneren in das äußere System hergeleitet werden:

$$A_i^\kappa := \frac{\partial X^\kappa}{\partial x^i} = \partial_i X^\kappa. \quad (3.75)$$

Da das innere Koordinatensystem substantiell mitgeführt wird – und zwar als gewöhnliche substantielle Mitführung – gilt:

$$D_t^{(v)} X^\kappa = 0. \quad (3.76)$$

Daraus folgt sofort das Verschwinden der Lie-Ableitung:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} D_t^{(v)} A_i^\kappa &= \mathcal{L} D_t^{(v)} \partial_i X^\kappa \\ &= \partial_i \partial_t X^\kappa + \partial_i v^j \partial_j X^\kappa + v^j \partial_j \partial_i X^\kappa \\ &= \partial_i \left(D_t^{(v)} X^\kappa \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Allerdings sind die Gleichungen $\mathcal{L} D_t^{(v)} A_i^\kappa$ und $D_t^{(v)} X^\kappa$ nicht voll äquivalent, da aus $\mathcal{L} D_t^{(v)} A_i^\kappa = 0$ nur $\partial_i D_t^{(v)} X^\kappa = 0$ und damit

$$D_t^{(v)} X^\kappa = f^\kappa(t) \quad (3.78)$$

folgt.

¹¹Die entsprechenden Rechnungen werden hier nicht vorgeführt, man findet eine ausführliche Darstellung in *Scholle* (1999)

Hier aber kann man Eichfreiheitsgrade benutzen: Die Definition (3.75) wird durch eine Umeichung der Form

$$X^\kappa \rightarrow X'^\kappa = X^\kappa + g^\kappa(t) \quad (3.79)$$

nicht geändert.

Die Eichfreiheitsgrade $g^\kappa(t)$ können somit genutzt werden, um die Funktionen $f^\kappa(t)$ zu kompensieren.

Wenn der Kristall Versetzungen enthält, sind die Integrabilitätsbedingungen (2.60) nicht mehr erfüllt. Ein Potentialansatz für die Cosserat-Vektoren muß dies berücksichtigen.

Hier wird, wie bei dem Clebsch-Ansatz für das Geschwindigkeitsfeld der idealen Flüssigkeit auch, für jeden Cosserat-Vektor ein eigener Clebsch-Ansatz gemacht, sodaß insgesamt neun Potentiale

$$\phi^\kappa, \alpha^\kappa, \beta^\kappa \quad \text{mit } \kappa = 1..3 \quad (3.80)$$

zur Verfügung stehen:

$$A_i^\kappa := \partial_i \phi^\kappa + \alpha^\kappa \partial_i \beta^\kappa, \quad \text{keine Summation über } \kappa! \quad (3.81)$$

Aus der substantiellen Mitführung der Potentiale folgt sofort das Verschwinden der zeitlichen Lie-Ableitung der Cosserat-Vektoren:

$$\begin{aligned} D_t^{(v)} \phi^\kappa &= 0 \\ D_t^{(v)} \alpha^\kappa &= 0 \\ D_t^{(v)} \beta^\kappa &= 0 \\ \Rightarrow D_t^{(v)} A_i^\kappa &= D_t^{(v)} (\partial_i \phi^\kappa + \alpha^\kappa \partial_i \beta^\kappa) \\ &= \partial_i \left(D_t^{(v)} \phi^\kappa + \alpha^\kappa D_t^{(v)} \beta^\kappa \right) + D_t^{(v)} \alpha^\kappa \partial_i \beta^\kappa = 0 \end{aligned} \quad (3.82)$$

und damit deren substantielle Mitführung. Anstatt die substantielle Mitführung der Cosserat-Vektoren in der Lagrangedichte zu berücksichtigen, werden nun die substantiellen Ableitungen der entsprechenden Potentiale in diese über Multiplikatoren eingebaut. Auf die Abhängigkeit der Energie von den Hyperdeformationen wird hier verzichtet, da dies zu einer Lagrangedichte zweiter Ordnung führen würde. Dann lautet die Lagrangedichte für einen elastischen Kristall mit festsitzenden Versetzungen:

$$\ell = - \varrho(A_i^\kappa) \left(\chi_\kappa D_t^{(v)} \phi^\kappa + \xi_\kappa D_t^{(v)} \alpha^\kappa + \zeta_\kappa D_t^{(v)} \beta^\kappa - \frac{1}{2} v^2 + W(e_{kl}) \right), \quad (3.83)$$

wobei für A_i^κ die Potentialdarstellung (3.81) einzusetzen ist.

Variation nach dem Geschwindigkeitsfeld liefert für dieses den *angepaßten Potentialansatz*:

$$v_i = \chi_\kappa \partial_i \phi^\kappa + \xi_\kappa \partial_i \alpha^\kappa + \zeta_\kappa \partial_i \beta^\kappa, \quad (3.84)$$

sodaß man nach Einsetzen des so dargestellten Geschwindigkeitsfeldes in die Lagrangedichte (3.83) erhält:

$$\begin{aligned} \ell = & -\varrho(A_i^\kappa) (\chi_\kappa \partial_t \phi^\kappa + \xi_\kappa \partial_t \alpha^\kappa + \zeta_\kappa \partial_t \beta^\kappa) \\ & - \varrho \left(\frac{1}{2} (\chi_\kappa \partial_i \phi^\kappa + \xi_\kappa \partial_i \alpha^\kappa + \zeta_\kappa \partial_i \beta^\kappa)^2 + W(e_{kl}) \right), \end{aligned} \quad (3.85)$$

wobei e_{kl} über Gl.(3.81) von den 9 Potentialen abhängt, die die Cosserat-Vektoren definieren.

Auf die Angabe der Euler-Lagrange-Gleichungen wird hier verzichtet. Die Noether'schen Ausdrücke für Impulsdichte und Spannungstensor lauten nun:

$$\begin{aligned} p_i &= \varrho (\chi_\kappa \partial_i \phi^\kappa + \xi_\kappa \partial_i \alpha^\kappa + \zeta_\kappa \partial_i \beta^\kappa) \\ &\stackrel{(3.84)}{=} \varrho v_i \end{aligned} \quad (3.86)$$

und

$$\begin{aligned} \sigma_i^j &= \varrho (\chi_\kappa \partial_i \phi^\kappa + \xi_\kappa \partial_i \alpha^\kappa + \zeta_\kappa \partial_i \beta^\kappa) (\chi_\kappa \partial_k \phi^\kappa + \xi_\kappa \partial_k \alpha^\kappa + \zeta_\kappa \partial_k \beta^\kappa) g^{kj} + \sigma_{\mathbf{e}l_i}^j \\ &\stackrel{(3.84)}{=} \varrho v_i v^j + \sigma_{\mathbf{e}l_i}^j, \end{aligned} \quad (3.87)$$

wobei der elastische Spannungstensor unter Berücksichtigung von Gl.(3.81) wie in (3.70) definiert ist.

Durch diese Lagrangedichte kann nun auch eine im Kristall festsitzende Versetzungsdichte beschrieben werden, die substantiell mit dem Hintergrundmedium mitgeführt wird. Ein zum Zeitpunkt $t = 0$ festgelegter Versetzungsdichtetensor

$$\alpha_{ij}^{\cdot\cdot k}(\mathbf{x}, t = 0) := A_\kappa^k(\mathbf{x}, t = 0) (\partial_i A_j^\kappa(\mathbf{x}, t = 0) - \partial_j A_i^\kappa(\mathbf{x}, t = 0)) \quad (3.88)$$

wird zusammen mit den Cosserat-Vektoren ebenfalls substantiell mitgeführt:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \alpha_{ij}^{\cdot\cdot k} = 0, \quad (3.89)$$

was sich durch Einsetzen der Definition über die Cosserat-Vektoren und deren substantieller Mitführung zeigen läßt (siehe auch Gl.(3.46) wegen $J_i^k = 0$).

Für eine von den Hyperdeformationen abhängende Energiedichte muß man jedoch entweder auf einen Lagrangeformalismus höherer Ordnung zurückgreifen oder die Cosserat-Vektoren als eigenständige Größen behalten, was die Zahl der Variablen erhöht.

Im Falle von sich relativ zum Hintergrundmedium bewegenden Versetzungen muß eine eigenständige Dynamik für die Clebsch-Potentiale der Cosserat-Vektoren gefunden werden. In dieser Arbeit wird jedoch nur die Dynamik der *Cosserat-Vektoren* als eigenständige Variablen hergeleitet. Erst in einem zweiten Schritt könnten dann die Noetherbilanzen angepaßt werden, indem man die so entwickelte Dynamik auf die Potentiale überträgt. Dies soll aber nicht Gegenstand dieser Arbeit sein.

3.2.3 Die plastische Deformation

In den elastischen Gleichungen

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = 0 \quad (3.90)$$

$$\varrho(A_i^\kappa) D_t^{(v)} v_i + \partial_j \sigma_i^{\cdot j}(A_i^\kappa) = 0 \quad (3.91)$$

werden die Spannungen $\sigma_i^{\cdot j}$ nur durch die Bewegung \mathbf{v} des Materials abgebaut, da die Cosserat-Vektoren, von denen allein der Spannungstensor abhängt, substantiell mitgeführt werden. Eine Spannungsänderung ist also nur über das Geschwindigkeitsfeld v_i möglich: das Material reagiert elastisch.

Wenn jedoch die Cosserat-Vektoren eine von \mathbf{v} teilweise *unabhängige* Bewegung

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = J_i^\kappa \neq 0 \quad (3.92)$$

ausführen, können wegen $\sigma_i^{\cdot j} = \sigma_i^{\cdot j}(A_i^\kappa)$ die Spannungen auf einem anderen Weg als über das Geschwindigkeitsfeld v_i geändert werden. Da so insbesondere Scherspannungen abgebaut werden können, zeigt das Material plastische, nämlich Fließ-Eigenschaften. Ein instantaner, vollständiger Abbau der Scherspannungen über den Driftstrom J_i^κ würde zu einer idealen Flüssigkeit führen, ein vollständiger, aber zeitlich verzögerter Abbau wird einen visko-elastischen Körper beschreiben: Auf kleinen Zeitskalen, in denen der Spannungsabbau noch nicht vollzogen werden kann, wird das Material elastisch reagieren, auf großen Zeitskalen jedoch wird das Material viskos fließen, weil die Scherspannungen verschwinden.

Für die Beschreibung des plastisch deformierbaren Kristalls kommt es nun darauf an, die Bewegung der Versetzungen relativ zum Gitter mit dem Driftstrom der Cosserat-Vektoren J_i^κ zu verknüpfen, da die Versetzungsbewegung Ursache der plastischen Deformation und damit dieses Driftstroms ist. Für den Einbau dieses allgemeinen Bewegungsgesetzes wird die Form (3.64) der Lagrangedichte benutzt, da die Potentialdarstellung (3.81) nur für substantielle Mitführung der Cosserat-Vektoren im Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} galt. Die Bestimmung des Driftstroms J_i^κ geschieht im Folgenden durch die Theorie der Versetzungsklassen, über die dieser Strom auf Bewegung einzelner Versetzungsklassen zurückgeführt wird.

Zunächst soll aber noch auf den Zusammenhang des Cosserat-Driftstroms mit der Kontinuitätsgleichung und der Bewegungsgleichung für den Versetzungsdichtetensor eingegangen werden.

Spurfreiheit des Cosserat-Driftstroms

In dieser Arbeit soll als Mechanismus der plastischen Deformation nur das Gleiten von Versetzungen beschrieben werden. Bei diesen Gleitprozessen bleibt die Kontinuitätsgleichung aber unangetastet, denn im Gegensatz zum Versetzungsklettern ist hier keine Diffusion von Materie erforderlich. Dies führt aber zu einer Einschränkung für J_i^κ . Die Kontinuitätsgleichung lautet jetzt:

$$D_t^{(v)} \varrho + \varrho \partial_i v^i \stackrel{(3.38)}{=} \varrho A_\kappa^j D_t^{(v)} A_j^\kappa + \varrho \partial_i v^i$$

$$\begin{aligned}
& \stackrel{(3.41)}{=} -\varrho A_\kappa^j A_i^\kappa \partial_j v^i + \varrho \partial_i v^i + \varrho A_\kappa^j J_j^\kappa \\
& = \varrho J_i^i.
\end{aligned} \tag{3.93}$$

Plastische Deformation, die durch Versetzungsgleiten hervorgerufen wird, erzwingt also einen spurfreien Cosserat–Driftstrom: $J_i^i = 0$. Diese Gleichung wird entweder direkt durch einen entsprechenden Ansatz für J_i^κ erfüllt, wenn dieser möglich ist, oder über Einführung der zusätzlichen Nebenbedingung $J_i^i = 0$. Da diese Nebenbedingung aber äquivalent zur Kontinuitätsgleichung ist, kann diese wie bei der idealen Flüssigkeit über einen Lagrangemultiplikator Φ erzwungen werden, was den Vorteil hat, daß für diesen eine Interpretation als Potentialfeld für v^i vorliegt.

3.2.4 Der Cosserat–Driftstrom als Versetzungsstrom

Der Cosserat–Driftstrom hängt direkt mit dem Driftstrom des Versetzungsdichtetenors zusammen (siehe Gl.(3.46)):

$$\mathcal{D}_t^{(v)} \alpha_{ij}^{:k} = \frac{1}{2} \left(\overset{(\Gamma)}{\nabla}_i J_j^k - \overset{(\Gamma)}{\nabla}_j J_i^k \right). \tag{3.94}$$

Linearisiert man diesen Ausdruck für kleine Versetzungsdichten, kleine Gitterdeformationen und Geschwindigkeiten, so führt dies auf

$$\partial_t \alpha_{ij}^{:k} = \frac{1}{2} \left(\partial_i J_j^k - \partial_j J_i^k \right), \tag{3.95}$$

was nach Überschieben mit ε^{lij} zu folgender Bilanz führt¹² (die vollständige Gleichung für den zweistufigen Versetzungsdichtetenor findet sich im Anhang A.2 Gl.(A.10)):

$$\partial_t \alpha^{lk} - \varepsilon^{lij} \partial_i J_j^k = 0 \quad \text{bzw.} \quad \partial_t \underline{\alpha} - \text{rot} \underline{J} = 0. \tag{3.96}$$

Dies ist die *flächenhafte Bilanzgleichung* für den Versetzungsdichtetenor, wie sie aus der Literatur (z.B. *Landau, Lifschitz* (1991)) in der linearen Theorie bekannt ist.

In flächenhaften Bilanzen werden *linienhafte Objekte* (hier die Versetzungslinien) bilanziert, die eine Testfläche F durchstoßen. Ihre flächenhafte Dichte kann sich ändern, wenn die Objekte die *Umrandung* ∂F durchqueren:

$$\partial_t \mathbf{a} + \text{rot} \mathbf{j} = 0, \text{ in integraler Form } \frac{d}{dt} \int_F \mathbf{a} \cdot d\mathbf{F} + \int_{\partial F} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{s} = 0 \tag{3.97}$$

nach Anwendung des Stokesschen Satzes.

Im Gegensatz dazu werden in volumenbezogenen Bilanzen der Form

$$\partial_t \varrho + \text{div} \cdot \mathbf{j} = 0, \text{ in integraler Form } \frac{d}{dt} \int_V \varrho dV + \int_{\partial V} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{F} = 0 \tag{3.98}$$

¹²Eine Abweichung des Vorzeichens im Vergleich zur Literatur hängt mit der Definition des Cosserat–Stroms in dieser Arbeit zusammen.

(Anwendung des Gaußschen Satzes) *punktförmige Objekte* in einem Testvolumen V bilanziert, deren Dichte sich durch Ströme durch die *Oberfläche* ∂V ändern kann. Während volumenbezogene Bilanzgleichungen über das Noethertheorem in den Lagrangeformalismus integriert sind, kann dies bei flächenbezogenen nicht geschehen, da sie nicht mit Lieschen Symmetrien verknüpft sind. Eine Erweiterung des Symmetriekonzepts auf flächenhafte Bilanzen findet man aber bei *Scholle* (1999).

Die Gleichungen (3.96) und die Divergenzfreiheit des Versetzungsdichtetensors

$$\partial_l \alpha^{lk} = 0 \quad (3.99)$$

zeigen formal Ähnlichkeit mit den beiden Maxwell'schen Gleichung für das magnetische Feld \mathbf{B} :

$$\partial_t \mathbf{B} + \mathbf{rot} \mathbf{E} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \partial_t B^l + \varepsilon^{lij} \partial_i E_j = 0 \quad (3.100)$$

$$\mathbf{div} \mathbf{B} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \partial_l B^l = 0. \quad (3.101)$$

Die Rolle des *Stromes* übernimmt dabei das elektrische Feld \mathbf{E} .

Es zeigt sich, daß diese Analogie weitergeführt werden kann, sodaß eichfeldtheoretische Methoden, die in der Elektrodynamik von Supraleitern benutzt werden, auf die phänomenologische Beschreibung von Versetzungsbewegungen übertragen werden können. Diese Methoden werden in dieser Arbeit nicht angewendet, es wird jedoch auf die Arbeit von *Marqués–Lopéz* (2002) verwiesen, in der eine ausführliche Darstellung zu diesem Thema gegeben wird.

3.3 Theorie der Versetzungsklassen

3.3.1 Motivation

Um nun zu einer genaueren Definition des Cosserat–Driftstroms zu kommen, muß eine Theorie entwickelt werden, die das Versetzungsgleiten beschreibt. Im statischen Fall muß sich das Eigenspannungsproblem ergeben, also eine Auswirkung der Versetzungsanordnung auf die Cosserat–Vektoren und damit auch auf den Spannungstensor σ_i^j . Im dynamischen Fall muß weiterhin sichergestellt sein, daß sich bei Versetzungsgleiten eine plastische Deformation ergibt, die durch einen nichtverschwindenden, aber spurfreien Cosserat–Strom J_i^k beschrieben wird.

Es soll aber auch möglich sein, Versetzungsnetzwerke in einem kontinuumstheoretischen Modell zu beschreiben. Dies ist auf makroskopischen Längenskalen in der Theorie elasto–plastischer Medien mit dem Versetzungsdichtetensor α^{ij} nicht möglich, da dieser auf großen Längenskalen praktisch verschwindet, obwohl auf kleineren Skalen sehr viele Versetzungen im Kristall miteinander wechselwirken und sich gegenseitig beeinflussen. Diese Wechselwirkungen sind jedoch wesentlich für das plastische Verhalten des Kristalls.

Es liegt daher nahe, die Versetzungen nicht durch *einen* Tensor zu beschreiben, sondern zu differenzieren. Hier gibt die Diskretheit der Versetzungen einen Anhaltspunkt: Versetzungen sind ihrem Wesen nach diskrete Objekte. Sie sind im Kristallgitter definiert. Dieser diskreten Struktur wird nun eine Kontinuumstheorie zugeordnet. Dabei

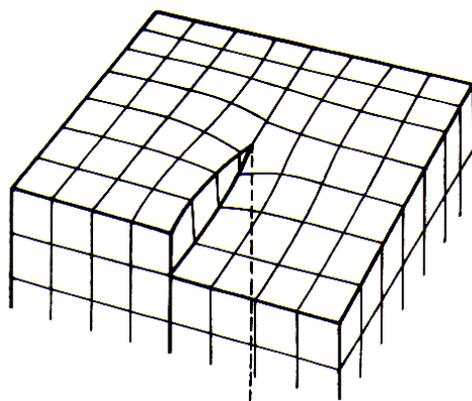


Abbildung 3.5: Schema einer Schraubenversetzung nach einem Schnitt, die durch Verschiebung der beiden Schnitthufer um einen Burgersvektor entsteht. Die gestrichelte Linie markiert die Versetzungslinie, gleichzeitig das Ende des Schnitts. (Aus: *Landau, Lifschitz (1991)*)

sollten die mikroskopischen Eigenschaften dieser Objekte so weit wie möglich erhalten bleiben: Jeder Versetzung kann ein Satz von Vektoren zugeordnet werden, der sie charakterisiert, z.B. Burgers- und Linienvektor. Dadurch lassen sich die Versetzungen voneinander unterscheiden und können nach Gruppen, sogenannten **Versetzungs-klassen** zusammengefaßt werden.

Die Einführung dieser Klassen in die Plastizitätstheorie wurde bereits von *Anthony, Azirhi (1998)* (siehe auch *Azirhi (1998)*) durchgeführt. Allerdings ergeben sich dort einige Inkonsistenzen, z.B. die Verletzung der Kontinuitätsgleichung oder die explizite Vorgabe der Fließspannung in der Lagrangedichte, obwohl Spannungen in dieser Theorie Antwortgrößen sind. Diese Schwierigkeiten sollen bei dem Aufbau der Klassentheorie in dieser Arbeit vermieden werden.

3.3.2 Einführung der Klassenvektoren

In diesem Abschnitt werden die Versetzungsklassen definiert. Jede Klasse ist ein Subkontinuum, das einen Teil der gesamten Versetzungsanordnung beschreibt. Die Unterscheidung der Klassen wird durch die sogenannten **Klassenvektoren** geschehen, die ihren Ursprung in der diskreten Struktur der Versetzungen in Einkristallen haben. Eine Versetzung kann im diskreten Fall durch die folgende **Klassenvektoren** charakterisiert werden:

- **Linienvektor l :**

Die Versetzungslinie ist das Ende der Schnittebene (vgl. Bild 3.5). Im Kristall kann der Linienvektor nur ganz bestimmte Richtungen annehmen, die von der Symmetrie des Gitters abhängen.

- **Burgersvektor b :**

Der Burgersvektor charakterisiert die Größe der Verschiebung nach dem Schnitt in Bild 3.5. Durch die Richtung von b ist zudem der Charakter der Versetzung

festgelegt. $\mathbf{b} \perp \mathbf{l}$ bedeutet Stufenversetzung, $\mathbf{b} \parallel \mathbf{l}$ bedeutet Schraubenversetzung. (In Kristallen können auch andere Versetzungen vorkommen. In hexagonalen Kristallen sind beispielweise 60° - und 30° -Stufenversetzungen möglich. Die z.B. in hexagonalen Kristallen vorkommenden Partialversetzungen werden hier nicht betrachtet, da sie nur entstehen, wenn Stapelfehler, also zusätzliche Gitterfehler im Kristallaufbau vorkommen, die hier nicht berücksichtigt werden.)

- **Gleitebenennormalenvektor \mathbf{m} :**

Er legt fest, in welcher Ebene sich die Versetzung durch Gleiten bewegen kann. Da sowohl der Linien- als auch der Burgersvektor in der Gleitebene liegen müssen, ist die Gleitebene bei Stufenversetzungen durch $\mathbf{l} \times \mathbf{b}$ bereits festgelegt, während es bei Schraubenversetzungen mehrere mögliche Gleitebenen gibt, deren Lagen durch die Kristallsymmetrie eingeschränkt werden. Daher muß der Normalenvektor der Gleitebene für Schraubenversetzungen als zusätzliches Unterscheidungsmerkmal hinzugenommen werden.

- **Gleitrichtungsvektor \mathbf{q} :**

Dieser Vektor gibt die Richtung an, in die die Versetzung gleiten kann. Da Gleiten per definitionem immer in der Gleitebene stattfindet, ist er senkrecht zum Normalenvektor \mathbf{m} der Gleitebene. Außerdem muß er immer senkrecht zur Linienrichtung sein, denn eine Bewegung in Richtung des Linienvektors ist nicht definiert. Damit liegt der Vektor der Gleitrichtung – bis auf das Vorzeichen – durch die Gleichung $\mathbf{q} := \mathbf{l} \times \mathbf{m}$ fest. Für Stufenversetzungen im kubischen Kristall folgt daraus, daß Gleiten nur in Richtung des Burgersvektors (oder entgegengesetzt) stattfinden kann.

Diese Vektoren definieren nun — mit den oben genannten Einschränkungen — die **Versetzungsclassen**. Zu jeder Klasse gehören also 4 Klassenvektoren, wobei die drei Vektoren \mathbf{l} , \mathbf{m} , \mathbf{q} per definitionem linear unabhängig sind und zudem ein Rechtssystem bilden. Der Burgersvektor bestimmt den Charakter der Versetzung (Stufenversetzung oder Schraubenversetzung).

Ein wichtiger Aspekt ist die **Konstanz der Klassenvektoren** im *Gittersystem* (κ):

Im Bild 3.6 wird skizziert, daß Klassenvektoren einer bestimmten Versetzungsclassen (hier gezeigt am Beispiel des Linienvektors \mathbf{l}) von außen betrachtet nicht konstant sind. Ein äußerer Beobachter wird bei elastischer Deformation des Kristall auch eine lokale Veränderung der Klassenvektoren sowohl in Richtung (bei Scherung) als auch in der Länge (bei Stauchung oder Dehnung) feststellen. Dabei folgen die Vektoren aber den durch die Cosserat-Vektoren definierten Deformationen, das heißt, sie bleiben *relativ* zur Cosserat-Basis konstant. Entwickelt man die Klassenvektoren also nach dieser Basis, d.h. betrachtet man sie im *Gittersystem*, so müssen ihre Komponenten *konstant* sein, da sich der Charakter einer Versetzung auch bei elastischer Deformation nicht ändern kann.

Schreibt man (exemplarisch für den Linienvektor einer Klasse)

$$\mathbf{l} = l^i \mathbf{e}_i, \tag{3.102}$$

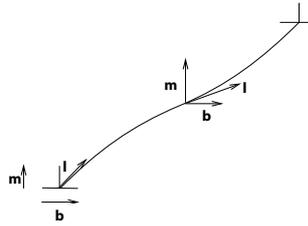


Abbildung 3.6: Eine Versetzungslinie

so sind die Komponenten l^i – bezüglich der konstanten Basisvektoren des Laborsystems – i.a. veränderliche Größen.

Im Gittersystem jedoch gilt

$$\mathbf{l} = l^\kappa \mathbf{a}_\kappa \quad (3.103)$$

mit *konstanten* Komponenten l^κ .

Wegen $\mathbf{a}_\kappa = A_\kappa^i \mathbf{e}_i$ gilt also:

$$l^i = A_\kappa^i l^\kappa \quad , \quad l^\kappa = \text{const.} \quad , \quad \text{und analog} \quad (3.104)$$

$$b^i = A_\kappa^i b^\kappa \quad , \quad b^\kappa = \text{const.} \quad (3.105)$$

$$m^i = A_\kappa^i m^\kappa \quad , \quad m^\kappa = \text{const.} \quad (3.106)$$

$$q^i = A_\kappa^i q^\kappa \quad , \quad q^\kappa = \text{const.} \quad (3.107)$$

Diese Konstanz der Klassenvektoren für jede vorher festgelegte Klasse führt dazu, daß durch Angabe eines Satzes dieser Vektoren im Gittersystem die Klasse eindeutig bestimmt ist.

Sei also eine bestimmte Klasse durch den Satz

$$\{l_D^\kappa, b_D^\kappa, m_D^\kappa, q_D^\kappa\} \quad (3.108)$$

definiert, so reicht es aus, den Index D zu kennen, um die Klasse zu bestimmen. Es ist lediglich vorher eine Vereinbarung zu treffen, welcher Index D zu welcher Klasse gehört.

Die Summe

$$\sum_D \quad (3.109)$$

bedeutet also eine Summation über alle möglichen Klassen, mit denen im Modell gearbeitet wird. Dabei hängt es vom jeweiligen Problem ab, mit welchen und mit wie vielen Klassen gearbeitet werden soll. Grundsätzlich können dies alle Arten von

Versetzungen sein, die in einem Kristall vorkommen. Aus energetischen Gründen werden aber nur die Versetzungen mit den kürzesten Burgersvektoren vorkommen, da diese die kleinste Energie haben. Dies folgt aus der Abschätzung für die Energie der Versetzungen $E \sim \mathbf{b}^2$ (siehe z.B. Kosevich (1979)).

Symmetrieoperationen der Klassen

Betrachtet man alle Klassen in einem Kristall, so werden die Komponenten der Klassenvektoren durch elastische Deformation nicht geändert, da das Gittersystem invariant bleibt. Werden jedoch die Cosserat-Vektoren selbst über Symmetrie-Transformationen

$$\mathbf{a}_\lambda \rightarrow \mathbf{a}'_\lambda = \mathbf{a}_\kappa R_\lambda^{\kappa} \quad (3.110)$$

geändert, so muß die Energie des Systems invariant gegenüber diesen Operationen bleiben, wenn R_λ^{κ} die Elemente der Dreh-Spiegelungs-Matrizen des Kristalls sind. So darf beispielsweise in einem kubischen System zyklische Vertauschung der Cosserat-Vektoren keinen Einfluß auf die meßbaren Größen haben. Andererseits wird durch das Vorhandensein einer einzigen Versetzungs Klasse eine Vorzugsrichtung vorgegeben. Die Anwesenheit von Versetzungen führt also zum *Symmetriebruch*. Die ausgezeichnete Richtung (z.B. die Richtung des Linienvektors) wird nur dann beibehalten, wenn

$$l^\kappa \rightarrow l'^\kappa = l^\lambda R_\lambda^{-1\kappa} \quad (3.111)$$

gilt. Dann sieht man, daß \mathbf{l} nun ein invariantes Objekt ist:

$$\mathbf{l}' = l'^\kappa \mathbf{a}'_\kappa = l^\lambda R_\lambda^{-1\kappa} R_\kappa^\mu \mathbf{a}_\mu = \mathbf{l}, \quad (3.112)$$

da für die Drehmatrizen

$$R_\lambda^{-1\kappa} R_\kappa^\mu = \delta_\lambda^\mu \quad (3.113)$$

gilt. Da sich aber die Komponenten der Klassenvektoren gemäß (3.111) transformieren, erhält man formal eine neue Klasse, das heißt es gilt

$$D \rightarrow D', \quad (3.114)$$

was als Symmetrieoperation zu verstehen ist. Wendet man also Symmetrieoperationen wie Drehungen und Spiegelungen auf das Gesamtsystem an, so sind darunter nicht nur Dreh-Spiegelungen der Cosserat-Vektoren, sondern auch definierte Änderung der Klasseneinteilungen zu verstehen.

Der Versetzungsdichtetensor einer Versetzungs Klasse

Man betrachte eine Versetzungs Klasse D in einem Kristall. Für *eine* Versetzung kann man den Versetzungsdichtetensor sofort angeben (vgl. z.B. Landau, Lifschitz (1991)):

$$\alpha_D^{\kappa\lambda} = \delta(\mathbf{x}) l_D^\kappa b_D^\lambda. \quad (3.115)$$

Die Versetzungslinie ist hier durch eine flächenhafte (zweidimensionale) Delta-Funktion beschrieben, der Vektor \boldsymbol{x} liegt orthogonal zu \boldsymbol{l} .

Es ist bekannt, daß der Versetzungsdichtetensor bei Integration über eine Testfläche, die senkrecht von der Versetzungslinie durchstoßen wird, den Burgersvektor der Versetzung liefert¹³:

$$\int \alpha^{\kappa\lambda} dF_\kappa = b^\lambda. \quad (3.116)$$

Für die Einzelversetzung nach Gl.(3.115) erhält man mit $dF_\kappa = l_{D\kappa} dF$:

$$\begin{aligned} \int \alpha_D^{\kappa\lambda} dF_\kappa &= \int \delta(x) l_D^\kappa b_D^\lambda dF_\kappa \\ &= b_D^\lambda \int \delta(x) dF \\ &= b_D^\lambda, \end{aligned} \quad (3.117)$$

wenn die Versetzungslinie, die durch $x = 0$ definiert ist, das Flächenelement dF durchstößt¹⁴ und der Linienvektor ein Einheitsvektor ist.

Für eine feldtheoretische Beschreibung der Versetzungen geht man nun von einer kontinuierlichen Verteilung ϱ_D der Versetzungen aus, statt eine singulären Verteilung $\delta(\boldsymbol{x})$ zu betrachten. Für den Versetzungsdichtetensor einer Versetzungsklasse D wird also der folgende Ansatz gemacht:

$$\alpha_D^{\kappa\lambda} := \varrho_D l_D^\kappa b_D^\lambda = \varrho n_D l_D^\kappa b_D^\lambda. \quad (3.118)$$

Da eine Versetzungsdichte nur in einem materiellen Hintergrund definiert werden kann, wird die Materiedichte ϱ herausgezogen. Die Größe n_D ist die **spezifische skalare Versetzungsdichte**, die die Zahl der Versetzungen pro Masseneinheit angibt. ϱn_D ist damit die Zahl von Versetzungen pro Volumeneinheit. Die Betrag der Größe

$$\varrho n_D l_D^i \quad (3.119)$$

ergibt somit die *Länge aller Versetzungen* dieser Klasse pro Volumeneinheit. Diese Größe stellt eine thermodynamische Zustandsgröße dar. Isentrope Änderung der Länge einer Versetzung wird über die Gibbsche Fundamentalform zu einer Änderung der inneren Energie führen. Betrachtet man die direkt damit zusammenhängende Größe n_D als Zustandsgröße (da im Gittersystem $\varrho_0 = const$ und ebenfalls $l^\kappa = const$ gilt), so wird

$$du = TdS + \underline{\sigma} d\underline{e} + \tilde{p}_D dn_D. \quad (3.120)$$

¹³Das Vorzeichen hängt vom der Orientierung der Fläche ab. Hier wird die Orientierung so angenommen, daß der Burgersvektor direkt bei der Integration herauskommt. Solange alle Gleichungen in sich konsistent sind, spielt diese Orientierung keine Rolle und ist nur Konvention.

¹⁴Wenn dF_κ nicht parallel zu l_κ ist, kommt der Schnittwinkel dieser beiden Größen ins Spiel. Sei dieser θ , so ist $dF_\kappa l^\kappa = dF \cos \theta$ und damit $\int \alpha^{\kappa\lambda} dF_\kappa = b^\lambda \cos \theta$.

Auf Änderung der *Versetzungslänge* pro Volumen – hier beschrieben über Änderung der spezifischen Versetzungsdichte – reagiert das System mit einer *Antwortgröße* \tilde{p}_D , die – in Analogie zur Antwortgröße Druck auf Änderung des spezifischen Volumens bzw. der Massendichte – **Versetzungsdruck** genannt wird. Er hängt i.a. von den anderen Systemvariablen, insbesondere von der jeweiligen Versetzungsdichte, ab.

Integration von Gl.(3.118) über eine Fläche senkrecht zum jeweiligen Linienvektor l_D^κ liefert:

$$\int \alpha_D^{\kappa\lambda} dF_\kappa = \int \varrho n_D dF b_D^\lambda = N b_D^\lambda. \quad (3.121)$$

N ist die Gesamtzahl aller Versetzungslinien, die das Flächenelement dF durchstoßen.

Transformationsverhalten des Versetzungsdichtetensors

Das explizite Herausziehen der Dichte in der Definition (3.118) hat einen weiteren Grund:

Der zweistufige Versetzungsdichtetensor ist eine *Tensordichte* vom Gewicht $+1$. Da l^κ und b^κ Vektoren, also Tensoren erster Stufe sind, muß ϱ_D eine skalare Dichte sein. Zieht man die materielle Dichte ϱ heraus, die eine skalare Dichte vom Gewicht $+1$ ist, so bleibt ein Skalarfeld übrig. Diese Aufteilung ist sinnvoll, da die spezifische Größe n_D sowohl im Gitter- als auch im Laborsystem gleich sein muß und damit das Transformationsverhalten eines skalaren Feldes besitzt.

ϱ transformiert sich bekanntlich wie eine skalare Dichte:

$$\stackrel{(i)}{\varrho} = \varrho \quad (3.122)$$

und

$$\stackrel{(\kappa)}{\varrho} = \varrho_0. \quad (3.123)$$

Die Indizes in Klammern geben das jeweilige System an, das bei Tensoren durch die Angabe der griechischen oder lateinischen Indizes bereits feststeht. Für Tensordichten muß das Bezugssystem jedoch explizit angegeben werden. Um nicht zu viele Indizes zu benutzen, wird hier folgende Vereinbarung getroffen:

Tensordichten ohne explizite Angabe des Bezugssystems sollen auf das Laborsystem (i) bezogen werden. Tensordichten im Gittersystem werden durch (κ) gekennzeichnet. (Ausnahme ist die Materiedichte, die mit $\stackrel{(\kappa)}{\varrho} := \varrho_0$ abgekürzt wird.)

Für den Versetzungsdichtetensor kann jeder Index auf ein Basissystem bezogen werden, gleiches gilt für die Materiedichte. Insbesondere bei gemischter Darstellung, in der z.B. der Linienvektor im Laborsystem, der Burgersvektor jedoch im Gittersystem angegeben wird, muß für die Materiedichte explizit das Bezugssystem angegeben werden, denn dadurch wird das Transformationsverhalten bestimmt. Es gelten beispielsweise folgende Definitionen¹⁵:

$$\alpha^{ij} := \varrho n^i b^j \quad (3.124)$$

¹⁵Bis auf weiteres wird der Klassenindex D weggelassen, da sich die folgenden Gleichungen auf eine Klasse beschränken.

$$\alpha^{i\kappa} := \varrho n l^i b^\kappa \quad (3.125)$$

$$\alpha^{\kappa j} := \varrho n l^\kappa b^j \quad (3.126)$$

$$\alpha^{\kappa\lambda} := \varrho n l^\kappa b^\lambda \quad (3.127)$$

$$\overset{(\kappa)}{\alpha}{}^{\kappa\lambda} := \varrho_0 n l^\kappa b^\lambda. \quad (3.128)$$

Innere Längenskalen

In einer Kontinuumstheorie der Versetzungen sollten Bezüge zu internen Längenskalen hergestellt werden (siehe dazu auch Popov, Kröner (1998, 1999)). Speziell der Burgersvektor hat einen Einfluß auf die Energie der Versetzung. Da er für jede Klasse festgelegt und konstant ist, kommt über seine Länge eine innere Längenskala ins Spiel. Der kleinste Burgersvektor hat die Länge a_0 , welches der minimale Gitterabstand ist. Da alle Klassenvektoren die Einheit *Länge* tragen, außer für den Burgersvektor aber nur ihre Richtung für die Einteilung in Klassen relevant ist, können sie auf eine Einheitslänge normiert werden.

Als **Normierungslänge** wird hier a_0 gewählt, sodaß die Klassenvektoren $\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{q}$ diese Länge im Gittersystem besitzen. Der Burgersvektor wird ebenfalls in Einheiten dieser Normierungslänge gemessen. Wichtig ist, daß die Normierung *nur* im Gittersystem, d.h. über die *Gittermetrik*, stattfinden kann, da nur in diesem die Konstanz der Klassenvektoren gewährleistet ist. Es gilt also beispielsweise für den Linienvektor:

$$l^\kappa l^\lambda a_{\kappa\lambda} = l^i l^j a_{ij} = a_0^2 = \text{const.} \quad (3.129)$$

Eigenschaften der Klassenvektoren

Da die Klassenvektoren die Eigenschaften der diskreten Versetzungen haben müssen, gelten wie oben gefordert folgende Beziehungen zwischen den Vektoren:

$$\mathbf{l} \perp \mathbf{m}, \quad \mathbf{m} \perp \mathbf{b}, \quad \mathbf{l} \perp \mathbf{q}, \quad \mathbf{m} \perp \mathbf{q}. \quad (3.130)$$

Dabei ist aber zu berücksichtigen, daß diese Orthogonalitäten auf das Gittersystem bezogen sind. Wie man in Skizze 3.7 erkennen kann, beziehen sich die Orthogonalitäten bei elastischer Deformation des Kristalls nur auf die Gittermetrik a_{ij} , nicht aber auf die Metrik g_{ij} des Laborsystems. Daher gilt:

$$l^\kappa m^\lambda a_{\kappa\lambda} = l^i m^j a_{ij} = 0 \quad (3.131)$$

$$b^\kappa m^\lambda a_{\kappa\lambda} = b^i m^j a_{ij} = 0 \quad (3.132)$$

$$q^\kappa m^\lambda a_{\kappa\lambda} = q^i m^j a_{ij} = 0 \quad (3.133)$$

$$l^\kappa q^\lambda a_{\kappa\lambda} = l^i q^j a_{ij} = 0. \quad (3.134)$$

Aus diesen Gleichungen folgt der Ansatz für q^κ :

$$\mathbf{q} \sim \mathbf{l} \times \mathbf{m}. \quad (3.135)$$

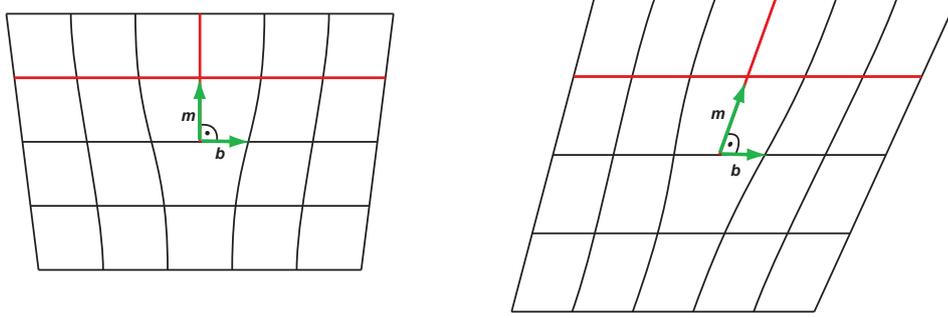


Abbildung 3.7: Gitter mit Versetzung, deformiert durch Versetzung und durch überlagerte kompatible Deformation. Der eingezeichnete rechte Winkel zwischen Ebenennormalenvektor \mathbf{m} und dem Burgersvektor \mathbf{b} gilt nur im Gittersystem, d.h. er wird mit der *Gittermetrik* gemessen.

Allerdings muß hier auch die Gittermetrik berücksichtigt werden. Führt man die mit dieser Metrik gesenkten kovarianten Vektoren

$$l_{\lambda}^{(a)} := l^{\kappa} a_{\kappa\lambda} \quad (3.136)$$

$$m_{\lambda}^{(a)} := m^{\kappa} a_{\kappa\lambda} \quad (3.137)$$

ein, so wird der **Gleitrichtungsvektor** wie folgt definiert:

$$q^{\kappa} := q_0 \frac{1}{\varrho_0} \varepsilon^{\kappa\lambda\mu} l_{\lambda}^{(a)} m_{\mu}^{(a)}. \quad (3.138)$$

Die Konstante q_0 dient dazu, den Vektor zu normieren. Die Dichte ϱ_0 fungiert als skalare Dichte vom Gewicht +1, die die Tensordichte $\varepsilon^{\kappa\lambda\mu} = \varepsilon^{(+1)\kappa\lambda\mu}$ kompensiert, da q^{κ} ein echter Tensor sein muß.

Für das Skalarprodukt mit $m_{\kappa}^{(a)}$ ergibt sich damit

$$\begin{aligned} m_{\kappa}^{(a)} q^{\kappa} &= m^{\nu} a_{\nu\kappa} q_0 \frac{1}{\varrho_0} \varepsilon^{\kappa\lambda\mu} l_{\lambda}^{(a)} m_{\mu}^{(a)} \\ &= q_0 \frac{1}{\varrho_0} \varepsilon^{\kappa\lambda\mu} a_{\kappa\nu} a_{\lambda\gamma} a_{\mu\delta} m^{\nu} l^{\gamma} m^{\delta}. \end{aligned} \quad (3.139)$$

In dieser Gleichung muß die Senkung aller Indizes des vollständig antisymmetrischen ε -Tensors mit der Gittermetrik $a_{\kappa\lambda}$ berechnet werden. Dabei ist zu berücksichtigen, daß $\varepsilon^{\kappa\lambda\mu} = \varepsilon^{(+1)\kappa\lambda\mu}$ eine Tensordichte vom Gewicht +1 ist, während $\varepsilon_{\kappa\lambda\mu} = \varepsilon^{(-1)\kappa\lambda\mu}$ eine Tensordichte vom Gewicht -1 ist. Daher muß bei der Indexhebung noch die Determinante der Metrik berücksichtigt werden, welche eine Tensordichte vom Gewicht (+2) ist¹⁶:

$$\varepsilon^{\kappa\lambda\mu} a_{\kappa\nu} a_{\lambda\gamma} a_{\mu\delta} = \varepsilon_{\nu\gamma\delta} \text{Det}|a_{\kappa\lambda}|. \quad (3.140)$$

¹⁶Ausführliche Betrachtungen finden sich in den Büchern von Schouten (1954, 1989).

Damit folgt

$${}^{(a)}m_\kappa q^\kappa = q_0 \frac{1}{\varrho_0} \text{Det}|a_{\kappa\lambda}| \varepsilon_{\nu\gamma\delta} m^\nu l^\gamma m^\delta = 0, \quad (3.141)$$

weil der ε -Tensor total antisymmetrisch ist, im rechten Teil des Ausdrucks allerdings eine symmetrische Kombination von m^ν steht.

Es stellt sich nun noch die Frage nach der Normierung des Vektors q^κ . Im Gittersystem soll er auf die gleiche konstante Einheitslänge a_0 normiert werden wie die Richtungsvektoren l^κ und m^κ .

Damit ist die Forderung

$$q^\kappa q^\lambda a_{\kappa\lambda} = a_0^2 \quad (3.142)$$

zu erfüllen.

Eine kleine Rechnung (siehe Anhang A.1) zeigt unter Berücksichtigung der Gewichte

$$q^\kappa = \frac{1}{a_0} \frac{\varepsilon^{(+1)\kappa\lambda\mu}}{\sqrt{a^{(+2)}}} l_\lambda m_\mu, \quad (3.143)$$

wobei a die Determinante der Gittermetrik ist und im Gittersystem (κ) konstant:

$$a := \text{Det}|a_{\kappa\lambda}| = 1 \quad \text{für} \quad a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}. \quad (3.144)$$

Im äußeren System gilt dann:

$$\text{Det}|a_{ij}| = \text{Det}|A_i^\kappa| \text{Det}|A_j^\lambda| \text{Det}|a_{\kappa\lambda}| \stackrel{*}{=} \left(\frac{\varrho}{\varrho_0} \right)^2, \quad (3.145)$$

und damit:

$$q^\kappa \stackrel{*}{=} \frac{1}{a_0} \varepsilon^{\kappa\lambda\mu} l_\lambda m_\mu \quad (3.146)$$

$$q^i \stackrel{*}{=} \frac{1}{a_0} \frac{\varrho_0}{\varrho} \varepsilon^{ijk} l_j m_k. \quad (3.147)$$

3.3.3 Klassentheorie im Lagrangeformalismus

Die Beschreibung der Versetzungsklassen mittels im Gittersystem konstanter Klassenvektoren und einer skalaren Versetzungsdichte n_D muß nun um die Versetzungsdynamik erweitert werden.

Dabei geht es hier zunächst um die *Versetzungsdrift*, d.h. Bewegung der Klassen relativ zu einem Hintergrund.

Die Dynamik jeder Versetzungsklasse wird mit Hilfe der Theorie der idealen Flüssigkeit modelliert, denn diese ist eine einfache und gut bekannte Beschreibung eines

Kontinuums, das eine skalare Dichte und eine Geschwindigkeit enthält. Zudem ist die ideale Flüssigkeit auch im Lagrangeformalismus gut bekannt, was bereits in Abschnitt 2.1.4 erläutert wurde. Um die dort aufgebaute Beschreibung auf die Klassentheorie zu übertragen, müssen einige Änderungen gemacht werden:

- Die **Gesamtgeschwindigkeit** der Versetzungen in einer Klasse D sei w_D^i :

Sie setzt sich aus der Mitführung der Versetzungen im Geschwindigkeitsfeld $v^i(\mathbf{x}, t)$ und einer zusätzlichen Driftgeschwindigkeit $u_D^i(\mathbf{x}, t)$ zusammen:

$$w_D^i(\mathbf{x}, t) := v^i(\mathbf{x}, t) + u_D^i(\mathbf{x}, t). \quad (3.148)$$

- Diese **Driftgeschwindigkeit** ist in ihrer Richtung festgelegt, denn Gleiten von Versetzungen findet immer in Richtung des Gleitrichtungsvektors q^i statt, sodaß

$$u_D^i(\mathbf{x}, t) := u_D(\mathbf{x}, t)q_D^i(\mathbf{x}, t) = u_D(\mathbf{x}, t)A_\kappa^i(\mathbf{x}, t)q_D^\kappa. \quad (3.149)$$

Damit ist in jeder Klasse die Driftgeschwindigkeit durch ein *Skalarfeld* $u_D(\mathbf{x}, t)$ festgelegt.

- Will man die Versetzungen im Rahmen der Theorie der idealen Flüssigkeit behandeln, ist eine Trägheit der Versetzungen nötig. Für die ideale Flüssigkeit ist die **Impulsdichte** gegeben durch

$$\rho \mathbf{v}. \quad (3.150)$$

In Verallgemeinerung dazu wird hier

$$\tilde{\rho}_D(\mathbf{v} + \mathbf{u}_D) \quad (3.151)$$

als **Gesamtimpulsdichte der Versetzungs Klasse D** gelten, wobei

$$\tilde{\rho}_D := \rho m_D n_D \quad (3.152)$$

zu setzen ist, um die Dimension einer Impulsdichte zu bekommen. Die konstante Masse m_D muß phänomenologisch eingeführt werden und hat einen direkten Bezug zur Trägheit der Versetzungen. Sie führt ebenfalls zu einer internen Längenskala, denn über die konstante Massendichte im Gittersystem ist ein Volumen mit dieser Masse

$$V_D = \frac{m_D}{\rho_0} \quad (3.153)$$

verknüpft. Dieses Volumen hängt mit einer Fehlanpassung der Gittervektoren im Kern der Versetzung zusammen und definiert damit eine Längenskala

$$L_D = \sqrt[3]{V_D}, \quad (3.154)$$

Diese Masse ist physikalisch notwendig, um das Modell der idealen Flüssigkeit beizubehalten. Mikroskopisch kann sie dadurch gedeutet werden, daß im Augenblick der Versetzungsbewegung reale Atome ihre relativen Positionen ändern,

womit eine effektive Verlagerung des Schwerpunktes geschieht. Der Gesamtimpuls dieser Bewegung dividiert durch die Geschwindigkeit der Verschiebung des topologischen Defekts Versetzung ergibt eine Masse pro Längeneinheit, die nach Multiplikation mit der internen Längenskala a_0 die Masse m_D ergeben sollte. m_D ist aber mit Sicherheit eine sehr kleine Größe, die in der Größenordnung der atomaren Masse liegt. Es ist jedoch zu beachten, daß sie erst in den Gleichungen für die Observablen vernachlässigt werden kann, wenn man Näherungen $m_D \approx 0$ betrachten will. Dies darf nicht in der Lagrangedichte geschehen, da sich sonst die Dynamik nicht vollständig beschreiben läßt.

Als Gesamtgeschwindigkeit der Versetzungen wird — wie oben erläutert — die Bewegung des Hintergrundmediums mit der Driftgeschwindigkeit summiert

$$w_D^i := v^i + u_D^i. \quad (3.155)$$

Folgende Lagrangedichte liefert dann einen Ansatz für das Subkontinuum einer Versetzungsklasse in Analogie zur idealen Flüssigkeit (vergleiche mit (2.45)):

$$\boxed{\begin{aligned} \ell_D = & -\varrho n_D m_D \left(D_t^{(w_D)} \varphi_D + \alpha_D D_t^{(w_D)} \beta_D - \frac{1}{2} \mathbf{w}_D^2 + W_D(n_D) \right) \\ & + \varrho \overset{(D)}{B}_l \left(w_D^l - v^l - u_D A_{\kappa}^l q_D^{\kappa} \right). \end{aligned}} \quad (3.156)$$

Dabei ist $D_t^{(w_D)}$ als *substantielle Zeitableitung im Geschwindigkeitsfeld w_D^i* definiert:

$$D_t^{(w_D)} := \partial_t + w_D^i \partial_i = \partial_t + v^i \partial_i + u_D q_D^i \partial_i = D_t^{(v)} + u_D q_D^i \partial_i. \quad (3.157)$$

Der Lagrangemultiplikator $\overset{(D)}{B}_l$ sorgt für die Substitution $w_D^l = v^l + u_D A_{\kappa}^l q_D^{\kappa}$, wobei diese Gleichung auch explizit eingesetzt werden kann, sodaß die Größen $\overset{(D)}{B}_l$ und w_D^l aus der Lagrangedichte eliminiert werden und die Zahl der Variablen um sechs reduziert wird. Aus Gründen der Übersicht und der späteren Auswertung der Lagrangedichte soll diese Substitution aber in die Lagrangedichte eingebunden werden.

$W_D(n_D)$ ist eine spezifische Energiedichte, die den Versetzungen eine Energie in Abhängigkeit ihrer jeweiligen Dichte zuordnet. Im Falle der idealen Flüssigkeit ist dies die innere bzw. elastische Energie, die zum hydroelastischen Druck führt.

Hier wird – in Analogie zu Gl.(3.120)– ein *Versetzungsdruck* entstehen, der zu anziehenden oder abstoßenden Kräften in Abhängigkeit von den Versetzungsdichten und den Klassenvektoren führen wird. Die Klassenvektoren gehen dabei als Parameter ein, da sie im Gittersystem Konstanten sind. Sie bestimmen zum Beispiel den Charakter der Versetzungsklasse, der in der Energie eine Rolle spielt. So kann ein allgemeiner Energieansatz durch Funktionen

$$f_1(n_D) (\mathbf{l}_D \times \mathbf{b}_D)^2 + f_2(n_D) (\mathbf{l}_D \cdot \mathbf{b}_D)^2 \quad (3.158)$$

geschehen, bei denen der erste Teil für Stufenversetzungen relevant ist, der zweite hingegen für Schraubenversetzungen.

Welcher Art die Wechselwirkungen aufgrund des Versetzungsdrucks sind, wird bei der Ankopplung an das Hintergrundmedium deutlich, die im nächsten Abschnitt geschieht. Es zeigt sich, daß im Versetzungsdruck die Hyperspannungen zum Ausdruck kommen.

Ohne Kopplung an den materiellen Hintergrund ist die Dichte ϱ hier zunächst ein von außen vorgegebenes Feld. Ebenso werden die Geschwindigkeit \mathbf{v} und die Cosserat-Vektoren A_κ^i als von außen vorgegeben betrachtet, sodaß nur n_D und $u_D^i = u_D A_\kappa^i q_D^\kappa$ als Observable relevant sind. Die Größen $\varphi_D, \alpha_D, \beta_D$ sind Clebsch-Potentiale.

Dann lauten die Euler-Lagrange-Gleichungen:

$$\delta\varphi_D : \partial_t(\varrho n_D m_D) + \partial_i(\varrho n_D m_D w_D^i) = 0 \quad (3.159)$$

$$\delta\alpha_D : \varrho n_D m_D D_t^{(w_D)} \beta_D = 0 \quad (3.160)$$

$$\delta\beta_D : \partial_t(\varrho n_D m_D \alpha_D) + \partial_i(\varrho n_D m_D \alpha_D w_D^i) = 0$$

$$\stackrel{(3.159)}{\implies} \varrho n_D m_D D_t^{(w_D)} \alpha_D = 0 \quad (3.161)$$

$$\delta n_D : \varrho m_D \left(D_t^{(w_D)} \varphi_D + \alpha_D D_t^{(w_D)} \beta_D - \frac{1}{2} \mathbf{w}_D^2 + W_D(n_D) + n_D \frac{\partial W_D(n_D)}{\partial n_D} \right) = 0 \quad (3.162)$$

$$\delta u_D : \varrho \overset{(D)}{B}_l q_D^l = 0 \quad (3.163)$$

$$\delta w_D^i : \varrho n_D m_D w_{D,i} - \varrho n_D m_D (\partial_i \varphi_D + \alpha_D \partial_i \beta_D) + \varrho \overset{(D)}{B}_i = 0 \quad (3.164)$$

$$\delta \overset{(D)}{B}_i : w_D^i - v^i - u_D A_\kappa^i q_D^\kappa = 0. \quad (3.165)$$

Auf eine weitere Auswertung der Gleichungen wird hier verzichtet, sie wird nach der Anbindung an den materiellen Hintergrund durchgeführt. Schematisch verläuft sie wie bei der idealen Flüssigkeit. Es sei nur erwähnt, daß Gl.(3.159) die *Kontinuitätsgleichung für die Versetzungs-klasse D* darstellt, was bedeutet, daß es zu keinen Versetzungsreaktionen kommt. Gl.(3.162) ist eine *verallgemeinerte Bernoulli-Gleichung der Versetzungs-klasse*.

3.4 Einbettung der Klassen in das Hintergrundmedium

In diesem Abschnitt wird die Kontinuumstheorie der Versetzungs-klassen in das Cosserat-Medium integriert. Der Einfluß des Cosserat-Kontinuums auf die Versetzungs-klassen wurde bereits deutlich: Die Subkontinua enthalten bereits die elementaren Größen ϱ , v^i und A_i^κ des Cosserat-Mediums.

Es wird nun noch gezeigt, welchen Einfluß die Versetzungs-klassen auf das Cosserat-Medium ausüben. Dazu werden die elementaren Zusammenhänge zwischen der Geometrie des Cosserat-Mediums und den Klassen definiert und die Folgen diskutiert.

3.4.1 Fundamentalgleichung der Klassentheorie

Der *mittlere Versetzungsdichtetensor* $\alpha^{i\kappa}$ ist die Verbindung zwischen Versetzungsklassen und Cosserat–Vektoren. Zum einen ist $\alpha^{i\kappa}$ über Gl.(3.118) definiert als

$$\alpha^{i\kappa} := \sum_D \varrho n_D l_D^i b_D^\kappa. \quad (3.166)$$

Zum anderen aber hängt dieser zweistufige Tensor mit den Cosserat–Vektoren über die Gleichung

$$\alpha^{i\kappa} := \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa \quad (3.167)$$

zusammen, ist also mit der Torsion $S_{jk}^{\cdot l} := \partial_{[j} A_{k]}^\kappa A_\kappa^l$ verknüpft.

Die Anbindung der Versetzungsklassen an das Hintergrundmedium geschieht nun durch die Forderung, daß beide Versetzungsdichtetensoren identisch sein müssen. Die Summe über alle Klassen muß also *zwingend* die in der Cosserat–Theorie bekannte Größe ergeben. Diese Forderung ist ein zentrales Postulat in dieser Arbeit, daher wird sie hier bezeichnet als:

Fundamentalgleichung der Theorie der Versetzungsklassen:

$$\boxed{\varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa \stackrel{(\text{Def.})}{=} \sum_D \varrho n_D l_D^i b_D^\kappa.} \quad (3.168)$$

Folgen der Fundamentalgleichung

- Für den mittleren Versetzungsdichtetensor gilt in gemischter Darstellung¹⁷ die *Divergenzfreiheit*:

$$\alpha^{i\kappa} = \varepsilon^{ikl} \partial_k A_l^\kappa \quad (3.169)$$

$$\Rightarrow \partial_i \alpha^{i\kappa} = 0. \quad (3.170)$$

Diese Divergenzfreiheit überträgt sich durch die Definition (3.168) auch auf die Klassensumme

$$\partial_i \left(\sum_D \varrho n_D l_D^i b_D^\kappa \right) = 0. \quad (3.171)$$

Hingegen folgt für eine *einzelne* Klasse die Divergenzfreiheit

$$\partial_i (\varrho n_D l_D^i b_D^\kappa) = 0 \quad (3.172)$$

nur dann, wenn sie lokal die einzige nicht verschwindende Klasse ist.

¹⁷Der zweite Index wird auf das Gittersystem bezogen

Die Divergenzfreiheit bedeutet physikalisch, daß keine Quellen oder Senken der Versetzungsdichte entlang der Linienrichtung existieren. Eine Versetzungslinie endet also nie in einem Kristall, sondern nur an dessen Oberfläche.

Es liegt also nahe, die Divergenzfreiheit für *jede* Versetzungs-klasse zu fordern, solange keine Reaktionen zwischen Klassen zugelassen sind. Die Gleichung

$$\partial_i (\varrho n_D l_D^i b_D^\kappa) = 0 \quad (3.173)$$

wird also unter Berücksichtigung der Reaktionsfreiheit gefordert.

Versetzungslinien können demnach auch nicht abknicken, also ihren Linienvektor ändern, denn ein Abknicken einer Versetzung stellt immer eine Versetzungsreaktion dar: Eine Klasse an diesem Punkt geht in eine andere über.

Erlaubt man hingegen Versetzungsreaktionen, dann kann für eine solches Abknicken nur die Divergenzfreiheit der Summe

$$\partial_i (\varrho n_1 l_1^i b_1^\kappa + \varrho n_2 l_2^i b_2^\kappa) = 0 \quad \text{mit} \quad b_1^\kappa = b_2^\kappa \quad (3.174)$$

garantiert werden, während die einzelnen Klassen Quellen Q bzw. Senken S aufweisen:

$$\partial_i (\varrho n_1 l_1^i b_1^\kappa) = S \quad (3.175)$$

$$\partial_i (\varrho n_2 l_2^i b_2^\kappa) = Q \stackrel{(3.174)}{=} -S. \quad (3.176)$$

In dieser Arbeit soll von Reaktionen abgesehen werden, da hier die Basis der Theorie aufgebaut wird. Es ist aber schon klar, daß Versetzungsreaktionen in dieser Theorie erfordern werden, daß man von der strengen Divergenzfreiheit (3.172) zu der minimalen Bedingung (3.171) übergeht.

Da die Versetzungs-klassen analog zu idealen Flüssigkeiten beschrieben werden, werden Versetzungsreaktionen in enger Analogie zu chemischen Reaktionen ablaufen. Da hier der Lagrangeformalismus entsprechend erweitert werden muß, wird in dieser Arbeit davon Abstand genommen. Ansätze dazu und zum vereinheitlichenden Aspekt des Lagrangeformalismus finden sich aber bei *Anthony* (1989, 1990).

- Versetzungsbewegung mit der Geschwindigkeit u_D^i relativ zum Hintergrundmedium hat eine plastische Deformation zur Folge, die durch einen nichtverschwindenden Driftstrom der Cosserat-Vektoren J_i^κ beschrieben werden kann. Mit der Fundamentalgleichung (3.168) ergeben sich daraus Konsequenzen für J_i^κ , denn die Größen u_D^i werden aus dem Modell der idealen Flüssigkeiten für die Subkontinua der Versetzungs-klassen entnommen, sodaß nach zeitlicher (substantieller) Ableitung beider Seiten der Gleichung (3.168)

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \left(\varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa \right) = \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \left(\sum_D \varrho n_D l_D^i b_D^\kappa \right) \quad (3.177)$$

eine Verknüpfung des Cosserat-Driftstroms J_i^κ mit den Klassengeschwindigkeiten u_D^i verbunden sein wird, d.h. Ansätze für J_i^κ müssen dieser Gleichung genügen, um *konsistent* mit der Fundamentalgleichung (3.168) zu sein. Eine ausführliche Betrachtung findet sich im Abschnitt 3.4.3.

- Wechselwirkung von Versetzungen

Die Versetzungen wechselwirken untereinander über die von ihnen verursachten Spannungsfelder. Diese Wechselwirkung äußert sich zum Beispiel in der bekannten Peach–Köhler–Kraft, die die Kräfte auf Versetzungen in Spannungsfeldern beschreibt und erstmals von *Peach, Köhler* (1950) beschrieben wurde. Da hier die elastischen Wechselwirkungen über die Cosserat–Vektoren beschrieben werden, werden diese Kräfte durch die Fundamentalgleichung bereits vollständig erfaßt und kommen in den Euler–Lagrange–Gleichungen bzw. in den daraus folgenden Gleichungen für die Observablen zum Ausdruck.

Bei *Azirhi* (1998) wird dies nicht gezeigt, sondern diese Kräfte *außerhalb* des Lagrangeformalismus explizit angesetzt.

3.4.2 Geometrische Eigenschaften des Modells

Aus dem bisherigen Aufbau der Theorie lassen sich (statische) Eigenschaften der Cosserat–Geometrie und der Versetzungsklassen ableiten. Diese Eigenschaften manifestieren sich in Gleichungen, deren physikalische Bedeutung anschaulich nicht immer klar ist. Daher werden hier einige Feldgleichungen, die aus dem Modell für Cosserat–Medium und Versetzungsklassen folgen, mit mikroskopischen Bildern von Versetzungen in einem Kristall veranschaulicht.

Existenz und Konsequenzen eines Fernparallelismus im Kristall mit Versetzungen

Wenn der ideale Kristall nur durch Versetzungen gestört ist, d.h. keine Disklinationen vorhanden sind, ist die Geometrie mit einem Fernparallelismus ausgestattet, sodaß der Riemann–Christoffel–Tensor

$$R_{ijk}^{\dots l} := 2\partial_{[i}\Gamma_{j]k}^l + 2\Gamma_{[i|p}^l\Gamma_{j]k}^p \quad (3.178)$$

verschwindet. Dies ist konsistent mit dem bisherigen Ansatz für die Konnexion

$$\Gamma_{ij}^k := A_{\kappa}^k\partial_i A_j^{\kappa}, \quad (3.179)$$

die nach Einsetzen in Gl.(3.178) zu $R_{ijk}^{\dots l} = 0$ führt.

Dies sieht man alternativ dazu, wenn man den Riemann–Christoffel–Tensor in das Gittersystem transformiert. In diesem enthält er das anholonome Objekt wegen des anholomen Basissystems, und man erhält nach kurzer Rechnung:

$$R_{\mu\nu\kappa}^{\dots\lambda} := 2\partial_{[\mu}\Gamma_{\nu]\kappa}^{\lambda} + 2\Gamma_{[\mu|\gamma}^{\lambda}\Gamma_{\nu]\kappa}^{\gamma} + 2\Omega_{\mu\nu}^{\gamma}\Gamma_{\gamma\kappa}^{\lambda}. \quad (3.180)$$

Dieser Ausdruck verschwindet offensichtlich, weil die Konnexion im Gittersystem naturalisierbar ist:

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda} = 0. \quad (3.181)$$

Kovariante Ableitung des Versetzungsdichtetensors

Aus Gl.(3.178) folgt nach Überschiebung mit ε^{ijk} und der Gl.(3.23) die Gleichung

$$\partial_i \alpha^{il} + \Gamma_{ij}^l \alpha^{ij} = 0. \quad (3.182)$$

Dies ist zum einen konsistent mit $\partial_i \alpha^{i\kappa} = 0$: Wegen

$$\begin{aligned} \partial_i \alpha^{il} + \Gamma_{ij}^l \alpha^{ij} &= \partial_i (\alpha^{i\kappa} A_\kappa^l) + \Gamma_{ij}^l \alpha^{ij} \\ &= \partial_i \alpha^{i\kappa} A_\kappa^l + \alpha^{i\kappa} \partial_i A_\kappa^l + \Gamma_{ij}^l \alpha^{ij} \\ &= \partial_i \alpha^{i\kappa} A_\kappa^l + \alpha^{ij} A_j^\kappa \partial_i A_\kappa^l + \Gamma_{ij}^l \alpha^{ij} \\ &= \partial_i \alpha^{i\kappa} A_\kappa^l - \underbrace{\alpha^{ij} \partial_i A_j^\kappa A_\kappa^l}_{=\Gamma_{ij}^l} + \Gamma_{ij}^l \alpha^{ij} \\ &= \partial_i \alpha^{i\kappa} A_\kappa^l = 0. \end{aligned} \quad (3.183)$$

Zum anderen kann Gl.(3.182) auch in die Form einer kovarianten Ableitung gebracht werden. Man muß jedoch berücksichtigen, daß α^{il} eine Tensordichte vom Gewicht (+1) ist. Für Tensordichten aber lautet die kovariante Ableitung (siehe auch *Schouten* (1954), *Eringen* (1971)):

$$\overset{\Gamma}{\nabla}_i \alpha^{(+1)il} := \partial_i \alpha^{(+1)il} + \Gamma_{ij}^l \alpha^{(+1)ij} + \Gamma_{ik}^i \alpha^{(+1)kl} - \Gamma_{ik}^k \alpha^{(+1)il}. \quad (3.184)$$

Damit ergibt sich für die kovariante Ableitung des mittleren Versetzungsdichtetensors unter Benutzung der Gl.(3.182):

$$\begin{aligned} \overset{\Gamma}{\nabla}_i \alpha^{(+1)il} &= \Gamma_{ik}^i \alpha^{(+1)kl} - \Gamma_{ik}^k \alpha^{(+1)il} \\ &= \Gamma_{ik}^i \alpha^{(+1)kl} - \Gamma_{ki}^i \alpha^{(+1)kl} \\ &\stackrel{(3.23)}{=} \varepsilon_{ikp}^{(-1)} \alpha^{(+1)pi} \alpha^{(+1)kl}. \end{aligned} \quad (3.185)$$

Bei *Schouten* (1954) entspricht diese Gleichung der sog. 2. *Identität* des Riemann–Christoffel–Tensors.

Folgen der Divergenzfreiheit der Klassen–Versetzungsdichtetensoren

In dieser Arbeit werden Reaktionen zwischen Versetzungsklassen ausgeschlossen. Das bedeutet, daß *jede* Klasse quellen– und senkenfrei ist. Daraus folgt die Divergenzfreiheit des Versetzungsdichtetensors *einer* Versetzungsklasse¹⁸:

$$\partial_i \alpha_D^{i\kappa} = \partial_i (\varrho n_D l_D^i b_D^\kappa) = 0. \quad (3.186)$$

¹⁸Auf die Angabe des Gewichtsindex der Tensordichte wird wieder verzichtet.

Mit den Rechenregeln 3.1.3 folgt:

$$\begin{aligned}
\partial_i (\varrho l_D^i) &= l_D^\lambda \partial_i (\varrho A_\lambda^i) \\
&= l_D^\lambda \varrho \left(A_\mu^j \partial_i A_j^\mu A_\lambda^i - A_\lambda^j \partial_i A_j^\mu A_\mu^i \right) \\
&= \varrho l_D^\lambda A_\lambda^i A_\mu^j \varepsilon_{ijk} \alpha^{k\mu} \\
&= \varrho l_D^i \varepsilon_{ijk} \alpha^{kj}
\end{aligned} \tag{3.187}$$

und damit

$$\partial_i \alpha_D^{i\kappa} = \partial_i (\varrho n_D l_D^i b_D^\kappa) = \varrho n_D l_D^i b_D^\kappa \varepsilon_{ijk} \alpha^{kj} + \varrho l_D^i b_D^\kappa \partial_i n_D = 0. \tag{3.188}$$

Mit der Fundamentalgleichung (3.168) wird daraus:

$$\boxed{\varrho b_D^\kappa \left(\sum_{D'} \varrho n_{D'} n_{D'} l_{D'}^i l_{D'}^k b_{D'}^j \varepsilon_{ijk} + l_D^i \partial_i n_D \right) = 0,} \tag{3.189}$$

und bei beliebigen Burgersvektoren folgt

$$l_D^i \partial_i n_D = - \sum_{D'} \varrho n_{D'} n_{D'} l_{D'}^i l_{D'}^k b_{D'}^j \varepsilon_{ijk} \tag{3.190}$$

Dies ist eine lokale Gleichung für die Richtungsableitung einer skalaren Versetzungsdichte n_D in Richtung ihres zugehörigen Linienvektors. Sie hängt offensichtlich von anderen Klassendichten ab, die am selben Ort von null verschieden sind.

Darauf können folgende Überlegungen aufgebaut werden:

1. Einfluß von Schraubenversetzungen:

In der Summe über D' spielen Schraubenversetzungen keine Rolle, denn für Schraubenversetzungen gilt wegen $b_D^i \parallel l_D^i$:

$$l_{D'}^k b_{D'}^j \varepsilon_{ijk} = 0 \quad \text{wenn } D' \sim \text{Schraubenversetzung.} \tag{3.191}$$

Schraubenversetzungen beeinflussen also die Änderung von n_D in Linierrichtung anderer Klassen am selben Ort nicht.

2. Zusammenhang mit dem mittleren Versetzungsdichtetensor:

Summiert man Gl.(3.189) über D und betrachtet alle Größen im äußeren System, so erhält man

$$\varepsilon_{ijk} \alpha^{kj} \alpha^{il} + \sum_D \varrho l_D^i b_D^l \partial_i n_D = 0, \tag{3.192}$$

sodaß sich mit Gl.(3.185) folgender Zusammenhang ergibt:

$$\sum_D \varrho l_D^i b_D^l \partial_i n_D = \overset{\Gamma}{\nabla}_i \alpha^{il}. \tag{3.193}$$

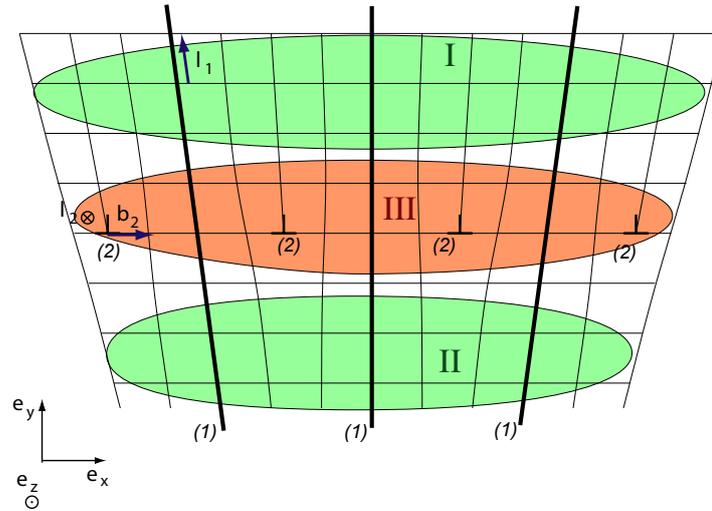


Abbildung 3.8: Zwei Versetzungsverteilungen, die sich im Gebiet **III** durchdringen. Klasse (1) ist durch die dick schwarz gezeichneten Versetzungslinien gekennzeichnet, die das Ende der Schnittebenen darstellen und kann entweder eine Stufen- oder eine Schraubenversetzungs-klasse sein. Klasse (2) repräsentiert eine Stufenversetzung, deren Verteilung in den Gebieten **I** und **II** verschwindet.

Dies ist die Klassen-Darstellung der kovarianten Ableitung des Versetzungsdichtetensors, die sich offenbar aus Summen über partielle Richtungsableitungen der skalaren Versetzungsdichten in Richtung des jeweiligen Linienvektors ergeben.

Nach Transformation in das Gittersystem wird dieser Zusammenhang deutlicher: Da im Gittersystem die kovariante Ableitung wegen $\Gamma_{\mu\nu}^{\kappa} = 0$ zur gewöhnlichen partiellen Ableitung wird, erhält man

$$\sum_D \varrho_0 l_D^\lambda b_D^\kappa \partial_\lambda n_D = \partial_\lambda \alpha^{\lambda\kappa} = \partial_\lambda \left(\sum_D \varrho_0 n_D l_D^\lambda b_D^\kappa \right), \quad (3.194)$$

was wegen der Konstanz von ϱ_0 , l^λ und b^κ sofort als wahrer Ausdruck zu erkennen ist.

3. Mikroskopische Deutung von Gl. (3.189):

Gl. (3.189) hat folgenden geometrischen Hintergrund: Als Beispiel werden Verteilungen von zwei Versetzungs-klassen angenommen, welche in Bild 3.8 durch diskrete Versetzungsanordnungen skizziert werden:

Das Bild zeigt einen zweidimensionalen Schnitt durch einen Einkristall. Die Stufenversetzungen der Klasse (2) erkennt man durch die abbrechenden Koordinatenlinien, die man auch als zusätzlich in den Kristall eingeschobene Halbebenen deuten kann. Diese Versetzungen sind in dem räumlichen Gebiet **III** lokalisiert, das *zusätzlich* Versetzungen der Klasse (1), die als dick gedruckte

schwarze Linien gekennzeichnet sind, enthält. Diese Linien stellen die Enden der Versetzungs-Schnittebenen dar (vgl. mit Bild 3.5) und sollen gerade in der hier skizzierten (Zeichen-)Ebene liegen. Ihr Charakter ist beliebig. (Falls es sich um Stufenversetzungen handelt, kennzeichnen diese Linien wieder das Ende von eingeschobenen Halbebenen.)

In den Gebieten **I** und **II** sind hingegen ausschließlich Versetzungen der Klasse (1) lokalisiert. Gl.(3.189) liefert in diesen Gebieten:

$$\varrho b_1^k l_1^i \partial_i n_1 = 0. \quad (3.195)$$

Hier verändert sich die *spezifische* Versetzungsdichte in Linienrichtung nicht.

Anschaulich ist nun aber klar, daß sich beim Vergleich der Gebiete **I** und **II** ein Unterschied in der spezifischen skalaren Versetzungsdichte ergibt. Dies kommt durch die zusätzlichen Halbebenen zustande, die aufgrund der Stufenversetzungen der Klasse (2) eingefügt sind, wodurch die *spezifische* Dichte – die ja auf die *Masse* bezogen ist – in dem Gebiet **I** geringer ist als im Gebiet **II**, da zwar die Zahl der Versetzungen gleich bleibt, aber zusätzlich Materie hinzukommt: Im Gebiet **I** befinden sich drei Gitterpunkte zwischen den Versetzungslinien, im Gebiet **II** nur zwei.

Man erwartet also, daß im Gebiet **III**, wo sich beide Versetzungsclassen durchdringen, die Richtungsableitung $l_1^i \partial_i n_1$ ändert, da die spezifische Dichte (im Bild von unten nach oben) in Linienrichtung abnimmt.

Diese Änderung wird gerade durch die Gleichung (3.189) beschrieben, denn es ergibt sich für beide Klassen im Gebiet **III**:

$$l_1^i \partial_i n_1 = -\varrho n_1 n_2 l_1^i l_2^k b_2^j \varepsilon_{ijk} \neq 0, \quad (3.196)$$

da die drei Vektoren $\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2, \mathbf{b}_2$ nicht in einer Ebene liegen.

Ebenso ergibt sich für die Richtungsableitung der Klasse (2)

$$l_2^i \partial_i n_2 = -\varrho n_1 n_2 l_2^i l_1^k b_1^j \varepsilon_{ijk}, \quad (3.197)$$

was allerdings nur dann von null verschieden ist, wenn der Burgersvektor der Klasse (1) zu einer Stufenversetzung gehört. Für eine Schraubenversetzung ist diese Gleichung hingegen null: Schraubenversetzungen haben ja *keinen* Einfluß auf die Richtungsableitung anderer Klassen, was anschaulich damit zu erklären ist, daß hier keine zusätzlichen Ebenen eingeschoben werden.

Damit lassen sich die Gleichungen des Kontinuums anschaulich auf die diskreten Eigenschaften der Versetzungen zurückführen und sind damit ein Abbild dieser Eigenschaften.

Diese Versetzungsverteilung ist allerdings statisch betrachtet worden. Es wird angenommen, daß sie in dieser Form im Kristall bereits vorhanden war. Es stellt sich allerdings die Frage, ob eine solche Verteilung unter der Bedingung der Reaktionsfreiheit auch durch Versetzungsbewegung zustande kommen kann, oder ob die Versetzungsclassen dieser Verteilung sich auch wieder trennen können. Diese Fragen werden im

nächsten Abschnitt im Zusammenhang mit den Versetzungsgeschwindigkeiten und dem Cosserat–Driftstrom behandelt.

Es ist noch einmal zu betonen, daß das Bild 3.8 nur die diskreten Versetzungen skizziert, während Gleichung (3.189) im Kontinuum gültig ist und somit eine Verallgemeinerung des skizzierten Sachverhaltes darstellt.

3.4.3 Konsistenzbedingung für den Cosserat–Driftstrom

Durch die Fundamentalgleichung (3.168) entsteht eine Verbindung des Cosserat–Mediums mit den Versetzungsklassen, die dazu führt, daß die substantiellen Zeitableitungen der beiden Definitionen des Versetzungsdichtetensors gleich sein müssen:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \left(\varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa \right) = \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} \left(\sum_D \varrho n_D l_D^i b_D^\kappa \right). \quad (3.198)$$

Wie eine kurze Rechnung zeigt (Anhang A.2), erhält man daraus folgenden Zusammenhang für den Cosserat–Driftstrom J_i^κ und die Versetzungsgeschwindigkeiten u_D^j :

Konsistenzbedingung für den Cosserat–Driftstrom:

$$\boxed{\varepsilon^{ijk} \partial_j J_k^\kappa + \alpha^{l\kappa} J_l^i = - \sum_D \partial_j \left(\varrho n_D u_D^j \right) l_D^i b_D^\kappa.} \quad (3.199)$$

Dabei gehen Bedingungen wie die Erhaltung der spezifischen Versetzungsdichte und die Bewegungsgleichung für die Cosserat–Vektoren ein. Da die n_D und u_D^j aus der Klassentheorie bestimmt werden, liefern diese 9 Gleichungen ($i = 1..3, \kappa = 1' \dots 3'$)¹⁹ die Bedingungen für die Cosserat–Driftströme J_i^κ .

Neben der zweiten Einschränkung

$$J_i^i = 0 \quad (3.200)$$

muß jeder Ansatz für J_i^κ diese Gleichungen erfüllen. Entsprechende Ansätze und die sich daraus ergebenden Konsequenzen werden in Abschnitt 3.4.4 diskutiert.

Einschränkungen für u_D

Da in dieser Arbeit Versetzungsklassen ohne Reaktionen betrachtet werden, müssen Versetzungslinien einer bestimmten Klasse intakt bleiben, es dürfen keine Jogs entstehen (vgl. Bild 3.9). Es stellt sich daher die Frage, welche Auswirkungen dies auf die Geschwindigkeit u_D^i der Versetzungen hat.

Zunächst ist klar, daß bei konstanter Linienrichtung l^κ auch die Geschwindigkeit in ihrer Richtung durch q^κ festgelegt ist. Die skalare Größe u_D gibt dann nur noch an, wie schnell sich die Versetzung in die festgelegte Richtung bewegt (wobei bei Vorzeichenwechsel von u_D die entgegengesetzte Richtung eingeschlagen wird).

¹⁹Um die Unterscheidung zwischen Labor- und Gittersystem deutlich zu machen, werden die Gitterindizes mit Strichen versehen.

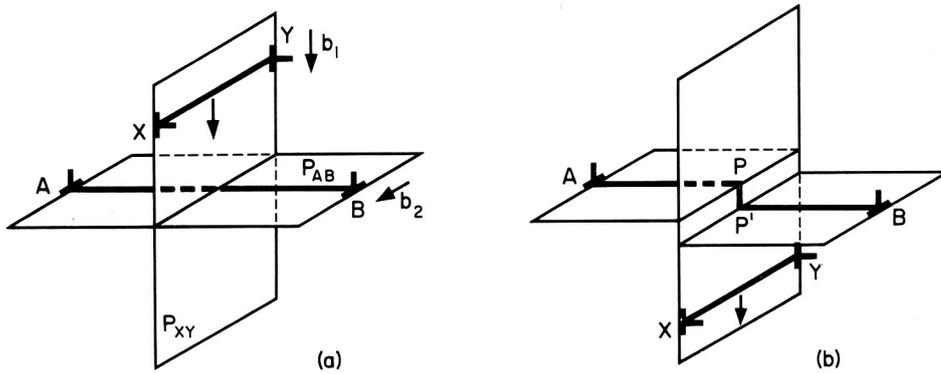


Abbildung 3.9: Durchdringung zweier Stufenversetzungen mit rechtwinklig zueinander orientierten Burgersvektoren: (a) Eine Versetzung XY bewegt sich in der Gleitebene P_{XY} und schneidet die Versetzung AB in der P_{AB} -Ebene. (b) Nach dem Durchgang von XY durch AB ist auf der Versetzung AB ein Jog PP' entstanden. Dieser Jog entsteht durch Verschiebung der Ebene P_{AB} um den Burgersvektor b_1 . (Aus: Read (1953))

Da die Versetzungslinie aber nicht auseinanderreißen darf, muß sie durch innere Kräfte zusammengehalten werden. In der Lagrangedichte werden sich diese durch Lagrangemultiplikatoren als Reaktion auf kinematische Bindungen ergeben. Für die skalare Versetzungsgeschwindigkeit u_D heißt dies, daß sie sich für eine Versetzungs-klasse entlang der Linienrichtung l_D^i nicht ändern darf, denn dies würde unweigerlich zu einem – hier verbotenen – Auseinanderreißen führen.

Für das Modell der nicht reagierenden Versetzungs-klassen bedeutet das eine physikalisch motivierte Einschränkung

$$l_D^i \partial_i u_D = 0. \quad (3.201)$$

Durchdringen von Versetzungen bei Gleitbewegungen

Durch diese Einschränkung des Modells auf nicht reagierende Versetzungs-klassen wird ein *Durchdringen* von Versetzungen bei Gleitbewegungen unmöglich. Dies wird in Abb. 3.9 deutlich: Bei jeder Durchdringung werden Jogs erzeugt.

Trotz dieser Einschränkungen ist dies immer noch ein Modell, das den Kristall gut beschreibt, wenn die Deformationsenergien nicht zu hoch sind: Um eine neue Versetzungslinie zu kreieren, muß die Linienenergie \mathcal{E}_D aufgebracht werden. Beschränkt man nun die Gleitbewegung und elastische Deformation auf Fälle, die unterhalb dieser lokalen Energie liegen, so ist davon auszugehen, daß sich Versetzungen – wie in diesem Modell – gegenseitig behindern und nicht durchdringen. Erst bei höheren Energien – und lokal größeren Spannungen – werden Versetzungsreaktionen eintreten.

3.4.4 Ansatz für den Cosserat–Driftstrom

Der Cosserat–Driftstrom wird in der Lagrangedichte (3.249) nur durch die Konsistenzbedingung (3.199) und die Kontinuitätsgleichung, welche $J_i^i = 0$ zur Folge hat, eingeschränkt. Dies liefert aber keine Definition für J_i^k .

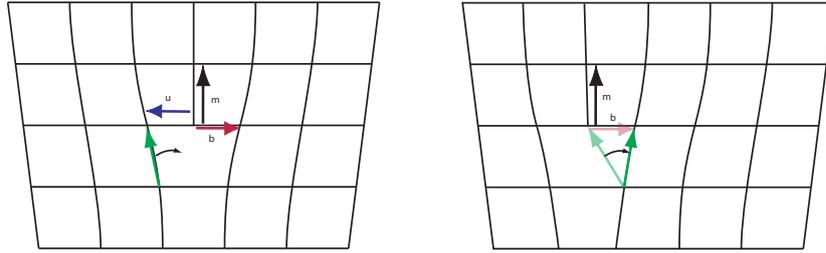


Abbildung 3.10: Drehung der Cosserat-Vektoren, wenn eine Versetzung sich nach links bewegt.

Das Ziel ist nun, einen Ansatz zu finden, der eine Beziehung zwischen dem Cosserat-Driftstrom und den Versetzungsbewegungen definiert und die Konsistenzbedingung erfüllt.

Dazu werden verschiedene Situationen betrachtet:

Eine Versetzungsklasse

Zunächst wird der Fall einer diskreten Versetzung betrachtet. Dazu ist in Bild 3.10 schematisch eine Stufenversetzung eingezeichnet, die sich mit der Geschwindigkeit u nach links bewegt. Im diskreten Fall ist die minimale Bewegung gerade die Verschiebung um einen Burgersvektor.

Man erkennt, daß Gleiten um einen Burgersvektor eine Drehung der Cosserat-Vektoren zur Folge hat²⁰. Zwar werden im diskreten Fall auch Längenänderungen sichtbar. Im Kontinuum aber wird der Cosserat-Vektor um einen infinitesimalen Winkel gedreht. Anschaulich wird klar, daß sich dabei die Komponenten A_{κ}^i in Richtung des Burgers-Vektors verschieben, und zwar nur für Cosserat-Vektoren, die *senkrecht* zur Gleitebene liegen, also *parallel* zum Normalen-Vektor $\overset{(a)}{m}_{\kappa} = m^{\lambda} a_{\lambda\kappa}$. Damit bedeutet Gleiten einer Versetzung, daß A_{κ}^i in einem Zeitintervall Δt übergeht in

$$A_{\kappa}^i \rightarrow A_{\kappa}^i + j \overset{(a)}{m}_{\kappa} b^i \Delta t. \quad (3.202)$$

Dabei ist j eine Proportionalitätskonstante.

Im Kontinuumsfall wird Gleiten größerer Versetzungsdichten zu proportional stärkeren Drehungen der Cosserat-Vektoren führen. Außerdem wird die Stärke der Drehung pro Zeitintervall proportional zur Driftgeschwindigkeit der Versetzungsklasse u sein. Der Ansatz lautet daher²¹:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_{\kappa}^i = -c_0 n u \overset{(a)}{m}_{\kappa} b^i \quad (3.203)$$

²⁰Hier muß man von den eigentlichen Cosserat-Vektoren \mathbf{a}_{κ} bzw. von den Matrizen A_{κ}^i ausgehen.

²¹Solange nur eine Versetzungsklasse betrachtet wird, wird der Index D unterdrückt, um die Formeln übersichtlicher zu gestalten. Es ist klar, daß n , u , l^i , m^i , b^i und q^i dann Klassengrößen sind.

mit c_0 als noch zu bestimmender Proportionalitätskonstante.

Die Änderung der Cosserat–Vektoren muß hier *relativ* zur Gitterbewegung betrachtet werden, daher muß hier die *substantielle Zeitableitung* verwendet werden. Da in der Skizze \mathbf{u} und \mathbf{b} unterschiedliche Richtungen haben, wird hier ein negatives Vorzeichen gewählt. Für diese spezielle Versetzung bedeutet das, daß der Richtungsvektor der Versetzungsbewegung \mathbf{q} die Richtung des Burgersvektors \mathbf{b} hat. Dies kann immer durch geeignete Wahl der Klassenvektoren erreicht werden.

Um die Gleichungen für die reziproken Cosserat–Vektoren zu erhalten, wird Gl. (3.41) benutzt:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = J_i^\kappa = c_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa. \quad (3.204)$$

Der Ansatz ist konsistent mit vergleichbaren Ansätzen aus der Literatur (siehe z.B. Landau, Lifschitz (1991)). Dort wird allerdings meist²²

$$J_i^\kappa := \varepsilon_{ijk} u^j \alpha^{k\kappa} \quad (3.205)$$

geschrieben.

Beide Ansätze sind für eine Versetzungs Klasse äquivalent, denn mit den Gl.(3.168) und (3.147) folgt:

$$\begin{aligned} J_i^\kappa &= \varepsilon_{ijk} u^j \alpha^{k\kappa} \\ &= \varepsilon_{ijk} \varrho n u q^j l^k b^\kappa \\ &= n u \frac{\varrho_0}{\varrho} \frac{1}{a_0} \varrho \varepsilon_{ijk} \varepsilon^{jmn} \overset{(a)}{l}_m \overset{(a)}{m}_n l^k b^\kappa \\ &= n u \varrho_0 \frac{1}{a_0} \left(\underbrace{\overset{(a)}{m}_i \overset{(a)}{l}_k}_{a_0^2} l^k b^\kappa - \underbrace{\overset{(a)}{l}_i \overset{(a)}{m}_k}_0 l^k b^\kappa \right) \\ &= \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa. \end{aligned} \quad (3.206)$$

Damit ist der Ansatz des Stromes in Gl.(3.204) konsistent mit dem zitierten, wenn

$$c_0 := \varrho_0 a_0 \quad (3.207)$$

gesetzt wird. Man beachte, daß der Wert ϱ_0 hier in *jedem* Bezugssystem gleich und damit auch im äußeren System konstant ist.

Damit gilt

$$J_i^\kappa := \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa \stackrel{(3.206)}{=} \varrho n \varepsilon_{ijk} u^j l^k b^\kappa. \quad (3.208)$$

Zum einen erfüllt dieser Ansatz die Spurfreiheit des Cosserat–Driftstroms, denn

$$J_i^i = \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^i = 0, \quad (3.209)$$

²²Das Vorzeichen hängt dabei von der Definition des Burgersvektors ab.

da der Burgersvektor definitionsgemäß in der Gleitebene liegt.

Für die Konsistenzbedingung (3.199) gilt nun eine vereinfachte Gleichung. Um diese abzuleiten, wird zunächst eine Hilfsformel erstellt:

Es gilt

$$l^\kappa \overset{(\Gamma)}{\nabla}_\kappa q^\lambda - q^\kappa \overset{(\Gamma)}{\nabla}_\kappa l^\lambda = l^\kappa \partial_\kappa q^\lambda - q^\kappa \partial_\kappa l^\lambda = 0 \quad (3.210)$$

aufgrund der Konstanz der Klassenvektoren.

In das Laborsystem transformiert ergibt sich wegen der Definition der kovarianten Ableitung:

$$\begin{aligned} 0 &= l^i \overset{(\Gamma)}{\nabla}_i q^j - q^i \overset{(\Gamma)}{\nabla}_i l^j \\ &= l^i \partial_i q^j - q^i \partial_i l^j + l^i \Gamma_{ik}^j q^k - q^i \Gamma_{ik}^j l^k \\ &= l^i \partial_i q^j - q^i \partial_i l^j + l^i q^k \left(\Gamma_{ik}^j - \Gamma_{ki}^j \right) \\ &= l^i \partial_i q^j - q^i \partial_i l^j + l^i q^k \varepsilon_{ikl} \alpha^{lj} \\ &= l^i \partial_i q^j - q^i \partial_i l^j + l^i q^k \varepsilon_{ikl} \varrho n l^j b^l \\ 0 &= l^i \partial_i q^j - q^i \partial_i l^j. \end{aligned} \quad (3.211)$$

Mit dieser Gleichung folgt dann aus der Konsistenzbedingung (3.199):

$$\begin{aligned} 0 &= \varepsilon^{ijk} \partial_j J_k^\mu + \alpha^{k\mu} J_k^i + \partial_j (\varrho n u q^j) l^i b^\mu \\ &\stackrel{(3.205)}{=} \partial_j \left(\varepsilon^{ijk} \varepsilon_{kmn} u \varrho n q^m l^n b^\mu \right) + \varrho n b^\mu \varrho_0 a_0 n u \underbrace{l^k \overset{(a)}{m}_k}_{=0} b^i + \partial_j (\varrho n u q^j) l^i b^\mu \\ &= \partial_j (\varrho n u q^i l^j b^\mu - \varrho n u q^j l^i b^\mu) + \partial_j (\varrho n u q^j) l^i b^\mu \\ &= \partial_j (\varrho n u q^i l^j b^\mu) - \varrho n u q^j \partial_j l^i b^\mu \\ &\stackrel{(3.172)}{=} \varrho n b^\mu (l^j \partial_j (u q^i) - u q^j \partial_j l^i) \\ 0 &\stackrel{(3.211)}{=} \varrho n b^\mu q^i l^j \partial_j u. \end{aligned} \quad (3.212)$$

Und das bedeutet, daß durch den Ansatz (3.208) die Konsistenzbedingung nun

$$l^j \partial_j u = 0 \quad (3.213)$$

lautet.

Damit folgt aus der Konsistenzforderung die in Gl.(3.201) bereits physikalisch motivierte Nebenbedingung, die ein Zerreißen von Versetzungslinien verhindert. Diese Nebenbedingung muß also nicht explizit in der Lagrangedichte gefordert werden, da sie über die Fundamentalgleichung (3.168) und deren zeitlicher Ableitung (3.198) erfüllt wird.

Mehrere Versetzungsklassen in der gleichen Gleitebene

Betrachtet man ein Ensemble von Versetzungsklassen, gleich ob Schrauben- oder Stufenversetzungen, denen *eine* bestimmte *Gleitebene* gemein ist, so ist der Ansatz (3.208) immer noch hinreichend, um die Konsistenzbedingung (3.199) zu erfüllen, wenn er als Summe über diese Klassen formuliert wird:

$$J_i^\kappa := \sum_D \varrho_0 a_0 n_D u_D \overset{(a)}{m}_{D_i} b_D^\kappa. \quad (3.214)$$

Der in α^{ij} und J_i^κ nichtlineare Term ergibt sich jetzt zu

$$\alpha^{i\nu} J_i^\mu = \sum_{D,D'} \varrho n_D l_D^i b_D^\nu \varrho_0 a_0 n_{D'} u_{D'} \overset{(a)}{m}_{D'} b_{D'}^\kappa = 0, \quad (3.215)$$

da nach Voraussetzung alle Klassen die gleiche Gleitebene haben sollen und damit $l_D^i \overset{(a)}{m}_{D'} = 0$ für alle D, D' .

Die Gl.(3.199) führt dann analog zur Rechnung (3.212) zu den Bedingungen

$$\sum_D \varrho n_D b_D^\mu q_D^i l_D^j \partial_j u_D = 0. \quad (3.216)$$

Da keine der Versetzungslinien auseinanderreißen darf, verschwindet jeder Summand dieser Summe und die Konsistenzbedingung ist erfüllt. Allerdings ist die physikalische motivierte Aussage, daß für *jede* Klasse

$$l_D^i \partial_i u_D = 0 \quad (3.217)$$

gelten muß, stärker als das Verschwinden der Summe. Die Bedingung (3.217) für alle Klassen folgt nicht zwingend aus (3.216) und muß daher *explizit* für $N - 1$ Klassen gefordert werden. Für zukünftige Erweiterungen der Theorie *mit* Versetzungsreaktionen müssen diese Nebenbedingungen gerade dann aufgegeben werden, wenn es zu einem Zerreißen von Versetzungslinien und damit zur Erzeugung neuer Versetzungen kommt.

Beliebige Versetzungsverteilung

Für eine beliebige Versetzungsverteilung bietet sich der Ansatz

$$J_i^\kappa := \sum_D \varrho_0 a_0 n_D u_D \overset{(a)}{m}_{D_i} b_D^\kappa = \sum_D \varepsilon_{ijk} u_D^j \alpha_D^{k\kappa} \quad (3.218)$$

an, der jetzt keinen Einschränkungen mehr unterliegt. Einsetzen in die Konsistenzbedingung liefert nach einigen Rechenschritten:

$$\sum_D \varrho n_D b_D^\mu q_D^i l_D^j \partial_j u_D + \sum_{D,D'} \varrho^2 n_D n_{D'} b_D^\mu b_{D'}^i u_D \varepsilon_{jkl} q_D^j l_D^k l_{D'}^l = 0. \quad (3.219)$$

Die erste Summe verschwindet, wenn die explizite Forderung nach Reaktionsfreiheit durch das Verschwinden der Richtungsableitung

$$l_D^j \partial_j u_D = 0 \quad (3.220)$$

für alle Klassen erfüllt wird.

Das Verschwinden der Doppelsumme ist dann äquivalent zum Erfüllen von Gl.(3.199). Ihre Bedeutung kann man anschaulich (analog zum Schaubild 3.8 im statischen Fall) verdeutlichen:

Betrachtet wird ein diskretes System von zwei sich durchdringenden Klassen. Das Spatprodukt $\varepsilon_{jkl} q_D^j l_D^k l_{D'}^l$ in der Doppelsumme in Gl.(3.219) verschwindet bei parallelen Linienvektoren $l_D \parallel l_{D'}$. Es werden daher zwei Klassen betrachtet, bei denen diese Bedingung nicht erfüllt ist.

In den Schaubildern 3.11 – 3.14 soll die Klasse (1) entweder eine Schraubenversetzung ($\mathbf{b}_1 \parallel \mathbf{l}_1$, zwei Gleitrichtungen möglich) oder eine Stufenversetzung (zwei Burgersvektoren $\mathbf{b}_1 \perp \mathbf{l}_1$ mit festgelegter Gleitrichtung $\mathbf{q}_1 \parallel \mathbf{b}_1$ möglich) sein.

Für die zwei Versetzungsklassen im Durchdringungsgebiet **III** kann Gl.(3.219), da der erste Term verschwinden soll, umgeformt werden zu

$$\varrho^2 n_1 n_2 \varepsilon_{jkl} l_1^k l_2^l \left(u_1 q_1^j b_1^\mu b_2^i - u_2 q_2^j b_2^\mu b_1^i \right) = 0. \quad (3.221)$$

Für das skizzierte System sind nun folgende vier Fälle möglich:

1. Zwei Stufenversetzungen mit $\mathbf{b}_1 \parallel \mathbf{b}_2 \parallel \mathbf{e}_x \Rightarrow \mathbf{q}_1 \parallel \mathbf{q}_2 \parallel \mathbf{e}_x$, Bild 3.11:

Für diesen Fall reduziert sich Gl.(3.221) mit $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 = \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2$ zu:

$$\varrho^2 n_1 n_2 b_1^i b_1^\mu \varepsilon_{jkl} b_1^j l_1^k l_2^l (u_1 - u_2) = 0 \quad \Rightarrow u_1 = u_2. \quad (3.222)$$

Die Versetzungen können sich also nur mit gleicher Geschwindigkeit relativ zum Gitter bewegen. Nur so kann die Forderung, daß keine Versetzungsreaktionen stattfinden dürfen, erfüllt werden.

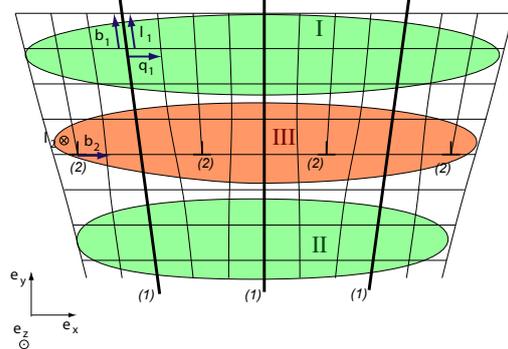
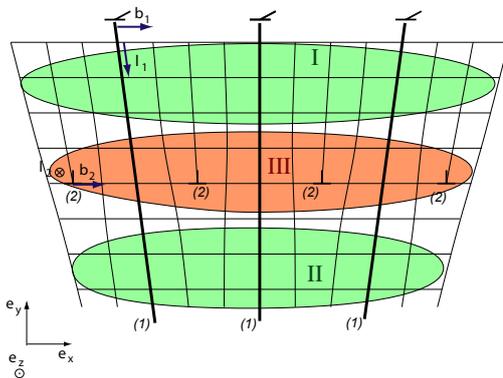


Abbildung 3.11: Zwei Stufenversetzungen mit parallelem Burgersvektor und daher mit gleicher Gleitrichtung.

Abbildung 3.12: Eine Stufenversetzung (2) und eine Schraubenversetzung (1) mit gleicher Gleitrichtung.

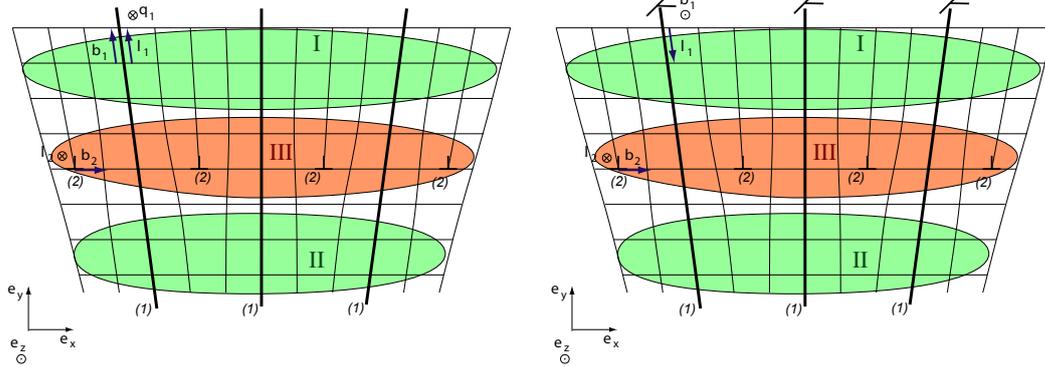


Abbildung 3.13: Eine Stufenversetzung (2) und eine Schraubenversetzung (1) mit unterschiedlichen Gleitrichtungen: $\mathbf{q}_1 \parallel \mathbf{e}_z$.
Abbildung 3.14: Zwei Stufenversetzungen (1) und (2) mit unterschiedlichen Gleitrichtungen: $\mathbf{q}_1 \parallel \mathbf{b}_1 \parallel \mathbf{e}_z$.

2. Eine Stufenversetzung (2) und eine Schraubenversetzung (1) mit gleichen Bewegungsrichtungen $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2 = \mathbf{b}_2$, Bild 3.12:

Hier erhält man:

$$\varrho^2 n_1 n_2 q_1^j \varepsilon_{jkl} l_1^k l_2^l (u_1 b_1^\mu b_2^i - u_2 b_2^\mu b_1^i) = 0. \quad (3.223)$$

Diese Gleichung ist nur dann erfüllt, wenn $u_1 = u_2 = 0$ gilt²³. Das bedeutet: Die Versetzungen hemmen sich gegenseitig. Anschaulich ist dies klar, da bei Bewegung der Stufenversetzung (2) die Versetzungslinien der Klasse (1) durch die “wandernden Halbebenen” zerschnitten werden würden. Umgekehrt werden auch bei Bewegung der Schraubenversetzungen in die angegebene Richtung die Versetzungslinien der Stufenversetzung zerschnitten.

3. Eine Stufenversetzung (2) und eine Schraubenversetzung (1) mit unterschiedlichen Bewegungsrichtungen $\mathbf{q}_1 = \mathbf{l}_2$ und $\mathbf{q}_2 = \mathbf{b}_2$, Bild 3.13:

Hier erhält man wegen $\mathbf{q}_1 \parallel \mathbf{l}_2$:

$$-\varrho^2 n_1 n_2 \varepsilon_{jkl} l_1^k l_2^l u_2 q_2^j b_2^\mu b_1^i = 0, \quad (3.224)$$

was zu

$$u_2 = 0 \quad \text{und} \quad u_1 \quad \text{beliebig} \quad (3.225)$$

führt.

Die Schraubenversetzung (1) kann sich also frei in \mathbf{e}_z -Richtung bewegen, während die Stufenversetzung (2) festgepinnt ist, da bei ihrer Bewegung wieder ein Zerschneiden der Schraubenversetzungslinie stattfinden würde.

²³Man sieht das, wenn alle Komponenten der Tensorprodukte $b_1^\mu b_2^i$ und $b_2^\mu b_1^i$ ausgeschrieben werden.

4. Zwei Stufenversetzungen mit $\mathbf{b}_1 \parallel \mathbf{l}_2 \Rightarrow \mathbf{q}_1 \parallel \mathbf{l}_2$, Bild 3.14:

Für diesen Fall erhält man:

$$-\varrho^2 n_1 n_2 \varepsilon_{jkl} l_1^k l_2^l u_2 q_2^j b_2^\mu b_1^i = 0. \quad (3.226)$$

Also gilt wie oben

$$u_2 = 0 \quad \text{und} \quad u_1 \quad \text{beliebig.} \quad (3.227)$$

Die Stufenversetzung (1) kann sich auch hier frei in \mathbf{e}_z -Richtung bewegen. Diese Bewegung bewirkt *kein* Zerschneiden der Versetzungslinie der Klasse (2). Umgekehrt jedoch führt Bewegung der Klasse (2) zu einem Zerschneiden der Linie (1), was $u_2 = 0$ zur Folge haben muß.

Alle möglichen Auswirkungen der Konsistenzgleichung für den skizzierten Fall sind im Einklang mit den Voraussetzungen des Modells. Daher wird auch für eine beliebige Versetzungsverteilung der Ansatz

$$J_i^k := \sum_D \varrho_0 a_0 n_D u_D \overset{(a)}{m}_{Di} b_D^k = \sum_D \varepsilon_{ijk} u_D^j \alpha_D^{kk}, \quad (3.228)$$

im Fall nicht-reagierender Versetzungen gewählt.

Für mehrere Versetzungsklassen muß jedoch explizit gefordert werden, daß

$$l^i \partial_i u_D = 0 \quad (3.229)$$

gilt, damit die Konsistenzbedingung erfüllt wird.

Pinning von Versetzungen

Der zweite der oben erwähnten Fälle ist besonders interessant, weil beide Versetzungsdriftgeschwindigkeiten verschwinden. Das bedeutet, es entsteht ein **Pinningeffekt**: Die so gepinnten Versetzungen werden zur plastischen Deformation keinen Beitrag liefern und zählen damit zu den sog. *immobilen Versetzungen* oder auch *Waldversetzungen*. Durch Vorgabe dieser oder ähnlicher Versetzungsanordnungen sind diese unbeweglichen Versetzungen automatisch in der Theorie enthalten und werden daher nicht als eigenständige Größen in die Theorie integriert (wie das im Gegensatz dazu bei Azirhi (1998) und Anthony, Azirhi (1998) geschieht).

Durch den hier vorgestellten Ansatz wird also deutlich, daß auch Eigenschaften von **Versetzungsnetzwerken**, hier die gegenseitige Behinderung beim Gleiten, beschrieben werden können. Dies wird einen großen Einfluß auf die makroskopischen plastischen Eigenschaften haben, denn durch die Verhinderung von Gleitprozessen tritt eine Verfestigung ein, da plastische Deformation dadurch behindert wird.

Falls man Versetzungsverteilungen betrachtet, die *nicht* durch Gleitprozesse zustande gekommen sein können, so hat man es im Rahmen dieser Theorie mit Verteilungen zu tun, die Anfangsbedingungen beschreiben. Diese können z.B. mit Versetzungen korrespondieren, die beim realen Kristallwachstum entstehen.

Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung wird über die Bewegungsgleichung der Cosserat-Vektoren berechnet, was die Spurfreiheit des Cosserat-Driftstroms voraussetzt:

$$J_i^i = 0 \quad (3.230)$$

Da dies aber für den allgemeinen Ansatz (3.218) der Fall ist, benötigt man keine explizite Forderung nach Erfüllen der Kontinuitätsgleichung. Es folgt nämlich aus Gl. (3.218):

$$J_i^i = \sum_D \varrho_0 a_0 n_D u_D \overset{(a)}{m}_{D_i} b_D^i = \sum_D \varrho n_D \varepsilon_{ijk} u_D q_D^j l_D^k b_D^i = 0, \quad (3.231)$$

weil für alle Versetzungen der Burgersvektor in der Gleitebene liegt, also $\overset{(a)}{m}_{D_i} b_D^i = 0$ gilt, bzw. Linien-, Burgers- und Gleitrichtungsvektor in dieser Ebene liegen, also das Spatprodukt $\varepsilon_{ijk} q_D^j l_D^k b_D^i$ verschwindet.

3.4.5 Separation der Energiedichte des Gesamtsystems

In der Lagrangedichte der Versetzungsklassen (3.156) wurde eine spezifische Energie $W_D(n_D)$ in Analogie zur idealen Flüssigkeit angenommen. Es soll nun gezeigt werden, wie ein solcher Ansatz zu motivieren ist:

Im allgemeinen Fall des Cosserat-Mediums kann die Energiedichte nicht nur von den Cosserat-Vektoren, sondern auch von ihren räumlichen Ableitungen abhängen. Dadurch wird es möglich, Momentenspannungen als Antwortgrößen auf Variation der Cosserat-Vektoren zu erhalten.

Der allgemeine Ansatz für die elastische Energie lautet dann:

$$W = W(A_i^\kappa, \partial_j A_i^\kappa). \quad (3.232)$$

Berücksichtigt man die in Abschnitt 3.1.2 eingeführten Größen der elastischen Deformation

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(a_{\kappa\lambda} A_i^\kappa A_j^\lambda - g_{ij} \right) \quad (3.233)$$

und der Hyperdeformation

$$h_{ij}^{\cdot\cdot k} := A_\kappa^k \partial_i A_j^\kappa, \quad (3.234)$$

so kann man die Energie als Funktion dieser Größen schreiben:

$$W = W(e_{ij}, h_{ij}^{\cdot\cdot k}). \quad (3.235)$$

Der Hyperdeformationstensor wird weiter untersucht:

Eine Indexsenkung im letzten Index mit der Gittermetrik führt zu einem dreifach kovarianten Tensor, der immer in folgende Summe aus einem symmetrischen und einem antisymmetrischen Tensor zerlegt werden kann:

$$H_{ijk} := h_i^{\cdot l} a_{lk} = H_{i(jk)} + H_{i[jk]}. \quad (3.236)$$

Den in den letzten beiden Indizes symmetrischen Tensor nennt man **natürlichen Hyperverzerrungstensor**:

$$\lambda_{ijk} := H_{i(jk)}, \quad (3.237)$$

der in den letzten beiden Indizes antisymmetrische Teil heißt **natürlicher Strukturkrümmungstensor**:

$$\kappa_{ijk} := H_{i[jk]}. \quad (3.238)$$

Der natürliche Hyperverzerrungstensor liefert keine neue Information, denn er ist identisch mit dem Gradienten der elastische Deformation, wie sich durch Einsetzen der Definitionen leicht zeigen läßt:

$$\lambda_{ijk} = \partial_i e_{jk}. \quad (3.239)$$

Der Strukturkrümmungstensor läßt sich auf die zweistufige Tensordichte

$$\kappa_i^{\cdot j} := \frac{1}{2} \varepsilon^{jmn} \kappa_{imn} \quad (3.240)$$

zurückführen, ohne Information zu verlieren.

Es folgt nach kurzer Rechnung:

$$\kappa_i^{\cdot j} = \varepsilon^{jmn} \partial_m e_{ni} + \left(\frac{1}{2} \delta_i^j \alpha^{mn} a_{mn} - \alpha^{jn} a_{ni} \right). \quad (3.241)$$

Der Strukturkrümmungstensor ist also vollständig bestimmt, wenn α^{ij} und e_{ij} bestimmt sind. Damit hängt die spezifische Energie von folgenden Größen ab:

$$W = W(e_{ij}, \partial_i e_{jk}, \alpha^{ij}). \quad (3.242)$$

Die Versetzungen tragen also über die von ihnen erzeugten Hyperdeformationen zur elastischen Energie bei.

Da in dieser Theorie ein Mehrflüssigkeitsmodell angenommen wird, in dem jede Flüssigkeit eine eigene Energiedichte besitzt, wird an dieser Stelle ein Separationsansatz für die spezifischen Energien gemacht. Dabei ist wichtig, daß der Versetzungsdichtetensor über die skalaren Versetzungsdichten n_D definiert ist. Der Ansatz lautet:

$$W = W_{elast}(e_{ij}, \partial_i e_{jk}) + W_{Vers}(n_D), \quad (3.243)$$

wobei die spezifische Versetzungsenergie noch von allen Versetzungsklassen abhängen kann.

Damit enthält W_{Vers} einerseits die hyperelastischen Anteile der Energie einer Klasse. Zum anderen kann damit aber auch die Energie der Versetzung im *Versetzungskern* mit erfaßt werden, die von den inneren Längenskalen abhängt und im Rahmen der klassischen Elastizitätstheorie nicht berücksichtigt wird. Außerdem können nicht-elastische Nah-Wechselwirkungen von Versetzungskernen *verschiedener* Klassen in dichten Versetzungsnetzwerken erfaßt werden, wenn die spezifische Energie einer Versetzungs-klasse lokal von anderen Versetzungs-klassen abhängen kann:

$$W_D := W_D(n_D, n_{D'}). \quad (3.244)$$

Auch diese “Nah-Wechselwirkungsenergie” geht über die Elastizitätstheorie hinaus. Zieht man noch als Konvention die Größen $m_D n_D$ aus der Energiedichte heraus, um zu der in der Lagrangedichte (3.156) vorgestellten Form zu gelangen, so lautet die gesamte Energiedichte²⁴ des Modells mit einem Summenansatz für W_{Vers} :

$$\varrho W_{ges} := \varrho W_{elast}(e_{ij}, \partial_i e_{jk}) + \sum_D \varrho m_D n_D W_D(n_D, n_{D'}). \quad (3.245)$$

Der **Versetzungsdruck** p_D einer Klasse wird analog zum Druck in einer Flüssigkeit

$$p(\varrho) := \varrho^2 \frac{\partial W(\varrho)}{\partial \varrho} \quad (3.246)$$

über die Ableitung der Versetzungsenergie nach der Versetzungsdichte definiert:

$$p_D := m_D n_D^2 \frac{\partial W_D}{\partial n_D}. \quad (3.247)$$

Dieser Versetzungsdruck ist als Antwortgröße bei Variation nach der Versetzungsdichte analog zu Momentenspannungen, die man durch Variation nach *den* Hyperdeformationen erhält, die auf eine nicht-verschwindende Versetzungsverteilung zurückzuführen sind. Die Richtungsinformationen des Tensors der Momentenspannungen sind hier über die Klassenvektoren enthalten, die aufgrund ihrer Konstanz im Gittersystem als Parameter in die Versetzungsenergie eingehen (was hier nur durch Vorgabe des Klassenindex D angedeutet wird).

²⁴Um von der *spezifischen Energie* zu der *Energiedichte* zu gelangen, muß natürlich mit ϱ multipliziert werden.

3.5 Aufbau der Lagrangedichte

Die bisher gesammelten Bausteine der Theorie werden nun zusammengefügt und die Lagrangedichte des Einkristalls mit beweglichen Versetzungen aufgebaut. Diese muß aus folgenden Teilen bestehen:

1. Elastisches Hintergrundmedium (Ideale Flüssigkeit mit Cosserat–Vektoren als innere Struktur): (3.64) (erste Zeile);
2. Bewegungsgleichung für die Cosserat–Vektoren: (3.41);
3. Versetzungsklassen (modelliert durch ideale Flüssigkeiten): (3.156) mit (3.244);
4. Fundamentalgleichung der Klassentheorie (Anbindung der Versetzungsklassen an das Hintergrundmedium): (3.168);
5. Konsistenzbedingung (Anbindung des Cosserat–Driftstroms J_i^κ an die Versetzungsgeschwindigkeiten): (3.189). Diese wird durch einen Ansatz erfüllt;
6. Nebenbedingungen, die sich aus der Forderung nach Reaktionsfreiheit der Versetzungsklassen ergeben: (3.186), (3.201).

Da die Dissipation erst im nächsten Kapitel separat behandelt wird, wird die aus dieser Lagrangedichte entstehende Dynamik nicht–dissipativ sein.

Es gilt zur Erinnerung

$$\varrho = \varrho(A_i^\kappa). \quad (3.248)$$

Damit liefert folgende Lagrangedichte eine Beschreibung für nicht reagierende Versetzungsklassen im elastisch und plastisch deformierbaren Kristall:

$$\begin{aligned}
 \ell = & -\varrho \left(-\frac{1}{2}v^2 + W_{elast}(e_{ij}, \partial_i e_{jk}) \right) & (a) \\
 & -\varrho \sum_D n_D m_D \left(D_t^{(wD)} \varphi_D + \alpha_D D_t^{(wD)} \beta_D - \frac{1}{2}w_D^2 + W_D(n_D, n_{D'}) \right) & (b) \\
 & + \varrho t_\kappa^i \left(\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa - \sum_D \varrho n_D u_D \varepsilon_{ijk} q_D^\mu A_\mu^j l_D^\nu A_\nu^k b_D^\kappa \right) & (c) \\
 & + h_{\mu\nu} \left(A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu - \sum_D \varrho n_D l_D^\mu b_D^\nu \right) & (d) \\
 & + \sum_D \varrho B_l^{(D)} \left(w_D^l - v^l - u_D q_D^\kappa A_\kappa^l \right) & (e) \\
 & + \sum_D^{D_{max}-1} \chi_D \partial_l \left(\varrho n_D A_\kappa^l \right) l_D^\kappa & (f) \\
 & + \sum_D \xi_D l_D^\mu A_\mu^i \partial_i u_D. & (g)
 \end{aligned} \quad (3.249)$$

Deutung der Elemente der Lagrangedichte:

- (a) Elastisches Hintergrundmedium: Auf eine Clebsch–Darstellung der Geschwindigkeit v^i kann verzichtet werden, da sich für sie eine verallgemeinerte Darstellung nach Variation von v^i ergibt;
- (b) Flüssigkeitsmodell der Versetzungsklassen;
- (c) Bewegungsgleichung für die Cosseratvektoren mit dem Driftstrom J_i^κ nach Gl.(3.214);
- (d) Fundamentalgleichung (siehe Gl.(3.168))
- (e) Definition der Gesamt–Versetzungsgeschwindigkeit $w_D^i := v^i + u_D q_D^i$. Diese Definition kann auch in die Lagrangedichte eingesetzt werden, dann entfallen die Variablen w_D^i und die Multiplikatoren $\overset{(D)}{B}_i$;
- (f) Erzwingt die Quellen– und Senkenfreiheit für $N - 1$ Klassen;
- (g) Erzwingt gleiche Versetzungsdriftgeschwindigkeit entlang einer Versetzungslinie für alle Klassen.

Die Euler–Lagrange–Gleichungen werden für das Modell mit einer Versetzungsklasse im nächsten Abschnitt berechnet. Bei der Variation ist darauf zu achten, daß die Klassenvektoren im Gittersystem konstant sind und daher nicht nach ihnen zu variieren ist. Außerdem sind nur die reziproken Transformationsmatrizen A_i^κ Variable, nicht hingegen die eigentlichen Matrizen A_k^i . Für Variation nach diesen ist die Rechenregel (3.39) zu verwenden.

3.6 Modellsystem mit einer Versetzungsklasse

Die Auswertung der Lagrangedichte (3.249) wird an einem Modell mit *einer* Versetzungsklasse vorgenommen. Dies vereinfacht die Gleichungen und erlaubt es dennoch, plastische Deformation zu berechnen.

Da die dissipativen Effekte in der Lagrangedichte (3.249) noch nicht enthalten sind, wird hier ein Reibungsterm nachträglich in die Gleichungen für die Observablen eingefügt, der für eine dissipative Driftbewegung der Versetzungsklasse sorgt. Der Einbau dissipativer Terme in die Lagrangedichte selbst geschieht im Kapitel 4.

Lagrangedichte und Auswertung

In der folgenden Lagrangedichte wird die elastische Energie nur in Abhängigkeit von der elastischen Verzerrung e_{kl} geschrieben. Hyperdeformationen, die Ableitungen von e_{kl} enthalten, werden vernachlässigt. Die *antisymmetrischen* Anteile der Hyperdeformation, die den Versetzungs-dichtetensor enthalten, sind jedoch über den Energieterm der Versetzungsklasse integriert und führen so zu Momentenspannungen, die sich in der vorliegenden Beschreibung aus dem Versetzungsdruck ergeben.

Weiterhin können die Nebenbedingungen in den Zeilen (3.249)(f) und (g) weggelassen werden, denn:

(3.249)(f) ist für *eine* Klasse immer durch die Fundamentalgleichung erfüllt;

(3.249)(g) ergibt sich eindeutig aus der Konsistenzbedingung für eine Versetzungs-
klasse (3.212).

Dann wird (3.249) zu folgender Lagrangedichte, wobei jetzt auf den Klassenindex D verzichtet wird²⁵:

$$\begin{aligned}
 \ell = & - \varrho \left(-\frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + W(A_i^\kappa) \right) \\
 & - \varrho n m_0 \left(D_t^{(w)} \varphi + \alpha D_t^{(w)} \beta - \frac{1}{2} \mathbf{w}^2 + W_D(n) \right) \\
 & + \varrho t_\kappa^i \left(\partial_t A_i^\kappa + v^k \partial_k A_i^\kappa + \partial_i v^k A_k^\kappa - \varrho n u \varepsilon_{ijk} A_\nu^j q^\nu A_\mu^k l^\mu b^\kappa \right) \\
 & + h_{\gamma\kappa} \left(A_m^\gamma \varepsilon^{mkl} \partial_k A_l^\kappa - \varrho n l^\gamma b^\kappa \right) \\
 & + \varrho B_l (w^l - v^l - u A_\nu^l q^\nu).
 \end{aligned} \tag{3.250}$$

Im folgenden werden teilweise die Abkürzungen

$$\alpha^{i\kappa} = \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa = \varrho n l^i b^\kappa \tag{3.251}$$

$$J_i^\kappa = \varrho n u \varepsilon_{ijk} q^j l^k b^\kappa = \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa \tag{3.252}$$

benutzt, um die Gleichungen übersichtlicher zu gestalten.

²⁵Die Referenzmasse m_D wird hier mit m_0 bezeichnet, die Versetzungsenergie weiterhin mit W_D .

Euler–Lagrange–Gleichungen

Nach Variation erhält man folgende Euler–Lagrange–Gleichungen, die hier teilweise schon etwas umgeformt sind. Gemäß ihrer Bedeutung werden sie benannt:

Bewegungsgleichung der Cosserat–Vektoren:

$$\delta t_\kappa^i : \partial_t A_i^\kappa + v^k \partial_k A_i^\kappa + \partial_i v^k A_k^\kappa - J_i^\kappa = 0 \quad (3.253)$$

Fundamentalgleichung:

$$\delta h_{\gamma\kappa} : A_m^\gamma \varepsilon^{mkl} \partial_k A_l^\kappa - \varrho n l^\gamma b^\kappa = 0 \quad (3.254)$$

Definition der Klassen–Driftgeschwindigkeit \mathbf{u} :

$$\delta B_l : w^l - v^l - u^l = 0 \quad (3.255)$$

Kontinuitätsgleichung der skalaren Versetzungsdichte:

$$\delta \varphi : \partial_t (\varrho n) + \partial_i (\varrho n w^i) = 0 \quad (3.256)$$

Clebsch–Potentiale der Versetzungsbewegung:

$$\delta \alpha : \varrho n D_t^{(w)} \beta = 0 \quad (3.257)$$

$$\delta \beta : \varrho n D_t^{(w)} \alpha = 0 \quad (3.258)$$

Potentialansatz für die Geschwindigkeit des Hintergrundmediums:

$$\begin{aligned} \delta v^l : \varrho v_l + \varrho t_\kappa^i \partial_l A_i^\kappa - \partial_i (\varrho t_l^i) - \varrho B_l &= 0 \\ \Rightarrow v_l = -t_\kappa^i \partial_l A_i^\kappa + \frac{1}{\varrho} \partial_i (\varrho t_l^i) + B_l & \end{aligned} \quad (3.259)$$

Potentialansatz für die Geschwindigkeit der Versetzungsklasse:

$$\begin{aligned} \delta w^l : \varrho n m_0 w_l - \varrho n m_0 (\partial_l \varphi + \alpha \partial_l \beta) + \varrho B_l &= 0 \\ \Rightarrow n m_0 w_l = n m_0 (\partial_l \varphi + \alpha \partial_l \beta) - B_l & \end{aligned} \quad (3.260)$$

Bestimmungsgleichung für den Lagrange–Multiplikator B_l :

$$\begin{aligned} \delta u : -\varrho t_\kappa^i \varepsilon_{ijk} q^j \varrho n l^k b^\kappa - \varrho B_l q^l &= 0 \\ \Rightarrow u^l B_l + J_i^\kappa t_\kappa^i &= 0 \end{aligned} \quad (3.261)$$

Bernoulli–ähnliche Gleichung für die Versetzungsklasse:

$$\delta n : \varrho m_0 \left(D_t^{(w)} \varphi - \frac{1}{2} \mathbf{w}^2 + W_D + n \frac{\partial W_D}{\partial n} \right) + \varrho \frac{1}{n} t_\kappa^i J_i^\kappa + h_{\gamma\kappa} \varrho l^\gamma b^\kappa = 0 \quad (3.262)$$

“Tensorielle Bernoulli–Gleichung” für das Hintergrundmedium:

$$\begin{aligned} \delta A_i^\kappa : \varrho A_p^\kappa \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} t_\kappa^i - A_p^\kappa \varepsilon^{ijk} \partial_j h_{k\kappa} + \varrho \delta_p^i \left(-\frac{1}{2} v^2 + W(A_i^\kappa) - p_D \right) + \varrho \sigma_p^i \\ + \varrho t_\kappa^i J_p^\kappa - \varrho \delta_p^i t_\kappa^l J_l^\kappa - h_{p\kappa} \alpha^{i\kappa} - \varrho B_p u^i &= 0 \end{aligned} \quad (3.263)$$

Gleichungen für die Observablen

Nun werden die Gleichungen für die Observablen A_i^κ, v^i, n und u aus den Euler–Lagrange–Gleichungen hergeleitet. Nach zeitlicher Ableitung der Geschwindigkeiten können dabei die Potentiale φ, α und β sowie die Lagrangemultiplikatoren t_κ^i und B_i eliminiert werden.

Man erhält folgenden Satz von Gleichungen:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa \quad (3.264)$$

$$\varrho M D_t^{(v)} v_l + \varrho n m_0 \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} u_l = -\varrho n m_0 u^i \partial_i u_l - \partial_i (\varrho \sigma_l^i) \quad (3.265)$$

$$\varrho D_t^{(v)} n = -\partial_l (\varrho n u^l) \quad (3.266)$$

$$\varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa = \varrho n l^i b^\kappa \quad (3.267)$$

$$\begin{aligned} \varrho n m_0 D_t^{(v)} (u \mathbf{q}^2) &= -\varrho n m_0 u q^i q^l \partial_i (u_l) + n m_0 q^l \partial_i (\varrho \sigma_l^i) - \varrho M q^l \partial_l p_D \\ &\quad + \varrho M n q^l \varepsilon_{lik} (\varrho \sigma_p^i b^p) l^k - M \partial_k (h_{lp} \varrho n l^k b^p q^l) \end{aligned} \quad (3.268)$$

Anmerkungen:

- $\mathbf{q}^2 = q^i q^j g_{ij}$ ist das Betragsquadrat des Vektors \mathbf{q} im äußeren System, also *nicht* konstant, denn mit Gl.(3.264) und der Rechenregel (3.43) folgt nach kurzer Rechnung:

$$D_t^{(v)} \mathbf{q}^2 = q^i q^k (\partial_i v_k + \partial_k v_i). \quad (3.269)$$

- $\overset{(a)}{m}_i$ ist definiert durch Gl.(3.137):

$$\overset{(a)}{m}_i := m^j a_{ij}. \quad (3.270)$$

- M ist eine Abkürzung für

$$M := 1 + n m_0. \quad (3.271)$$

Deutung der Gleichungen (3.264 – 3.268):

(3.264) : Bewegungsgleichung für die Cosserat–Vektoren.

(3.265) : Impulsbilanz des elastischen Hintergrundmediums.

Da die Versetzungen in diesem Modell mit einer Masse und damit mit einer Trägheit verknüpft sind, erscheinen sie in der Impulsbilanz. Diese Terme enthalten jeweils $n m_0$.

(3.266) : Kontinuitätsgleichung der skalaren Versetzungsdichte.

(3.267) : Fundamentalgleichung der Versetzungsklassentheorie.

(3.268) : Impulsbilanz des Versetzungssubkontinuums.

Da die Richtung der Bewegung durch die Klassenvektoren festgelegt ist, reicht diese Gleichung zur Bestimmung der Versetzungsdriftgeschwindigkeit u aus.

Die Peach–Köhler–Kraft

Der vorletzte Term der Gleichung (3.268) enthält mit

$$\varepsilon_{lik} (\varrho \sigma_p^i b^p) l^k \quad (3.272)$$

die **Peach–Köhler–Kraft** (siehe auch *Peach, Köhler (1950)*), welche die Kraft des elastischen Spannungsfeldes auf eine Versetzung (in diesem Fall Versetzungsdichte) beschreibt. Die Multiplikation mit q^l sorgt für eine Projektion dieser Kraft in Gleitrichtung.

In indexfreier Notation ist dieser Anteil (bis auf die Vorfaktoren):

$$\mathbf{q} \cdot [(\mathbf{b} \cdot \underline{\sigma}) \times \mathbf{l}], \quad (3.273)$$

was als Spatprodukt der Vektoren \mathbf{q} , $\mathbf{b} \cdot \underline{\sigma}$ und \mathbf{l} zu erkennen ist. Zyklische Vertauschung ergibt

$$\begin{aligned} \mathbf{q} \cdot [(\mathbf{b} \cdot \underline{\sigma}) \times \mathbf{l}] &= (\mathbf{b} \cdot \underline{\sigma}) \cdot (\mathbf{l} \times \mathbf{q}) \\ &= -(\mathbf{b} \cdot \underline{\sigma}) \cdot \overset{(a)}{\mathbf{m}}, \end{aligned} \quad (3.274)$$

oder in der hier üblichen Index–Notation unter Berücksichtigung der Einheitslängen und der Konstanten

$$q^l \varepsilon_{lik} (\varrho \sigma_p^i b^p) l^k = -\varrho_0 a_0 \sigma_p^i b^p \overset{(a)}{m}_i. \quad (3.275)$$

Die Peach–Köhler–Kraft ist also elementar in der Theorie enthalten und folgt direkt aus der hier benutzten geometrischen Betrachtung im verallgemeinerten Cosserat–Kontinuum. (Dies wird bei *Azirhi (1998)* nicht gezeigt.)

Der Anteil der Peach–Köhler–Kraft *senkrecht* zur Gleitebene wird hier nicht betrachtet: Da die Versetzungen in dieser Richtung nicht gleitfähig sind und Versetzungsklettern in dieser Theorie ausgeschlossen wird, muß dieser Anteil durch eine Reaktionskraft kompensiert werden. Da diese Einschränkung sich aus Zwangsbedingungen in der Lagrangedichte ergibt, werden die Reaktionskräfte gerade durch die Lagrangeschen Multiplikatoren gegeben, die diese Bedingungen erzwingen.

Bedeutung des Lagrangemultiplikators $h_{\mu\nu}$

Der Lagrange–Multiplikator $h_{\mu\nu}$ läßt sich nicht vollständig eliminieren. Das liegt daran, daß er Kräfte beschreibt, die die Versetzungslinie als ganzes Objekt “zusammenhalten”. Die Driftgeschwindigkeit darf entlang l^k nicht variieren, der Spannungstensor jedoch schon. Über $h_{\mu\nu}$ werden also gerade die Komponenten der Gleichung (3.261) kompensiert, deren Richtungsableitung in Richtung Linienvektor *nicht* verschwindet. Es ist zu erwarten, daß nach Einbau von Versetzungsreaktionen in die Theorie dieser Multiplikator ebenfalls aus den Observablen–Gleichungen eliminiert werden kann, da dann ein Zerreißen von Versetzungslinien und eine damit verknüpfte Erzeugung neuer Versetzungen erlaubt sein wird. Diese Untersuchung ist jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Weitere Erläuterungen zu $h_{\mu\nu}$ folgen in den nächsten Abschnitten.

Noethersche Energiebilanz

Aus dem Noethertheorem erhält man folgende Ausdrücke für die Energiedichte und die Energiestromdichte:

$$e = \varrho W + \varrho n m_0 W_D + \frac{1}{2} \varrho v^2 + \frac{1}{2} \varrho n m_0 w^2 - \partial_i \left(\varrho t_k^i v^k \right), \quad (3.276)$$

sowie

$$\begin{aligned} j_{(e)}^l = & \left(\varrho W + \frac{1}{2} \varrho v^2 \right) v^l + \left(\varrho n m_0 W_D + \frac{1}{2} \varrho n m_0 w^2 \right) w^l + \partial_t \left(\varrho t_k^l v^k \right) \\ & + \varrho \sigma_k^l v^k + \varrho p_D u^l \\ & + \varrho n l^l h_{ij} u^i b^j \\ & + \varepsilon^{lijk} \partial_j \left(-h_{kp} v^p + \varrho t_p^i v^p v^q \varepsilon_{kqi} \right). \end{aligned} \quad (3.277)$$

Der Term $(\varrho t_k^i v^k)$ verschwindet identisch aus der Bilanz

$$\partial_t e + \partial_l j_{(e)}^l = 0. \quad (3.278)$$

Der letzte Term ist ein Rotationsausdruck, der bei Divergenzbildung ebenfalls verschwindet. Mit substantiellen Ableitungen schreibt sich die Energiebilanz dann als

$$\varrho D_t^{(v)} \left(W + \frac{1}{2} v^2 \right) + \varrho n m_0 D_t^{(w)} \left(W_D + \frac{1}{2} w^2 \right) + \partial_l \left(\varrho \sigma_k^l v^k + \varrho p_D u^l + \varrho n l^l h_{ij} u^i b^j \right) = 0. \quad (3.279)$$

Der letzte Term ist ein Strom, der den Lagrangemultiplikator $h_{\mu\nu}$ enthält.

Wegen $\partial_l (\varrho n l^l) = 0$ und $l^l \partial_l u = 0$ folgt:

$$\varrho D_t^{(v)} \left(W + \frac{1}{2} v^2 \right) + \varrho n m_0 D_t^{(w)} \left(W_D + \frac{1}{2} w^2 \right) + \partial_l \left(\varrho \sigma_k^l v^k + \varrho p_D u^l \right) = -\varrho n u^l q^\lambda b^\kappa \partial_l h_{\lambda\kappa} \quad (3.280)$$

Es ist also lediglich die Richtungsableitung von $h_{\mu\nu}$ in Richtung der Versetzungslinie für den zusätzlichen Stromterm relevant.

Sowohl dieser Zusatzterm in der Energiebilanz als auch der letzte Term in Gl.(3.268) enthalten nur die Richtungsableitung $l^i \partial_i (h_{\mu\nu} q^\mu b^\nu)$. In einem in Versetzungslinienrichtung *homogenen* Medium, in dem alle Feldableitungen in dieser Richtung verschwinden, wird in *keiner* der Observablengleichungen dieser Lagrange-Multiplikator mehr vorkommen. Ein solches Medium wird im Abschnitt 3.7 betrachtet.

Dissipativer Zusatzterm

In dem Modell fehlt bisher die Dissipation. An dieser Stelle soll nun ein phänomenologischer Reibungsterm eingeführt werden, der zu einer dissipativen Versetzungsbeziehung führt. Ohne diesen Term wird eine einmal begonnene plastische Deformation bei fehlenden äußeren Kräfte mit konstanter Deformationsgeschwindigkeit, bei vorhandenen äußeren Kräften sogar beschleunigt weiterlaufen. Um bei der Berechnung

der Dispersionsrelation dissipative Effekte mit berücksichtigen zu können, wird in der Bewegungsgleichung für die Versetzungsgeschwindigkeit (3.268) ein Reibungsterm

$$\varrho \mathbf{q}^2 \eta u \quad (3.281)$$

hinzugefügt. Der Term \mathbf{q}^2 wird dabei nur aus Dimensionsgründen hinzugefügt: er geht im linearisierten System in a_0^2 über. Diese Reibung beschreibt phänomenologisch die dissipativen Verluste bei der Bewegung von Versetzungen relativ zum Hintergrundmedium.

Der Reibungskoeffizient η hat die Einheit s^{-1} . Damit wird über die *Relaxationszeit*

$$\tau := \frac{1}{\eta} \quad (3.282)$$

eine Zeitskala definiert, auf der bei fehlenden äußeren Kräften eine Versetzungsbewegung zum Stillstand kommt.

Das Gleichungssystem der Observablen lautet nun:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa \quad (3.283)$$

$$\varrho M D_t^{(v)} v_l + \varrho n m_0 \overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} u_l = -\varrho n m_0 u^i \partial_i u_l - \partial_i (\varrho \sigma_l^i) \quad (3.284)$$

$$\varrho D_t^{(v)} n = -\partial_l (\varrho n u^l) \quad (3.285)$$

$$\varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa = \varrho n l^i b^\kappa \quad (3.286)$$

$$\begin{aligned} \varrho n m_0 D_t^{(v)} (u \mathbf{q}^2) + \varrho \mathbf{q}^2 \eta u &= -\varrho n m_0 u^i q^l \partial_i (u_l) + n m_0 q^l \partial_i (\varrho \sigma_l^i) - \varrho M q^l \partial_l p_D \\ &\quad + \varrho M n q^l \varepsilon_{lik} (\varrho \sigma_p^i b^p) l^k - M \partial_k (h_{lp} \varrho n l^k b^p q^l) \end{aligned} \quad (3.287)$$

Der Grenzfall $m_0 \rightarrow 0$

Die Referenzmasse m_0 wurde eingeführt, um der Trägheit der Versetzungen Rechnung zu tragen, denn bei dem Gleiten einer Versetzung wird Masse verlagert. Der Effekt dieser Masse wird aber als klein angenommen. Der Grenzfall $m_0 \rightarrow 0$ wird hier unter Beibehaltung der oben eingeführten Reibung betrachtet. Der mit den Euler–Lagrange–Gleichungen kompatible Fall ist über $\eta := 0$ zu erreichen.

Die Bewegungsgleichungen lauten für $m_0 \rightarrow 0$ und damit $M \rightarrow 1$:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa \quad (3.288)$$

$$\varrho D_t^{(v)} v_l = -\partial_i (\varrho \sigma_l^i) \quad (3.289)$$

$$\varrho D_t^{(v)} n = -\partial_l (\varrho n u^l) \quad (3.290)$$

$$\varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\kappa = \varrho n l^i b^\kappa \quad (3.291)$$

$$\mathbf{q}^2 \eta u = -q^l \partial_l p_D + n q^l \varepsilon_{lik} (\varrho \sigma_p^i b^p) l^k - n l^k \partial_k h \quad (3.292)$$

Dabei wurde

$$h := h_{\mu\nu} q^\mu b^\nu \quad (3.293)$$

gesetzt. Der Versetzungsdruck enthält die Hyperspannungen und wurde beibehalten, obwohl in seiner Definition die Masse m_0 enthalten ist. Da die Hyperspannungen aber unabhängig von m_0 sein müssen, ist davon auszugehen, daß diese Masse über die Energiedefinition aus dem Druckterm herausfällt. Da m_0 (oder allgemein m_D) aus der spezifischen Energie in Gl.(3.245) aus rein rechen-technischen Gründen herausgezogen wurde, wird die spezifische Versetzungsenergie W_{Vers} die Masse m_D nicht enthalten.

Die Gleichungen sind nun recht übersichtlich:

Gl.(3.289) ist die klassische Impulsbilanz, die die Bewegung des elastischen Mediums beschreibt. Allerdings ist sie an die Versetzungen über die Abhängigkeit $\underline{\sigma} = \underline{\sigma}(A_i^c)$ gekoppelt, und zwar einmal über die statische Beziehung der Fundamentalgleichung (3.291), zum anderen über die kinematische Bindung der Cosserat-Vektoren an die Versetzungsgeschwindigkeit (3.288).

Die Erhaltung der Versetzungszahl (3.290) und die Kräftebilanz für die Versetzungs-klasse (3.292) komplettieren das Gleichungssystem.

Über den Reibungsterm erhält man nun eine direkte Beziehung zwischen Kräften und Versetzungsbewegung. Für große η wird damit $u \rightarrow 0$ gehen, was einem phänome-nologischen *Pinning* entspricht. (Hier kann das *Peierlspotential* für den Fall modelliert werden, daß die treibenden Kräfte auf die Versetzungen zu schwach sind, als sie über diese Potentialbarriere hinweg ziehen zu können.)

Ohne diesen Reibungsterm erhält man eine Gleichung, in der nur noch der Verset-zungsdruck, die Peach-Köhler-Kraft und der mit zwei Klassenvektoren überschobene (3.293) Lagrangemultiplikator $h_{\mu\nu}$ vorkommen:

$$-q^l \partial_l p_D + n q^l \varepsilon_{lik} (\varrho \sigma_p^i b^p) l^k - n l^k \partial_k h = 0. \quad (3.294)$$

In dieser Gleichung müssen sich alle Kräfte aufheben, die Größe $h = h_{\mu\nu} q^\mu b^\nu$ sorgt also für die notwendigen Reaktionskräfte, falls sich Versetzungsdruck und Peach-Köhler-Term nicht kompensieren.

Der in Gleitrichtung projizierte Gradient des Versetzungsdrucks in dieser Gleichung ist eigentlich die Verallgemeinerung der Peach-Köhler-Kraft auf einen Term, der den Momentenspannungstensor neben den Kraftspannungen enthält, nur daß die Mo-mentenspannungen aufgrund der einfachen Symmetrie durch den Druckgradienten repräsentiert werden können.

3.7 Die Nyesche Strukturkrümmung

Das Gleichungssystem (3.283) – (3.287) wird nun linearisiert²⁶. Dazu wird ein geeig-ner Referenzzustand aus der Lösung des stationären Gleichungssystems betrachtet.

Als Modellsystem wird hier die sogenannte **Nyesche Strukturkrümmung** betrach-tet. Diese zeichnet sich dadurch aus, daß sie keine elastischen Verzerrungen trotz einer Krümmung des Kristalls aufweist. Dies wird durch eine entsprechende Versetzungs-verteilung von Stufenversetzungen möglich, wie in Bild 3.15 skizziert wird. Weiterhin

²⁶Da der Trägheitsterm $D_t^{(v)} u$ der Versetzungen in diesem Abschnitt mit berücksichtigt werden soll, wird hier das volle Gleichungssystem ohne den Grenzübergang $m_0 \rightarrow 0$ betrachtet.

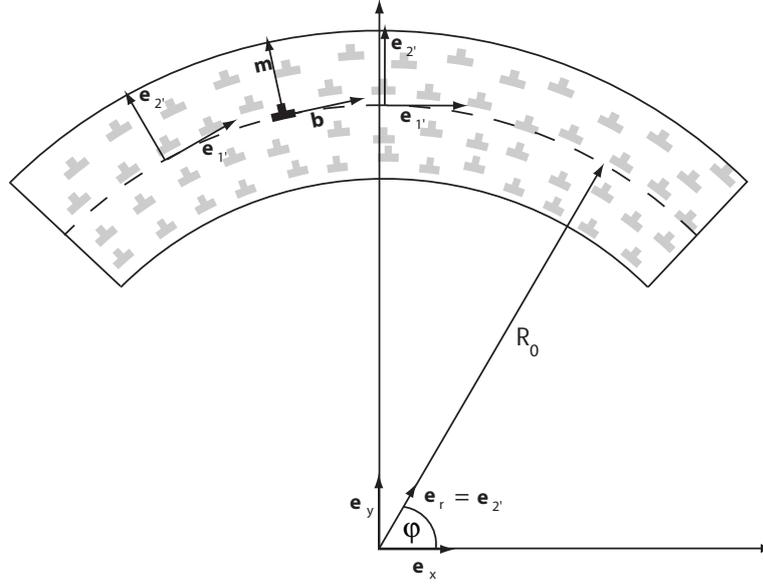


Abbildung 3.15: Skizze der Nyeschen Strukturkrümmung.

wird hier ein in Linienrichtung homogener Kristall angenommen, sodaß das Gleichungssystem (3.264) – (3.268) auf zwei Dimensionen reduziert werden kann.

Beachtet werden muß auch, daß die Länge des Linienvektors im Gittersystem a_0 ist. Diese Größe muß an allen Stellen eingehen, in denen der Linienvektor eingesetzt wurde.

Mit diesen Überlegungen wird das Gleichungssystem (3.264) – (3.268) nach Reduktion auf zwei Dimensionen:

$$\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa = \varrho_0 a_0 n u \overset{(a)}{m}_i b^\kappa \quad (3.295)$$

$$\varrho M D_t^{(v)} v_l = -\varrho n m_0 u^i \partial_i (v_l + u_l) - \varrho n m_0 D_t^{(v)} u_l - \partial_i (\varrho \sigma_l^i) \quad (3.296)$$

$$\varrho D_t^{(v)} n = -\partial_l (\varrho n u^l) \quad (3.297)$$

$$\partial_2 A_1^\kappa - \partial_1 A_2^\kappa = \varrho n a_0 b^\kappa \quad (3.298)$$

$$\begin{aligned} \varrho D_t^{(v)} (u \mathbf{q}^2) + \varrho \eta u \mathbf{q}^2 &= -\varrho u q^i q^l \partial_i (u_l) + q^l \partial_i (\varrho \sigma_l^i) - \varrho \frac{M}{n m_0} q^l \partial_l p_D \\ &\quad - \varrho \frac{M}{n m_0} n a_0 (q^1 \varrho \sigma_p^{.2} - q^2 \varrho \sigma_p^{.1}) b^p \end{aligned} \quad (3.299)$$

Der Referenzzustand der Nyeschen Strukturkrümmung

In Bild 3.15 erkennt man die Grundzüge der Nyeschen Struktur: Die räumliche Versetzungsanordnung einer Klasse von Stufenversetzungen führt zu der zwei-dimensionalen Krümmung des Kristalls im Fall fehlender äußerer Kräfte. Die Cosserat-Vektoren

sind lokal orthonormiert, was zu dem Verschwinden der lokalen elastischen Verzerrung führt.

Es wird ein polares Koordinatensystem eingeführt, das orthonormiert ist und damit das anholonome Gitterbasissystem repräsentiert. Die Koordinaten sind $1'$ und $2'$, wobei $1'$ eine Winkelkoordinate ist, während $2'$ radial vom Ursprung ausgeht. Dabei gelten für die Ableitungen nach diesen Variablen:

$$\partial_{1'} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.300)$$

$$\partial_{2'} = \frac{\partial}{\partial r}. \quad (3.301)$$

Diese Koordinaten sind dadurch ausgezeichnet, daß die Klassenvektoren Konstanten in diesen sind. So ist der Skizze 3.15 zu entnehmen, daß der Burgersvektor immer in Richtung der $1'$ -Koordinate verläuft, während die Gleitebene (die genauer betrachtet nur im Gittersystem eine echte Ebene darstellt) durch einen Normalenvektor parallel zur $2'$ -Koordinate gegeben ist.

Die Versetzungsklasse ist also durch folgende Klassenvektoren definiert:

$$\mathbf{l} := -a_0 \mathbf{e}_{3'} = -a_0 \mathbf{e}_z \quad (3.302)$$

$$\mathbf{m} := a_0 \mathbf{e}_{2'} \quad (3.303)$$

$$\mathbf{b} := b_0 \mathbf{e}_{1'} \quad (3.304)$$

$$\Rightarrow \mathbf{q} = a_0 \mathbf{e}_{1'}. \quad (3.305)$$

Mit den eingezeichneten Variablen φ und r beschreiben folgende Matrizen die zwei-dimensionalen Cosserat-Transformationen und ihre reziproken Gegenstücke im Nye-schen Referenzzustand:

$${}^0 A_{\kappa}^{\cdot i} := \begin{pmatrix} \sin \varphi & -\cos \varphi \\ \cos \varphi & \sin \varphi \end{pmatrix} \quad (3.306)$$

sowie

$${}^0 A_i^{\cdot \kappa} := \begin{pmatrix} \sin \varphi & \cos \varphi \\ -\cos \varphi & \sin \varphi \end{pmatrix}. \quad (3.307)$$

Diese Matrizen erfüllen die Reziprozitätsbedingungen:

$${}^0 A_{\kappa}^{\cdot i} {}^0 A_i^{\cdot \lambda} = \delta_{\kappa}^{\lambda} \quad (3.308)$$

$${}^0 A_j^{\cdot \kappa} {}^0 A_{\kappa}^{\cdot i} = \delta_j^i. \quad (3.309)$$

Außerdem verschwindet der Tensor der elastischen Deformation:

Mit

$$g_{ij} := \delta_{ij} \quad \text{und} \quad a_{\mu\nu} := \delta_{\mu\nu} \quad (3.310)$$

wird

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(A_i^{\cdot\mu} A_j^{\cdot\nu} \delta_{\mu\nu} - \delta_{ij} \right) = 0, \quad (3.311)$$

was man durch Einsetzen zeigen kann. Anschaulich ist dieses Ergebnis klar, weil das Cosserat–Dreibein (bzw. hier Zweibein) in jedem Punkt orthonormiert ist.

Damit kann nun das Referenzsystem der Variablen $A_i^{\cdot\kappa}$, n , u und v angegeben werden. Es wird um ein statisches System entwickelt, die Referenzgeschwindigkeiten verschwinden also:

$$\overset{0}{u} = 0 \quad (3.312)$$

$$\overset{0}{v} = 0 \quad (3.313)$$

$$\overset{0}{n} = N_0 \frac{R_0}{r} \quad (3.314)$$

$$A_i^{\cdot\kappa} = \begin{pmatrix} \sin \varphi & \cos \varphi \\ -\cos \varphi & \sin \varphi \end{pmatrix} \quad (3.315)$$

mit

$$\varphi := \arctan \frac{y}{x}. \quad (3.316)$$

Der oben angegebene Referenzzustand erfüllt nun alle Gleichungen des Gleichungssystems (3.295) - (3.299), denn man erhält nach Einsetzen:

$$\partial_t \overset{0}{A}_i^{\cdot\kappa} = 0 \quad (3.317)$$

$$\partial_i (\varrho \sigma_j^{\cdot i}) = 0 \quad (3.318)$$

$$\varrho_0 \partial_t \left(N_0 \frac{R_0}{r} \right) = 0 \quad (3.319)$$

$$\partial_2 A_1^{1'} - \partial_1 A_2^{1'} - \varrho_0 N_0 \frac{R_0}{r} a_0 b_0 = 0 \quad (3.320)$$

$$\partial_2 A_1^{2'} - \partial_1 A_2^{2'} = 0 \quad (3.321)$$

$$q^j \partial_i (\varrho \sigma_j^{\cdot i}) - \varrho \frac{M}{N_0 m_0} q^l \frac{\partial p_D}{\partial n} \partial_l \left(N_0 \frac{R_0}{r} \right) - \varrho \frac{M}{N_0 m_0} N_0 \frac{R_0}{r} \sigma_1^{\cdot 2'} a_0 b_0 = 0 \quad (3.322)$$

Gl.(3.318) ist erfüllt, da für die Nyesche Strukturkrümmung $\sigma_j^{\cdot i} = 0$ gilt.

Gl.(3.317) und (3.319) werden durch die Stationarität des Referenzzustandes erfüllt.

Gl.(3.320) und (3.321) werden durch die Ansätze (3.306) und (3.307) erfüllt. Dabei ist zu berücksichtigen, daß wegen $\varphi = \arctan \frac{y}{x}$

$$\partial_1 \varphi = \partial_x \varphi = -\frac{y}{r^2} \quad (3.323)$$

$$\partial_2 \varphi = \partial_y \varphi = \frac{x}{r^2} \quad (3.324)$$

ist. Damit erhält man aus

$$\partial_2 A_1^{1'} - \partial_1 A_2^{1'} = \frac{1}{r} \quad (3.325)$$

den Zusammenhang zwischen Referenz-Versetzungsdichte und Krümmungsradius:

$$R_0 := \frac{1}{\varrho_0 N_0 a_0 b_0}. \quad (3.326)$$

Die Referenzdichte ist aus der Determinante des Referenzzustandes zu entnehmen:

$$\varrho^0 = \varrho_0 \text{Det} | A_i^{\kappa} | = \varrho_0. \quad (3.327)$$

In Gl.(3.322) verschwinden schließlich der erste und letzte Term wegen $\sigma_j^i = 0$, der zweite wegen

$$\begin{aligned} q^l \partial_l \frac{1}{r} &= q^\kappa \partial_\kappa \frac{1}{r} = q^{1'} \partial_{1'} \frac{1}{r} \\ &= -a_0 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{1}{r} = 0. \end{aligned} \quad (3.328)$$

Für den Energieansatz wird ein isotropes, elastisches Medium angenommen²⁷:

$$W := \frac{1}{2} \lambda (e_{ij} g^{ij})^2 + \mu e_{ik} e_{jl} g^{ij} g^{kl}. \quad (3.329)$$

Dies führt zu Spannungen als Antwortgrößen nach der Variation, die nun linear mit der elastischen Distorsion zusammenhängen:

$$\varrho \sigma_{ij} = \lambda e_{kk} \delta_{ij} + 2\mu e_{ij}. \quad (3.330)$$

Da die elastischen Deformationen durch (3.307) verschwinden, wird auch

$$\sigma_{ij}^0 = 0, \quad (3.331)$$

wie es für die Nyesche Krümmung sein muß.

Damit sind alle Gleichungen des zweidimensionalen Systems im stationären Fall erfüllt.

²⁷Es ist klar, daß zwei Konstanten für einen Kristall, selbst in einfachster Symmetrie, nicht ausreichen. Um die Gleichungen aber nicht zu überfrachten, wird hier die meist in guter Näherung erfüllte Annahme eines isotropen elastischen Körpers in den Ansatz für die Energie eingebracht, wie dies fast immer in der Literatur geschieht, siehe z.B. *Landau, Lifschitz* (1991).

Linearisierung des Systems

Als Abweichungen vom Referenzzustand werden nun die Größen a_i^κ, v, u, n definiert, in denen konsequent linearisiert wird: Terme quadratischer oder höherer Ordnung werden vernachlässigt.

Es gilt:

$$A_i^\kappa := A_i^{\kappa 0} + a_i^\kappa \quad (3.332)$$

$$v_{ges} := v^0 + v = v \quad (3.333)$$

$$u_{ges} := u^0 + u = u \quad (3.334)$$

$$n_{ges} := n^0 + n \frac{R_0}{r} = (N_0 + n) \frac{R_0}{r}. \quad (3.335)$$

Die Cosserat–Bewegungsgleichung lautet nun, im linearisierten Fall²⁸, wobei bereits die Zerlegung der Klassenvektoren berücksichtigt wurde:

$$\partial a_1^{1'} + v^i \partial_i \frac{y}{r} + \partial_1 v^1 \frac{y}{r} - \partial_1 v^2 \frac{x}{r} = \frac{x}{r} \frac{a_0 u}{r} \quad (3.336)$$

$$\partial a_1^{2'} + v^i \partial_i \frac{x}{r} + \partial_1 v^1 \frac{x}{r} + \partial_1 v^2 \frac{y}{r} = 0 \quad (3.337)$$

$$\partial a_2^{2'} + v^i \partial_i \frac{y}{r} + \partial_2 v^1 \frac{x}{r} + \partial_2 v^2 \frac{y}{r} = 0 \quad (3.338)$$

$$\partial a_2^{1'} - v^i \partial_i \frac{x}{r} + \partial_2 v^1 \frac{y}{r} - \partial_2 v^2 \frac{x}{r} = \frac{y}{r} \frac{a_0 u}{r}. \quad (3.339)$$

Der linearisierte elastische Deformationstensor lautet:

$$\begin{aligned} e_{ij} &= \frac{1}{2} \left(A_i^{\kappa 0} A_j^{\lambda 0} a_{\kappa\lambda} - g_{ij} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(A_i^{\kappa 0} a_j^\lambda a_{\kappa\lambda} + a_i^\kappa A_j^{\lambda 0} a_{\kappa\lambda} \right). \end{aligned} \quad (3.340)$$

Mit $a_{\kappa\lambda} = \delta_{\kappa\lambda}$ folgen dann seine Komponenten:

$$e_{11} = \frac{y}{r} a_1^{1'} + \frac{x}{r} a_1^{2'} \quad (3.341)$$

$$e_{22} = -\frac{x}{r} a_2^{1'} + \frac{y}{r} a_2^{2'} \quad (3.342)$$

$$e_{12} = e_{21} = \frac{1}{2} \left(\frac{y}{r} a_2^{1'} + \frac{y}{r} a_2^{1'} - \frac{x}{r} a_1^{1'} + \frac{x}{r} a_2^{2'} \right). \quad (3.343)$$

²⁸Diese Gleichungen werden für den zweiten Lösungsansatz, die homogene plastische Deformation, gebraucht, daher werden sie hier ausführlich dargestellt. Es wurde bereits $A_i^{\kappa 0}$ eingesetzt, wobei $\sin \varphi = \frac{y}{r}$ und $\cos \varphi = \frac{x}{r}$ zu beachten ist.

Da diese Größen noch von den Koordinaten abhängen, wird das System am Referenzpunkt

$$\begin{aligned} x &= 0 \\ y &= R_0 \end{aligned}$$

betrachtet, an dem

$$r = R_0 \quad \text{und damit} \quad (3.344)$$

$$\overset{0}{n} = N_0 \quad (3.345)$$

ist. Die Linearisierung ist damit nur in einer Umgebung dieses Punktes gültig. Diese Umgebung kann jedoch als hinreichend groß angesehen werden, wenn die Krümmung und damit die Versetzungsdichte als klein angenommen werden.

Somit werden die Komponenten des linearen Deformationstensors:

$$e_{11} = a_1^{1'} \quad (3.346)$$

$$e_{22} = a_2^{2'} \quad (3.347)$$

$$e_{12} = e_{21} = \frac{1}{2} (a_1^{2'} + a_2^{1'}). \quad (3.348)$$

Damit erhält man für die Komponenten des linearisierten Spannungstensors die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \varrho\sigma_{11} &= \lambda (e_{11} + e_{22}) + 2\mu e_{11} \\ &= \lambda (a_1^1 + a_2^2) + 2\mu a_1^1 \end{aligned} \quad (3.349)$$

$$\varrho\sigma_{22} = \lambda (a_1^1 + a_2^2) + 2\mu a_2^2 \quad (3.350)$$

$$\varrho\sigma_{12} = \varrho\sigma_{21} = \frac{1}{2}\mu (a_1^2 + a_2^1). \quad (3.351)$$

Für die lineare Änderung der Massendichte gilt

$$\Delta\varrho = \left. \frac{\partial\varrho}{\partial A_i^\kappa} \right|_{(A_i^\kappa = A_i^0)} \cdot a_i^\kappa \quad (3.352)$$

$$= \varrho_0 \overset{0}{A} \overset{i}{\kappa} a_i^\kappa \quad (3.353)$$

$$= \varrho_0 a_i^i = \varrho_0 (a_1^1 + a_2^2). \quad (3.354)$$

Bei der Linearisierung um $x = 0$ und $y = R_0$ verschwindet auch der Unterschied der gestrichenen Koordinaten zu den ungestrichenen:

$$a_1^{1'} = a_1^1 \overset{0}{A} \overset{1'}{1} + a_2^2 \overset{0}{A} \overset{1'}{2} \approx a_1^1 =: a_{11} \quad \text{etc.}, \quad (3.355)$$

sowie der Unterschied zwischen Ko- und Kontravarianz.

Einsetzen in (3.295) – (3.299) liefert unter Berücksichtigung der Linearisierung folgendes Gleichungssystem:

$$\partial_t a_{11} + \partial_1 v_1 = 0 \quad (3.356)$$

$$\partial_t a_{12} + \partial_1 v_2 + \frac{v_1}{R_0} = 0 \quad (3.357)$$

$$\partial_t a_{22} + \partial_2 v_2 = 0 \quad (3.358)$$

$$\partial_t a_{21} + \partial_2 v_1 - \frac{v_1}{R_0} - \frac{a_0 u}{R_0} = 0 \quad (3.359)$$

$$I \partial_t v_1 + N_0 m_0 a_0 \partial_t u + (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu}) \partial_1 a_{11} + \tilde{\lambda} \partial_1 a_{22} + \tilde{\mu} \partial_2 (a_{12} + a_{21}) = 0 \quad (3.360)$$

$$I \partial_t v_2 + (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu}) \partial_2 a_{22} + \tilde{\lambda} \partial_2 a_{11} + \tilde{\mu} \partial_1 (a_{12} + a_{21}) = 0 \quad (3.361)$$

$$\partial_t \frac{n}{N_0} + a_0 \partial_1 u = 0 \quad (3.362)$$

$$\begin{aligned} a_0 \partial_t u + a_0 \eta u - (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu}) \partial_1 a_{11} - \tilde{\lambda} \partial_1 a_{22} - \tilde{\mu} \partial_2 (a_{12} + a_{21}) \\ + I c_n^2 \partial_1 \frac{n}{N_0} + \frac{I}{\kappa} \tilde{\mu} (a_{12} + a_{21}) = 0 \end{aligned} \quad (3.363)$$

mit den folgenden Abkürzungen:

$$I := 1 + m_0 N_0 \quad (3.364)$$

$$\tilde{\lambda} := \frac{\lambda}{\varrho} \quad (3.365)$$

$$\tilde{\mu} := \frac{\mu}{\varrho} \quad (3.366)$$

$$c_n^2 := \frac{1}{m_0} \frac{\partial p_D}{\partial n} \Big|_{n=N_0} \quad (3.367)$$

$$\kappa := \frac{m_0}{\varrho_0 a_0 b_0}. \quad (3.368)$$

Über die Definition von κ kommt eine weitere Längenskala ins Spiel, die an die Trägheit m_0 der Versetzungen gekoppelt ist. Sei die Masse pro Einheitszelle a_0^3 gleich M_0 , so wird wegen

$$\varrho_0 = \frac{M_0}{a_0^3} \quad (3.369)$$

diese Längenskala zu

$$\kappa = \frac{m_0 a_0^2}{M_0 b_0}. \quad (3.370)$$

Der Burgersvektor sei in diesem System der minimale:

$$b_0 := a_0, \quad (3.371)$$

sodaß κ eine Längenskala ist, die mit dem Gitterabstand a_0 und der Einheitsmasse M_0 über

$$\kappa = a_0 \frac{m_0}{M_0} \quad (3.372)$$

verknüpft ist.

Die Größe c_n hat die Dimension einer Geschwindigkeit und resultiert aus der Definition des Versetzungsdrucks, der die hyper-elastische Selbstwechselwirkung der Versetzungs Klasse beschreibt (als Alternative zu Momentenspannungen). Die Größe c_n , in linearer Näherung eine Konstante, wird sich in den Dispersionsrelationen wiederfinden und eine charakteristische Geschwindigkeit definieren, die aus dem Ansatz für die Versetzungsenergie und damit aus dem Materialgesetz für diese Versetzungs Klasse folgt. Als Alternative kann sie wegen des Zusammenhangs zwischen Versetzungsdichte und Hyperdeformation auch aus dem Materialgesetz für die Hyperspannungen folgen.

Dispersionsrelation

Für das vorliegende lineare Gleichungssystem soll nun die Dispersionsrelation ausgerechnet werden. Dazu werden für alle Felder Ψ Ansätze mit ebenen Wellen

$$\Psi(x, y, t) = \iiint \tilde{\Psi}(k_1, k_2, \omega) e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)} dk_1 dk_2 d\omega \quad (3.373)$$

gemacht. Das entstehende algebraische Gleichungssystem hat nur dann eine nicht-triviale Lösung, wenn die Säkular determinante verschwindet. Daraus ergeben sich die Dispersionsrelationen $\omega(k_1, k_2)$.

Die Säkular determinante ist: (3.374)

$$\begin{vmatrix} -i\omega & 0 & 0 & 0 & ik_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\omega & 0 & 0 & \frac{1}{R_0} & ik_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\omega & 0 & ik_2 - \frac{1}{R_0} & 0 & 0 & -\frac{1}{R_0} \\ 0 & 0 & 0 & -i\omega & 0 & ik_2 & 0 & 0 \\ (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu})k_1 & \tilde{\mu}k_2 & \tilde{\mu}k_2 & \tilde{\lambda}k_1 & -I\omega & 0 & 0 & -\omega m_0 N_0 \\ \tilde{\lambda}k_2 & \tilde{\mu}k_1 & \tilde{\mu}k_1 & (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu})k_2 & 0 & -I\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\omega & ik_1 \\ (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu})k_1 & \tilde{\mu}(k_2 + i\frac{I}{\kappa}) & \tilde{\mu}(k_2 + i\frac{I}{\kappa}) & \tilde{\lambda}k_1 & 0 & 0 & -Ic_n^2 k_1 & \omega + i\eta \end{vmatrix}$$

Die entstehende Gleichung ist eine Polynom achter Ordnung in ω , für dessen Lösung i.a. nur numerische Ergebnisse gefunden werden können. Hier soll der Grenzfall analytisch betrachtet werden, der sich für kleine Versetzungsdichten ergibt:

Wenn eine kleine Referenz-Versetzungsdichte N_0 angenommen wird, so folgt, daß wegen Gl.(3.326) auch der Term

$$\frac{1}{R_0} = \varrho_0 a_0 b_0 N_0 \quad (3.375)$$

sehr klein wird, zumal hier N_0 noch mit den mikroskopischen Längenskalen a_0 und b_0 multipliziert wird.

Es soll ebenfalls der Term $\omega m_0 N_0$ in der rechten Spalte vernachlässigt werden. Dazu muß die Annahme gemacht werden, daß die Referenzmasse m_0 verschwindet oder zumindest vernachlässigbar klein ist.

Zwar wird dann $(\kappa)^{-1}$ groß, da diese Größe invers zu m_0 ist. Es zeigt sich aber, daß diese Größe in die Dispersionsrelation nicht mehr eingeht.

Die entstehende Determinante (3.376)

$$\begin{vmatrix} -i\omega & 0 & 0 & 0 & ik_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\omega & 0 & 0 & 0 & ik_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\omega & 0 & ik_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\omega & 0 & ik_2 & 0 & 0 \\ (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu})k_1 & \tilde{\mu}k_2 & \tilde{\mu}k_2 & \tilde{\lambda}k_1 & -I\omega & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\lambda}k_2 & \tilde{\mu}k_1 & \tilde{\mu}k_1 & (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu})k_2 & 0 & -I\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\omega & ik_1 \\ (\tilde{\lambda} + 2\tilde{\mu})k_1 & \tilde{\mu}(k_2 + i\frac{1}{\kappa}) & \tilde{\mu}(k_2 + i\frac{1}{\kappa}) & \tilde{\lambda}k_1 & 0 & 0 & -Ic_n^2 k_1 & \omega + i\eta \end{vmatrix}$$

wird null gesetzt und ist analytisch lösbar.

Unter Berücksichtigung von

$$k^2 := \sqrt{(k_1)^2 + (k_2)^2} \quad (3.377)$$

erhält man folgende acht Zweige der Dispersionsrelation:

$$\omega_{1,2} = 0, \quad (3.378)$$

$$\omega_{3,4} = \pm \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{I\rho_0}} k = \pm \frac{1}{\sqrt{I}} c_L k =: \pm c_L^{(n)} k, \quad (3.379)$$

$$\omega_{5,6} = \pm \sqrt{\frac{\mu}{I\rho_0}} k = \pm \frac{1}{\sqrt{I}} c_T k =: \pm c_T^{(n)} k, \quad (3.380)$$

$$\omega_{7,8} = -i\frac{\eta}{2} \pm \sqrt{c_n^2 k_1^2 - \frac{\eta^2}{4}}. \quad (3.381)$$

Die ersten beiden Lösungen sind statisch. Die zweite Gruppe repräsentiert, wie zu erwarten, die elastischen Longitudinalwellen mit der Schallgeschwindigkeit c_L , die dritte entsprechend Transversalwellen, also Scherwellen mit der Schallgeschwindigkeit c_T , die mit dem elastischen Schermodul μ verknüpft sind.

Die Schallgeschwindigkeiten sind mit dem Korrekturfaktor $\frac{1}{\sqrt{I}}$ versehen, der den Einfluß der Versetzungen auf die elastischen Wellen beschreibt. Allerdings wird bei kleinen $m_0 N_0$ diese Korrektur klein sein, sodaß hier in linearer Näherung folgende Änderungen der Schallgeschwindigkeiten auftreten:

$$c_L^{(n)} \approx c_L \left(1 - \frac{1}{2} m_0 N_0 \right) \quad (3.382)$$

$$c_T^{(n)} \approx c_T \left(1 - \frac{1}{2} m_0 N_0 \right). \quad (3.383)$$

Die letzte Gruppe von Frequenzen hängt hingegen mit der Versetzungsbewegung zusammen und enthält die Dämpfungskonstante der Versetzungen sowie eine Richtungsabhängigkeit. Diese beiden Zweige der Dispersionsrelation sind nur für Wellenvektoren in x -Richtung relevant. Dies ist verständlich, da nur in dieser Richtung eine Bewegung der Versetzungen möglich ist. Für kleine Dämpfungen erhält man Wellen mit der freien Geschwindigkeit

$$v_n = c_n \quad (3.384)$$

wobei sich c_n aus dem Versetzungsdruck (3.247) gemäß Gl.(3.367) ergibt.

Für große Dämpfungen wird ein schneller exponentieller Abfall mit $e^{-\eta t}$ erkennbar, was Energiedissipation aufgrund von Versetzungsbewegung beschreibt: Versetzungsbewegungen werden in kurzen Zeiten $\tau = \frac{1}{\eta}$ abklingen.

Es ist noch anzumerken, daß der Ansatz ebener Wellen nur für genügend kleine Wellenlängen gilt, da ein Referenzpunkt im Raum bei der Linearisierung betrachtet wurde. Wenn die Wellenlänge der ebenen Wellen in die Größenordnung der Krümmung kommt, wird das Ergebnis nicht mehr korrekt sein. Da aber von kleinen Krümmungen und entsprechend von großen Krümmungsradien ausgegangen wurde, wird die Dispersionsrelation in einem großen Wellenlängen- und Frequenzbereich gültig sein.

3.8 Homogene plastische Deformation

Eine sehr einfache Lösung zeigt sehr deutlich, daß Versetzungsbewegung zu einer plastischen Deformation führt. Dabei bleibt das Kristallgitter im idealen Zustand, es gibt aber dennoch eine Strömungsgeschwindigkeit $v \neq 0$. Im abgeschlossenen System werden ohne äußere Kräfte keine konstanten, von null verschiedenen stationären Strömungsgeschwindigkeiten möglich sein, da mit der Versetzungsbewegung immer eine Dissipation verbunden ist. Hier soll jedoch der Fall frei beweglicher Versetzungen, d.h. $\eta \rightarrow 0$ betrachtet werden.

Der folgende Ansatz löst dann das linearisierte Gleichungssystem:

$$a_i^\kappa := 0 \quad (3.385)$$

$$n := 0 \quad (3.386)$$

$$\mathbf{v} = v^1 \mathbf{e}_{1'} := r \cdot f(r) \mathbf{e}_{1'}. \quad (3.387)$$

Die Versetzungsdichte bleibt in diesem Beispiel also die des Referenzzustands. Durch den Geschwindigkeitsansatz und die konstant bleibenden Cosserat-Vektoren werden die (hier noch *nicht* an einem Referenzpunkt x und y betrachteten) Gleichungen (3.337) und (3.338) erfüllt. Man beachte, daß

$$v^1 = yf(r), \quad (3.388)$$

$$v^2 = -xf(r). \quad (3.389)$$

Die Gleichungen (3.336) und (3.339) liefern dann nach kurzer Rechnung die Bedingung für die Versetzungsbewegung:

$$\frac{df(r)}{dr} = \frac{a_0 u(r)}{r^2}. \quad (3.390)$$

Alle anderen Gleichungen des linearisierten Systems werden ebenfalls erfüllt, weil der Zustand weiterhin spannungsfrei ($\sigma_j^i = 0$) ist und die Versetzungsdichte zeitlich konstant bleibt.

Gl.(3.390) bedeutet, daß eine reine starre Drehung des gekrümmten Kristalls um den Ursprung, die mit

$$v = c \cdot r \quad \text{also} \quad f = c = \text{const.} \quad (3.391)$$

verknüpft ist, keine Versetzungsbewegung zur Folge hat.

Hingegen wird beispielsweise für $f(r) = \frac{v_0}{R_0^2} r$, wenn sich also äußere Schichten der Krümmungsstruktur schneller bewegen als innere (und damit eine Scherung des Materials stattfindet):

$$u = \frac{v_0}{a_0 R_0^2} r^2. \quad (3.392)$$

Dies bedeutet, daß die Versetzungen gleiten und sich das Material *plastisch* deformiert, da ein Geschwindigkeitsgradient auftritt, obwohl die Cosserat-Vektoren *konstant* bleiben und die elastischen Spannungen weiterhin verschwinden.

Im Bereich, wo die Versetzungsdichte gerade N_0 ist, also für $r = R_0$, gilt dann:

$$u = \frac{v_0}{a_0}. \quad (3.393)$$

Der Schergradient ist (im Referenzpunkt $x = 0$, $y = R_0$):

$$D := \partial_y v = 2 \frac{v_0}{R_0} \quad (3.394)$$

und damit

$$D = 2a_0 u \varrho_0 N_0 a_0 b_0. \quad (3.395)$$

Mit $b_0 = a_0$ und $\varrho = \frac{M_0}{a_0^3}$ folgt:

$$D = 2u M_0 N_0, \quad (3.396)$$

wobei $M_0 N_0$ aufgrund der Definition von N_0 als *spezifische* Versetzungsdichte gerade die Zahl der Versetzungen ist. Damit ist der Schergradient proportional zu Versetzungszahl und -geschwindigkeit.

Kapitel 4

Dissipation im Lagrangeformalismus

Die bisher aufgebaute Theorie der Versetzungsdynamik im Lagrangeformalismus muß um einen entscheidenden Faktor erweitert werden: Die Dissipation. Wenn Versetzungen gleiten, so geschieht dies unter Dissipation von mechanischer Energie, was letztendlich zu einer Erhöhung der Temperatur des Kristalls führt, wenn abgeschlossene Systeme betrachtet werden.

Zwar wurde im letzten Abschnitt ein dissipativer Term *nachträglich* in die Gleichungen eingebaut, das Ziel ist jedoch, dissipative Prozesse *direkt* in den Lagrangeformalismus zu integrieren und sie damit im Rahmen des Hamiltonschen Variationsprinzips zu beschreiben.

Dazu werden zunächst die von Anthony entwickelten Grundlagen der Thermodynamik irreversibler Prozesse (**TIP**) skizziert. Anschließend wird ein Modellsystem zweier sich durchdringender Flüssigkeiten betrachtet, die dissipativen (Reibungs-)Kräften unterworfen sind. Dieses Modell kann dann mit kleinen Änderungen in die Lagrangeformaldehyde der plastischen Deformation (3.249) integriert werden, da dort ebenfalls ein Mehrflüssigkeitsmodell betrachtet wird, nämlich die um die Cosserat-Vektoren erweiterte Flüssigkeit des Hintergrundmediums und die (ebenfalls durch ideale Flüssigkeiten modellierte) Subkontinua der Versetzungsklassen.

Zum Schluß wird das Modell um einen von Systemgrößen abhängigen Reibungskoeffizienten erweitert, um eine phänomenologische Beschreibung der Fließgrenze zu ermöglichen.

4.1 Thermodynamik irreversibler Prozesse im Lagrangeformalismus

An dieser Stelle wird der Ansatz von Anthony (1990) skizziert, die **TIP** in den Lagrangeformalismus zu integrieren. Dabei werden hier nur die zentralen Gedanken am Beispiel der Fourierschen Wärmeleitungsgleichung wiedergegeben, der interessierte Leser möge sich an die Literaturangaben halten. Das Konzept von Anthony enthält neben der Beschreibung der Wärmeleitung sowie chemischer Reaktionen auch das sog.

Entropiekonzept, welches mit der Darstellung der Temperatur (oder auch Konzentrationen von Stoffen in Systemen mit Diffusion) durch komplexe Felder verknüpft ist. Es erlaubt einen neuen Zugang zu der Zustandsgröße Entropie über Stabilitätsbetrachtungen.

Das Konzept von Anthony

Die zentrale Idee, die Anthony im Zusammenhang mit der Wärmeleitung vorstellt, ist die Benutzung komplexer Felder. Man stellt fest, daß die *Fouriersche Wärmeleitungsgleichung*¹ bei angenommener konstanter spezifischer Wärme c_0 und konstantem Wärmeleitungskoeffizienten λ

$$c_0 \partial_t T(\mathbf{x}, t) - \lambda \Delta T(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (4.1)$$

keine Euler–Lagrange–Gleichung einer Lagrangedichte sein kann, da diese Gleichung nicht selbstadjungiert ist und auch keine entsprechende Transformation gefunden werden kann. Allerdings ist diese Gleichung nur im Rahmen des *Prinzips des lokalen Gleichgewichts* (siehe dazu auch *Meixner, Reik (1959)*) gültig: Abweichungen vom lokalen Gleichgewicht werden nicht erfaßt. Es müssen also neue Variablen definiert werden, da die Temperatur allein nicht ausreicht.

Eine Möglichkeit wäre, die Ströme – hier den Wärmestrom j_Q – als unabhängige Größen zu betrachten und so neue Variablen einzuführen, wie dies in der sog. *erweiterten Thermodynamik irreversibler Prozesse (Jou, Casas-Vázquez, Lebon (1993))* geschieht.

Im Rahmen des Lagrangeformalismus geschieht die Erweiterung auf Nicht–Gleichgewichtsprozesse mit Hilfe des komplexwertigen Feldes der **thermischen Erregung** $\Psi(\mathbf{x}, t)$, das zusammen mit seinem konjugiert komplexen Pendant eine Definition der **absoluten Temperatur** möglich macht:

$$T(\mathbf{x}, t) := \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) \geq 0. \quad (4.2)$$

Diese Definition hat zwei entscheidende Vorteile: Erstens ist die so definierte absolute Temperatur immer positiv definit. Zweitens besteht nun die Möglichkeit, die Wärmeleitungsgleichung in den Lagrangeformalismus zu integrieren, da durch die Einführung eines komplexwertigen Feldes als *primäres Feld* über seine Darstellung durch Betrag und Phase

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{T(\mathbf{x}, t)} e^{i\varphi(\mathbf{x}, t)} \quad (4.3)$$

eine zweite Größe $\varphi(\mathbf{x}, t)$ ins Spiel gebracht wird, die aufgrund des Zusammenhangs der komplexen Felder mit der Wärmeleitung die **thermische Phase** genannt wird.

¹In diesem Abschnitt wird bis auf weiteres wieder die indexfreie Notation gewählt.

Nun beschreibt folgende Lagrangedichte² die Wärmeleitung:

$$l = -\frac{1}{\omega} (c_0 T \partial_t (\varphi - \varphi_0(t, T)) - \lambda \nabla T \cdot \nabla (\varphi - \varphi_0(t, T)) + \partial_t G(T)). \quad (4.4)$$

In dieser verkürzten Darstellung werden die Abkürzung

$$\varphi_0(t, T) := -\omega t + \frac{T_0}{2T} \quad (4.5)$$

sowie die Konstanten ω aus Dimensionsgründen und T_0 als Referenztemperatur eingeführt.

Die Euler–Lagrange–Gleichungen ergeben sich nach freier Variation der Felder T und φ zu

$$\delta\varphi : \frac{1}{\omega} (c_0 \partial_t T - \lambda \Delta T) = 0 \quad (4.6)$$

$$\delta T : \frac{1}{\omega} (c_0 \partial_t (\varphi - \varphi_0) + \lambda (\varphi - \varphi_0)) = 0. \quad (4.7)$$

Neben der Wärmeleitungsgleichung erhält man eine zweite Gleichung für die thermische Phase, die nach der Interpretation von Anthony die Möglichkeit eröffnet, Nichtgleichgewichtsprozesse zu beschreiben.

Für die partikuläre Lösung

$$\varphi_p(\mathbf{x}, t) = \varphi_0(t, T(\mathbf{x}, t)) \quad (4.8)$$

stimmt die Noethersche Energiebilanz mit der klassischen Lösung überein (die in diesem Fall wieder die Wärmeleitungsgleichung ist). Dieser Fall wird daher mit dem traditionellen Prinzip des lokalen Gleichgewichts identifiziert, das in dieser Theorie als Sonderfall erhalten bleibt.

Die Größe $G(T)$ spielt in den Euler–Lagrange–Gleichungen keine Rolle, sie wird zur Anpassung der Entropie nach dem Entropiekonzept von Anthony (1988, 1990) an die **TIP** benötigt:

Dort wird die Stabilität von wahren Prozessen mit neuen Observablen verknüpft, die *inhomogenen* Bilanzgleichungen mit positiv definiten Erzeugungstermen genügen, ähnlich wie dies die Entropie in der **TIP** tut. Anthony zeigte, daß es tatsächlich möglich ist, die für die Wärmeleitung bekannte Entropiebilanz als Ergebnis dieses Konzeptes zu erhalten und die Observable Entropie über dieses Konzept zu definieren. Dies geht jedoch nur, wenn die komplexen Felder als *primäre* Felder und die Temperatur als *abgeleitete* Größe aufgefaßt werden (vgl. Gl.(4.2)), was analog zur Quantenmechanik ist, in der die Wahrscheinlichkeitsdichte ebenfalls eine von den primären Größen Ψ und Ψ^* abgeleitete Größe ist (siehe dazu auch Schargott (2001)).

²Für die Euler–Lagrange–Gleichungen und die durch sie beschriebene Dynamik des Systems ist es ohne Belang, ob man die Darstellung der Lagrangedichte mit komplexwertigen Feldern $l = l(\Psi, \Psi^*, \partial_t \Psi, \partial_t \Psi^*, \nabla \Psi, \nabla \Psi^*)$ oder mittels Betrag und Phase $l = l(T, \varphi, \partial_t T, \partial_t \varphi, \nabla T, \nabla \varphi)$ wählt. Hier wird die Betrag–Phase–Darstellung gewählt, weil sie anschaulicher ist und die Temperatur als Variable auftritt. Die komplexwertigen Felder der thermischen Erregung sind allerdings weiterhin die primären Felder.

Das Entropiekonzept setzt eine konsequente Darstellung aller Observablen durch komplexwertige Felder voraus. Eine solche Darstellung wurde aber in dieser Arbeit nicht betrachtet, daher wird an dieser Stelle nicht ausführlicher auf diesen Themenkomplex eingegangen.

4.2 Dissipative Prozesse im Lagrangeformalismus

Die von Anthony vorgeschlagene Lagrangedichte (4.4) wird nun als Basis genommen, um thermodynamische Aspekte in die Beschreibung der Versetzungsbewegung einzubringen. Dazu wird auf die Wärmeleitung verzichtet, um den Formelapparat nicht zu überfrachten. Es geht hier zunächst ausschließlich um den Aspekt der Dissipation, also Transfer der Energie von *mechanischen* auf *thermische* Freiheitsgrade. Da auf eine Anpassung an das Entropiekonzept verzichtet wird, kann die Funktion $G(T)$ vernachlässigt werden. Auf die Euler–Lagrange–Gleichung hat sie keinen Einfluß. Allerdings wird die Konstanz der spezifischen Wärme zunächst aufgegeben. Die Referenztemperatur in Gl.(4.5) wird formal zu

$$T_0 = 0 \tag{4.9}$$

gesetzt, was auf die Observablengleichungen keinen Einfluß hat und die Lösung des lokalen Gleichgewichts zu

$$\varphi_0 = -\omega t \tag{4.10}$$

verkürzt.

4.2.1 Aufbau der Lagrangedichte

Wenn das Temperaturfeld $T(\mathbf{x}, t)$ in einem Hintergrundmedium betrachtet wird, das sich mit einer Geschwindigkeit \mathbf{v} bewegt, müssen substantielle statt partielle zeitliche Ableitungen gewählt werden. Außerdem muß für das Hintergrundmedium eine Bewegungsgleichung aus der Lagrangedichte folgen. Dazu wird als Medium wieder die ideale Flüssigkeit gewählt, die bereits ausführlich diskutiert wurde.

Als Energie kann zum Beispiel eine Summe $U(\varrho) + cT$ angesetzt werden. Dies ist aber nicht der allgemeine Fall. Es ist besser, eine Zustandsfunktion $U = U(\varrho, S)$ zu wählen. Allerdings ist hier die Temperatur die unabhängige Variable, sodaß besser $U = U(\varrho, T)$ gewählt wird³.

U ist hier die spezifische innere Energie. Als Antwortgrößen sind Druck p und die spezifische Entropie s definiert über die freie Energie

$$dF = -sdT + \frac{p}{\varrho^2}d\varrho, \tag{4.11}$$

³Es ist aber zu beachten, daß diese Funktion keine Potentialfunktion mehr ist. Dazu wäre die freie Energie $F(\varrho, T) := U - Ts$ als Funktion heranzuziehen.

sodaß folgt:

$$s := -\frac{\partial F}{\partial T} \quad (4.12)$$

$$p := \varrho^2 \frac{\partial F}{\partial \varrho}. \quad (4.13)$$

Über den Zusammenhang

$$U(\varrho, T) = F(\varrho, T) + Ts(\varrho, T) \quad (4.14)$$

erhält man für die (später auch bei der Variation auftretenden) partiellen Ableitungen der Energiedichte

$$\frac{\partial U}{\partial \varrho} = \frac{p}{\varrho^2} + T \frac{\partial s}{\partial \varrho} \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial U}{\partial T} = T \frac{\partial s}{\partial T} =: c(\varrho, T), \quad (4.16)$$

wobei aus der letzten Gleichung die spezifische Wärmekapazität c definiert wird.

Durch den Energieansatz $U = U(\varrho, T)$ ist nun eine reversible Kopplung zwischen thermischen und mechanischen Freiheitsgraden möglich. Diese äußert sich z.B. durch Ausdehnung des Mediums bei Erwärmung und wird durch den **Ausdehnungsmodul**

$$N(\varrho, s) := \frac{\partial T}{\partial \varrho} \quad (4.17)$$

beschrieben. Im Variablensatz (ϱ, T) wird daraus mit den üblichen funktionellen Zusammenhängen der Thermodynamik der Ausdehnungsmodul

$$N(\varrho, T) := -\frac{\frac{\partial s(\varrho, T)}{\partial \varrho}}{\frac{\partial s(\varrho, T)}{\partial T}} = -\frac{T}{c} \frac{\partial s(\varrho, T)}{\partial \varrho}. \quad (4.18)$$

Es muß gewährleistet sein, daß die Entropie sich substantiell nicht ändert, da zunächst keine dissipativen Prozesse berücksichtigt werden:

$$\varrho D_t^{(v)} s(\varrho, T) = \varrho \frac{\partial s}{\partial \varrho} D_t^{(v)} \varrho + \varrho \frac{\partial s(\varrho, T)}{\partial T} D_t^{(v)} T = 0. \quad (4.19)$$

Für die Temperatur folgt, daß sie der Gleichung

$$D_t^{(v)} T - N(\varrho, T) D_t^{(v)} \varrho = 0 \quad \text{oder} \quad D_t^{(v)} T + \varrho N \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (4.20)$$

genügen muß⁴. Änderungen der Temperatur sind also nur durch adiabatische Kompression oder Expansion über die thermo-mechanische Kopplung möglich.

⁴Im zweiten Ausdruck wurde die Kontinuitätsgleichung des Hintergrundmediums benutzt.

Berücksichtigt man diesen Zusammenhang, so enthält folgender Ansatz für eine Lagrangedichte der idealen Flüssigkeit die thermodynamischen Freiheitsgrade:

$$l = -\varrho \left(D_t^{(v)} \Phi + \alpha D_t^{(v)} \beta + \frac{c_0}{\omega} T D_t^{(v)} \varphi - \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + U(\varrho, T) + \frac{c_0}{\omega} \varphi N(\varrho, T) D_t^{(v)} \varrho \right) \quad (4.21)$$

mit den konstanten Referenzgrößen

$$c_0 = \text{const.} \quad (4.22)$$

$$\omega = \text{const.} \quad (4.23)$$

Die Variation nach der thermischen Phase führt nun zu der geforderten Gleichung für die Temperatur:

$$\varrho \left(\frac{c_0}{\omega} D_t^{(v)} T - \frac{c_0}{\omega} N(\varrho, T) D_t^{(v)} \varrho \right) = 0. \quad (4.24)$$

Variation nach der Temperatur führt zu folgender Euler–Lagrange–Gleichung für die thermische Phase:

$$\frac{c_0}{\omega} \varrho D_t^{(v)} \varphi + \varrho c(\varrho, T) + \frac{c_0}{\omega} \varrho \varphi \frac{\partial N(\varrho, T)}{\partial T} D_t^{(v)} \varrho = 0. \quad (4.25)$$

Wegen der Ankopplung der thermischen Freiheitsgrade an den materiellen Träger geht der einfache Zusammenhang (4.10) für das lokale Gleichgewicht verloren. Wenn die innere Energie jedoch in

$$U(\varrho, T) = c_0 T + U_{el}(\varrho) \quad (4.26)$$

zerfällt, so wird Gl.(4.25) wegen $N = 0$ zu

$$\begin{aligned} \frac{c_0}{\omega} \varrho D_t^{(v)} \varphi + \varrho c_0 &= 0 \\ \Rightarrow D_t^{(v)} \varphi + \omega &= 0, \end{aligned} \quad (4.27)$$

was wieder

$$\varphi_0 = -\omega t \quad (4.28)$$

als Lösung im lokalen Gleichgewicht nach sich zieht.

Die restlichen Euler–Lagrange–Gleichungen werden hier nicht explizit angegeben, sondern weiter unten im Zusammenhang mit dem Zwei–Flüssigkeits–Modell. Es ist aber anschaulich klar, daß der Einbau der thermischen Freiheitsgrade einen Einfluß auf die Impulsbilanz der Flüssigkeit haben wird. Erwähnenswert ist außerdem, daß die Kontinuitätsgleichung des Hintergrundmediums erhalten bleibt, sodaß die Massenerhaltung nicht verletzt wird.

4.2.2 Einbau der Dissipationsrate

Die Integration dissipativer Effekte in den Lagrangeformalismus geschieht in dem hier aufgebauten Modell über folgenden Ansatz:

In der Temperaturgleichung wird eine positiv definite Dissipationsrate vorgegeben, die zu einer Erhöhung der thermischen Energie führt. Die Dissipation wird also über *energetische* Betrachtungen in das Modell eingebaut. Dieser Ansatz unterscheidet sich von der Methode, Reibungs- und damit dissipative Phänomene in bestehende mechanische Modelle zu integrieren, indem eine *Reibungskraft* vorgegeben wird, die dann zu einer Dissipationsrate in der Wärmebilanz führt. Hier wird

$$\varrho T D_t^{(v)} s = \varrho \sigma \quad \Rightarrow \quad \varrho c \left(D_t^{(v)} T - N D_t^{(v)} \varrho \right) = \varrho \sigma \quad (4.29)$$

vorgegeben. Die Vorgabe der Dissipationsrate σ in der Lagrangedichte hat natürlich einen Einfluß auf die Euler–Lagrange–Gleichungen. Es wird nun gezeigt, daß durch diesen Ansatz eine dissipative Dynamik beschrieben werden kann, die zu Reibungskräften in den Bewegungsgleichungen führen.

Hier wird nur eine rein von der Geschwindigkeit abhängende Reibung beschrieben, die Dissipationsrate lautet also

$$\varrho \sigma_d(\mathbf{v}) \geq 0. \quad (4.30)$$

Explizites Herausziehen der Dichte geschieht wieder, weil alle hier betrachteten dissipativen Prozesse nur stattfinden können, wenn Materie vorhanden ist.

In die Lagrangedichte muß dieser Ansatz so integriert werden, daß die Variation nach der thermischen Phase zu der Temperaturgleichung

$$\varrho c D_t^{(v)} T - \varrho c N D_t^{(v)} \varrho = \varrho \sigma \quad (4.31)$$

führt. Dazu ist die Lagrangedichte um einen Term

$$\varphi \frac{c_0}{c(\varrho, T) \omega} \varrho \sigma \quad (4.32)$$

zu erweitern.

Es werden hier abgeschlossene Systeme betrachtet. Da das Ziel die Modellierung von Reibung zweier Medien untereinander ist, nämlich des Subkontinuums der Versetzungen mit dem Hintergrundmedium, wird nun ein Modellsystem entwickelt, das zwei Flüssigkeiten beschreibt, die sich gegenseitig durchdringen (siehe auch *Schargott* (2001)).

4.2.3 Modell zweier Flüssigkeiten mit Reibung

Es werden zwei Flüssigkeiten beschrieben, wobei jeder Flüssigkeit eine eigene Dichte, Geschwindigkeit, Temperatur und thermische Phase zugeordnet wird. Die einzige

Wechselwirkung sei eine Reibung, die bei nicht-verschwindender Relativgeschwindigkeit der Fluide stattfindet. Sie wird vorgegeben durch die Dissipationsrate

$$f(\varrho_1, \varrho_2) \sigma_d(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = f(\varrho_1, \varrho_2) \sigma_d(|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|) \geq 0, \quad (4.33)$$

die aus Symmetriegründen nur von der Differenzgeschwindigkeit abhängt und positiv semi-definit sein muß. Der Vorfaktor ist hier nicht *eine* Dichte ϱ sondern eine Funktion $f(\varrho_1, \varrho_2)$ der Dichten *beider* Flüssigkeiten.

Außerdem muß berücksichtigt werden, daß sich die dissipierte Energie auf beide Fluide aufteilt.

Die Lagrangedichte wird nun aus zwei Flüssigkeiten mit thermischer Energie gemäß Gl.(4.21) aufgebaut. Die dritte Zeile enthält den — durch die oben gemachten Betrachtungen motivierten — Ansatz für die dissipativen Terme:

$$\begin{aligned}
 l = & -\varrho_1 \left(D_t^{(1)} \Phi_1 + \alpha_1 D_t^{(1)} \beta_1 + \frac{c_0}{\omega_0} T_1 D_t^{(1)} \varphi_1 - \frac{1}{2} \mathbf{v}_1^2 + U_1 + \frac{c_0}{\omega_0} \varphi_1 N_1 D_t^{(1)} \varrho_1 \right) \\
 & -\varrho_2 \left(D_t^{(2)} \Phi_2 + \alpha_2 D_t^{(2)} \beta_2 + \frac{c_0}{\omega_0} T_2 D_t^{(2)} \varphi_2 - \frac{1}{2} \mathbf{v}_2^2 + U_2 + \frac{c_0}{\omega_0} \varphi_2 N_2 D_t^{(2)} \varrho_2 \right) \\
 & - \underbrace{\frac{c_0}{\omega_0} f(\varrho_1, \varrho_2) \left(\frac{\lambda_1}{c_1} \varphi_1 + \frac{\lambda_2}{c_2} \varphi_2 \right)}_{:=\Omega(\varrho_1, \varrho_2, T_1, T_2, \varphi_1, \varphi_2)} \sigma(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)
 \end{aligned} \quad (4.34)$$

Dabei sind c_0 und ω_0 Referenzgrößen und λ_1 und λ_2 mit $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ Konstanten, die die Aufteilung der dissipierten Energie auf die beiden Medien bestimmen, und

$$D_t^{(1)} := \partial_t + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla \quad \text{und} \quad D_t^{(2)} := \partial_t + \mathbf{v}_2 \cdot \nabla \quad (4.35)$$

sind die substantiellen Ableitungen bezüglich der ersten bzw. der zweiten Flüssigkeit.

Die Energien, Ausdehnungsmoduln und spezifischen Wärmekapazitäten sind jeweils Funktionen der Dichte und Temperatur der ihnen zugeordneten Flüssigkeit:

$$U_1 = U_1(\varrho_1, T_1) \quad \text{und} \quad U_2 = U_2(\varrho_2, T_2), \quad (4.36)$$

$$N_1 = N_1(\varrho_1, T_1) \quad \text{und} \quad N_2 = N_2(\varrho_2, T_2), \quad (4.37)$$

$$c_1 = c_1(\varrho_1, T_1) \quad \text{und} \quad c_2 = c_2(\varrho_2, T_2). \quad (4.38)$$

Auf die Beschreibung von Prozessen, die zum Temperatúrausgleich zwischen den beiden Medien führen, speziell die Wärmeleitung, wird hier verzichtet, um die Gleichungen nicht zu überfrachten. Weiterhin beachte man noch die – zur Abkürzung eingeführte – Größe Ω :

$$\Omega := \frac{c_0}{\omega_0} f(\varrho_1, \varrho_2) \left(\frac{\lambda_1}{c_1} \varphi_1 + \frac{\lambda_2}{c_2} \varphi_2 \right). \quad (4.39)$$

Euler–Lagrange–Gleichungen

Die Euler–Lagrange–Gleichungen werden hier nur für das erste Fluid mit dem Index (1) angegeben⁵. Die Gleichungen sind hier der Übersicht wegen bereits etwas umgeformt:

Kontinuitätsgleichung:

$$\delta\Phi_1 : \partial_t \varrho_1 + \nabla \cdot (\varrho_1 \mathbf{v}_1) = 0 \quad (4.40)$$

Bewegungsgleichung der **Clebsch–Potentiale**:

$$\delta\alpha_1 : \varrho_1 D_t^{(1)} \beta_1 = 0 \quad (4.41)$$

$$\delta\beta_1 : \varrho_1 D_t^{(1)} \alpha_1 = 0 \quad (4.42)$$

Implizite Definition der **Geschwindigkeit**:

$$\delta\mathbf{v}_1 : \mathbf{v}_1 = \nabla\Phi_1 + \alpha_1 \nabla\beta_1 + \frac{c_0}{\omega_0} T_1 \nabla\varphi_1 + \frac{c_0}{\omega_0} \varphi_1 N_1 \nabla\varrho_1 + \frac{\Omega}{\varrho_1} \frac{\partial\sigma}{\partial\mathbf{v}_1} \quad (4.43)$$

Temperaturgleichung:

$$\delta\varphi_1 : \frac{c_0}{\omega_0} \varrho_1 D_t^{(1)} T_1 - \frac{c_0}{\omega_0} \varrho_1 N_1 D_t^{(1)} \varrho_1 - \frac{c_0}{\omega_0} f \frac{\lambda_1}{c_1} \sigma = 0 \quad (4.44)$$

Thermische Phase (umgeformt mit $c_1 = \frac{\partial U_1}{\partial T_1}$):

$$\delta T_1 : D_t^{(1)} \varphi_1 + \omega_0 \frac{c_1}{c_0} + \varphi_1 \frac{\partial N_1}{\partial T_1} D_t^{(1)} \varrho_1 + \frac{f}{\varrho_1} \frac{\lambda_1 \varphi_1}{c_1^2} \frac{\partial c_1}{\partial T_1} \sigma = 0 \quad (4.45)$$

Verallgemeinerte Bernoulli–Gleichung:

$$\begin{aligned} \delta\varrho_1 : D_t^{(1)} \Phi_1 - \frac{1}{2} \mathbf{v}_1^2 + \frac{c_0}{\omega_0} T_1 D_t^{(1)} \varphi_1 + U_1 + \varrho_1 \frac{\partial U_1}{\partial \varrho_1} + \frac{c_0}{\omega_0} \varphi_1 N_1 D_t^{(1)} \varrho_1 - \frac{c_0}{\omega_0} \varrho D_t^{(1)} (\varphi_1 N_1) \\ + \frac{c_0}{\omega_0} \varrho_1 \varphi_1 \frac{\partial N_1}{\partial T_1} D_t^{(1)} \varrho_1 + \frac{\partial f}{\partial \varrho_1} \frac{\Omega}{f} \sigma - \frac{c_0}{\omega_0} f \frac{\lambda_1 \varphi_1}{c_1^2} \frac{\partial c_1}{\partial \varrho_1} \sigma = 0. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Auf folgende Aspekte dieser Gleichungen sei hier hingewiesen:

- Die Geschwindigkeit wird in Gl.(4.43) über einen verallgemeinerten Clebsch–Ansatz definiert. Allerdings ist diese Definition mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_2 über die Dissipationsrate gekoppelt, sodaß es sich hier um eine *implizite* Definition der Geschwindigkeit handelt.
- Die Temperaturgleichung (4.44) lautet nach kurzer Umformung:

$$\varrho_1 c_1 D_t^{(1)} T_1 - \varrho_1 c_1 N_1 D_t^{(1)} \varrho_1 = \lambda_1 f(\varrho_1, \varrho_2) \sigma \geq 0 \quad (4.47)$$

und ist damit analog zu der geforderten Gleichung (4.31), wobei wegen der Aufteilung der dissipierten Energie auf zwei Fluide der Faktor λ_1 hinzukommt.

⁵Aufgrund der Symmetrie des Systems erhält man die Euler–Lagrange–Gleichungen für das zweite Fluid durch Austausch der Indizes (1) \leftrightarrow (2).

Die Funktion $f(\varrho_1, \varrho_2)$, welche die Dichten der beiden Flüssigkeiten verknüpft, läßt die Möglichkeit offen, den Einfluß der Dichten auf die Dissipationsrate zu berücksichtigen.

- Die verallgemeinerte Bernoulli–Gleichung (4.46) enthält nun Terme mit der thermischen Phase, Temperatur und über die Dissipationsrate auch die Geschwindigkeit des anderen Fluids.

Noethersche Bilanzen

Die Ergebnisse für das Noethersche Theorem bezüglich Orts- und Zeittranslationsinvarianz liefern die homogenen Impuls- und Energie-Bilanzen beider Fluide.

Die **Impulsbilanz** lautet⁶:

$$\begin{aligned} & \partial_t (\varrho_1 \mathbf{v}_1 + \varrho_2 \mathbf{v}_2) + \nabla \cdot (p_1 \underline{\mathbf{1}} + p_2 \underline{\mathbf{1}} + \varrho_1 \mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_1 + \varrho_1 \mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_2) \\ & - \nabla \cdot \left(\Omega (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \otimes \frac{\partial \sigma}{\partial (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)} + \frac{c_0 f_0}{\omega_0} \sigma \left(\frac{\lambda_1 \varphi_1}{c_1} \left(1 + \frac{\varrho_1 N_1}{T_1} \right) + \frac{\lambda_2 \varphi_2}{c_2} \left(1 + \frac{\varrho_2 N_2}{T_2} \right) \right) \underline{\mathbf{1}} \right) = 0 \end{aligned} \quad (4.48)$$

Sie läßt erkennen, daß die dissipative Dynamik Einfluß auf die Gesamtimpulsbilanz hat, und zwar über einen erweiterten Spannungstensor (2. Zeile).

Verschwindet die Dissipationsrate σ , so wird die Impulsbilanz, in substantiellen Ableitungen geschrieben, zu derjenigen zweier Flüssigkeiten, die *nicht* wechselwirken:

$$\varrho_1 D_t^{(1)} \mathbf{v}_1 + \varrho_2 D_t^{(2)} \mathbf{v}_2 + \nabla p_1 + \nabla p_2 = 0. \quad (4.49)$$

Die **Energiebilanz**⁷ lautet:

$$\begin{aligned} & \partial_t \left(\frac{1}{2} \varrho_1 \mathbf{v}_1^2 + \varrho_1 U_1 + \frac{1}{2} \varrho_2 \mathbf{v}_2^2 + \varrho_2 U_2 \right) \\ & + \nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{2} \varrho_1 \mathbf{v}_1^2 + \varrho_1 U_1 + p_1 \right) \mathbf{v}_1 + \left(\frac{1}{2} \varrho_2 \mathbf{v}_2^2 + \varrho_2 U_2 + p_2 \right) \mathbf{v}_2 \right) \\ & + \partial_t \left(\Omega \left(\sigma - \mathbf{v}_1 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_1} - \mathbf{v}_2 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_2} \right) \right) \\ & - \nabla \cdot \left(\Omega \left(\mathbf{v}_1 \left[\mathbf{v}_1 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_1} \right] + \mathbf{v}_2 \left[\mathbf{v}_2 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_2} \right] \right) \right) = 0 \end{aligned} \quad (4.50)$$

Man erkennt, daß neben der klassisch zu erwartenden Energiedichte ein Anteil hinzukommt, der hier als **Transferenergie** bezeichnet wird:

$$e_{Tr} := \Omega \left(\sigma - \mathbf{v}_1 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_1} - \mathbf{v}_2 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_2} \right). \quad (4.51)$$

Dazu gehört eine **Transferenergie-Stromdichte**:

$$j_{Tr} := \Omega \left(\mathbf{v}_1 \left[\mathbf{v}_1 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_1} \right] + \mathbf{v}_2 \left[\mathbf{v}_2 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_2} \right] \right) \quad (4.52)$$

⁶ $\underline{\mathbf{1}}$ ist der Einheitstensor δ_{ij} .

⁷ Der Übersicht halber hier für $N = 0$ und $c_1 = c_2 = c_0 = \text{const.}$ angegeben.

Beide Größen spielen nur bei dissipativen Prozessen eine Rolle, denn für $\sigma = 0$ verschwindet der Transferanteil, und die Energiebilanz reduziert sich auf die bekannte Bilanz zweier unabhängiger Fluide.

Interpretation der Transferenergie

Die oben beschriebenen Gleichungen enthalten neben den “klassischen” Energieanteilen wie kinetische und innere Energie und den dazugehörigen Strömen auch die sog. *Transferenergie* und den zugehörigen Strom. Diese Energie ist direkt mit der Dissipationsrate verknüpft und wird folgendermaßen interpretiert:

In diesem Modell geschieht der Übergang der dissipierten mechanischen Energie auf thermische Freiheitsgrade offenbar nicht instantan: die dissipierte Energie wird in einer neuen Energieform “zwischen gespeichert”. Wenn die Temperatur T in diesem Beispiel als *Gleichgewichtstemperatur* interpretiert wird, so ist hier i.a. kein *direkter* Transfer der dissipierten Energie in das Gleichgewicht möglich, sondern es gibt einen Mechanismus, der als “Moderator” für diesen Übergang dient und den Transfer beeinflusst. Die zugehörige Energieform wird folglich *Transferenergie* genannt.

Dieser Mechanismus ist in dem hier erstellten Modell allein von den Variablen $\varrho_i, \mathbf{v}_i, T_i$ und φ_i abhängig und wird durch die Dynamik des Systems bestimmt. In der vorliegenden Arbeit wird dieser Mechanismus der Dissipation vollständig im Lagrangeformalismus beschrieben und kann somit als Modell für die Dissipation der Versetzungsbewegung dienen.

Die Transferenergie muß im Gleichgewicht verschwinden. Daß dies tatsächlich der Fall ist, zeigen die Beispiele verschiedener Reibungsgesetze weiter unten. Zunächst müssen aber die Bewegungsgleichungen der beiden Flüssigkeiten berechnet werden.

Das Reibungsgesetz für die Differenzgeschwindigkeit

Die eigentliche dissipative Dynamik wird durch die Gleichung für die Differenzgeschwindigkeit \mathbf{u} bestimmt. Für den etwas vereinfachten Fall, daß sich die inneren Energiedichten als Summen elastischer und thermischer Energiedichten darstellen lassen

$$U_i(\varrho_i, T_i) = W_i(\varrho_i) + c_i T_i, \quad i = 1, 2 \quad (4.53)$$

sowie nach Wahl der Funktion

$$f(\varrho_1, \varrho_2) = f_0 := \varrho_0 \quad (4.54)$$

mit $\varrho_0 = \text{const.}$ als Referenzdichte und der Definition der Differenzgeschwindigkeit

$$\mathbf{u} := \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 \quad (4.55)$$

können die partikulären Lösungen für die thermischen Phasen im lokalen Gleichgewicht aus Gl.(4.45) zu

$$\varphi_1^{(0)} = -\omega \frac{c_1}{c_0} t \quad (4.56)$$

und

$$\varphi_2^{(0)} = -\omega \frac{c_2}{c_0} t \quad (4.57)$$

bestimmt werden.

Für diesen Fall vereinfacht sich die Größe Ω in Gl.(4.39) zu

$$\Omega = -\varrho_0 t, \quad (4.58)$$

was sich durch Einsetzen sofort verifizieren läßt.

Damit folgt nach kurzer Rechnung für die Impulsbilanz einer Flüssigkeit⁸:

$$\varrho_1 D_t^{(1)} \mathbf{v}_1 + \nabla p_1 = -\varrho_0 t \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \nabla \cdot \mathbf{v}_1 - \varrho_0 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} - \varrho_0 t \left(D_t^{(1)} \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} + \nabla \otimes \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \right). \quad (4.59)$$

Für die zweite Flüssigkeit folgt unter Berücksichtigung von

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_1} = \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} = -\frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{v}_2} \quad (4.60)$$

die analoge Gleichung

$$\varrho_2 D_t^{(2)} \mathbf{v}_2 + \nabla p_2 = \varrho_0 t \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \nabla \cdot \mathbf{v}_2 + \varrho_0 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} + \varrho_0 t \left(D_t^{(2)} \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} + \nabla \otimes \mathbf{v}_2 \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \right), \quad (4.61)$$

die mit (4.59) in der Summe die folgende Noetherbilanz für diesen vereinfachten Fall ergibt⁹:

$$\varrho_1 D_t^{(1)} \mathbf{v}_1 + \varrho_2 D_t^{(2)} \mathbf{v}_2 + \nabla p_1 + \nabla p_2 = \nabla \cdot \left((-\varrho_0 t) \mathbf{u} \otimes \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} + (-\varrho_0 t) \sigma \right). \quad (4.62)$$

Aus der Differenz dieser Gleichungen folgt hingegen die Gleichung für die Relativgeschwindigkeit \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{u} = & -\mathbf{v}_1 \cdot \nabla \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \cdot \nabla \mathbf{v}_2 - \frac{\nabla p_1}{\varrho_1} + \frac{\nabla p_2}{\varrho_2} - \varrho_0 \left(\frac{1}{\varrho_1} + \frac{1}{\varrho_2} \right) \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} - \varrho_0 t \left(\frac{1}{\varrho_1} + \frac{1}{\varrho_2} \right) \partial_t \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \\ & + \frac{\varrho_0 t}{\varrho_1} \left(\nabla \otimes \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} - \nabla \cdot \left(\mathbf{v}_1 \otimes \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \right) \right) + \frac{\varrho_0 t}{\varrho_2} \left(\nabla \otimes \mathbf{v}_2 \cdot \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} - \nabla \cdot \left(\mathbf{v}_2 \otimes \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \right) \right). \end{aligned}$$

(4.63)

⁸Man wende die substantielle Zeitableitung auf Gl.(4.43) an und setze die Bewegungsgleichungen für die Clebsch-Potentiale und die thermischen Größen ein.

⁹Man setze in Gl.(4.49) $N_1 = N_2 = 0$ und $c_1 = c_2 = c_0$ sowie $\Omega = -\varrho_0 t$ und benutze die Kontinuitätsgleichung, um auf substantielle Ableitungen umzuformen.

Lösungen für zwei homogene Flüssigkeiten

Um die Bedeutung der Gleichung (4.63) zu beurteilen, werden thermodynamisch homogene, inkompressible Flüssigkeiten betrachtet. Das bedeutet, daß die Gradienten der Geschwindigkeiten verschwinden, ebenso die Druckterme, da eine freie Strömung betrachtet wird.

Für inkompressible Flüssigkeiten konstanter Dichten mit der Zuordnung einer Referenzdichte

$$\varrho_0 := \frac{\varrho_1 \varrho_2}{\varrho_1 + \varrho_2} \quad (4.64)$$

als reduzierter Dichte und wegen

$$\partial_t \Omega = -\varrho_0 \quad (4.65)$$

folgt nun die Bewegungsgleichung für die Differenzgeschwindigkeit:

$$\varrho_0 \partial_t \mathbf{u} = -\varrho_0 \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} - \varrho_0 t \partial_t \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} = -\partial_t \left(t \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \right). \quad (4.66)$$

Dies ist die Bewegungsgleichung für die Differenzgeschwindigkeit. Auf der linken Seite steht die zeitliche Änderung der Impulsdichte, folglich ist die rechte Seite als Kraftdichte zu interpretieren. Da ausschließlich Reibungswechselwirkung betrachtet wurde, muß dies eine Reibungskraft sein, sodaß man

$$\varrho_0 \partial_t u = \varrho_0 f_R \quad (4.67)$$

schreiben kann. Die Reibungskraft ist hier offenbar über die *zeitliche Ableitung* einer Funktion definiert, sodaß man hier — in Analogie zu Potentialfunktionen, bei denen die Kräfte aus Gradienten bestimmt werden — von einem *zeitlichen Potential* sprechen kann:

$$f_R := -\partial_t \left(t \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{u}} \right). \quad (4.68)$$

Trotz der gemachten Vereinfachungen ist diese Gleichung direkt aus den Euler-Lagrange-Gleichungen hergeleitet, ist also Folge der Variation der Lagrangedichte (4.34).

Dieses vereinfachte System kann sofort durch Integration gelöst werden. Beginnt man bei $t_0 = 0$ mit einer Relativgeschwindigkeit von $u(t_0) = u_0$, so folgt aus Gl.(4.66):

$$u = u_0 - t \frac{\partial \sigma}{\partial u}. \quad (4.69)$$

Ein Ansatz für die Dissipationsrate bestimmt über diese Gleichung das Reibungsgesetz. Es sollen nun die Reibungsgesetze hergeleitet werden, die für Dissipationsraten entstehen, wie sie für die prominentesten Reibungsgesetze gelten, nämlich die Coulombsche Reibung, auch trockene Reibung genannt, und die Stokesche Reibung.

Coulomb–Reibung

Für Coulombsche Reibung folgt aus (4.69) im eindimensionalen Fall mit

$$\sigma_C = \mu|u| \quad (4.70)$$

für $u \geq 0$ die Lösung

$$u = u_0 - \mu t, \quad (4.71)$$

also die bekannte Gleichung für die Differenzgeschwindigkeit zweier Körper, die der Coulombschen Reibung unterworfen sind.

Hier wird die klassische Gleichung reproduziert. Für diesen Fall verschwindet auch die *Transferenergie*, die sich nach Gl.(4.51) zu

$$e_{Tr} = -\varrho_0 t \left(\sigma_C - u \frac{\partial \sigma_C}{\partial u} \right) \stackrel{(4.70)}{=} 0 \quad (4.72)$$

ergibt. Dabei besteht darin ein Unterschied zur bekannten Coulomb–Reibung, daß diese für *Oberflächen*–Kontakte gemessen wird. Hier hat man es aufgrund des Zwei–Flüssigkeit–Modells mit Reibung im *Volumen* zu tun. Im Hinblick auf die dissipative Bewegung der Versetzungen kann dieses Modell der Volumenreibung aber als möglicher Ansatz benutzt werden.

Stokessche Reibung

Bei der Stokesschen Reibung mit der Dissipationsrate

$$\sigma_S = \eta u^2 \quad (4.73)$$

ergibt sich ein etwas anderes Bild:

Hier ergibt sich die Lösung

$$u = u_0 - 2\eta t u, \quad (4.74)$$

was zu der dissipativen Bewegung

$$u = \frac{u_0}{1 + 2\eta t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0 \quad (4.75)$$

und damit zum Verschwinden der Differenzgeschwindigkeit für $t \rightarrow \infty$ führt.

Diese Lösung weicht aber vom klassischen Fall ab, für die das Reibungsgesetz

$$\partial_t u = -\eta u \quad (4.76)$$

bekanntlich folgende Lösung hat:

$$u_{kl} = u_0 e^{-\eta t}. \quad (4.77)$$

Diese Abweichung liegt an einer veränderten Dynamik des Gesamtsystems. Während klassisch die gesamte dissipierte mechanische Energie *instantan* zu einer Erhöhung der thermischen Energie führt, ist hier eine Transferenergie als weitere Größe ins Spiel gekommen, die durch Zwischenspeicherung die Dynamik verändert

$$e_{Tr} = -\varrho_0 t \left(\sigma - u \frac{\partial \sigma}{\partial u} \right) \stackrel{(4.73)}{=} \varrho t \eta u^2, \quad (4.78)$$

die aber für $t \rightarrow \infty$ gegen 0 geht und im Fall verschwindender Dissipation ebenfalls verschwindet.

Abschließende Bemerkungen

Das hier vorgestellte Modell zweier Flüssigkeiten enthält eine dissipative Dynamik, die im Falle der Coulombschen Reibung mit der klassischen Dynamik übereinstimmt. Die Versetzungsklassen können nun, jede für sich, zusätzlich mit dissipativen Elementen versehen werden, nämlich den Bewegungen relativ zum Hintergrundmedium (also abhängig von den Driftgeschwindigkeiten).

Im oben beschriebenen Stokesschen Fall erhält man eine von der klassischen Beschreibung abweichende Dynamik. Diese unterliegt jedoch noch einer wesentlichen Einschränkung: Für die thermische Phase ging hier nur die *Gleichgewichtslösung* ein. Da jedoch Dissipation nicht im Gleichgewicht stattfindet, muß für die volle Beschreibung die zeitliche Entwicklung der thermischen Phase bekannt sein. Dazu sind jedoch genauere Information über Prozesse außerhalb des Gleichgewichts nötig. Erst dann kann die volle Nicht-Gleichgewichtsdynamik des Systems bestimmt werden. Da auch die Transferenergie von der thermischen Phase (im Beispiel über die Größe Ω) abhängt, wird dies zu einer genaueren Beschreibung des Transfers von mechanischen auf thermische Freiheitsgrade führen.

Insbesondere die Versetzungsdynamik erfolgt fernab vom lokalen Gleichgewicht. Insofern ist zu erwarten, daß die Bewegungen der Versetzungen auf die Bewegungsgleichung der thermischen Phase wesentlichen Einfluß haben.

In dieser Arbeit besteht aber das wesentliche Ziel darin, die dissipative Bewegung *prinzipiell* in das Modell der Versetzungsdynamik zu integrieren. Dies ist nun möglich und wird abschließend im nächsten Abschnitt behandelt.

4.3 Dissipative Versetzungsdynamik

Aufbauend auf dem Mehr-Flüssigkeitsmodell der Versetzungen wird nun die Versetzungsdynamik im Lagrangeformalismus um dissipative Eigenschaften erweitert. Dies geschieht phänomenologisch über einen Ansatz, der eine Reibungskraft der Versetzungen mit dem Hintergrundmedium in Analogie zu dem oben beschriebenen Zwei-Flüssigkeitsmodell berücksichtigt.

Die spezielle Form der Dissipationsrate wird hier offengelassen, es sind sowohl Coulombsche als auch Stokessche Reibung denkbar. Allerdings wird für dieses Modell die Konstanz des Reibungskoeffizienten η aufgegeben¹⁰:

¹⁰Dabei kann η sowohl für den Coulombschen als auch für den Stokesschen Reibungskoeffizienten

4.3.1 Veränderlicher Reibungskoeffizient

Um reale Verformungskurven zu modellieren, wird ein Reibungskoeffizient angenommen, der mindestens zwei verschiedene Werte annehmen kann. Für kleine äußere Spannungen soll der Kristall elastisch reagieren. Versetzungsbewegungen spielen hier kaum eine Rolle. Im Modell bedeutet das, daß der Reibungskoeffizient sehr groß ist. Anschaulich kann dies anhand der Gleichung (3.299) bzw. der linearisierten Gleichung (3.363) gesehen werden: Das Reibungsgesetz lautet dort vereinfacht

$$\partial_t u + \eta u = f_g, \quad (4.79)$$

wobei f_g als Abkürzung für die Summe der auf die Versetzung wirkenden Kräfte steht.

Dann kann bei kleinen Kräften und großer Reibung eine schleichende Versetzungsbewegung angenommen werden, in der der Trägheitsterm $\partial_t u$ vernachlässigt werden kann. Man erhält:

$$u \approx \frac{f_g}{\eta} \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} 0. \quad (4.80)$$

Für große Reibungsterme bewegen sich die Versetzungen also kaum, die Dissipationsrate wird klein:

$$\sigma_d = \eta u^2 \approx \frac{f_g^2}{\eta} \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} 0. \quad (4.81)$$

Damit reagiert der Kristall im Grenzfall $\eta \rightarrow \infty$ ideal elastisch. Für endliche, aber große Reibungskoeffizienten wird bei konstant gehaltener Spannung zwar eine schleichende Versetzungsbewegung und damit eine plastische Deformation eintreten. Diese findet jedoch auf sehr großen Zeitskalen statt.

Damit wird ein viskoelastisches Material im elastischen Grenzfall modelliert. Das bekannteste Beispiel – auch wenn es sich hier nicht um einen Kristall handelt – ist Glas, das auf großen Zeitskalen fließt, wie man das z.B. an alten Kirchenfenstern sehen kann.

Damit läßt sich zwar nicht modellieren, daß sich Versetzungen bei kleinen äußeren Kräften (und hinreichend niedrigen Temperaturen) *überhaupt* nicht bewegen. Als gute Näherung kann jedoch η so groß gewählt werden, daß keine makroskopische Deformation auf hinreichend großen Zeiten (die durch experimentelle Möglichkeiten definiert werden) eintritt. Der Grenzfall $\eta \rightarrow \infty$ würde einem exakten Pinning entsprechen, für η fehlte dann aber die Beschreibung durch analytische Funktionen.

Wenn die äußeren Spannungen erhöht werden, so beginnt die plastische Deformation. Der Trägheitsterm in der Bewegungsgleichung der Versetzungsdriftgeschwindigkeit kann nun nicht mehr vernachlässigt werden. Die Versetzungen im Modell bewegen sich nun auf kleineren Zeitskalen und das Material zeigt plastische Deformation. Das bedeutet, daß der Reibungskoeffizient kleiner werden muß, wenn die äußeren Spannungen zunehmen und einen kritischen Wert überschreiten. Meist wird dazu die *kritische Spannung* oder sog. *Fließgrenze* definiert. Diese Grenze kann hier aber *nicht* stehen.

als Kriterium benutzt werden: Im Lagrangeformalismus und der Theorie der Versetzungsklassen, wie sie hier dargestellt wurde, sind Spannungen *Antwortgrößen*, die sich *nach* der Variation ergeben. Das bedeutet, man kann kein Fließ-Kriterium in die Lagrangedichte integrieren, das auf diese Spannungen zurückgreift. Tut man dies dennoch, so setzt man voraus, das Spannungsfeld $\underline{\sigma}(x, t)$ zu kennen, ohne es berechnet zu haben. Dies ist ein Kritikpunkt der Arbeit von *Azirhi* (1998), in der genau dies durchgeführt wurde.

In dieser Arbeit soll die Fließgrenze durch den Übergang des Reibungskoeffizienten von großen zu kleinen Werten definiert werden. Seine Abhängigkeit muß sich jedoch auf die Variablen in der Lagrangedichte beschränken. Es kommen hier drei Größen in Frage: Der Tensor der elastischen Verzerrung, die Hyperdeformationen, die in dieser Arbeit auf die Versetzungsdichten zurückgeführt werden können und die Temperatur: eine Erhöhung der Temperatur wird zu thermisch aktivierten Prozessen führen, die ein Gleiten der Versetzungen erleichtern.

Durch dieses Modell wird es möglich, den Effekt der mikroskopisch wirksamen Potentiale (wozu insbesondere das sog. *Peierls-Potential* der atomaren Umgebung der Versetzung gehört) zu berücksichtigen.

Weiterhin wird der Reibungskoeffizient als *Klassengröße* definiert. So wird es möglich, z.B. Schraubenversetzungen einen anderen Reibungskoeffizienten als Stufenversetzungen zuzuordnen.

Die Dissipationsrate, die für diese Theorie angesetzt wird, lautet:

$$\sigma_d = \sum_D \eta_D(e_{kl}, n_D, T) \tilde{\sigma}_D(|u_D|) \quad (4.82)$$

und hängt neben den angesprochenen Reibungskoeffizienten nur noch von den Driftgeschwindigkeiten der Versetzungen relativ zum Hintergrundmedium ab.

Im Gegensatz zum Zwei-Flüssigkeitsmodell soll hier nur dem Hintergrundmedium eine Temperatur zugeordnet sein (was im Falle des Zweiflüssigkeitmodells durch die Wahl der Parameter $\lambda_1 = 1$ und $\lambda_2 = 0$ erreicht wird, die dort die Aufteilung der dissipierten Energie bestimmten).

4.3.2 Lagrangedichte für die dissipative Versetzungsdynamik

Die gesamte Lagrangedichte wird für den Fall angegeben, daß die innere Energie in eine Summe aus elastischen, thermischen und Versetzungsanteilen aufzuspalten ist. Dann erhält man:

$$\begin{aligned}
\ell = & -\varrho \left(-\frac{1}{2}v^2 + W_{elast}(e_{ij}) + cT + \frac{c}{\omega}TD_t^{(v)}\Phi \right) \\
& -\varrho \sum_D n_D m_D \left(D_t^{(w_D)}\varphi_D + \alpha_D D_t^{(w_D)}\beta_D - \frac{1}{2}w_D^2 + W_D(n_D, n_{D'}) \right) \\
& + \varrho l_\kappa^i \left(\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa - \sum_D \varrho n_D u_D \varepsilon_{ijk} q_D^\mu A_\mu^j l_D^\nu A_\nu^k b_D^\kappa \right) \\
& + h_{\mu\nu} \left(A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu - \sum_D \varrho n_D l_D^\mu b_D^\nu \right) \\
& + \sum_D \varrho \overset{(D)}{B}_l \left(w_D^l - v^l - u_D q_D^\kappa A_\kappa^l \right) \\
& + \sum_D^{D_{max}-1} \chi_D \partial_l \left(\varrho n_D A_\kappa^l \right) l_D^\kappa \\
& + \sum_D \xi_D l_D^\mu A_\mu^i \partial_i u_D \\
& - \frac{1}{\omega} \varrho \eta(e_{kl}, n_D, T) \tilde{\sigma}_d(|u_D|)
\end{aligned} \tag{4.83}$$

Dabei bezeichnet Φ hier die thermische Phase.

Die nicht-trivialen Randbedingungen lauten unter Berücksichtigung der Gl.(2.10) mit dem Normalenvektor auf der Oberfläche e_i^N :

$$-\varrho n_D m_D u_D q_D^i e_i^N = 0 \tag{4.84}$$

$$-\varrho n_D m_D \alpha_D u_D q_D^i e_i^N = 0 \tag{4.85}$$

$$\varrho l_k^i e_i^N = 0 \tag{4.86}$$

$$h_{\mu\nu} A_i^\mu \varepsilon^{ijk} e_j^N - \sum_D \chi_D \varrho n_D l_D^k A_\nu^j e_j^N = 0 \tag{4.87}$$

$$\sum_D \chi_D n_D l_D^i e_i^N = 0 \tag{4.88}$$

$$\chi_D \varrho l_D^i e_i^N = 0 \tag{4.89}$$

$$\xi_D l_D^i e_i^N = 0 \tag{4.90}$$

Die Lagrangemultiplikatoren χ_D und ξ_D verschwinden damit dort auf der Oberfläche, wo Versetzungslinien auf dieser enden und dort $l_D^i e_i^N \neq 0$ gilt, ebenso die Versetzungs-

driftgeschwindigkeit u_D^i . Da sich die Oberfläche in der Zeit mit der Geschwindigkeit des Hintergrundmediums v^i bewegt, gilt immer:

$$v^i e_i^N = 0 \quad (4.91)$$

auf der Oberfläche.

Für eine Versetzungsklasse lautet die Lagrangedichte dann

$$\begin{aligned} \ell = & -\varrho \left(-\frac{1}{2}v^2 + W_{elast}(e_{ij}) + cT + \frac{c}{\omega}TD_t^{(v)}\Phi \right) \\ & - \varrho nm_0 \left(D_t^{(w)}\varphi + \alpha D_t^{(w)}\beta - \frac{1}{2}w^2 + W(n) \right) \\ & + \varrho t_\kappa^i \left(\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa - \varrho nu \varepsilon_{ijk} q^\mu A_\mu^j l^\nu A_\nu^k b^\kappa \right) \\ & + h_{\mu\nu} \left(A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu - \varrho n l^\mu b^\nu \right) \\ & + \varrho \overset{(D)}{B}_l \left(w^l - v^l - u q^\kappa A_\kappa^l \right) \\ & - \frac{1}{\omega} \varrho \eta(e_{kl}, n, T) \tilde{\sigma}_d(|u|) \end{aligned} \quad (4.92)$$

Einen reduzierten Variablensatz erhält man, wenn die Definition für die Versetzungsgesamtgeschwindigkeit w_D eingesetzt wird. Für eine Versetzungsklasse lautet die Lagrangedichte dann

$$\begin{aligned} \ell = & -\varrho \left(-\frac{1}{2}v^2 + W_{elast}(e_{ij}) + cT + \frac{c}{\omega}TD_t^{(v)}\Phi \right) \\ & - \varrho nm_0 \left(D_t^{(v)}\varphi + \alpha D_t^{(v)}\beta + u q^\kappa A_\kappa^i (\partial_i \varphi + \alpha \partial_i \beta) - \frac{1}{2}(\mathbf{v} + u\mathbf{q})^2 + W(n) \right) \\ & + \varrho t_\kappa^i \left(\overset{\mathcal{L}}{D}_t^{(v)} A_i^\kappa - \varrho nu \varepsilon_{ijk} q^\mu A_\mu^j l^\nu A_\nu^k b^\kappa \right) \\ & + h_{\mu\nu} \left(A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu - \varrho n l^\mu b^\nu \right) \\ & - \frac{1}{\omega} \varrho \eta(e_{kl}, n, T) \tilde{\sigma}_d(|u|) \end{aligned} \quad (4.93)$$

Die nicht-trivialen Randbedingungen lauten hier:

$$-\varrho nm_0 u q^i e_i^N = 0 \quad (4.94)$$

$$-\varrho nm_0 \alpha u q^i e_i^N = 0 \quad (4.95)$$

$$\varrho t_k^i e_i^N = 0 \quad (4.96)$$

$$h_{\mu\nu} A_i^\mu \varepsilon^{ijk} e_j^N = 0. \quad (4.97)$$

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde eine Feldtheorie der nicht-reagierenden Versetzungsklassen im Lagrangeformalismus mit dissipativen Eigenschaften aufgebaut. Dazu wurde das Modell der idealen Flüssigkeit als Grundlage herangezogen:

Es wurde sowohl zur Beschreibung des elastischen Hintergrundmediums verwendet, indem es um die Eigenschaften des verallgemeinerten Cosserat-Kontinuums erweitert wurde, als auch für die Modellierung der Versetzungsdynamik. Hierzu wurden die Versetzungen als Subkontinua beschrieben, die sich nach Klassen einteilen lassen.

Der Klassenbegriff resultiert aus der mikroskopischen Anschauung der Versetzungen und erlaubt eine differenziertere Darstellung von Versetzungsnetzwerken, als das der Tensor der Versetzungsdichte aus der elastoplastischen Theorie vermag. Hierzu zählen insbesondere Versetzungsanordnungen, die sich gegenseitig in ihrer Bewegung behindern und so den immobilen Versetzungen zuzuordnen sind.

Für das Beispiel einer Versetzungsklasse wurden die Dispersionsrelationen berechnet, die sich nach Linearisierung der Observablengleichungen ergaben. Außerdem wurde anhand dieser Gleichungen gezeigt, daß eine homogene plastische Deformation, nämlich Bewegung des Hintergrundmediums ohne Aufbau elastischer Spannungen, möglich ist und sich auf die Bewegung der Versetzungen zurückführen läßt.

Die Dissipation wurde auf der Basis der Arbeiten von Anthony in den Lagrangeformalismus integriert, indem zunächst Elemente der von Anthony entwickelten Beschreibung der Thermodynamik irreversibler Prozesse in ein Hintergrundmedium eingebettet wurden, für das wieder die ideale Flüssigkeit als Modellsystem diente. Anschließend wurde die Dissipation durch Vorgabe der Dissipationsrate für ein System zweier über Reibung wechselwirkenden Flüssigkeiten im Lagrangeformalismus eingebettet.

Der Existenz der Fließgrenze wurde über die Wahl des Reibungsparameters Rechnung getragen: Dieser ist nicht konstant, sondern wurde im elastischen Bereich der Fließkurve als so groß angenommen, daß auf den physikalisch relevanten Zeitskalen keine Versetzungsbewegung zustande kommen kann. Im plastischen Bereich der Fließkurve sinkt er und ermöglicht so die Beschreibung der dissipativen Versetzungsbewegung, die zur plastischen Deformation führt.

Ausblick

Auf Basis dieser Theorie kann zukünftig eine differenziertere Beschreibung der plastischen Deformation gemacht werden. Dabei sind drei wesentliche Elemente von Bedeutung:

Erstens spielen Reaktionen von Versetzungen, zu denen insbesondere die Versetzungserzeugung gehört, eine entscheidende Rolle für das Verhalten des Kristalls bei plastischer Deformation. Auf der Basis der hier aufgebauten Theorie kann der Weg aufgezeigt werden, diese Reaktionen in den Lagrangeformalismus zu integrieren:

Der Schlüssel liegt dabei in der Erweiterung der Thermodynamik irreversibler Prozesse im Lagrangeformalismus um chemische Reaktionen. Dazu gibt es bereits wichtige Arbeiten von Anthony. Da die Versetzungsklassen auf dem Modell der idealen Flüssigkeit aufbauen, liegt es nahe, in Analogie zu chemischen Reaktionen die Reaktionen der Versetzungsklassen in dieses Modell zu integrieren. Dabei müssen die Kontinuitätsgleichungen der einzelnen Klassen aufgegeben werden, sodaß es Quellen und Senken für Versetzungen geben kann. Erzeugung von Versetzungen ist über die Versetzungsenergie in die thermodynamische Beschreibung einzuarbeiten, und schließlich müssen Nebenbedingungen bei diesen Reaktionen wie die Erhaltung des Burgersvektors, beispielsweise bei dem Zerfall einer Versetzungsklasse in zwei andere, erfüllt werden.

Weiterhin können andere Gitterdefekte wie Zwischengitteratome oder Leerstellen über eigene Subkontinua in die Theorie integriert werden. Diese stellen mögliche Pinningzentren dar, an denen Versetzungen festsitzen. Dazu gehört die Beschreibung von Diffusion im Lagrangeformalismus. Über solche Diffusionsprozesse kann dann auch das mit ihnen verbundene Versetzungsklettern beschrieben werden.

Zweitens können neben der analytischen Bearbeitung auch numerische Konzepte entwickelt werden, die diese Theorie für praktische Anwendungen handhabbar macht. Ein entscheidender Vorteil ist dabei der Aufbau im Lagrangeformalismus:

Da selbst nun die dissipativen Prozesse im Rahmen des Hamiltonschen Variationsprinzips zugänglich sind, ist es über Minimierungsverfahren wie das Ritzsche Verfahren möglich, numerisch die Extremalwerte des Wirkungsfunktional zu finden.

Auf der anderen Seite bietet diese Theorie vielleicht auch die Möglichkeit, das numerische Verfahren der Zellulären Automaten (vgl. *Psakhie (1995)*) um dissipative Effekte und implizites Fließverhalten bei plastischer Deformation zu erweitern.

Drittens kann die komplette thermodynamische Beschreibung des plastisch deformierbaren Kristalls auf der Basis der Arbeiten von Anthony im Lagrangeformalismus geschehen. Voraussetzung ist, daß die Darstellung aller Observablen durch komplexwertige Felder geschieht. Dann läßt sich über das Entropiekonzept auch die Entropiebilanz aus der Lagrangedichte ableiten. Dies gibt Anlaß zu der Hoffnung, auch die weit weg vom thermodynamischen Gleichgewicht anzusiedelnde Versetzungsdynamik in die Thermodynamik irreversibler Prozesse zu integrieren.

Die Grundlagen für diese zukünftigen Herausforderungen wurden in dieser Arbeit durch einen konsequenten Aufbau der Theorie in klar definierten Schritten gelegt, wodurch die Theorie leicht erweiterbar wird.

Anhang **A**

Anhang

A.1 Berechnung der Konstanten q_0

Aus Gl. (3.142) folgt (unter Auslassung der Gewichte der Tensordichten)

$$q^\kappa q^\lambda a_{\kappa\lambda} = \frac{q_0^2}{\varrho_0^2} \varepsilon^{\kappa\gamma\mu} \varepsilon^{\lambda\nu\delta} a_{\kappa\lambda} a_{\gamma\alpha} a_{\mu\beta} a_{\nu\epsilon} a_{\delta\phi} l^\alpha l^\epsilon m^\beta m^\phi \quad (\text{A.1})$$

Dabei gilt: $\varepsilon^{(+1)\lambda\nu\delta} a_{\kappa\lambda} a_{\nu\epsilon} a_{\delta\phi} = \varepsilon^{(-1)\kappa\epsilon\phi} a^{(+2)}$, wobei $a^{(+2)} := \text{Det}|a_{\mu\nu}|$ die Determinante der Metrik eine Tensordichte vom Gewicht $(+2)$ darstellt, sodaß die Gewichte auf beiden Seiten der Gleichung zusammenpassen.

Mit der Forderung (3.142) folgt nun

$$\begin{aligned} a_0^2 &= \frac{q_0^2}{\varrho_0^2} \varepsilon^{\kappa\gamma\mu} \varepsilon^{\lambda\nu\delta} a_{\kappa\lambda} a_{\gamma\alpha} a_{\mu\beta} a_{\nu\epsilon} a_{\delta\phi} l^\alpha l^\epsilon m^\beta m^\phi \\ &= \frac{q_0^2}{\varrho_0^2} a \underbrace{\varepsilon^{\kappa\gamma\mu} \varepsilon_{\kappa\epsilon\phi}}_{\delta_\epsilon^\gamma \delta_\phi^\mu - \delta_\epsilon^\mu \delta_\phi^\gamma} a_{\gamma\alpha} a_{\mu\beta} l^\alpha l^\epsilon m^\beta m^\phi \\ &= \frac{q_0^2}{\varrho_0^2} a \left(\underbrace{l_\gamma}_{a_0^2} l^\gamma \underbrace{m_\mu}_{a_0^2} m^\mu - \underbrace{l_\gamma}_0 m^\gamma \underbrace{m_\epsilon}_0 l^\epsilon \right) \\ &= a_0^4 \frac{q_0^2}{\varrho_0^2} a. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Und damit gilt

$$q_0 := \frac{\varrho_0}{a_0 \sqrt{a}} \quad (\text{A.3})$$

Man sieht, daß zur Kompensation des Gewichts $(+1)$ des ε -Tensors nicht die Dichte, sondern die Wurzel der Metrik-Determinante herangezogen werden muß. Wenn die

Metrik jedoch in einem System (z.B. (κ)) die Determinante $\overset{(\kappa)}{a} = 1$ hat, so gilt bei Beibehaltung des Rechtssystems:

$$\overset{(i)}{a} = \text{Det}|A_i^\kappa|^2 \quad \overset{(\kappa)}{a} = \text{Det}|A_i^\kappa|^2, \quad (\text{A.4})$$

sodaß

$$\sqrt{\overset{(+2)}{a}} = \text{Det}|A_i^\kappa| \quad (\text{A.5})$$

folgt.

Die Konstruktion

$$\frac{\overset{(+1)}{\varepsilon}{}^{\mu\nu\kappa}}{\text{Det}|A_i^\kappa|} \quad (\text{A.6})$$

nennt man W-Dichte. Sie ist ein echter Tensor, solange die Transformation die Orientierung des Basissystems nicht ändert, was hier immer vorausgesetzt werden soll.

A.2 Konsistenzbedingung für den Cosserat-Strom J_i^κ

Die Gleichung (3.199) wird über die substantielle Zeitableitung des Ansatzes (3.168) hergeleitet:

Es wird die allgemeine Bewegungsgleichung für die Cosserat-Vektoren vorausgesetzt, die neben der substantiellen Mitführung einen Driftstrom enthält:

$$\partial_t A_i^\kappa + v^k \partial_k A_i^\kappa + \partial_i v^k A_k^\kappa - J_i^\kappa = 0 \quad (\text{A.7})$$

Nun werden die daraus folgenden Bewegungsgleichungen für den Versetzungsdichtentensor abgeleitet und mit denen der Klassendefinition verglichen. Für diese Klassendefinition wird folgende Kontinuitätsgleichung der skalaren Versetzungsdichten postuliert:

$$\partial_t (\varrho n_D) + \partial_i (\varrho n_D (v^i + u_D^i)) = 0 \quad (\text{A.8})$$

oder unter Berücksichtigung der Kontinuitätsgleichung

$$\varrho D_t^{(v)} n_D = -\partial_i (\varrho n_D u_D^i) \quad (\text{A.9})$$

Nun werden die Bewegungsgleichungen berechnet, und zwar für den Tensor $\overset{(i)}{\alpha}{}^{\mu\nu} := \alpha^{ij} A_i^\mu A_j^\nu$:

$$\begin{aligned} D_t^{(v)} \overset{(i)}{\alpha}{}^{\mu\nu} &= D_t^{(v)} \left(A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu \right) \\ &= -\partial_i v^l A_l^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu + J_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu + A_i^\mu \varepsilon^{ijk} D_t^{(v)} (\partial_j A_k^\nu) \\ &= -\partial_i v^l A_l^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu + J_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j A_k^\nu + A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \left(\partial_j D_t^{(v)} A_k^\nu - \partial_j v^l \partial_l A_k^\nu \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\partial_i v^l A_l^\mu \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} + \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} J_i^\mu + A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \left(\partial_j J_k^\nu - \partial_j A_l^\nu \partial_k v^l - \partial_j v^l \partial_l A_k^\nu \right) \\
&= -\partial_i v^l A_l^\mu \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} + \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} J_i^\mu + A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \left(\partial_j J_k^\nu + \partial_j v^l (\partial_k A_l^\nu - \partial_l A_k^\nu) \right) \\
&= -\partial_i v^l A_l^\mu \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} + \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} J_i^\mu + A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \left(\partial_j J_k^\nu + \partial_j v^l \varepsilon_{klm} \overset{(i)}{\alpha}{}^{m\nu} \right) \\
&= -\partial_i v^l A_l^\mu \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} + \overset{(i)}{\alpha}{}^{i\nu} J_i^\mu + A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j J_k^\nu + A_i^\mu \left(\delta_l^i \delta_m^j - \delta_l^j \delta_m^i \right) \partial_j v^l \overset{(i)}{\alpha}{}^{m\nu} \\
&= -\partial_l v^l \overset{(i)}{\alpha}{}^{\mu\nu} + \overset{(i)}{\alpha}{}^{\kappa\nu} A_\kappa^i J_i^\mu + A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j J_k^\nu. \tag{A.10}
\end{aligned}$$

Dabei wird J_i^κ zunächst noch nicht weiter spezifiziert. Es gilt lediglich, daß die Kontinuitätsgleichung nur dann erhalten bleibt, wenn $J_i^i = 0$ als Nebenbedingung erfüllt wird.

Für die einzelnen Klassen ergibt sich

$$\overset{(i)}{\alpha}{}_D^{\mu\nu} := \varrho n_D l_D^\mu b_D^\nu. \tag{A.11}$$

Die Zeitableitung wirkt sich hierbei nur auf ϱ und n_D aus. Für ϱ gilt die bekannte Kontinuitätsgleichung, für n_D die in (A.8) postulierte Versetzungszahl–Erhaltungsgleichung.

Es folgt:

$$\begin{aligned}
D_t^{(v)} \overset{(i)}{\alpha}{}_D^{\mu\nu} &= D_t^{(v)} (\varrho n_D) l_D^\mu b_D^\nu \\
&= -\partial_l v^l \overset{(i)}{\alpha}{}_D^{\mu\nu} - \partial_l \left(\overset{(i)}{\alpha}{}_D^{\mu\nu} u_D^l \right)
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Nun wird dies über alle Klassen summiert und berücksichtigt, daß

$$\overset{(i)}{\alpha}{}^{\mu\nu} := \sum_D \overset{(i)}{\alpha}{}_D^{\mu\nu} \tag{A.13}$$

den mittleren Versetzungsdichtetensor ergibt.

Der Vergleich der dann entstehenden Gleichungen liefert:

$$\partial_l \left(\sum_D \overset{(i)}{\alpha}{}_D^{\mu\nu} u_D^l \right) = -A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j J_k^\nu - \overset{(i)}{\alpha}{}^{\kappa\nu} A_\kappa^i J_i^\mu \tag{A.14}$$

Diese Gleichung ist die Bestimmungsgleichung (3.199) für J_i^μ aus u_D^l , denn nach Einsetzen von $\overset{(i)}{\alpha}{}_D^{\mu\nu} = \varrho n_D l_D^\mu b_D^\nu$ folgt wegen der Konstanz der Klassenvektoren im Gittersystem

$$\partial_l \left(\sum_D \varrho n_D u_D^l \right) l_D^\mu b_D^\nu = -A_i^\mu \varepsilon^{ijk} \partial_j J_k^\nu - \overset{(i)}{\alpha}{}^{\kappa\nu} A_\kappa^i J_i^\mu, \tag{A.15}$$

was nach Multiplikation mit A_μ^l zu Gleichung (3.199) wird.

A.3 Dissipative Systeme in der Punktmechanik

Mechanische Gleichungen

In der Punktmechanik kann die Bewegung $\mathbf{x}(t)$ einer Punktmasse unter Einwirkung einer Reibungskraft als Prototyp einer dissipativen Bewegung angesehen werden:

$$m\ddot{\mathbf{x}} = F_R. \quad (\text{A.16})$$

Für die Reibungskraft gibt es nun verschiedene Ansätze. Im allgemeinen hängt die Reibungskraft von der Geschwindigkeit ab, sodaß $F_R = F_R(\dot{\mathbf{x}})$ angesetzt werden kann.

Die Coulombsche Reibung beschreibt in guter Näherung die Reibungskraft, die bei der Bewegung zweier fester Körper entsteht. Sie hängt in einem weiten Bereich nicht von der Geschwindigkeit ab und kann als konstant angesetzt werden. Allerdings ist sie immer der Geschwindigkeit entgegengesetzt:

$$m\ddot{\mathbf{x}} + \mu \frac{\dot{\mathbf{x}}}{|\dot{\mathbf{x}}|} = 0. \quad (\text{A.17})$$

Im Falle $\dot{\mathbf{x}} = 0$ verschwindet diese Kraft, sodaß der Massenpunkt weiterhin ruht, sobald er zum Stillstand gekommen ist.

Nimmt man an, daß die Bewegung mit positiver Geschwindigkeit stattfindet, kann man wegen

$$\dot{\mathbf{x}} > 0 \quad (\text{A.18})$$

zu der eindimensionalen Gleichung

$$m\ddot{x} + \mu = 0 \quad (\text{A.19})$$

gelangen. Diese Gleichung beschreibt die Bewegung eines Körpers, der durch die Coulombsche Reibung gebremst wird, bis er zum Stillstand kommt. Da für $\dot{x} = 0$ keine äußere Kraft mehr auftritt, bleibt der Körper in Ruhe. Somit erhält man für die Koordinate dieses Punktes

$$x = x_0 + v_0 t - \frac{1}{2} \mu t^2 \quad \text{für } t = 0..t_{max}, \quad (\text{A.20})$$

wenn v_0 die Anfangsgeschwindigkeit ist, wobei

$$t_{max} := \frac{v_0}{\mu} \quad (\text{A.21})$$

der Zeitpunkt ist, an dem der Körper zu Ruhe kommt.

Die Gl.(A.19) ist äquivalent zur Bewegungsgleichung für den freien Fall, falls der Körper sich anfangs entgegen der Schwerkraft bewegt. Für den Fall positiver Geschwindigkeit kann also sofort eine Lagrangefunktion angeschrieben werden:

$$L := \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \mu x. \quad (\text{A.22})$$

Eine weitere Reibung, die häufig auftritt, ist die Stokessche. Die Reibungskraft ist hier proportional zur Geschwindigkeit und tritt auf, wenn sich ein Körper langsam in einer viskosen Flüssigkeit bewegt. Die Bewegungsgleichung lautet nun:

$$m\ddot{\mathbf{x}} + \gamma\dot{\mathbf{x}} = 0. \quad (\text{A.23})$$

Diese Gleichung ist nicht selbstadjungiert, sodaß sie garantiert keine Euler–Lagrange–Gleichung einer Lagrangefunktion ist. Allerdings kann sie in eine selbstadjungierte Gleichung transformiert werden:

$$e^{\frac{\gamma}{m}t} (m\ddot{\mathbf{x}} + \gamma\dot{\mathbf{x}}) = 0 \quad (\text{A.24})$$

ist zu Gl.(A.23) äquivalent, da der Vorfaktor nicht verschwindet. Eine zugehörige Lagrangefunktion lautet

$$L = e^{\frac{\gamma}{m}t} \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 \right). \quad (\text{A.25})$$

Diese hängt zwar explizit von der Zeit ab, ihre Euler–Lagrange–Gleichung lautet aber:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{\gamma}{m}t} m \dot{\mathbf{x}} \right) &= 0 \\ \Leftrightarrow e^{\frac{\gamma}{m}t} (m\ddot{\mathbf{x}} + \gamma\dot{\mathbf{x}}) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Auf ähnliche Weise bekommt man die Lagrangefunktion für den Harmonischen Oszillator mit Stokesscher Reibung:

$$L = e^{\frac{\gamma}{m}t} \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2} \mathbf{x}^2 \right), \quad (\text{A.27})$$

die zu der Gleichung

$$e^{\frac{\gamma}{m}t} (m\ddot{\mathbf{x}} + \gamma\dot{\mathbf{x}} + D\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{A.28})$$

$$\Leftrightarrow m\ddot{\mathbf{x}} + \gamma\dot{\mathbf{x}} + D\mathbf{x} = 0 \quad (\text{A.29})$$

führt.

Abgeschlossene Systeme

Die oben gezeigten Lagrangefunktionen beschreiben zwar Systeme mit Reibung. Diese Systeme sind aber nicht abgeschlossen, wie die Energiebilanz zeigt. Für den harmonischen Oszillator mit Stokesscher Reibung ergibt sich nach Multiplikation mit $\dot{\mathbf{x}}$:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2} D \mathbf{x}^2 \right) + \gamma \dot{\mathbf{x}}^2 = 0. \quad (\text{A.30})$$

Die mechanische Energie nimmt also immer ab, bis der Körper zur Ruhe gekommen ist. Betrachtet man diesen Oszillator aber als energetisch abgeschlossenes System, erkennt man, daß die Beschreibung unvollständig ist.

Um das System (A.29) energetisch abzuschließen, müssen neue Variablen eingeführt werden. Geht man davon aus, daß die dissipierte Energie sofort zu einer Temperaturerhöhung der Gleichgewichtstemperatur T führt, so kann in der Näherung einer konstanten spezifischen Wärme C die Gleichung

$$C\dot{T} = \gamma\dot{\mathbf{x}}^2 \quad (\text{A.31})$$

angesetzt werden. Dabei ist unter der Gleichgewichtstemperatur T die Temperatur des Gesamtsystems zu verstehen, und die spezifische Wärme C muß zum Gesamtsystem gehören. Es wird jedoch keine Aussage gemacht, ob die Temperatur zum Punktteilchen gehört – das in strenger Betrachtung ja kein thermodynamisches System darstellt –, wobei hier von der Idealisierung eines Massenpunktes abgegangen werden muß, oder zu einem Körper, auf dessen Oberfläche sich der Massenpunkt bewegt bzw. zu einer Flüssigkeit, in der er sich für den Stokeschen Fall ebenfalls bewegen kann.

Die Gesamtenergie des Systems

$$E = \frac{1}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 + CT \quad (\text{A.32})$$

ist dann zeitlich konstant, denn mit den Gl.(A.30) und (A.31) folgt

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 + CT \right) = 0. \quad (\text{A.33})$$

Lagrangefunktionen für abgeschlossene dissipative Systeme

Neben dem in dieser Arbeit zum Thema Dissipation – beziehend auf die Arbeiten von Anthony – eingeschlagenen Weg, dissipative Vorgänge in den Lagrangeformalismus einzubauen, soll hier ein anderer Weg aufgezeigt werden, der allerdings für ein spezielles System entwickelt wird.

Wenn in der Lagrangefunktion

$$L = e^{\frac{\gamma}{m}t} \left(\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 \right) \quad (\text{A.34})$$

keine explizite Zeitabhängigkeit mehr enthalten wäre, liefert das Noether–Theorem formal eine abgeschlossene Energiebilanz.

Der Exponentialterm $e^{\frac{\gamma}{m}t}$ kann implizit als Lösung der Gleichung

$$\frac{\dot{f}}{f} - \frac{\gamma}{m} = 0 \quad \text{mit} \quad f \neq 0 \quad (\text{A.35})$$

aufgefaßt werden.

Zwar enthält die Lösung dieser Gleichung noch eine Konstante

$$f = f_0 e^{\frac{\gamma}{m}t}, \quad (\text{A.36})$$

die aber in den relevanten Gleichungen keine Rolle spielt. Wird die Gleichung (A.35) mittels eines Lagrange-Multiplikators h erzwungen, so lautet die Lagrangefunktion nun:

$$L = f \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2} D \mathbf{x}^2 \right) + h \left(\frac{\dot{f}}{f} - \frac{\gamma}{m} \right). \quad (\text{A.37})$$

Die Euler-Lagrange-Gleichungen lauten damit:

$$\delta h \quad : \quad \frac{\dot{f}}{f} - \frac{\gamma}{m} = 0 \Rightarrow f = f_0 e^{\frac{\gamma}{m} t} \quad (\text{A.38})$$

$$\delta \mathbf{x} \quad : \quad \frac{d}{dt} (f m \dot{\mathbf{x}}) + f D \mathbf{x} = 0, \quad (\text{A.39})$$

$$\Rightarrow m \ddot{\mathbf{x}} + \gamma \dot{\mathbf{x}} + D \mathbf{x} = 0, \quad (\text{A.40})$$

$$\delta f \quad : \quad \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2} D \mathbf{x}^2 \right) - \frac{\dot{h}}{f} = 0. \quad (\text{A.41})$$

Die erste Gleichung liefert die angesetzte Bewegungsgleichung für die Hilfsgröße f , die zweite ist die Bewegungsgleichung des gedämpften harmonischen Oszillators, die dritte zeigt den Zusammenhang zwischen den Variablen x , f und dem Lagrange-Multiplikator.

Die Bedeutung dieses Multiplikators wird deutlicher, wenn man sich die Energie ansieht, die aus dem Noether-Theorem folgt:

$$\begin{aligned} E_N &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{f}} \dot{f} - L \\ &= f \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2} D \mathbf{x}^2 \right) + h \frac{\gamma}{m}. \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Dieser Ausdruck ist eine Erhaltungsgröße:

$$\frac{d}{dt} E_N = 0. \quad (\text{A.43})$$

Spaltet man den bekannten Anteil der mechanischen Energie ab, so erhält man:

$$E_N = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2} D \mathbf{x}^2 + \left(h \frac{\gamma}{m} + (f - 1) \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2} D \mathbf{x}^2 \right) \right). \quad (\text{A.44})$$

Nun sieht man, wie in diesem Modell die Energie erhalten bleibt. Zwar liefern die Bewegungsgleichungen ebenfalls eine abnehmende mechanische Energie, die aber offensichtlich auf den zusätzlichen Energie-Term

$$E_Z = h \frac{\gamma}{m} + (f - 1) \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2} D \mathbf{x}^2 \right) \quad (\text{A.45})$$

übergeht. Damit ist ein dissipativer Vorgang in einem abgeschlossenen System beschrieben. Allerdings ist die Zusatzenergie hier noch nicht mit thermischen Freiheitsgraden in Verbindung gebracht. Man kann aber die Gleichgewichtstemperatur dadurch einführen, daß der Multiplikator h durch folgenden Term substituiert wird:

Dabei wird lediglich ein *Variablenwechsel* vorgenommen, es werden aber *keine* neuen Größen eingeführt:

$$h := \frac{m}{\gamma}CT - \frac{m}{\gamma}(f-1) \left(\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 \right). \quad (\text{A.46})$$

Dann ist die Energie die Summe aus mechanischer und thermischer Energie

$$E_N = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 + CT \quad (\text{A.47})$$

In der Lagrangefunktion führt diese Substitution zu

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 - CT \\ &+ CT \frac{m\dot{f}}{\gamma f} + \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 \left((f-1) \left(2 - \frac{m\dot{f}}{\gamma f} \right) \right) - \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 \left((f-1) \frac{m\dot{f}}{\gamma f} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

In der ersten Zeile erkennt man die Differenz aus zwei Energien, wobei die bekannte Faustregel “kinetische minus potentielle Energie” abgelöst wird durch “kinetische minus innere Energie”, wobei die innere Energie hier aus elastischer und thermischer Energie additiv zusammengesetzt ist.

In der zweiten Zeile befinden sich Terme, in denen die drei Energieanteile mit verschiedenen Formen der Hilfsgröße f und deren Ableitungen verknüpft werden. Offensichtlich ist es gerade diese Art der Verknüpfung, die vermöge der Größe f den Transfer von mechanischen auf thermische Freiheitsgrade ermöglicht und in einem Extremalprinzip zur Anwendung kommt.

Die Euler–Lagrange–Gleichungen lauten nun:

$$\delta T : \frac{m\dot{f}}{\gamma f} - 1 = 0 \Rightarrow \text{Bestimmungsgleichung für } f \quad (\text{A.49})$$

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{x} : & m\ddot{\mathbf{x}} + D\mathbf{x} + \frac{d}{dt} \left(m\dot{\mathbf{x}}(f-1) \left(2 - \frac{m\dot{f}}{\gamma f} \right) \right) \\ & + D\mathbf{x} \left((f-1) \frac{m\dot{f}}{\gamma f} \right) = 0 \\ & \stackrel{(\text{A.49})}{\Rightarrow} f(m\ddot{\mathbf{x}} + \gamma\dot{\mathbf{x}} + D\mathbf{x}) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

$$\begin{aligned} \delta f : & \frac{m}{\gamma}C\dot{T} \frac{1}{f} - \frac{1}{f} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 \frac{m}{\gamma} (f-1) \right) - \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 \left(2 - \frac{m\dot{f}}{\gamma f} \right) \\ & - \frac{1}{f} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 \frac{m}{\gamma} (f-1) \right) + \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 \frac{m\dot{f}}{\gamma f} = 0 \\ & \stackrel{(\text{A.49})}{\Rightarrow} C\dot{T} - f\gamma\dot{\mathbf{x}}^2 - (f-1) \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 \right) = 0 \\ & \stackrel{(\text{A.50})}{\Rightarrow} C\dot{T} - \gamma\dot{\mathbf{x}}^2 = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

Man erkennt, daß unter Benutzung der ersten beiden Gleichungen die Variation nach f zu der richtigen Temperaturbilanz führt.

Die Substitutionen

$$f := e^\varphi \quad (\text{A.52})$$

$$\omega := \frac{\gamma}{m} \quad (\text{A.53})$$

führt schließlich zur Lagrangefunktion:

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 - CT + CT\frac{\dot{\varphi}}{\omega} \\ & + \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 \left((e^\varphi - 1) \left(2 - \frac{\dot{\varphi}}{\omega} \right) \right) - \frac{1}{2}D\mathbf{x}^2 \left((e^\varphi - 1) \frac{\dot{\varphi}}{\omega} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

Man erkennt, daß die Größe φ eine starke Analogie zur thermischen Phase in Gl.(4.4) besitzt. Die Einbindung der Dissipation geschieht in dieser Lagrangefunktion jedoch auf einem anderen Weg, nämlich über den Term in der zweiten Zeile von Gl.(A.54).

Zur Interpretation von f :

Zwar ist $f \sim e^{\omega t}$, wächst also exponentiell an. Ihre Inverse aber ist exponentiell fallend

$$f^{-1} = f_0^{-1} e^{-\omega t} \quad (\text{A.55})$$

und kann z.B. mit dissipativen Prozessen in einer Flüssigkeit in Zusammenhang gebracht werden, wenn es um die Stokessche Reibung geht. Wirbel, die um den strömenden Körper herum entstehen, werden durch die innere Reibung der Flüssigkeit gedämpft, dadurch wird mechanische Energie dissipiert. Damit könnte die Wirbel-dichte in Beziehung zur Größe f gesetzt werden.

Für Coulombsche Reibung funktioniert dieser Ansatz, eine explizite Zeitabhängigkeit in der Lagrangefunktion durch eine Hilfsgröße zu ersetzen, ebenfalls.

Die Columbsche Reibung kann als

$$\frac{d}{dt} \left(m\dot{\mathbf{x}} + \mu \frac{\dot{\mathbf{x}}}{|\dot{\mathbf{x}}|} t \right) = 0 \quad (\text{A.56})$$

umgeschrieben werden¹.

Damit wird die Lagrangefunktion zu

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + \mu|\dot{\mathbf{x}}|t. \quad (\text{A.57})$$

¹Es wird darauf verzichtet, auf mathematische Probleme der Differenzierbarkeit im Punkt $\dot{\mathbf{x}} = 0$ einzugehen. Hier muß bei der Variation natürlich dieses Problem berücksichtigt werden.

Mit der Substitution $g := \mu t$ und Hinzunahme der Gleichung $\dot{g} = \mu$ mittels eines Lagrangemultiplikators sowie der Forderung, daß die Energie dieses Systems

$$E_N = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + CT \quad (\text{A.58})$$

sein soll, ergibt sich analog zur obigen Rechnung:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - CT + CT\frac{\dot{g}}{\mu} + g|\dot{\mathbf{x}}| \quad (\text{A.59})$$

mit den Euler–Lagrange–Gleichungen

$$\delta T : C \left(\frac{\dot{g}}{\mu} - 1 \right) = 0 \Rightarrow g = g_0 + \mu t \quad (\text{A.60})$$

$$\delta \mathbf{x} : m\ddot{\mathbf{x}} + \frac{\dot{\mathbf{x}}}{|\dot{\mathbf{x}}|}\dot{g} = 0 \Rightarrow m\ddot{\mathbf{x}} + \mu \frac{\dot{\mathbf{x}}}{|\dot{\mathbf{x}}|} = 0 \quad (\text{A.61})$$

$$\delta g : CT\frac{1}{\mu} - |\dot{\mathbf{x}}| = 0 \Rightarrow CT = \mu|\dot{\mathbf{x}}|. \quad (\text{A.62})$$

Hier ist $\mu|\dot{\mathbf{x}}|$ die zu erwartende Dissipationsrate für den Coulombschen Fall.

Für die Substitutionen

$$g := \varphi \quad (\text{A.63})$$

$$\mu := \omega \quad (\text{A.64})$$

erhält man die Lagrangefunktion, die die Dissipationsrate $\mu|\dot{\mathbf{x}}|$ mit der explizit auftretenden thermischen Phase an die Temperaturgleichung ankoppelt:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - CT + CT\frac{\dot{\varphi}}{\omega} + \frac{\varphi}{\omega}\mu|\dot{\mathbf{x}}|. \quad (\text{A.65})$$

Literaturverzeichnis

K.-H. Anthony, 1970a

Die Reduktion von nichteuklidischen geometrischen Objekten in eine euklidische Form und physikalische Deutung der Reduktion durch Eigenspannungszustände in Kristallen

Arch. Rat. Mech. Anal. **37** 161

K.-H. Anthony, 1970b

Die Theorie der Disklinationen

Arch. Rat. Mech. Anal. **39** 43

K.-H. Anthony, 1974

Feldtheorie physikalischer Linienstrukturen

Habilitationsschrift Universität Stuttgart

K.-H. Anthony, 1988

Entropy and Dynamical Stability – a Method Due to Lagrange–Formalism as Applied to Thermodynamics of Irreversible Processes

in: Trends in Application of Mathematics to Mechanics (Hrg.: J. F. Besseling und W. Eckhaus) Springer

K.-H. Anthony, 1989

Unification of Continuum Mechanics and Thermodynamics by Means of Lagrange Formalism — Present Status of the Theory and Presumable Applications

Arch. Mech. **41** 511

K.-H. Anthony, 1990

Phenomenological Thermodynamics of Irreversible Processes within Lagrange Formalism

Acta Physica Hungarica **67** 321

K.-H. Anthony, A. Azirhi, 1998

Lagrangian field theory of plasticity and dislocation dynamics – attempts towards unification with thermodynamics of irreversible processes

Arch. Mech. **50** 345

- A. Azirhi**, 1998
Neue Zugänge zur Versetzungsdynamik und Plastizitätstheorie
Dissertation Universität-GH Paderborn
- H. Bateman**, 1929
Notes on a Differential Equation which Occurs in the Two-Dimensional Motion of a Compressible Fluid and the Associated Variational Problems
Proc. Roy. Soc. London **A 125** 598
- E. Bessel-Hagen**, 1921
Über die Erhaltungssätze der Elektrodynamik
Math. Ann. **84** 258
- B. A. Bilby, R. Bullough, E. Smith**, 1955
Continuous distributions of dislocations: a new application of the methods of non-Riemannian geometry
Proc. Roy. Soc. London **A 231** 263
- B. A. Bilby, E. Smith**, 1956
Continuous distributions of dislocations
Proc. Roy. Soc. London **A 236** 481
- A. Clebsch**, 1857
Über eine allgemeine Transformation der hydrodynamischen Gleichungen
J. reine u. angew. Math. **54** 293
- A. Clebsch**, 1859
Über die Integration der hydrodynamischen Gleichungen
J. reine u. angew. Math. **56** 1
- E. Cosserat, F. Cosserat**, 1909
Théorie des corps déformables
Paris: A. Hermann et fils
- P. G. DeGennes**, 1974
The Physics of Liquid Crystals
Oxford University Press London
- A. C. Eringen**, 1971
Tensor Analysis
in: Continuum Physics (Hrg.: A. C. Eringen) Academic Press New York – London
- H. Goldstein**, 1972
Klassische Mechanik
Akademische Verlagsgesellschaft Frankfurt a.M.
- W. Günther**, 1958
Zur Statik und Kinematik des Cosseratschen Kontinuums
Abh. d. Braunsch. Wiss. Ges. **10** 195

-
- D. Jou, J. Casas-Vázquez, G. Lebon, 1993**
Extended Irreversible Thermodynamics
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York
- H. Kleinert, 1989**
Gauge fields in condensed matter II - Stresses and defects
World Scientific Publishing Co., Singapore
- K. Kondo, 1955**
Memoirs of the unifying study of the basic problems in engineering sciences by means of geometry
Tokyo, Gakujutsu Bunken Fukyu-Kai
- A. M. Kosevich, 1979**
Crystal Dislocations and the Theory of Elasticity
in: Dislocations in Solids, Band I (Hrg.: F.R.N. Nabarro) North-Holland Publ. Comp. Amsterdam – New York – Oxford
- E. Kröner, 1958**
Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen
Springer Verlag Berlin – Göttingen – Heidelberg
- E. Kröner (Hrg.), 1968**
Mechanics of Generalized Continua
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York
- E. Kröner, 2001**
Benefits and shortcomings of the continuous theory of dislocations
Int. J. Sol. Struct. **38** 1115
- L.D. Landau, E.M. Lifschitz, 1997**
Lehrbuch der Theoretischen Physik: Band I: Mechanik
Akademie Verlag, Berlin
- L.D. Landau, E.M. Lifschitz, 1991**
Lehrbuch der Theoretischen Physik: Band VII: Elastizitätstheorie
Akademie Verlag, Berlin
- C. C. Lin, 1963**
Hydrodynamics of Helium II, in: Liquid Helium (Hrg.:G. Careri)
Proc. Int. School of Physics “Enrico Fermi” **21** 93
- J.-L. Marqués-Lopéz, 2002**
The Superconductor as Model for the Hardening Stages in a Dislocated Crystal
Dissertation Universität Paderborn
- J. Meixner, H.G. Reik, 1959**
Thermodynamik irreversibler Prozesse
in: Handbuch der Physik Band III.2 (Hrg.: S. Flügge): Prinzipien der Thermodynamik und Statistik Springer Verlag Berlin

- H. K. Moffat**, 1969
The Degree of Knottedness of Tangled Vortex Lines
J. Fluid Mech. **35** 117
- E. Noether**, 1918
Invariante Variationsprobleme
Nachr. Ges. Wiss. Göttingen Math.-Phys. Kl. 235
- E. Orowan**, 1934
Zur Kristallplastizität
Z. Phys. **89** 605
- M. Peach, J. S. Köhler**, 1950
The Forces Exerted on Dislocations and the Stress Fields Produced by Them
Phys. Rev. **80** 436
- M. Polanyi**, 1934
Über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte
Z. Phys. **89** 660
- V. L. Popov, E. Kröner**, 1998
On the role of scaling in the theory of elastoplasticity
Phys. Mesomechanics **1** 103
- V. L. Popov, E. Kröner**, 1999
On the dynamic theory of elastoplastic medium with microstructure
Comp. Mat. Sci. **16** 218
- S.G. Psakhie, Y. Horie, S.Yu. Korostelev, A.Yu. Smolin, A.I. Dmitriev, E.V. Shilko**, 1995
Movable cellular automata method as a tool for simulation within framework of physical mesomechanics of materials
Rus. Phys. J. **11** 1157
- W. T. Read**, 1953
Dislocations in Crystals
McGraw-Hill
- R. M. Santilli**, 1977
Necessary and Sufficient Conditions for the Existence of a Lagrangian in Field Theory I - Variational Approach to Self-adjointness for Tensorial Field Equations
Ann. Phys. **103** 354
- R. M. Santilli**, 1978
Foundations of Theoretical Mechanics I - The Inverse Problem in Newtonian Mechanics
Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg, Tokyo
- M. Schargott**, 2001
Friction in deformable media. A field theoretical approach towards a thermodynamics of dissipative processes within Lagrange formalism
Phys. Mesomechanics **4** 47

- E. Schmutzer**, 1972
Symmetrien und Erhaltungssätze der Physik
Akademie Verlag Berlin
- M. Scholle**, 1999
Das Hamiltonsche Prinzip in der Kontinuumstheorie nichtdissipativer und dissipativer Systeme
Dissertation Universität-GH Paderborn
- J.A. Schouten**, 1954
Ricci-Calculus (second edition)
Springer Verlag Berlin – Göttingen – Heidelberg
- J.A. Schouten**, 1989
Tensor Analysis for Physicists (second edition)
Dover Publications, Inc., New York
- R. L. Seliger, G. B. Whitham**, 1968
Variational Principles in Continuum Mechanics
Proc. Roy. Soc. London **A 305** 1
- G.I. Taylor**, 1934
The mechanism of plastic deformation of crystals
Proc. Roy.Soc.London **A 145** 362
- H.-J. Wagner**, 1997
Das inverse Problem der Lagrangeschen Feldtheorie in Hydrodynamik, Plasmadynamik und hydrodynamischem Bild der Quantenmechanik
Habilitationsschrift Universität-GH Paderborn

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt zunächst Professor Karl-Heinz Anthony, der mir beim Erstellen dieser Arbeit alle Freiheiten gegeben hat, die man sich für die Forschung wünschen kann. Ich glaube, daß nur so kreatives und schöpferisches Arbeiten möglich ist. Dafür meinen herzlichen Dank, ebenso für seine ständige Bereitschaft, meine Arbeit mit Vorschlägen zu unterstützen und in Diskussionen zu verbessern. Und schließlich waren es seine Vorlesungen und seine Fähigkeit, die Physik anschaulich und verständlich zu erklären, die mich bewogen haben, diese Arbeit zu beginnen.

Vielen Dank auch an Professor Valentin L. Popov, der sich freundlicherweise bereit erklärt hat, das Zweitgutachten zu übernehmen. Darüberhinaus habe ich durch seine Arbeiten und die Diskussionen mit ihm erfahren, wie wichtig die Kreativität für die wissenschaftliche Forschung ist und wie einfach manchmal das Leben sein kann.

Ebenso bedanke ich mich bei allen Mitgliedern der theoretischen Physik in Paderborn. Der große Vorteil dort ist die Unterbringung aller Professoren und Mitarbeiter auf einem Flur, was zu einem besonders kollegialen Arbeitsklima führte. Insbesondere die Diskussionen im "Kaffeeraum" trugen zum Gelingen dieser Arbeit bei, und zwar auch gerade deswegen, weil es in ihnen oftmals nicht um Physik ging. Besonders vermissen werde ich die *Kuchen-* und *Pizza-*Tradition: wenn auch die Zeit oftmals knapp war, manchmal ist es gut, eine Pause einlegen zu können.

An dieser Stelle besonderen Dank an Uwe Gerstmann, Marc Amkreutz, Alexander Blumenau und Eva Rauls für die zahlreichen spannenden und informativen Unterhaltungen, Markus Scholle für seine ständige Bereitschaft, mich mit Tips und Anregungen zu versorgen, H. J. Wagner und Jörg Meyer für ihren scheinbar nie versiegenden Reichtum an Anekdoten zur Physik, dem Leben, dem Universum und dem ganzen Rest, und an Professor Gerhard Leßner für seine Einblicke in die Politik, Wirtschaft und die Irrungen und Wirrungen unseres Rechtssystems.

Zoltan Hajnal, Christof Köhler und Peter König habe ich für die funktionierenden Rechner und Drucker zu danken: Sie haben mir immer das Gefühl gegeben, daß mein Computer und meine Daten in sicheren Händen sind (sprich: in ihren). Dies gilt auch für Michael Sternberg, dem ich darüberhinaus für die Erlaubnis, Teile seines L^AT_EX-Stils benutzen zu dürfen, dankbar bin.

Nicht vergessen darf und möchte ich unsere ehemalige Sekretärin Astrid Canisius, die in allen Lebenslagen sofort Rat und Tat wußte: vielen herzlichen Dank.

Last not least gilt mein Dank natürlich auch meiner Familie und meiner Frau Christine, die mich auch in Streßphasen ertragen haben, und bei denen ich immer einen Ruhepol finden konnte.