

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 7 (1934)
Heft: VI

Artikel: Zur Berechnung physikalischer Konstanten quasiisotroper Vielkristalle
Autor: Boas, W. / Schmid, E.
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-110392>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 13.10.2024

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Zur Berechnung physikalischer Konstanten quasiisotroper Vielkristalle

von W. Boas und E. Schmid.

(13. VII. 34.)

Zusammenfassung. Ein von A. HUBER und dem einen von uns angegebenes Verfahren zur Berechnung der elastischen Moduln quasiisotroper Vielkristalle aus dem Einkristallverhalten wird an einer Reihe von Metallen überprüft und mit andern Mittelungsverfahren verglichen. Die Bewährung des neuen Verfahrens wird dabei deutlich. Die Übertragung auch auf andere Eigenschaften (Ausdehnungskoeffizient, spez. elektrischer Widerstand) führt auch hier zu einer befriedigenden Wiedergabe der Beobachtungen.

Im vorangehenden Artikel ist eine Mittelung beschrieben worden für den Elastizitäts- und Torsionsmodul quasiisotroper Vielkristalle aus den elastischen Parametern des Einkristalls. Hier vergleichen wir zunächst die auf diese Weise und nach früher angegebenen Verfahren berechneten Vielkristallwerte mit der Erfahrung. Weiterhin wird das neue Mittelungsprinzip auch für Ausdehnungskoeffizient und spezifischen Widerstand angewendet und der Vergleich mit dem Experiment durchgeführt.

I. Elastizitäts- und Torsionsmodul.

In Tabelle 1 ist das Ergebnis der nach den verschiedenen Methoden berechneten Mittelwerte der Moduln angegeben. Die Berechnung nach VOIGT¹⁾ erfolgt nach den Formeln:

$$E = \frac{(A - B + 3C)(A + 2B)}{2A + 3B + C}; \quad G = \frac{1}{5}(A - B + 3C),$$

$$\text{wobei } 3A = c_{11} + c_{22} + c_{33}$$

$$3B = c_{12} + c_{23} + c_{31}$$

$$3C = c_{44} + c_{55} + c_{66}$$

bedeuten.²⁾ Die Berechnung nach REUSS³⁾ ist für kubische Kristalle durch die Ausdrücke

$$E = \frac{5}{3s_{11} + 2s_{12} + s_{44}} \quad \text{und} \quad G = \frac{5}{4s_{11} - 4s_{12} + 3s_{44}}$$

¹⁾ W. VOIGT, Lehrb. der Kristallphysik, Teubner, 1910.

²⁾ c_{ik} und s_{ik} sind die elastischen Parameter in Voigtscher Bezeichnungsweise.

³⁾ A. REUSS, Z. angew. Math. u. Mech. **9**, 49, 1929.

gegeben. Für die Berechnung nach BRUGGEMAN sei auf die Originalarbeit¹⁾, für die Rechnung nach HUBER-SCHMID auf den vorangehenden Artikel verwiesen.

Die Hauptschwierigkeit für die Beurteilung der einzelnen Mittelungsverfahren bildet die Auswahl des Beobachtungswertes der Moduln. Besonders bei starker elastischer Anisotropie der Einzelkörner spielt ihre Orientierung im vielkristallinen Aggregat eine wesentliche Rolle. Angabe der Lagenmannigfaltigkeit in der untersuchten Probe ist ein unerlässliches Erfordernis. Dem ist jedoch bei den bisher vorliegenden Bestimmungen der Moduln kaum Rechnung getragen. Es besteht daher keineswegs die Sicherheit, dass die unter „beob.“ eingetragenen Werte wirklich an regellos orientierten Vielkristallen gemessen sind, worauf sich die theoretischen Mittelwertbildungen beziehen. Immerhin glauben wir, dass die in Tab. 1 eingetragenen Werte einigermaßen zutreffend sind für feinkörnigen, quasiisotropen Zustand. Erkennt man dies an, so zeigen die Zahlen zunächst, dass die nach VOIGT und REUSS berechneten Mittelwerte nur eine sehr rohe Annäherung bedeuten und überdies systematische Abweichungen von den Beobachtungen aufweisen: sämtliche Werte nach VOIGT sind grösser, sämtliche Werte nach REUSS kleiner als die experimentellen. Nur im Falle der durch geringe elastische Anisotropie gekennzeichneten Metalle Aluminium und Magnesium werden die Beobachtungen richtig wiedergegeben.

Die beiden anderen Mittelungsverfahren liefern eine deutlich bessere Annäherung an die experimentellen Werte. Eine Bevorzugung eines der beiden ist auf Grund der Zahlen nicht möglich. Immerhin sei bemerkt, dass auch noch die BRUGGEMAN'schen Werte *stets über* den beobachteten liegen. Wenn also auch die numerischen Rechnungen keines der beiden letzten Verfahren hervorheben, so scheint uns doch, mit Rücksicht auf die speziellen Voraussetzungen, welche das BRUGGEMAN'sche Rechenverfahren fordert²⁾, die neue, so durchsichtige und einfache Mittelung ein gangbarer Weg zur Berechnung der elastischen Eigenschaften von Vielkristallen zu sein.

II. Thermische Ausdehnung; spezifischer Widerstand.

Im nachfolgenden ziehen wir das am Beispiel elastischer Moduln bewährte Mittelungsverfahren auch zur Berechnung anderer Eigenschaften heran. Für den Fall des spezifischen Wider-

1) D. A. G. BRUGGEMAN, Dissertation, Utrecht, 1930.

2) Vgl. die vorangehende Mitteilung.

Tabelle 1.

Vergleich von Berechnung*) und Beobachtung**) für Elastizitätsmodul und Torsionsmodul.

Metall	Elastizitätsmodul (10^{11} Dyn/cm ²)					Torsionsmodul (10^{11} Dyn/cm ²)				
	Voigt	Reuss	Bruggeman	Huber-Schmid	beob.	Voigt	Reuss	Bruggeman	Huber-Schmid	beob.
Aluminium	7,03	7,01	7,01	7,03	7,1	2,62	2,60	2,61	2,61	2,7
Kupfer	14,4	11,4		11,7	11,9	5,46	4,00		4,21	4,3
Silber	8,73	6,89	7,93	7,35	7,9	3,23	2,49	2,90	2,59	2,7
Gold	9,06	7,11	8,20	7,61	8,0	3,22	2,49	2,89	2,60	2,8
α -Messing (72% Cu) .	13,3	9,03	11,2	10,3	~10	5,04	3,27	4,14	3,49	~4
α -Eisen	22,7	19,4		20,3	21,0	8,88	7,41		7,62	8,2
Magnesium	4,44			4,43	4,4	1,75			1,74	1,8
Zink	10,96		9,94	9,85	9,8	4,42		4,01	3,55	3,6
Cadmium	6,63		6,03	6,00	5,0	2,50		2,27	2,09	2,2

*) Der Berechnung zugrunde liegende elastische Parameter aus: E. GOENS, Ann. d. Phys. **17**, 233, 1933 (Al); E. GOENS und J. WEERTS, Zeitschr. f. Instr.-Kde. **52**, 167, 1932 (Cu); H. RÖHL, Ann. d. Phys. **16**, 887, 1933 (Ag, Au); M. MASIMA und G. SACHS, Zeitschr. f. Phys. **50**, 161, 1928 (α -Ms); E. GOENS und E. SCHMID, Naturw. **19**, 520, 1931 (α -Fe); E. GOENS und E. SCHMID, Naturw. **19**, 376, 1931 (Mg); E. GOENS, Ann. d. Phys. **16**, 793, 1933 (Zn); die Werte nach BRUGGEMAN sind mit den etwas verschiedenen Parametern aus der für Cd zitierten Arbeit berechnet); E. GRÜNEISEN und E. GOENS, Phys. Zeitschr. **24**, 506, 1923 (Cd).

**) Nach LANDOLT-BÖRNSTEIN-ROTH-SCHEEL, Phys.-chem. Tabellen, 5. Aufl.

Tabelle 2.

Vergleich von Berechnung*) und Beobachtung**) für thermische Ausdehnung und spezifischen Widerstand.

Metall	Therm. Ausdehnung		Spez. Widerstand bei 20° C (10^{-6} Ω cm)		
	ber. zw. 20 u. 100° C	beob. zw. 0 u. 100° C	ber. n. (1)	ber. n. (2)	beob.
Magnesium	25,9	26,0	4,29	4,32	4,4
Zink	30,7	30,0	5,89	5,91	6,0
Cadmium	31,8	31,6	7,30	7,37	7,4
β -Zinn	20,5***)	23,0	11,0	11,4	11,1

*) Der Berechnung zugrunde liegende Kristallwerte: E. GOENS und E. SCHMID, Naturw. **19**, 376, 1931 (Mg); E. GOENS und E. GRÜNEISEN, Ann. d. Phys. **14**, 164, 1932 (Widerstand Zn und Cd); E. GRÜNEISEN und E. GOENS, Zeitschr. f. Phys. **29**, 141, 1924 (therm. Ausdehn. Zn und Cd); P. W. BRIDGMAN, Proc. Am. Acad. **60**, 305, 1925 (Sn).

**) Nach KOHLRAUSCH, Lehrb. d. prakt. Physik, 16. Aufl. 1930.

***) Bei ca. 20° C.

stands ist bereits bei VOIGT eine Berechnung für das regellose Kristallaggregat durchgeführt¹⁾. Es werden Gründe dafür gebracht, dass die Mittelung der Leitfähigkeitskonstanten gegenüber der der Widerstandskonstanten zu bevorzugen ist. Für den mittleren Widerstand $\bar{\varrho}$ des Vielkristalls folgt daraus der Ausdruck

$$\frac{1}{\bar{\varrho}} = \frac{1}{3 \varrho_1} + \frac{1}{3 \varrho_2} + \frac{1}{3 \varrho_3},$$

worin ϱ_1 , ϱ_2 und ϱ_3 die drei Hauptleitfähigkeiten bedeuten. Für Kristalle mit einer Hauptachse geht diese Formel in

$$\frac{1}{\bar{\varrho}} = \frac{1}{3 \varrho_{\parallel}} + \frac{2}{3 \varrho_{\perp}} \quad \text{über.} \quad (1)$$

Das direkte Mittelungsverfahren geht wieder von dem Ausdruck für die Orientierungsabhängigkeit der zu mittelnden Grösse aus. Dieser lautet für Kristalle mit einer ausgezeichneten Achse für eine ganze Reihe von Eigenschaften (thermische Ausdehnung, spezifischer Widerstand für Wärme und Elektrizität, Thermokraft, magnetische Suszeptibilität u. a.)

$$f(\zeta) = f_{\parallel} \cos^2 \zeta + f_{\perp} \sin^2 \zeta,$$

worin ζ den Winkel zwischen betrachteter Richtung und Hauptachse, f_{\parallel} und f_{\perp} die Werte der Eigenschaft parallel und senkrecht zur Hauptachse bedeuten. Der Mittelwert \bar{f} für den feinkörnigen, quasiisotropen Vielkristall folgt daraus zu

$$\bar{f} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} f(\zeta) \sin \zeta \, d\zeta \, d\varphi = \frac{1}{3} f_{\parallel} + \frac{2}{3} f_{\perp}. \quad (2)$$

Für die elektrische Leitfähigkeit ist die Art der direkten Mittelung schon von ANDRADE und CHALMERS²⁾ angegeben worden. Man erhält dadurch für $\bar{\varrho}$, wenn $\varrho_{\parallel} > \varrho_{\perp}$

$$\bar{\varrho} = \frac{\sqrt{\varrho_{\perp} (\varrho_{\parallel} - \varrho_{\perp})}}{\operatorname{arctg} \sqrt{\frac{\varrho_{\parallel} - \varrho_{\perp}}{\varrho_{\perp}}}}, \quad (3a)$$

wenn $\varrho_{\parallel} < \varrho_{\perp}$

$$\bar{\varrho} = \frac{2 \sqrt{\varrho_{\perp} (\varrho_{\perp} - \varrho_{\parallel})}}{\operatorname{lg} \frac{\sqrt{\varrho_{\perp} + \sqrt{\varrho_{\perp} - \varrho_{\parallel}}}}{\sqrt{\varrho_{\perp} - \sqrt{\varrho_{\perp} - \varrho_{\parallel}}}}}. \quad (3b)$$

¹⁾ W. VOIGT, l. c.

²⁾ E. N. da C. ANDRADE und B. CHALMERS. Proc. Roy. Soc. **138**, 348, 1932.

Für die thermische Ausdehnung und den spez. elektrischen Widerstand ideal ungeordneter Vielkristalle ist der Vergleich zwischen Berechnung und Beobachtung in Tabelle 2 durchgeführt; es zeigt sich durchgehend befriedigende Übereinstimmung. Allerdings besteht auch hier die schon oben hervorgehobene Schwierigkeit bei der Auswahl der Beobachtungswerte. Zum Fehlen der Angabe der Textur der untersuchten Probe kommt beim spez. Widerstand hinzu, dass es sich hier um eine vom Reinheitsgrad wesentlich abhängige Eigenschaft handelt. Die Verschiedenheit des Materials bei der Widerstandsbestimmung im ein- und vielkristallinen Zustand stellt so eine neue Unsicherheit dar.

Zur Beurteilung der Übereinstimmung von beobachteten und berechneten Ausdehnungskoeffizienten sei daran erinnert, dass zwar beim Magnesiumkristall die Ausdehnung nahezu isotrop erfolgt, bei den übrigen Metallen dagegen sehr erhebliche Unterschiede in verschiedenen Richtungen vorhanden sind, die bei Zink 350% erreichen.

Eine experimentelle Entscheidung zwischen den Mittelungsformeln für den spez. Widerstand scheint noch nicht möglich. (Die nach (3a) bzw. (3b) berechneten Werte liegen zwischen den nach (1) und (2) erhaltenen). Die Widerstandsanisotropie der aufgeführten Metalle ist verhältnismässig gering (maximal 45% bei Zinn), und auch die Sicherheit des Beobachtungswertes ist nicht gross genug.

Physikal. Institut der Universität Freiburg.
