

4. Solitonen in der Festkörperphysik

Nach der Entdeckung von solitären Wellen in der Hydrodynamik und solitonischen Differentialgleichungen im vorigen Jahrhundert nahm die Solitentheorie in der Mitte dieses Jahrhunderts einen weiteren Anlauf durch die Entdeckung der SG-Gleichung als ein Modell in der Festkörperphysik, und zwar zuerst in der Kristallphysik. Sie beschreibt die Bewegung von wandernden Versetzungen in Kristallen, also wandernden Kristallbaufehlern. Auf diese Weise konnten Solitonenlösungen der SG-Gleichung physikalisch interpretiert und solitonische Eigenschaften studiert werden. Es war jedoch ein langer Weg bis zu einer diesbezüglichen Theorie. Den Anfang bildeten Vorstellungen, daß Fehlorderungen in Kristallen die Voraussetzung für die plastische Verformbarkeit des Festkörpers sein können. Ein Meilenstein in dieser Geschichte ist das nach seinen Entdeckern benannte Frenkel-Kontorova-Modell. Der bekannte St.Petersburger Professor für Theoretische Physik JAKOV IL'ITCH FRENKEL' (1894 - 1954) und seine Assistentin TATJANA ABRAMOVNA KONTOROVA (1911 - 1976) [Kurzbiographie] formulierten 1938 eine Gleichung, aus der man die SG-Gleichung durch räumliche Kontinuierung gewinnen kann. Hier wurde die Gleichung schon im Zusammenhang mit solitären Wellen - ohne expliziten Gebrauch dieses Begriffes - gesehen. FRENKEL und KONTOROVA fanden sogar die Ein-Solitonenlösung der SG-Gleichung. Diese Untersuchungen wurden in Stuttgart von den Theoretischen Physikern SEEGER et alias Ende der vierziger und Anfang der fünfziger Jahre fortgesetzt. Während dieser Arbeit stieß ALFRED SEEGER (* 1927) [Kurzbiographie] per Zufall auf die Werke der Differentialgeometrie des letzten Jahrhunderts, die eine systematische Konstruktion exakter Lösungen der SG-Gleichung ermöglichten. Damit wurde das Phänomen der Solitonen, wenn auch noch nicht unter diesem Namen, in der Festkörperphysik etabliert.

Bemerkenswerterweise hat der Name *Sinus-Gordon-Gleichung* weder einen geschichtlichen noch einen sachlich richtigen Bezug. Er entstammt wohl vielmehr aus einem Scherz. Dieser bezog sich auf die äußere Ähnlichkeit der Sinus-Gordon- und der Klein-Gordon-Gleichung und den Reim von "Klein" auf das englische "sine". SIDNEY COLEMAN berichtete [Coleman 1977, S. 403], wie DAVID FINKELSTEIN ihm in einem Brief die Entstehung dieses Namens erklärte. FINKELSTEIN schrieb:

"I am sorry that I ever called it the sine-Gordon equation. It was a private joke between me and Julio Rubinstein, and I never used it in print. By the time, he used it as the title of a paper he had earned his Ph.D. and was beyond the reach of justice."

Der von RUBINSTEIN verfaßte Artikel hat den schlichten Titel "Sine-Gordon equation" [Rubinstein 1970]. In ihm gibt RUBINSTEIN allerdings in einer Fußnote an, daß der Name von KRUSKAL stamme. ROBIN BULLOUGH [Bull., Cau. 1980, S. 14] bemerkte hierzu:

"...Rubinstein ([Rubinstein 1970]) ascribes the name to Kruskal; Coleman ([Coleman 1977])

indicates otherwise, and Kruskal himself is "not quite sure" ([private Mitteilung von Kruskal an Bullough]). Whichever way, the name is certainly here to stay!"

Vor RUBINSTEINs Arbeit wurde die SG-Gleichung übrigens *nichtlineare Klein-Gordon-Gleichung* genannt [Scott 1969]. Doch der Name Sinus-Gordon-Gleichung sei "more precise and convenient", wie [BEMS 1971] fanden, weshalb sie und andere nach ihnen diesen Namen bevorzugten. Da die SG-Gleichung nichts mit GORDON zu tun hat, muß man den Namen leider zu den schlecht gewählten zählen.

4.1 Der Weg zum Frenkel-Kontorova-Modell

Seit der industriellen Revolution wurde ein immer genaueres Verständnis der inneren Struktur der Metalle benötigt. Besondere Bedeutung kam dabei dem Mechanismus der plastischen Verformung der Metalle zu. Die großen Erfolge der molekularen Theorie der Gase und der Lösungen und die Theorie des thermischen Verhaltens der Festkörper rechtfertigten die Annahme, daß das Verständnis der plastischen Verformung auf der Grundlage des molekularen Modells zu erreichen sei. Nach der Entstehung der Raumgittertheorien, die die Vorstellung des Kristalls schufen, wurde die molekulare Theorie der Elastizität für vollkommen elastische Körper entwickelt. Eine Erklärung der Verformung und Viskosität der Kristalle bereitete jedoch Schwierigkeiten [Kármán 1913]. Gestützt auf Beobachtungen wußte man, daß die meisten Metalle und Gesteine aus kleinen Kristalliten bestehen, und daß diese "kristallinen Haufwerke" im allgemeinen ungemein stärkere Nachwirkungen auf äußere Kräfte zeigten als isomorphe Einzelkristalle. Das legte den Gedanken nahe, daß sich die für die Verformung nötigen Verschiebungen der Atome in festen Körpern hauptsächlich an den Grenzflächen der Kristallite abspielten. Im Jahre 1913 veröffentlichte THÉODOR VON KÁRMÁN (1881 - 1963) [Kármán 1913] ein bis dahin, nach seinen eigenen Worten, unveröffentlichtes Modell von LUDWIG PRANDTL (1875 - 1953), das große Vorzüge aufwies: Das Modell nutzte die Grenzfläche zwischen Kristalliten für einen Erklärungsansatz der plastischen Deformation und konnte auch die Wärmebewegung der einzelnen Atome sowie die Hysterese verständlich machen. PRANDTL legte seinem Modell der Grenzfläche zwischen zwei Kristalliten eine Reihe von Vereinfachungen zu Grunde. Aus der räumlichen Struktur wurden zwei aneinander stoßende Gitterflächen herausgegriffen (s. Abb. 4.1). Als das Wesentliche der so entstandenen eindimensionalen Grenze betrachtete er nur die diese Grenze direkt berührenden Atome. Es entsteht so ein Modell, welches aus zwei Atomketten verschiedener Gitterkonstanten besteht. In diesem Modell wurden die Atome der unteren Kette als starr angenommen. Die untere Atomkette übt somit auf die Atome der oberen Kette eine Kraft aus, die wegen der Starrheit der unteren Kette eine periodische Funktion des Ortes ist. Der Einfachheit halber nahm PRANDTL hierfür eine Sinusfunktion. Die Atome der beweglichen Kette suchen sich nun eine Gleichgewichtslage, die sich aus den Kräften ergibt, die auf sie ausgeübt werden - der der Auslenkung proportionalen Kraft innerhalb der Kette nach dem Hookschen Gesetz und der sinusförmigen Kraft der unteren Kette, wobei nur Auslenkungen in der Richtung der Kette zugelassen wurden. Der Abstand der Atome untereinander in der oberen Kette ist in der Gleichgewichtsposition nun nicht mehr gleich. Eine elastische Deformation des Kristalls bewirkt zuerst, daß die beiden Kristallite, also in der Vereinfachung die beiden Ketten, aneinander

entlang durch Einwirken äußerer Kräfte verschoben werden. Die Elastizitätsgrenze des Kristalls wird erreicht, sobald ein Atom der Grenzlinie über einen "Berg" des periodischen Potentials geschoben wird. Es wird ein Stück weit "herunterfallen" und in die gleiche Richtung drücken wie die äußere Kraft. Bei weiterer Deformation werden nun immer gleich viele Atome über ihren nächsten Potentialberg geschoben; d.h. die Deformation geschieht mit konstanter äußerer Kraft, so wie es die Ergebnisse der Experimente verlangten.

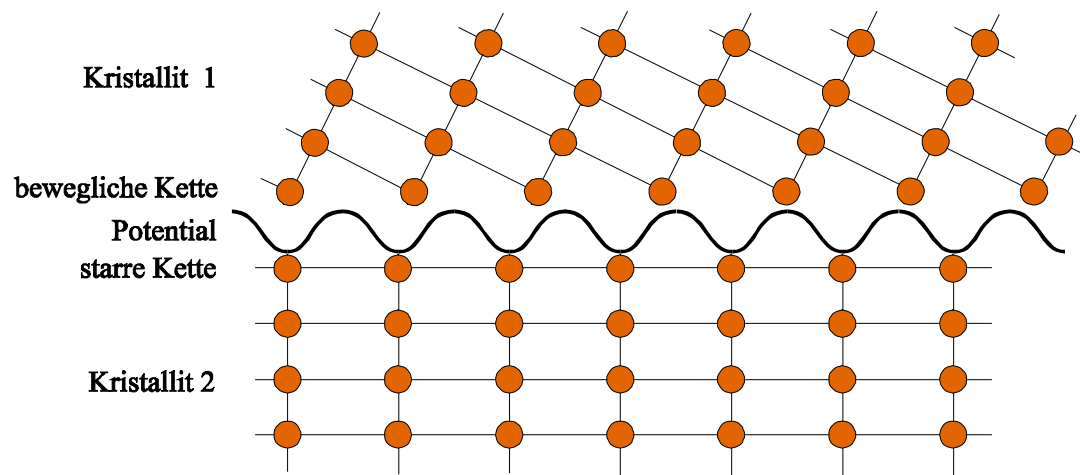


Abbildung 4.1:

Das Prandtl'sche Modell der Grenzfläche zwischen zwei Kristalliten 1 und 2. Das Potential der als starr angenommenen unteren Kette übt eine Kraft auf die beweglichen Atome der oberen Kette aus. Sie sind in der Abbildung somit nicht in der Gleichgewichtsposition.

PRANDTL lieferte hiermit eine erste Erklärung für den experimentell längst bekannten Befund, daß die mechanische Belastbarkeit von Metallen weit niedriger ist, als es Berechnungen für ideale Kristalle forderten. In diesen Berechnungen wurde angenommen, daß alle Atome gleichzeitig über die "Potentialberge" gedrückt werden müssen. PRANDTLs Modell verband außerdem die Vorstellung, daß Bewegung in Metallen an den Grenzflächen zwischen Kristalliten stattfindet, mit den Gedanken LORD KELVINS. Dieser hatte 1904 [Kelvin 1904] mögliche Gleichgewichtslagen eines eindimensionalen Modells betrachtet, unter der Annahme eines räumlich periodischen Kraftgesetzes. Die Ausführungen, die KÁRMÁN über das Prandtl'sche Modell machte, verbleiben ganz in der qualitativen Betrachtung. Auch PRANDTL, der 1928 selbst eine Arbeit zu diesem Thema verfaßte [Prandtl 1928], blieb in diesem Punkt ganz in der Vorstellung und formulierte keine mathematischen Gleichungen.

Das Problem der Kristallplastizität und dessen Lösungsansatz via Grenzflächen zwischen Kristalliten beschäftigte zu dieser Zeit weitere Autoren, u.a. M. POLANYI [Polanyi 1925] und JACOV IL'ITCH FRENKEL' [Frenkel 1926]. Eine wichtige Vorarbeit in Richtung der SG-Gleichung wurde 1929 von ULRICH DEHLINGER (1901 - 1981) in seiner Habilitationsschrift geleistet [Dehlinger 1929]. DEHLINGER kam unabhängig von PRANDTL, wie er anmerkte, zu einem ganz ähnlichen Modell, lieferte jedoch im Gegensatz zu PRANDTL auch eine

mathematische Beschreibung. DEHLINGER betrachtete wie PRANDTL zwei parallele Atomketten an der Grenze zweier sich gegeneinander bewegender Kristallite. Der Gitterabstand sei nun allerdings bei beiden Ketten gleich.

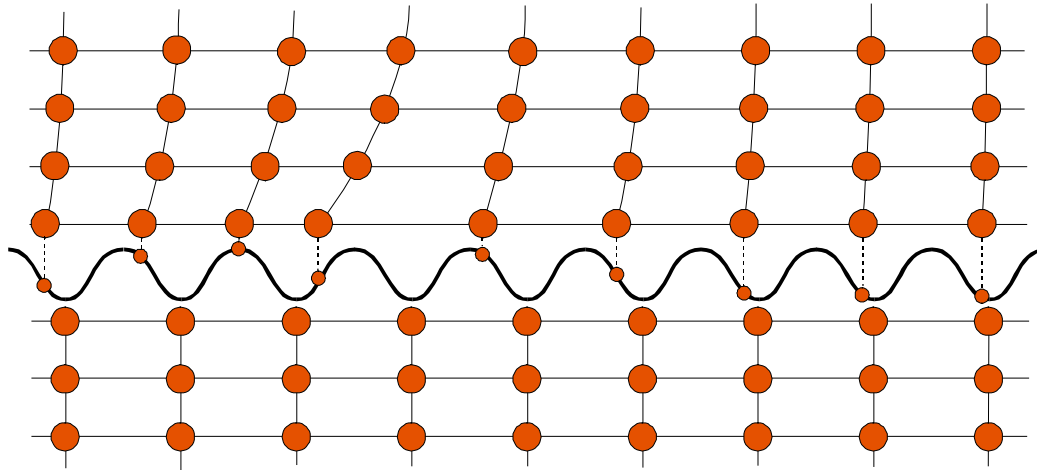


Abbildung 4.2:

Verhokung nach DEHLINGER. Ein Atom der beweglichen Kette ist durch eine temporäre äußere Kraft über einen Potentialberg gedrückt worden und dort verblieben.

Auch er meinte, daß ein sinusförmiges Energiepotential der Periodizität des Kristalls am ehesten Rechnung trüge. Sein Modell (s. Abb. 4.2) erklärt sich wie folgt: Durch eine Bewegung des oberen Kristallits nach rechts um einen oder mehrere Atomabstände hinweg wurden die oberen Atome gemeinsam über die "Potentialberge" gedrückt. Ein Atom sei dabei zurückgeblieben, sei also nicht über den Potentialberg gekommen. Aus dieser Position drückt es seine Nachbaratome nach links. Die Störung, DEHLINGER nannte es eine *Verhokung*, wirkt sich um so weniger aus, je weiter die Atome von ihr entfernt sind. Entstehen durch die Verformung des Metalls Verhokungen in großer Zahl, so tragen sie nach DEHLINGER dazu bei, daß die Grenzflächen leichter aneinander entlang gleiten. Für DEHLINGER waren sie eine Erklärung dafür, daß die mechanische Belastbarkeit vieler Metalle weit niedriger ist, als es Berechnungen für ideale Kristalle vermuten lassen.

Um zu quantitativen Ergebnissen zu gelangen, stellte DEHLINGER die Gleichgewichtsbedingung des n-ten Atoms der beweglichen Kette auf. Das periodische Potential setzte er gleich

$$\Phi = 2A \sin^2 \pi \frac{q_n}{a} , \quad (4.1)$$

wobei q_n = Auslenkung des n-ten Atoms aus der Position des idealen Gitters, a = Gitterabstand, $2A$ = Potentialmaximum. Aufgrund des Hookschen Gesetzes ergibt sich die Gleichgewichtsbedingung

$$\frac{\partial \Phi}{\partial q_n} = C(q_{n-1} - 2q_n + q_{n+1})$$

oder

$$2\pi \frac{A}{a} \sin 2\pi \frac{q_n}{a} - C(q_{n-1} - 2q_n + q_{n+1}) = 0. \quad (4.2)$$

Eine recht ausführliche Behandlung der Arbeiten LUDWIG PRANDTLs und ULRICH DEHLINGERS findet sich bei ALFRED SEEGER [Seeger 1980a, b]. In [Seeger 1983] ist auch eine kurze Beschreibung von Arbeiten anderer Autoren zur Kristallplastizität.

Auf DEHLINGERS Vorstellungen zur Beschreibung von Verhakungen kam wenige Jahre später u.a. GEOFFREY INGRAM TAYLOR (1886 - 1975) zurück [Taylor 1934]. Im Jahre 1934 betrachteten TAYLOR, E. OROWAN und M. POLANYI unabhängig voneinander wandernde *Versetzungen* [Seeger 1983]. (*Versetzung* eben deshalb, weil ein ganzer Teil des Kristalls gegenüber einem anderen Teil durch das Wandern der Fehlstelle entlang der Grenze um einen oder mehrere Gitterplätze versetzt wird.) Wie PRANDTL und DEHLINGER griff TAYLOR aus einem zweidimensionalen Kristallgitter zwei benachbarte Atomketten heraus, die sich aneinander entlang bewegen.

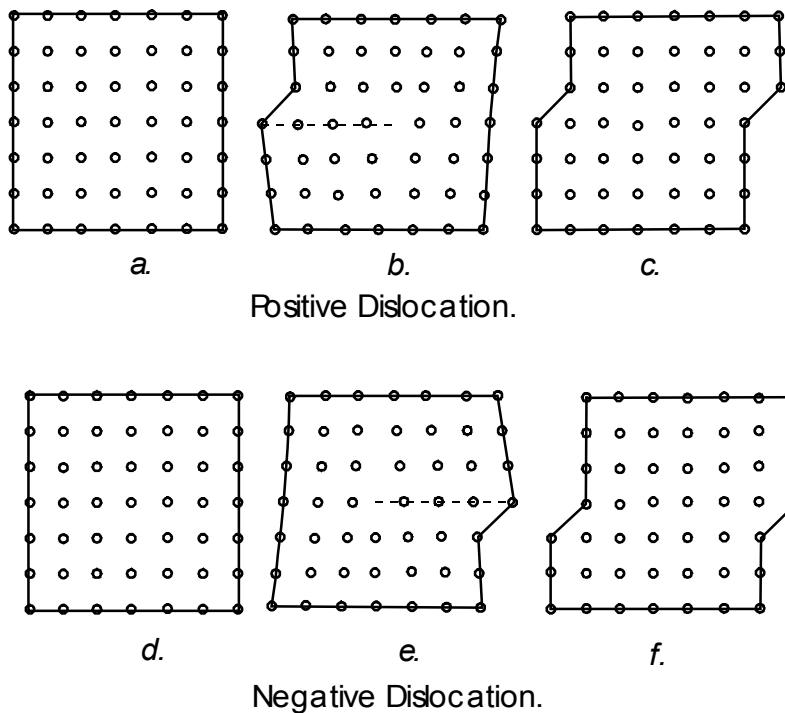


Abbildung 4.3:
Positive und negative Versetzung nach TAYLOR. Aus [Taylor 1934].

Diese Bewegung bewirkt eine *einfache Schiebung*, wie es zu der Zeit bezeichnet wurde; man kann es als Scherung im Kristallit betrachten. Eine durch Temperaturbewegung oder Spannung im Kristall hervorgerufene Versetzung äußert sich nach TAYLOR darin, daß eine Atomkette auseinandergezogen, und die andere zusammengedrückt wird (s. Abb. 4.3). Die so in der auseinandergezogenen Kette entstandene Lücke kann nun durch den Kristall wandern, bei der positiven Versetzung in Abb. 4.3 von links nach rechts, bei der negativen von rechts nach links.

Der Vorstellung, daß die durch den Kristall laufende Versetzung nur aus einer einzigen Lücke in der auseinandergezogenen Kette bestehen soll, widersprach 1938 der Professor für Theoretische Physik des Leningrader Physikalisch-Technischen Instituts JAKOV IL'ITCH FRENKEL' in einer zusammen mit seiner Assistentin TATJANA ABRAMOVNA KONTOROVA geschriebenen dreiteiligen Arbeit [Fre., Kon. 1938]. FRENKEL und KONTOROVA (im weiteren: F & K) waren der Meinung, daß die bei TAYLOR beschriebene Versetzung sich nur dann fortbewegt, wenn keine einzelne Lücke in der auseinandergezogenen Kette vorliegt, sondern sich die Kette in einer mehr kontinuierlichen Form auseinanderzieht (s. Abb. 4.4).

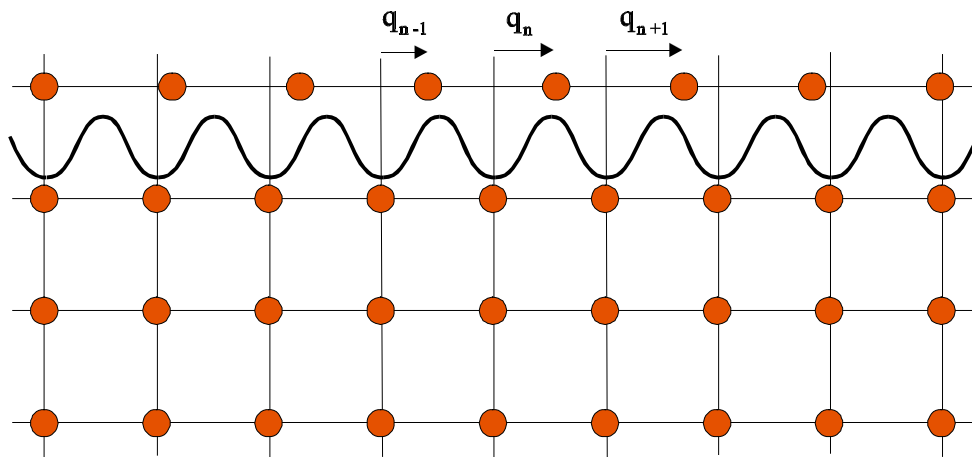


Abbildung 4.4:
Lang auseinandergezogene Versetzung des Frenkel-Kontorova-Modells.

Dieser Vorstellung entspricht eine stärkere Kopplung der Atome innerhalb der Atomketten gegenüber einem schwächeren sinusförmigen Potential zwischen den verschobenen Ketten. F & K zeigten in ausführlichen Rechnungen und Vergleichen, daß diese Vorstellung vorzüglich mit experimentellen Befunden übereinstimmte [Fre., Kon. 1938, Teil II] und somit die Annahme einer langgezogenen Versetzung berechtigt war. Sie griffen auch das von TAYLOR erwähnte Wandern der Versetzung auf und befaßten sich im Wesentlichen im ganzen ersten Teil ihrer Arbeit mit der Dynamik der Versetzungen, d.h. mit der Dynamik der Atome der beweglichen Kette. Sie gingen vom gleichen Ansatz wie DEHLINGER 1929 aus, machten allerdings aus DEHLINGERS statischer Gleichung (Gleichung (4.2)) eine Bewegungsgleichung:

$$m \frac{d^2 q_n}{dt^2} = -2\pi \frac{A}{a} \sin 2\pi \frac{q_n}{A} + C (q_{n-1} - 2q_n + q_{n+1}) \quad (4.3)$$

Ob FRENKEL DEHLINGERS Habilitationsarbeit [Dehlinger 1929] bekannt war, ist nicht klar. Dafür spricht, auch wenn er sie nicht direkt zitierte, daß sie von TAYLOR 1934 erwähnt wurde [Taylor 1934], dessen Arbeit F & K ihren Studien gegenüberstellten. FRENKEL legte besonderen Wert auf das genaue Studium der gesamten Fachliteratur, insbesondere der zur Festkörperphysik [Tamm 1962], [Frenkel 1974]. Andererseits ist der einleitende Satz zum ersten Teil der Arbeit nicht ganz richtig, was F & K, hätten sie DEHLINGERS oder PRANDTLs Arbeiten gekannt, gewußt hätten. Der Satz lautet [Fre., Kon. 1938, Teil 1, S. 89, Übersetzung von R. Schimming]:

"Bis zu den Arbeiten von Taylor hat man gewöhnlich angenommen, daß die plastische Verformung von Kristallen mittels einer Verschiebung eines Teils des Kristalls als Ganzem relativ zu einem anderen Teil realisiert wird, wobei man voraussetzte, daß diese Verschiebung nur in einer Ebene stattfindet und gleichzeitig in der Gesamtheit dieser Ebene."

Schon DEHLINGER und PRANDTL hatten mit dieser Ansicht gebrochen (s.o.).

F & K gelang es, Gleichung (4.3) näherungsweise durch geschickte Annahmen zu lösen. Dieser Weg sei hier kurz skizziert. Sie setzten den reibungsfreien Gleitprozess voraus: "Rutscht" ein Atom der beweglichen Kette aus seinem Gitterplatz etwa nach rechts auf den nächsten Gitterplatz (s. Abb. 4.4, erstes Atom von rechts in der beweglichen Kette relativ zum ersten Atom von links), so zieht es durch die Kopplung innerhalb der beweglich Kette die Atome links von sich nach rechts hinter sich her. Als Folge davon wandert die ganze Versetzung nach rechts. Da F & K nur zwei Ketten betrachteten, wovon eine wie bei DEHLINGER fest und unbeweglich sein sollte, kann solch eine Wanderung reibungsfrei verlaufen. Dies setzten F & K voraus und setzten

$$q_n(t) = q_{n+1}(t + \tau) . \quad (4.4)$$

Dabei ist τ die Zeit, die die Versetzung benötigt, um einen Gitterplatz weiter zu wandern. Die Wanderungsgeschwindigkeit ist somit $v = a/\tau$ (mit $a =$ Gitterkonstante). Damit wird Gleichung (4.3) zu

$$m \frac{d^2 q_n}{dt^2} = -2\pi \frac{A}{a} \sin 2\pi \frac{q_n}{a} + C (q_n(t - \tau) - 2q_n(t) + q_n(t + \tau)) .$$

F & K entwickelten diese Gleichung in eine Taylorreihe bezüglich τ und brachen nach dem quadratischen Term ab. Als Bedingung für diesen Schritt forderten sie, daß die Funktion q sich während der Zeit τ nur wenig verändern sollte. Diese Forderung beinhaltet, daß sich die Versetzung über viele Gitterplätze erstreckt, wie F & K es in Opposition zu TAYLOR einleitend angenommen und im Experiment bestätigt gefunden hatten. Auf diese Weise erhielten sie eine gewöhnliche Differentialgleichung:

$$m' \frac{d^2 q_n}{dt^2} = -2\pi \frac{A}{a} \sin 2\pi \frac{q_n}{a} \quad (4.5)$$

mit einer neuen "formalen" Masse $m' = m - C\tau^2$. Diese Gleichung hat die Form der Bewegungsgleichung des Fadenpendels, wobei aber m' beliebiges Vorzeichen haben kann. F & K erhielten sowohl für $m' > 0$ als auch für $m' < 0$ Lösungen. Für $m' > 0$ beschreiben diese Lösungen kleine Oszillationen um die Ruhelage. Als eine Lösung für $m' < 0$, erhielten F & K

$$q_n = \frac{2a}{\pi} \arctg \left(C_0 e^{\pm \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{A}{m}} t} \right) \quad (4.6)$$

mit einer Integrationskonstante C_0 , die den zeitlichen Nullpunkt festlegt. Die Voraussetzung der gleichförmigen Bewegung (Gleichung 4.4) genügt F & K, um die statische Lösung (4.6) in eine bewegte übergehen zu lassen:

$$q_n = \frac{2a}{\pi} \arctg \left(C_1 e^{\pm \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{A}{m}} (t-n\tau)} \right) . \quad (4.7)$$

Diese Lösung ist die Ein-Solitonenlösung der SG-Gleichung! (Wegen Gleichung (4.4), also $v = \text{const.} = a/\tau$ gilt $n\tau = n a/v = x/v$.) Dies scheint zuerst verwunderlich, da die Differential-Differenzgleichung (4.3), von der F & K ausgingen, sich von der SG-Gleichung durch die Diskretheit der Ortsvariablen unterscheidet. Eine kontinuierliche Ortsvariable ($q = q(x,t)$) hätte direkt zur SG-Gleichung geführt

$$m \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = -2\pi \frac{A}{a} \sin 2\pi \frac{q}{a} .$$

Dieser Schritt der Kontinuierung ist von F & K implizit durch die Forderung gemacht worden, daß q_n sich nur wenig ändern sollte im Laufe der Zeit τ , die Versetzung also langgestreckt, kontinuierlich sein sollte. Die besonderen Eigenschaften dieser Lösung als Soliton blieben F & K allerdings verborgen, bis auf die gleichbleibende Bewegung der Versetzung durch den Kristall. Doch diese konnte sie nicht verwundern, da sie als Forderung in den Lösungsweg mit eingegangen war.

Die Arbeit von F & K ist durchaus kein Zufallsprodukt, sondern in einen langen Kontext in FRENKELs Lebenslauf eingebunden. Das Diskrete in seinen verschiedensten Formen, diskrete Verteilungen, diskrete Massen an Ketten, waren eins seiner "Lieblingsthemen", denen er sich immer wieder widmete [V. Ja. Frenkel (Sohn von Ja. I. Frenkel), persönliche Mitteilungen]. Schon mit 16 Jahren entwickelte er eine Verallgemeinerung der Reihentheorie und zeigte sie dem St.Petersburger Universitätsprofessor Ja. V. USPENSKIJ. Dieser fand darin die Grundzüge der Rechenmethode der finiten Differenzen, die USPENSKIJs Lehrer A. A. MARKOV nicht lange vorher entwickelt hatte [Frenkel 1974]. Die aktuellen Fragen der Kristallphysik in den dreißiger Jahren, speziell die der Härte und Elastizität von Kristallen, wurden intensiv von A. F. JOFFE untersucht. FRENKEL, der auch in dem von JOFFE gegründeten Leningrader Physikalisch-Technischen Institut (LFTI) arbeitete, kam daher mit diesen Problemstellungen intensiv in Verbindung und widmete sich ihnen auch ausführlich. An diesem Institut wurden auch viele Versuche zu Fehlstellen in Kristallen gemacht; u.a. untersuchte JOFFE die Bruchfestigkeit und Elastizität von Kristallen, deren Oberfläche er an einer Stelle mit Säure behandelte. Wie er feststellte, waren die so behandelten Stellen wesentlich zäher und stabiler gegenüber Deformation und Bruch als die unbehandelten Stellen [V. Ja. Frenkel, pers. Mitt.].

Die Theorie zu diesen Versuchen überließ FRENKEL seiner Assistentin KONTOROVA als Doktorarbeit mit dem Thema "Statistische Theorie der Festigkeit von Kristallen" [Kontorova 1938]. Aus dieser Arbeit ging der Artikel [Fre., Kon. 1938] hervor. FRENKEL hatte daher sehr detaillierte Kenntnisse speziell zur Theorie der Elastizität und Deformierbarkeit von Kristallen und den damit in Verbindung gebrachten Versetzungen. Trotz dieser Kenntnisse waren sich F & K der großen Bedeutung der Versetzungen für die Plastizität der Metalle wohl nicht bewußt [Fre., Kon. 1938, Teil 2, aus Frenkel, ges. Werke, S. 372]. Das ist nicht verwunderlich, denn abgesehen von wenigen Autoren, die darauf hinwiesen, daß die Versetzungen die maßgebliche Rolle bei der plastischen Deformation von Metallen spielen [Bur., Bur. 1935], [Kochendörfer 1937], war diese Tatsache in den 30er Jahren noch nicht bekannt [Seeger, pers. Mitt.]. Die Theorie der Versetzungen befand sich noch in den Anfängen. Auf die Bedeutung der Versetzungen und insbesondere ihrer Dynamik wiesen 1940 DEHLINGER und ALBERT KOCHENDÖRFER (1908 - 1995) hin [Dehl., Koch. 1940]. Im Titel ihrer Arbeit [Dehl., Koch. 1940] nannten sie die bewegten Versetzungen *Eigenbewegungen* und wiesen damit auf die Verwandtschaft der Versetzungsbewegungen mit den gewöhnlichen *Eigenschwingungen* eines Kristallgitters hin. Während die Eigenschwingungen aus dem quadratischen Ansatz des Kristallpotentials resultieren, entstehen die sogenannten Eigenbewegungen durch die Periodizität des Kristallpotentials.

Daß FRENKEL die bedeutungsvolle Arbeit an wandernden Versetzungen zu keinem späteren Zeitpunkt wieder aufnahm, kann mehrere Gründe haben. Zum einen schien er die Bedeutung der Versetzungen nicht erkannt zu haben. Zum anderen kann es daran liegen, daß er, mag man die Klassifizierung W. OSTWALDs in seinem Buch "Große Männer" nehmen, ein "romantischer" Wissenschaftler war [Tamm 1962], [Frenkel 1974]. Es lag zum einen nicht in seiner Linie, sich ausführlich mit Details eines Problems auseinanderzusetzen. Und zum anderen beschäftigte er sich in seinen produktivsten Jahren 1938-39 - an der Zahl seiner Veröffentlichung gemessen - mit einer außerordentlichen Zahl und Weite von Themen, die ein In-die-Tiefe-Gehen kaum zuließ. Keinesfalls liegt es daran, daß die Theorie der Versetzungen während der Zeiten des Stalinismus aus ideologischen Gründen in Verruf geraten war¹. Daß sie in Verruf geraten war, belegen zwei Hinweise. SEEGER [pers. Mitt.] bemerkte, daß 1955, zu Beginn der "Tauwetterperiode", der sowjetische Wissenschaftler ODING nach Stuttgart kam und um "Starthilfe" in der Theorie der Versetzungen bat. Die Versetzungen, teilte er mit, hatten bis dato nicht in die Ideologie gepaßt, weshalb die Sowjetunion nun in dieser Beziehung ins Hintertreffen gelangt sei. Die technische Relevanz und wohl nicht zuletzt der spätere Einsatz des in der Sowjetunion sehr bekannten Mathematikers SEDOV für die Versetzungen verhalfen der Theorie der Versetzungen zur Rehabilitation. Der zweite Hinweis kommt von V. Ja. FRENKEL [Frenkel, pers. Mitt.]. Angeregt wohl durch KONTOROVA selber, die im Gegensatz zu FRENKEL Parteimitglied war, geriet die Theorie der Versetzungen etwa 1945 in ideologische Diskussionen. KONTOROVA hatte sich in dieser Zeit sehr mit dem Dialektischen Materialismus und dessen Rolle in der Physik beschäftigt. In ihrem Nachlaß fanden sich allein zehn Notizbücher zu diesem Themengebiet und anderen philosophischen Fragen. Nicht nur wegen des späten Zeitpunktes der

¹ Die Ablehnung bestimmter einzelwissenschaftlicher Richtungen, oder auch ganzer Disziplinen wurde mit der Abgrenzung von der "bourgeois" westlichen Wissenschaft begründet. In die Auseinandersetzungen zwischen verschiedenen wissenschaftlichen Schulen oder auch Personen wurden wissenschaftsfremde, diffamierende Elemente der Ideologie bzw. Politik hineingetragen, mit teilweise verheerenden Folgen.

"Verurteilung" der Versetzungen wird sie keine Rolle bei FRENKELs Themenwahl zu seinen Forschungen gespielt haben. Auch stand dieses kleine Detail in keinem Verhältnis zu FRENKELs Arbeiten zur Relativitäts- und Quantentheorie, die schon viel früher als "bourgeoise Wissenschaft" galten.

Das Frenkel-Kontorova-Modell fand in den folgenden Jahrzehnten in der Festkörperphysik mehrfach Anwendung [Nabarro 1967] und ist bis heute Objekt mancher Forschungen [Aub., Dae. 1983], [Strunz 1995]. Wie sehr das Modell fesseln kann zeigt eine Äußerung des amerikanischen Feldtheoretikers ROBERT HOBART, der in den fünfziger und sechziger Jahren mit beteiligt an der Suche nichtlinearer Feldgleichungen war (s. Kapitel 5.1), eine Suche, die schließlich auch zur SG-Gleichung führte. HOBART schrieb in einem Brief an den Autor dieser Dissertation:

"I've been retired now for three years. My current research is again my thesis problem: Develop analytical tools tailored to calculating the energy barrier to mobility of a discrete Frenkel-Kontorova dislocation. The barrier is essentially singular in the lattice spacing parameter, so the problem can't be solved by perturbation methods."

4.2 Die Sinus-Gordon-Gleichung als Gleichung für wandernde Versetzungen

Nachdem das Modell der Versetzungen durch die Physiker F & K in Leningrad, DEHLINGER und KOCHENDÖRFER in Stuttgart und TAYLOR und POLANYI in England bis zur Dynamik der Versetzungen vorangetrieben war und durch Experimente [Dehl., Koch. 1940] weitgehend bestätigt worden war, unterbrach der 2. Weltkrieg die fruchtbaren internationalen Verbindungen der Forscher. Der deutsche Einmarsch in Rußland 1941 bewirkte eine Isolation der Sowjetwissenschaft, die Reduzierung und Verlegung der Forschung, deren Umstellung auf kriegsrelevante Themen. In Stuttgart wurde von DEHLINGER und KOCHENDÖRFER während des Krieges, soweit dieser es zuließ, weiter an Versetzungen geforscht. Für DEHLINGER stellte die Diskretheit der Atome im Kristall eine wichtige Eigenschaft dar, die beim Studium der Versetzungen (für DEHLINGER waren es ja *Verhakungen*) nicht außer Acht gelassen werden sollte [Seeger, pers. Mitt.]. Deshalb verfolgte er die Kontinuierung, die F & K begonnen hatten, nicht weiter.

Im Sommer 1948 regten DEHLINGER und KOCHENDÖRFER den jungen Studenten der TH Stuttgart ALFRED SEEGER an, im Rahmen seiner Diplomarbeit das dynamische Modell der Versetzungen weiter zu untersuchen. Das Modell von F & K sollte verallgemeinert werden für den Fall, daß die obere bewegliche und die untere feste Atomkette verschiedene Gitterkonstanten hatten, und es sollte genauer ausgearbeitet werden [Seeger, pers. Mitt.]. Da bei zwei verschiedenen Gitterkonstanten die beweglichen Atome auch ohne Versetzung nicht äquidistant sind (wie schon PRANDTL gezeigt hatte), ließ SEEGER neben der Verschiebungskoordinate $q_n(t)$ noch die Anfangslage z_n^0 zu, die die Abweichung der Ruhelage des n-ten Atoms von der

Äquidistanz beschreibt. So kam er zu der gegenüber Gleichung (4.3) leicht modifizierten Gleichung

$$m \frac{d^2 q_n}{dt^2} = -2\pi \frac{A}{a} \sin \frac{2\pi}{a} (z_n^0 + q_n) + C (q_{n-1} - 2q_n + q_{n+1}). \quad (4.8)$$

SEEGERS Absicht war es, den Ansatz von F & K nicht nur zu generalisieren, indem er verschiedene Gitterkonstanten zuließ, sondern die F & K-Gleichung auch allgemein zu lösen, ohne viele Annahmen machen zu müssen. Es hatte sich schnell gezeigt, daß die Annahmen, die FRENKEL in das System hineinstecken mußte, um zur lösbaren Bewegungsgleichung (4.5) zu kommen, sehr speziell waren und eine Verallgemeinerung nicht zuließen [See., Koch. 1950]. Zu diesem Zweck trennte er die beiden Haupteigenschaften eines Kristallgitters, die Periodizität und die Diskretheit der einzelnen Atome. Für SEEGER war - im Gegensatz zu DEHLINGER - die Periodizität des Kristalls die wichtigere Eigenschaft, wohingegen die Diskretheit aufgegeben werden konnte, da auch das periodische Potential nicht diskret ist [Seeger, pers. Mitt.]. SEEGER baute auf FRENKELs Vorstellung auf, daß sich die Versetzung über mehrere Gitterabstände erstreckt. Das erlaubte es ihm, auf die für die Dehlingerschen Verhakungen noch wichtige Diskretheit der Atome zu verzichten und eine Kontinuierung der Ortskoordinate durchzuführen (s. Abb. 4.5).

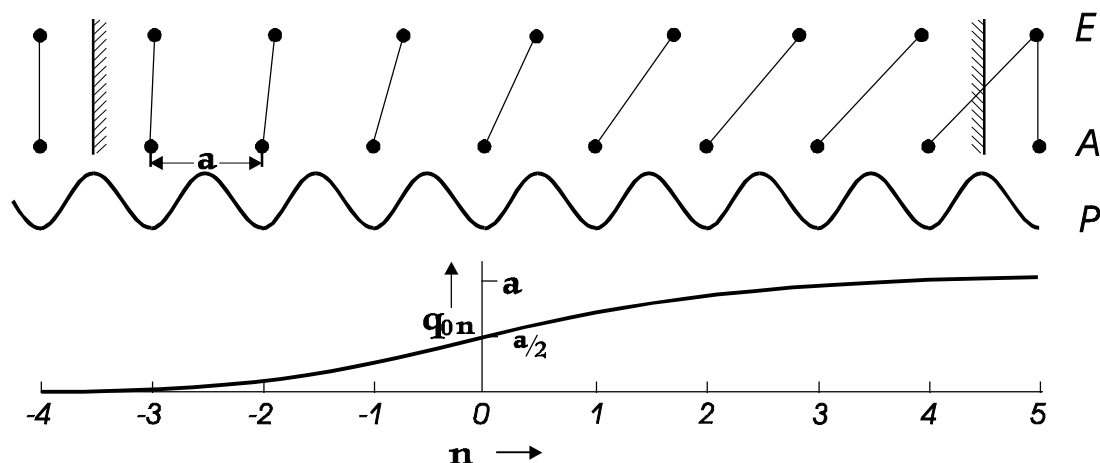


Abbildung 4.5:

Abbildung aus der auch aus A. SEEGERS Diplomarbeit hervorgegangenen Veröffentlichung [See., Koch 1950]. Unten: Verlauf der Atomverschiebung q_{0n} einer ruhenden Versetzung (der Index 0 steht für $v = 0$) in Abhängigkeit von der Atomnummer n für eine Versetzung im Falle gleicher Gitterkonstanten, also $a = \alpha$, berechnet nach (4.6). Oben: Potentialverlauf P ; Anfangslagen A der Atome in den Potentialmulden; Endlagen E der Atome. Die senkrechten schraffierten Linien geben die Länge der Versetzung an.

Die diskrete Variable $q_n(t)$ ersetzte er durch die kontinuierliche Variable $q(n,t)$ gemäß der Approximation

$$q_{n+1}(t) - 2q_n(t) + q_{n-1}(t) = [q_{n+1}(t) - q_n(t)] - [q_n(t) - q_{n-1}(t)]$$

$$\approx \frac{\partial^2 q(n,t)}{\partial n^2} .$$

Diese Näherung hätte es direkt erlaubt, Gleichung (4.8) in eine Differentialgleichung überzuführen. SEEGER beschrift jedoch den Weg über das Hamiltonsche Variationsprinzip und gab die potentielle und kinetische Energie des Systems vor. Als Euler-Lagrange-Gleichungen erhielt er

$$c \frac{\partial^2 q}{\partial n^2} - m \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = 2\pi \frac{A}{\alpha} \sin \frac{2\pi}{\alpha} (z^0 + q) . \quad (4.9)$$

Die Gitterkonstante α anstatt a aus Gleichung (4.8) trägt der Tatsache Rechnung, daß die maximale Verschiebung der Atome durch die Versetzung eine Periode α des Potentials beträgt. Mit der Variablentransformation

$$x = \frac{2\pi}{\alpha} \sqrt{\frac{A}{c}} n; \quad y = \frac{2\pi}{\alpha} \sqrt{\frac{A}{m}} t; \quad u = \frac{2\pi}{\alpha} q; \quad Z^0 = \frac{2\pi}{\alpha} z^0$$

nimmt Gleichung (4.9) die Form an

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \sin(Z^0 + u) . \quad (4.10)$$

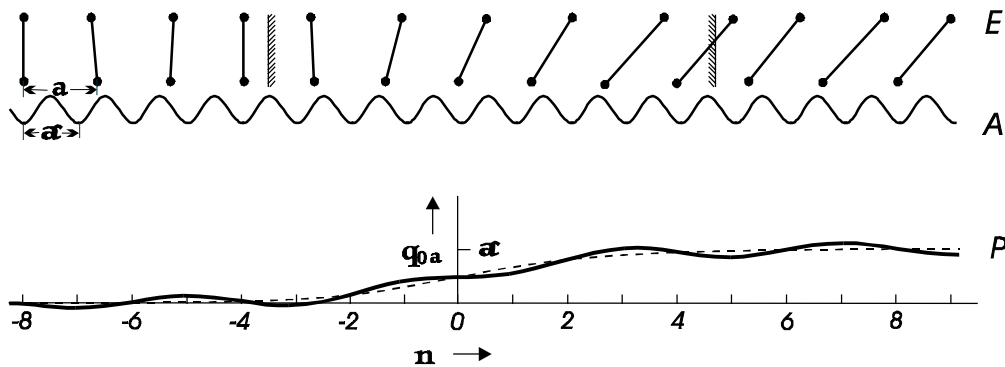


Abbildung 4.6:

Wie Abb. 4.5, nur für den Fall $a \neq \alpha$. Die gestrichelte Linie gibt den mittleren Verlauf an, der einer Versetzung nach Abb. 4.5 entspricht.

Die nicht äquidistanten Ruhelagen der Atome bei verschiedenen Gitterkonstanten, die in $Z^0(x)$ der Gleichung (4.10) sichtbar wird, bereiteten arge Probleme beim Lösen dieser Gleichung, so daß sich SEEGER in seiner Diplomarbeit nur um Lösungen für $Z^0 = 0$ bemühte. Für $Z^0 = 0$ geht Gleichung (4.10) in die SG-Gleichung über, die auf diese Weise zum ersten Mal in einem physikalischen Kontext aufgeschrieben wurde:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \sin u \quad . \quad (4.11)$$

Zur Lösung dieser Gleichung wandte SEEGER die Lie- bzw. Lorentztransformation an. Ihm war bekannt, daß alle Gleichungen der Form $u_{xx} - u_{yy} = f(u)$ lorentzinvariant sind. Also löste er die zeitfreie Gleichung

$$\frac{\partial^2 u_0(\omega)}{\partial x^2} = \sin u_0(\omega) \quad , \quad (4.12)$$

die Gleichung für ruhende Versetzungen, um sie dann mittels Lorentztransformation wieder zeitabhängig zu machen. $u_0(\omega)$ wird so zu $u(x,y)$ falls gilt $\omega = c_1 x + c_2 y$ mit $c_1^2 - c_2^2 = 1$ und $c_2 / c_1 = v$. Damit folgt für die bewegte Versetzung

$$u(x,y) = u_0 \left(\frac{x + vy}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \quad . \quad (4.13)$$

Dabei ist, wie im Folgenden, v in Einheiten der Schallgeschwindigkeit v_s angegeben.

Zweimalige Integration der Gleichung (4.12) führten SEEGER et al. zu den elliptischen Funktionen [See., Koch. 1950]

$$u_0 = \pi + 2 \operatorname{am} \left(\frac{x}{k} + C_2, k \right) \quad , \quad (4.14)$$

mit: am = Amplitudenfunktion mit Modul k . Die Integrationskonstante C_2 legt den Koordinatenursprung fest. Diese allgemeine statische Lösung ließ für verschiedene Werte des Moduls k (als zweite Integrationskonstante) verschiedene Interpretationen zu. Für den speziellen Fall $k = 1$ geht sie über in

$$u_0 = 4 \operatorname{arctg} e^x \quad . \quad (4.15)$$

Diese statische Lösung entspricht für den Fall gleicher Gitterkonstante, also mit $\alpha = a$, der Frenkelschen Lösung (4.6).

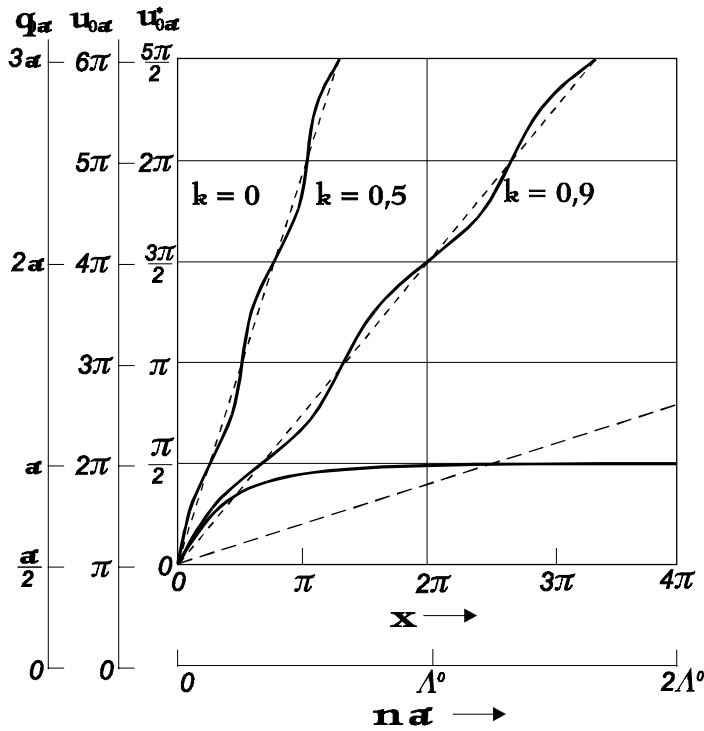


Abbildung 4.7:

Abbildung aus der aus SEEGERS Diplomarbeit [Seeger 1949] hervorgegangenen Veröffentlichung [See., Koch. 1950]. Verlauf der Atomverschiebung u_0 bzw. q_0 in Abhängigkeit von der Ortskoordinate x bzw. $n\alpha$ nach (4.14). Die Kurven mit $k < 1$ stellen periodisch angeordnete Versetzungen (in unendlichen Atomreihen) dar. Die gestrichelte Gerade bezeichnet die mittlere Neigungsgerade, bis zu welcher im Falle $\alpha = a$ Versetzungen in endlichen Atomreihen stabil sind. Die Kurve eine einzelnen Versetzung, also mit $k = 1$, entspricht dem rechten Teil der Kurve aus Abbildung 4.5 bei um $\alpha/2$ verschobenem Koordinatenursprung.

Somit hatten SEEGERS Bemühungen, den Ansatz so allgemein wie möglich zu halten, den Erfolg allgemeinerer Lösungen als bei F & K. Die allgemeine statische Lösung (4.14) konnten SEEGER et al. mittels der Lorentztransformation in Bewegung versetzen, so daß sie folgende Lösungen erhielten [Seeger 1953]:

$$u = \pi + 2 \arcsin \frac{1}{k} \operatorname{sn} \left(\frac{x - vy}{\sqrt{1 - v^2}}, \frac{1}{k} \right) \quad \text{für } v < 1 \quad (4.16a)$$

$$u = \pi + 2 \arcsin \frac{1}{k} \operatorname{sn} \left(\frac{vy - x}{\sqrt{v^2 - 1}}, \frac{1}{k} \right) \quad \text{für } v > 1 \quad (4.16b)$$

Die Konstante k liefert für $k \geq 0$ reelle Lösungen in beiden Fällen (4.16a, b). Für $v < 1$ und $k < 1$ ergeben sich unendliche Reihen gleicher bewegter Versetzungen, die SEEGER et al. schon aus energetischen Gründen nicht für physikalisch hielten. Daher sahen sie nur die bewegte Lösung der Einzelversetzung als physikalisch an, die aus der Schar (4.16a) für $k = 1$ hervorging:

$$u = 4 \arctg e^{\frac{x-vy}{\sqrt{1-v^2}}} . \quad (4.17)$$

Aus der Lösungsschar (4.16b) interessierten SEEGER et al., ebenfalls aus energetischen Gründen, nur die Lösungen mit $k > 1$. Sie stellten Schwingungen der Atome mit Überschallgeschwindigkeit um ihre Ruhelage dar und glichen den Frenkelschen Lösungen mit $m' > 0$. Für $k \gg 1$ wird (4.16b) zu

$$u = \frac{2}{k} \sin \left(\frac{vy - x}{\sqrt{v^2 - 1}} \right) . \quad (4.18)$$

Diese Zustände, die SEEGER gründlich untersuchte [SDK 1953], [Seeger 1953], stellten Schwingungen dar, die abweichendes Verhalten von der linearen Bornschen Gittertheorie zeigten.

SEEGER war kurz nach dem Krieg nicht der Einzige, der - aufbauend auf dem Frenkel-Kontorova-Modell - zur SG-Gleichung vorstieß. Etwa zeitgleich - und auf dem gleichen Wege wie SEEGER über die Taylorschen Versetzungen und das Frenkel-Kontorova-Modell - gelangten in Bristol der Engländer F. C. FRANK und der Südafrikaner J. H. VAN DER MERVE zur SG-Gleichung. In einer vierteiligen Arbeit behandelten sie die SG-Gleichung als Modell für Versetzungen ausführlich [Fra., Mer. 1949a-c, 1950], legten allerdings ihren Schwerpunkt mehr auf die physikalischen Interpretationsmöglichkeiten dieses Modells als auf eine Lösung der SG-Gleichung. Ebenso wie SEEGER behandelten FRANK und VAN DER MERVE zuerst das statische Problem und lösten die Gleichung der Form (4.12) und gelangten zu den Lösungen der Form (4.14) bzw. (4.15). Die Lösung (4.14) für $k < 1$ interpretierten FRANK und VAN DER MERVE auch als Kette von Versetzungen und zeigten in ihrer ersten Arbeit der vierteiligen Reihe verschiedene der Abb. 4.7 entsprechende Zeichnungen. Ferner lieferten sie viele physikalische Interpretationsmöglichkeiten für die Lösungen (4.14) bzw. (4.15). So sahen sie die Möglichkeit, mit ihnen Versetzungen auf Kristalloberflächen zu beschreiben. Hierbei weist eine Atomkette innerhalb der obersten Atomlage des Kristalls eine Versetzung auf; diese kann innerhalb einer geschlossenen Fläche liegen, oder aber auch die äußerste Kante einer Terrasse bilden. Das Zulassen verschiedener Gitterkonstanten zwischen unbeweglicher und beweglicher Kette erlaubte auch die Interpretation einer Versetzung in einer adsorbierten Monolage aus einer von dem Substrat verschiedenen Substanz. Auch das Modell einer Versetzung innerhalb einer Burgerschen Schraubenversetzung konnten FRANK und VAN DER MERVE in ihre Interpretationen miteinbeziehen. In ihrer zweiten Arbeit der Reihe zu eindimensionalen Versetzungen arbeiteten FRANK und VAN DER MERVE das Modell der Versetzungen in adsorbierten Monolagen aus und erweiterten die statische Gleichung in ihrer dritten Arbeit um einen zweiten harmonischen Term im Potential. Erst in der vierten und letzten Arbeit behandelten sie - ausgehend von der SG-Gleichung - die Dynamik der Versetzungen. Bei der

Lösung der SG-Gleichung gingen sie ebenfalls genau so vor, wie es zur gleichen Zeit, jedoch unabhängig, SEEGER tat. Sie stellten (indirekt) die Lorentzinvarianz fest und verfolgten Lösungen der Form (4.14), d.h. sie mußten nur die zeitunabhängige "SG-Gleichung" lösen und die erhaltenen Lösungen mit Hilfe der Gleichung (4.13) zur Bewegung verhelfen.

Der Inhalt der vierten Arbeit von FRANK und VAN DER MERVE ist - wenn man nur die Ergebnisse betrachtet, die die SG-Gleichung und ihre Integration betreffen - mit den Ergebnissen von SEEGERs Diplomarbeit bzw. denen der Arbeit [See., Koc. 1950] vergleichbar. Leider unternahmen sie keine weiteren Integrationsversuche, wie es SEEGER tat. In diesem Zusammenhang ist eine Bemerkung FRANKs und VAN DER MERVEs interessant: In ihrer vierten Arbeit erwähnten sie, daß sie die Arbeit von FRENKEL und KONTOROVA [Fre., Kon., 1938], die ja ähnliche Ergebnisse zur Dynamik aufweist, nicht gekannt hätten, ehe ihre eigenen Untersuchungen abgeschlossen waren. Die Arbeit [Fre., Kon. 1938] hatten sie allerdings schon in ihrer ersten Arbeit zitiert, die im Dezember 1948 eingereicht worden war. Nach dieser Bemerkung haben sie die SG-Gleichung als Modell für die Dynamik von Versetzungen schon 1948 verwendet, zumindest im Kopf. Sie haben damit also zeitgleich mit SEEGER, der seine Diplomarbeit im Sommer 1948 begonnen hatte, die SG-Gleichung in einem physikalischen Kontext gesehen.

4.3 Die Lösung der Sinus-Gordon-Gleichung

Nach diesen ersten vielversprechenden Lösungsansätzen der SG-Gleichung gerieten SEEGERs Arbeiten erst einmal ins Stocken. Rückblickend aus dem Jahre 1983 beschrieb er selber seine damalige Situation [Seeger 1983, S. 590]:

"Nach der damaligen Ansicht erschien es fast aussichtslos, nach echt zweidimensionalen Lösungen (d.h. nicht auf ein eindimensionales Problem zurückführbaren) strengen Lösungen einer nichtlinearen partiellen Differentialgleichung zweiter Ordnung wie Gleichung (4.11) zu suchen. Zu jener Zeit war das Denken der theoretischen Physik, wohl nicht zuletzt unter dem Eindruck der damals gerade erzielten Erfolge der Störungsrechnung mit Renormalisierung bei der Quantenelektrodynamik, ganz auf die Methoden der Linearisierung der Störungsrechnung abgestellt. Dementsprechend entwickelte ich in meiner Dissertation verschiedene Verfahren zur störungstheoretischen Behandlung von Gleichung (4.11) und von gewissen Erweiterungen." (Anmerkung: Zu diesen Erweiterungen zählt auch die Gleichung (4.10)). "Eine ganze Reihe der so gewonnenen Ergebnisse hat auch heute noch ihre Bedeutung; insbesondere bilden die Berechnungen des Schwingungsspektrums bei Anwesenheit von Versetzungen und die Behandlung von Streuung von Phononen an Versetzungen die Grundlage für die Thermodynamik der Solitonen."

SEEGERs störungstheoretische Behandlungen der SG-Gleichung finden sich in [See., Koch. 1951]. Die Störungsrechnung erwies sich für die SG-Gleichung als relativ leicht handhabbar. So bereitete z.B. die Lösung des Anfangswertproblems keine große Mühe. Da die Störungsrechnung bei stärkerer Nichtlinearität sonst in der Regel zu extrem komplexen Problemen führte,

vermutete SEEGER, daß sich von dieser von ihm untersuchten Gleichung strenge Lösungen explizit angeben ließen, und er hielt Ausschau nach solchen. Diese Suche nach strengen Lösungen führte ihn 1950 zu den Arbeiten der Differentialgeometrie des letzten Jahrhunderts, die die SG-Gleichung ausführlich behandelten. Nach einem Vortrag des Autors im Jahre 1994 im MPI in Stuttgart erzählte Prof. SEEGER dem Auditorium in einer Anekdote, wie er zu diesen Arbeiten fand: Nach dem Krieg gab es an der TH in Stuttgart nur sehr wenige Professoren und infolge dessen auch nur wenige Vorlesungen. Daher war es üblich, alle angebotenen Vorlesungen zu hören, die mehr oder weniger in die Richtung des eigenen Studienfaches paßten. So hörte SEEGER eine Vorlesung über die Differentialgeometrie, die allerdings seiner Meinung nach schlecht war. Obwohl es kein Prüfungsfach war, interessierte ihn die Differentialgeometrie doch so, daß er sich ein Buch zuhelfe nahm, um dort mehr über die Differentialgeometrie zu lesen. Dieses Buch, es war die vierte Auflage von W. BLASCHKEs "Vorlesungen über Differentialgeometrie" [Blaschke 1945], war der Schlüssel, denn auf Seite 207 enthielt es eine Fußnote, die die SG-Gleichung erwähnte. Dort stand, daß auf Flächen von konstantem Gaußschen Krümmungsmaß $K = -1$ der Winkel zwischen den Asymptotenlinien der Gleichung (4.11) gehorcht, wenn man die Krümmungslinien der Flächen als Parameterlinien wählt. Das veranlaßte SEEGER, die ältere Lehrbuch- und Enzyklopädieliteratur zur Differentialgeometrie zu durchforsten, bis er durch die Übersetzung [Bianchi 1910] von BIANCHIs "Lezioni di geometria differenziale" auf die Bäcklundtransformation stieß.

SEEGER stellte fest, daß die von ihm bearbeitete Gleichung nicht nur die zu jener Zeit dank den Arbeiten von Bäcklund, Bianchi, Darboux und anderen Mathematikern wohl am gründlichsten untersuchte nichtlineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung war, sondern darüber hinaus eine Fülle von physikalisch hochinteressanten Eigenschaften aufwies, die mit der Bäcklundtransformation zusammenhingen. Die Bedeutung dieser Entdeckung war SEEGER sofort klar [Seeger, pers. Mitt.]: Es gab Probleme in der Kristallphysik, die wesentlich von der Nichtlinearität gesteuert wurden. Schon BORN hatte darauf hingewiesen. Die Wärmeleitfähigkeit z.B., die mit der Störungstheorie behandelt wurde, oder die Infrarotabsorption. Das war auch mit ein Grund, warum die Störungstheorie so blühte. Aus bekannten Gründen hat die Störungstheorie jedoch nur einen beschränkten Wirkungsradius. SEEGER erkannte, daß mit der Bäcklundtransformation nun auch eine nichtlineare Gleichung exakt und allgemein gelöst werden konnte, und die Hoffnung bestand, daß die SG-Gleichung nicht die einzige integrable nichtlineare Gleichung ist. Das Zentrum der Anwendungsmöglichkeiten stellte für ihn das "nichtlineare Superpositionsprinzip" dar (Gleichung (3.15)). Damit war es möglich, nach je einmaliger Integration durch die Bäcklundtransformation, für zwei verschiedene Lösungen φ_1 und φ_2 , auf systematische Weise Familien von Lösungen mit unendlich vielen Mitgliedern zu generieren. Sie bildeten sich durch die Überlagerung gemäß dem Additionstheorem der Arcus-Tangens-Funktion aus, wobei selbst die Trivialsolution $\varphi = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \dots$ als Ausgangslösung genommen werden konnte und physikalisch Interessantes ergab, nämlich die Überlagerung beliebig vieler Versetzungen beiderlei Vorzeichens mit beliebigen Geschwindigkeiten.

Das nun einsetzende schnelle Vorankommen SEEGERs und des mit ihm arbeitenden Diplomanden HANS DONTN in der Zeit direkt nach diesen Entdeckungen schilderte SEEGER selber [Seeger 1983, S. 591]:

"Mit den von der Differentialgeometrie bereitgestellten mathematischen Hilfsmitteln konnten mein Mitarbeiter H. Donth und ich in kürzester Zeit eine Fülle von Problemen lösen:

Zusammenstöße zwischen Versetzungen gleichen oder entgegengesetzten Vorzeichens, Wechselwirkungen von Versetzungen mit Phononen und mit Wellenpaketen, allmähliches Entstehen von Versetzungspaaren über sog. "breather-Lösungen", Reflexion von Versetzungen an Kristalloberflächen u.a.m. Zu jener Zeit galt es, zumindest unter den sich mit Kristallphysik befassenden Physikern, als Dogma, daß Nichtlinearitäten mit Energieaustausch bzw. Energiedissipation verbunden sein müßten. Unsere Erkenntnisse widersprachen dem auf's radikalste. Trotz der starken Nichtlinearität von Gleichung (4.11) hatten wir Lösungen gefunden, die selbst bei heftigster Wechselwirkung ihre wesentlichen Eigenschaften bewahrten, sich also wie Teilchen verhielten. Um die Verwandtschaft der neuentdeckten Anregungsformen mit den wohlbekannteren nichtwechselwirkenden Eigenschwingungen zu betonen, führten wir die Namen translatorische Eigenbewegungen für die versetzungsartigen Lösungen und oszillatorische Eigenbewegungen für jene wesentlich durch die Nichtlinearität von Gleichung (4.11) bedingten Lösungen ein, die wie Eigenschwingungen zeitlich periodisch waren. H. Donth und ich hatten ziemlich klare Vorstellungen einerseits von der weitreichenden Bedeutung unserer Resultate, andererseits aber auch von den Einschränkungen, denen sie unterlagen. Wir wußten, daß es eine Reihe von weiteren Gebieten der Festkörperphysik gab, die in mehr oder minder guter Näherung durch Gleichung (4.11) oder eine ihrer Erweiterungen beschrieben wurden, und bei denen mit dem Auftreten ähnlich verblüffender Phänomene zu rechnen war. Dazu gehörten der Ferromagnetismus, Phasenumwandlungen, sowie Kinken und Versetzungen."

Eine Weile nach diesen Entdeckungen erschien 1953 von SEEGER, DONTN und KOCHENDÖRFER der dritte Teil einer Veröffentlichungsreihe [See., Koch. 1950, 1951], [SDK 1953], der die Ergebnisse prägnant zusammenfaßte und aus heutiger Sicht einen vielzitierten "Klassiker" (citation classic, golden oldie) in der Literatur zu Solitonen darstellt. In diesen dritten Teil der Reihe flossen auch die Ergebnisse der Doktorarbeit SEEGERs [Seeger 1951] und der Diplomarbeit DONTNs [Donth 1951] ein. Der erste Teil beinhaltete im Wesentlichen die Ergebnisse aus SEEGERs Diplomarbeit [Seeger 1949]. Der zweite Teil befaßte sich mit der störungstheoretischen Behandlung der SG-Gleichung. Und der dritte Teil rundete die im ersten und zweiten Teil begonnene Behandlung der elliptischen Lösungen (4.14-18) der SG-Gleichung ab und gab eine erste Übersicht über die mit Bäcklundtransformation gewonnenen Lösungen. Die durch Bäcklundtransformation aus der Nulllösung $u_0 = 0$ gewonnenen elementaren Funktionen

$$u_1 = 4 \operatorname{arctg} \gamma e^{\frac{x+(\sin \sigma)y}{\cos \sigma}} = 4 \operatorname{arctg} e^{\frac{x-y_0-vy}{\sqrt{1-v^2}}} \quad (4.19)$$

konnten SEEGER et al. mit Hilfe des Superpositionsprinzips einander überlagern und erhielten so aus zwei Lösungen der Form (4.19) eine weitere der Form

$$u_3 = 4 \operatorname{arctg} \left[\frac{\cos(\sigma_1 + \sigma_2)/2}{\sin(\sigma_1 - \sigma_2)/2} \frac{\gamma_1 e^{\varepsilon_1} - \gamma_2 e^{\varepsilon_2}}{1 + \gamma_1 \gamma_2 e^{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} \right]. \quad (4.20)$$

Durch die verschiedensten Kombinationsmöglichkeiten von σ_1 , σ_2 , γ_1 und γ_2 lieferten die so gewonnenen Lösungen (4.20) eine große Vielfalt an Interpretationsmöglichkeiten. Darunter führte der Fall $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$ und σ_1 konjugiert komplex zu σ_2 in einem gewissen Bereich zu

Wellenpaketen, die SEEGER et al. als Modell für die thermische Bewegung in Kristallen vorschlugen (s. Abb. 4.8).

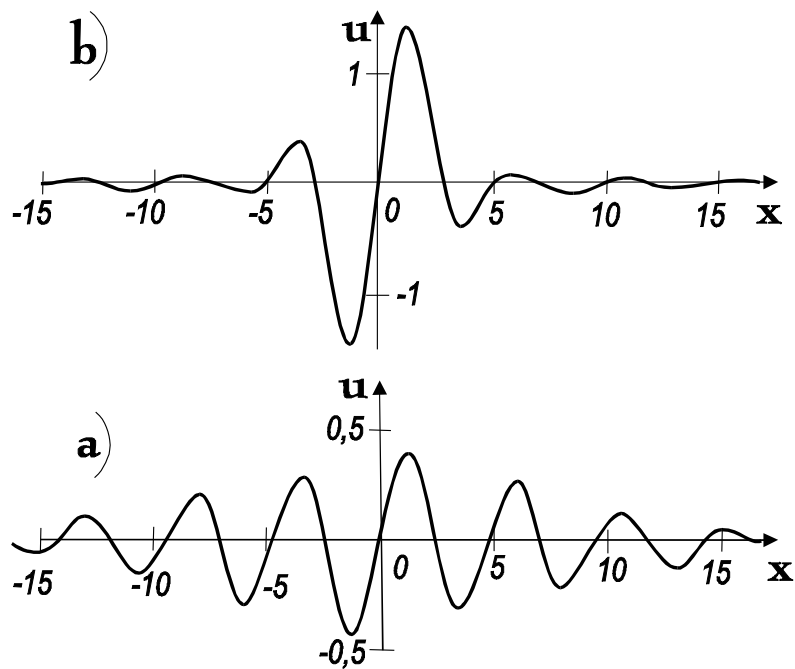


Abbildung 4.8:

Zwei Lösungen der Form (4.20) mit $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$ und σ_1 konjugiert komplex zu σ_2 , aus [SDK 1953]. Sie bilden Wellengruppen, die SEEGER et al. als Modell für die thermische Bewegung in Kristallen vorschlugen.

Damit war es möglich, mit den Lösungen einer einzigen Gleichung, der SG-Gleichung, die Überlagerung von wandernden Versetzungen im thermisch angeregten Kristall zu modellieren. Wie SEEGER et al. auch in einer Abbildung zeigten (Abb. 4.9), fand zwar heftige Wechselwirkung zwischen Versetzung und Wellenpaket statt, der Teilchencharakter beider blieb jedoch vollständig erhalten, wie auch Energie, Wanderungsgeschwindigkeit und Form. Damit war dem herrschenden Dogma, daß bei Nichtlinearität Energiedissipation stattfinden muß, auf das heftigste widersprochen.

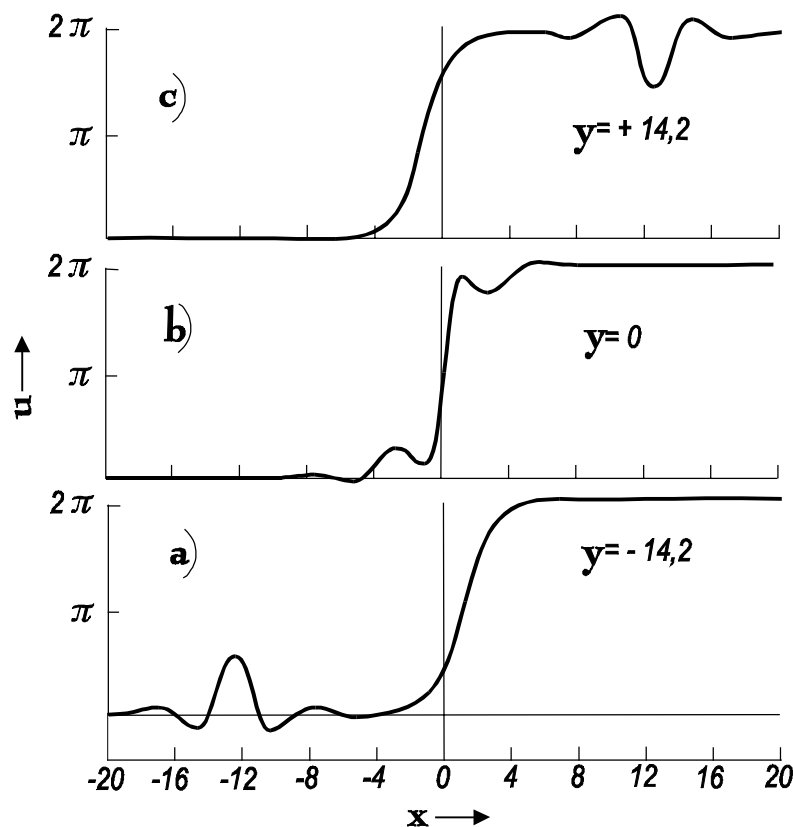


Abbildung 4.9:

Eine Wellengruppe durchdringt eine ruhende Versetzung. a) vor, b) während und c) nach der Durchdringung [SDK 1953]. Diese Abbildung zeigt die später so wichtig werdende Kollisionseigenschaft der Lösungen der SG-Gleichung.

Trotz der nichtlinearen Kraftgesetze war bei kontinuierlicher Behandlung des eindimensionalen Kristalls eine kontinuierliche Bewegung ohne Energiezufuhr möglich. Bei Berücksichtigung der diskontinuierlichen Struktur ergab sich hingegen eine Energiedissipation, wie SEEGER et al. am Ende ihres Artikels [SDK 1953] bemerkten, aufgrund der Wanderungsenergieschwelle, die die Versetzung überwinden muß. Dabei kommt es zu einer periodischen Änderung der Versetzungslänge und Versetzungsgeschwindigkeit, und damit zur Aussendung elastischer Wellen.

Die Arbeiten SEEGERs et al. schlugen keine hohen Wellen; die Reaktion darauf war eher verhalten [Seeger, pers. Mitt.], wie so oft bei Arbeiten, die dem Hauptstrom vorausziehen. Die Einmaligkeit der darin enthaltenen Entdeckungen wurden eben auch als "einmalig" betrachtet, d.h. als eine einzelne und daher unwichtige Kuriosität ohne allgemeine Bedeutung. Da die Solitonenlösungen spezielle Lösungen der partiellen Differentialgleichung sind, wurde vermutet, daß ihnen auch spezielle Anfangsbedingungen zugrunde liegen, die im Vergleich zum Anfangswertproblem eine eher untergeordnete Rolle spielen. Und die konkreten Anwendungen der SG-Gleichung, die sich im Jahre 1953 noch auf die Versetzungen im Kristall und deren thermische Bewegung beschränkten, waren nicht zahlreich genug, nicht allgemein genug, um

große Durchschlagskraft zu erzielen. Diese wäre aber nötig gewesen, um die "Hemmschwelle" nichtlinearer Gleichungen in der Physik überwinden zu können. Die Bedeutung des "nichtlinearen Superpositionsprinzips" wurde nicht erkannt, da es eher als mathematisch interessant als für die Physik von Nutzen eingestuft wurde. Die mit dem Superpositionsprinzip zusammenhängenden Phänomene, die Teilchenartigkeit der Lösungen, hätten in Verbindung mit der Anwendbarkeit der SG-Gleichung und ihren Lösungen auffallen müssen, doch die Anwendungen schienen noch zu gering, man maß ihnen "singulären Charakter" zu. Daß das Superpositionsprinzip eine Art Erzeugungsoperator war, konnte noch nicht recht auffallen. Denn die zweite Quantisierung war in den fünfziger Jahren noch viel zu unbekannt, um das Superpositionsprinzip mitreißen zu können. Die Feldtheoretiker waren sich zu der Zeit noch nicht im Klaren, was das heißen konnte. Außerdem war der Bezug der SG-Gleichung zur Feldtheorie nicht zu erkennen; diese war ja erst in der Entstehung begriffen.

Um vom allgemeingültigen Charakter der entdeckten Eigenschaften der SG-Gleichung zu überzeugen, suchten SEEGER et alia in der folgenden Zeit nach weiteren Anwendungen und auch nach weiteren nichtlinearen Gleichungen mit analogen Eigenschaften. Das nichtlineare Superpositionsprinzip war solch eine Eigenschaft. Um die physikalische Relevanz zu wahren, sollten diese Gleichungen auch lorentzinvariant sein. Die Suche SEEGERs konzentrierte sich also auf Gleichungen der Form $u_{xx} - u_{yy} = f(u)$, die das Superpositionsprinzip erfüllten. In den Folgejahren fand sich jedoch keine einzige weitere Gleichung dieser Art. Durch diesen Mangel an Anwendungen konnte SEEGER seine Entdeckungen, die besonderen Eigenschaften des Modells der Versetzungen und die Integrabilität der dazugehörigen nichtlinearen partiellen Differentialgleichung, nicht zur Ausbreitung bringen. In Stuttgart jedoch wurde in den folgenden Jahrzehnten an dem hoffnungsvollen Modell weiter gearbeitet. Weitere physikalische Anwendungen für das Modell der Versetzungen wurden gefunden [Seeger 1955], insbesondere die Beschreibbarkeit der Solitonen durch die Thermodynamik [Donth 1957], [See., Sch. 1966], und die Stuttgarter Schule um ALFRED SEEGER erlangte eine Führungsposition auf dem Gebiet der Versetzungen.