**6. Über die elektrische Natur der Kohäsionskräfte
fester Körper;
von M. Born.**

Die elastische Kompressibilität der Halogensalze einwertiger Metalle kann durch die Annahme¹⁾ erklärt werden, daß sich die Ionen entsprechend ihren Ladungen nach dem Coulombschen Gesetze anziehen oder abstoßen und daß außerdem zwischen je zwei Ionen eine Abstoßungskraft wirkt, deren Potential der neunten Potenz der Entfernung umgekehrt proportional ist.

Im folgenden soll dieser Ansatz weitergeführt werden. Die Aufgabe ist die, alle übrigen physikalischen Eigenschaften solcher Kristalle aus der genannten Hypothese über die Molekularkräfte abzuleiten. Wenn dies gelingt, so bedeutet es einen Schritt in der Richtung der elektrischen Auffassung der Materie.

Als Material kommen vorläufig nur die schon früher benutzten binären Halogensalze vom Typus NaCl in Betracht, weil sie die reinste Form heteropolarer Verbindungen darstellen; nur bei solchen kann man erwarten, daß sich die Atomkräfte elektrostatisch (ohne Quantentheorie) auffassen lassen, wie Kossel²⁾ an dem Beispiel der chemischen Bindung überzeugend nachgewiesen hat.

Leider ist die Anzahl der physikalischen Konstanten, die man berechnen kann, nicht groß. Bei regulären Kristallen hat man die folgenden³⁾:

1. eine langwellige ultrarote Eigenfrequenz ω (Reststrahl):
2. den Beitrag dieser ultraroten Schwingung zur Dielektrizitätskonstante, $\epsilon - \epsilon_0$;

1) M. Born und A. Landé, Verh. d. D. Phys. Ges., 20. S. 210. 1918.

2) W. Kossel, Ann. d. Phys. 49. S. 229. 1916.

3) Vgl. M. Born, Phys. Ztschr. 19. S. 539. 1918.

3. drei Elastizitätskonstanten¹⁾ c_{11} , c_{12} , c_{44} (wobei c_{11} oder c_{12} durch die Kompressibilität κ ersetzt werden können);
4. bei azentrischen Kristallen eine Konstante e_{14} der polaren Piezoelektrizität.

Dazu kämen noch die auch bei zentrischen Kristallen auftretende tensorielle Piezoelektrizität²⁾, die aber quantitativ noch nicht genügend erforscht ist, sowie sämtliche Vorgänge, die mit Temperaturänderung verknüpft sind, also die thermische Ausdehnung, die Temperaturkoeffizienten der unter 1., 2., 3., 4. genannten Konstanten, die Pyroelektrizität usw.; doch müssen diese noch außer Betracht bleiben, weil die Theorie der Zustandsgleichung der Kristallgitter nicht weit genug entwickelt ist.³⁾

Da das unserm Ansatz zugrunde liegende Gitter vom Typus des NaCl zentrisch symmetrisch ist, kommen nur die unter 1., 2., 3. genannten Konstanten ω , $\varepsilon - \varepsilon_0$, c_{11} , c_{12} , c_{44} in Frage. Aber es sind noch weitere Einschränkungen notwendig. Wie a. a. O.⁴⁾ gezeigt worden ist, bestehen unter der Voraussetzung, daß die Atome punktförmige Kraftzentren sind, bei zweiatomigen Gittern mit Symmetriezentrum zwei Relationen zwischen diesen fünf Größen, nämlich

$$c_{12} = c_{44}, \quad (\varepsilon - \varepsilon_0) \omega^2 = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{e^2}{\Delta},$$

wo e die Ladung der Ionen, m_1 , m_2 ihre Massen und Δ das Volumen der Gitterzelle ist, die ein Atom jeder Art enthält.

Die erste ist die sogenannte Cauchysche Relation; sie ist, wie Voigt⁵⁾ nachgewiesen hat, für den in unsere Klasse gehörigen Kristall KCl (Sylvin) nicht erfüllt. Das muß daran liegen, daß die Atome ausgedehnte Gebilde sind, die sich

1) Wir benutzen die Bezeichnungen von W. Voigt, Lehrbuch der Kristallphysik, Leipzig, B. G. Teubner 1910. Vgl. insbesondere Kap. VII, § 371, S. 738 und § 372, S. 741.

2) Vgl. W. Voigt, Phys. Ztschr. 17. S. 287 und 307, 1916; 18. S. 59. 1917.

3) Für quantitative Schlüsse, wie sie hier angestrebt werden, genügen die Theorien von Mie, Grüneisen und Debye nicht; ich behalte mir vor, die nötigen Ergänzungen demnächst mitzuteilen.

4) Vgl. die S. 87, Anm. 3 zitierte Abhandlung.

5) W. Voigt, Kristallphysik (vgl. Anm. 1), § 372, S. 744.

drehen und deformieren.¹⁾ Man kann leicht einsehen, daß diese Drehungen oder Deformationen wesentlich den Wert von c_{44} beeinflussen, während c_{11} und c_{12} nicht so stark davon betroffen werden. Daher werden wir c_{44} aus unseren Betrachtungen ausschließen.

Die zweite Relation ist zuerst von Dehlinger²⁾ aufgestellt und dann von mir³⁾ unter allgemeineren Voraussetzungen bewiesen worden. Für die Halogensalze der Alkalimetalle bewährt sie sich einigermaßen, für die Halogensalze von Thallium und Silber aber versagt sie vollständig.⁴⁾ Woran das liegen mag, wird im folgenden (S. 102, 103) erörtert werden. Jedenfalls scheidet die Größe $\varepsilon - \varepsilon_0$ für die hier verfolgte Absicht aus.

Unser Ziel ist daher, die Frequenz ω des Reststrahls und die Elastizitätskonstanten c_{11} und c_{12} (oder statt dessen κ) aus der eingangs genannten Hypothese über die Atomkräfte zu berechnen.

Ehe man daran geht, muß man sich klar machen, wie weit man überhaupt eine Übereinstimmung zwischen Theorie und Beobachtung erwarten darf. Die Daten, aus denen die drei Größen ω , c_{11} , c_{12} berechnet werden sollen, sind:

1. die Massen m_1 und m_2 der beiden Atome,
2. das elektrische Elementarquantum e .
3. die Gitterkonstante δ .

Dazu kommt noch der Exponent n des Abstoßungsterms $b r^{-n}$ der potentiellen Energie; nach unseren früheren Ergeb-

1) W. Voigt (Nachr. d. K. Ges. d. Wiss. zu Göttingen, Math.-phys. Kl. 1918) vertritt die Anschauung, daß es genügt, die Atome als starre Körper zu behandeln, deren Drehungen berücksichtigt werden müssen. Ich glaube, daß das optische Verhalten der Kristalle im Ultraroten, wie es auch in vorliegender Abhandlung wieder deutlich wird, dafür spricht, daß Deformationen der Atome zum mindesten dieselbe Rolle spielen wie Drehungen.

2) W. Dehlinger, Phys. Ztschr. 15. S. 276. 1914.

3) M. Born, Sitzungsber. d. Preuß. Akad. d. Wiss., 13. Juni 1918, S. 604; vgl. auch die S. 87, Anm. 3 zitierte Abhandlung.

4) Ich habe in der zitierten Abhandlung (Anmerkung 3) aus der Formel das Verhältnis z der Ionenladung zur Elektronenladung bestimmt; bei den Alkalisalzen ergab sich z etwas größer als 1, bei den einwertigen TI-Salzen zwischen 3 und 4, bei den Ag-Salzen zwischen 1 und 2.

nissen soll $n = 9$ sein, doch lassen wir den Wert für den Augenblick unbestimmt.

Dann ergibt eine einfache Dimensionsbetrachtung, daß man zu Formeln folgender Art gelangen muß:

$$\omega^2 = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{e^2}{\delta^3} f(n),$$

$$c_{11} = \frac{e^2}{\delta^4} f_1(n), \quad c_{12} = \frac{e^2}{\delta^4} f_2(n);$$

dabei sind $f(n)$, $f_1(n)$, $f_2(n)$ dimensionslose Größen, deren Zahlenwert noch von n abhängt. Wenn n gewählt ist, so kommen die Unterschiede der einzelnen Kristalle nur noch durch die Gitterkonstante δ zum Ausdruck, und es ist klar, daß man an so primitive Formeln keine allzu hohen Ansprüche stellen darf. Man sieht nun aber, daß die angegebenen Ausdrücke nur dann in die richtige Größenordnung führen, wenn die Zahlenwerte von f , f_1 , f_2 etwa 20—30 betragen; die Frage ist also, ob der für die Kompressibilität gefundene Wert $n = 9$ dies leistet. Wenn dies der Fall ist, so ist damit mehr als eine triviale Größenordnungsbeziehung gewonnen. Wir werden sehen, daß die Theorie diese Forderung erfüllt. Leider ist das Beobachtungsmaterial, besonders bei den Elastizitätskonstanten, noch wenig umfangreich und gestattet nur eine beschränkte Prüfung der Formeln; aber es genügt, um den Glauben an die elektrische Natur der Kohäsionskräfte zu befestigen.

§ 1. Die Gleichgewichtsbedingung.

Um in Übereinstimmung mit den früheren Arbeiten zu bleiben, bezeichnen wir den Abstand zweier gleichartiger Atome in der Richtung der Würfelkante mit δ . Als Elementarparallelogramm (Zelle) des Gitters¹⁾ wählt man aber am besten

1) Die Bezeichnungen und Benennungen sind bis auf geringfügige Abänderungen dieselben, die ich in meinem Buche „Dynamik der Kristallgitter“, Leipzig, B. G. Teubner 1915, gebraucht habe. In folgenden Punkten weiche ich hier davon ab: 1. Ich rechne nicht mit dem „Obergitter“, dessen Zelle das Volumen 1 hat, sondern mit dem wirklichen Gitter. 2. Zur Festlegung einer Zelle im Gitter gebrauche ich nicht drei Indizes l , m , n , sondern einen Index l , der oben angegeben wird; er ersetzt symbolisch jene drei Indizes, die ich hier mit l_1 , l_2 , l_3 bezeichne. 3. Die Indizes k , k' , welche die verschiedenen Par-

nicht den Würfel von der Kantenlänge δ , der vier Atome jeder Art enthält, sondern ein Rhomboeder, dessen Kanten zu den Verbindungen einer Würfecke mit den Mittelpunkten der drei Nachbarflächen parallel sind (Fig. 1); diese Zelle enthält je ein Atom von beiden Arten. Ist ihr Volumen Δ , so gilt

$$(1) \quad 4 \Delta = \delta^3.$$

Die Gitterpunkte kann man auf die Kanten dieses Rhomboeders als schiefwinklige Achsen beziehen; bequemer ist es, sie durch die rechtwinkligen Koordinaten parallel zu den Würfelkanten zu kennzeichnen. Der Vektor von irgendeinem

Fig. 1.

Gitterpunkte k zu irgendeinem anderen k' ($k, k' = 1, 2$) sei $r_{kk'}$, mit den Komponenten

$$(2) \quad x_{kk'}^{(1)} = \frac{\delta}{2} l_1, \quad y_{kk'}^{(1)} = \frac{\delta}{2} l_2, \quad z_{kk'}^{(1)} = \frac{\delta}{2} l_3,$$

wo l_1, l_2, l_3 ganze Zahlen sind, deren Summe gerade ist, wenn die beiden Atome gleicher Art, aber ungerade, wenn sie verschiedener Art sind:

$$(2') \quad l_1 + l_2 + l_3 \begin{cases} \text{gerade für } k = 1, k' = 1 \text{ und } k = 2, k' = 2, \\ \text{ungerade für } k = 1, k' = 2 \text{ und } k = 2, k' = 1. \end{cases}$$

Wir nehmen nun an, daß die Atome 1 (Metallatome) die positive Ladung $+e$, die Atome 2 (Halogenatome) die negative Ladung $-e$ tragen; dann bestehen zwischen je zwei

Atomsorten voneinander unterscheiden, schreibe ich unten an. Bringt man diese Änderungen der Bezeichnung an, wird man leicht die Formeln des Buches wiedererkennen (ich zitiere dieses im folgenden als D. K.).

Atomen Coulombsche Anziehungen oder Abstoßungen. Außerdem soll noch eine Wirkung zwischen je zwei Atomen vorhanden sein, die das Zusammenstürzen verhindert und näherungsweise als Zentralkraft angesehen werden soll, die einer höheren Potenz des Abstandes umgekehrt proportional ist. Wir setzen daher die gesamte potentielle Energie zwischen zwei Atomen k, k' gleich

$$(3) \quad \varphi_{kk'} = \pm e^2 r^{-1} + b_{kk'} r^{-n}, \quad b_{k'k} = b_{kk}.$$

Dabei gilt das $+$ -Zeichen im ersten Gliede für $k = k'$, das $-$ -Zeichen für $k \neq k'$. Ferner muß für benachbarte Atome verschiedener Art jedenfalls $b_{12} > 0$ sein, damit das zweite Glied eine Abstoßung bedeutet; dagegen kann man das Vorzeichen von b_{11}, b_{22} zunächst offen lassen, da die Wechselwirkung der nächstbenachbarten Atome gleicher Art wegen ihres größeren Abstandes schon so gering sein wird, daß es für die Stabilität des Gitters gleichgültig ist, ob sie sich anziehen oder abstoßen.

Wir berechnen nun zunächst die potentielle Energie des Gitters pro Zelle Δ . Den elektrostatischen Anteil können wir den früheren Arbeiten¹⁾ entnehmen, wo er nach der Methode von Madelung²⁾ berechnet worden ist (vgl. auch den Anhang); wir fanden dort für die elektrostatische Energie des Gitters pro Elementarwürfel der Kante δ den Wert $a \delta^{-1}$ mit

$$(4) \quad a = 13,94 e^2.$$

Die elektrostatische Energie pro Zelle Δ ist der vierte Teil davon.

Die gesamte elektrostatische Energie pro Zelle Δ im Gleichgewicht ist daher³⁾

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{2} \sum_k \sum_{k'} \varphi_{kk'}^{(i)}, \\ &= -\frac{a}{4} \delta^{-1} + \frac{1}{2} \sum_k \sum_{k'} b_{kk'} (r_{kk'}^{(i)})^{-n}, \end{aligned}$$

wo $\varphi_{kk'}^{(i)}$, die potentielle Energie (3) zwischen zwei Gitterpunkten k, k' im Gleichgewichtsabstande

1) M. Born und J. A. Landé, Sitzungsber. d. Preuß. Akad. d. Wiss. 1918. S. 1048. Vgl. auch die S. 87, Anm. 1 zitierte Abhandlung.

2) E. Madelung, Phys. Ztschr. 19. S. 524. 1918.

3) Der Summationsindex i bedeutet eine Summation über alle ganzzahligen Werte der drei Indizes l_1, l_2, l_3 ; vgl. Anm. 1, S. 90.

$$r_{kk'}^{(l)} = \frac{\delta}{2} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{\frac{1}{2}}, \quad l_1 + l_2 + l_3 \begin{cases} \text{gerade für } k = k' \\ \text{ungerade für } k \neq k' \end{cases}$$

bedeutet. Wir führen nun die Summen

$$(5) \quad \left\{ \begin{aligned} S_1(n) &= \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ ungerade}} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{-\frac{n}{2}} \\ &= 6 + 8 \cdot 3^{-\frac{n}{2}} + 24 \cdot 5^{-\frac{n}{2}} + 30 \cdot 9^{-\frac{n}{2}} + \dots, \\ S_2(n) &= \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ gerade}} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{-\frac{n}{2}} \\ &= 12 \cdot 2^{-\frac{n}{2}} + 6 \cdot 4^{-\frac{n}{2}} + 24 \cdot 6^{-\frac{n}{2}} + 12 \cdot 8^{-\frac{n}{2}} + \dots \end{aligned} \right.$$

und die Bezeichnungen

$$(6) \quad b_{12} = b, \quad \frac{b_{11} + b_{22}}{2b_{12}} = \beta$$

ein; dann wird:

$$(7) \quad \Phi = -\frac{a}{4} \delta^{-1} + b \left(\frac{\delta}{2} \right)^{-n} (S_1(n) + \beta S_2(n)).$$

Im Gleichgewicht muß Φ als Funktion von δ ein Minimum sein; daraus folgt:

$$\frac{d\Phi}{d\delta} = \frac{a}{4} \delta^{-2} - \frac{n b}{2} \left(\frac{\delta}{2} \right)^{-n-1} (S_1(n) + \beta S_2(n)) = 0.$$

Hieraus berechnen wir die Konstante b der Abstoßungskraft durch den Gleichgewichtswert von δ :

$$(8) \quad b = \frac{a}{8n} \left(\frac{\delta}{2} \right)^{n-1} \frac{1}{S_1(n) + \beta S_2(n)}.$$

Die Konstante β bleibt unbestimmt; sie ist nach (6) von der Größenordnung 1. Da für größere Werte von n die Summe $S_2(n)$ klein gegen $S_1(n)$ ist, so spielt β keine ausschlaggebende Rolle.

§ 2. Die Kompressibilität.

Die physikalische Konstante, die man am einfachsten aus dem Potential (7) berechnen kann, ist die Kompressibilität.¹⁾ Drückt man Φ mit Hilfe von (1) als Funktion des Zellenvolumens Δ aus

1) Vgl. die S. 87, Anm. 1 u. S. 92, Anm. 1 zitierten Abhandlungen.

$$\Phi = -\frac{a}{8} \left(\frac{D}{2}\right)^{-\frac{1}{3}} + b \left(\frac{D}{2}\right)^{-\frac{n}{3}} (\delta_1(n) + \beta \delta_2(n)),$$

so ist der Druck

$$p = -\frac{d\Phi}{dD} = -\frac{a}{48} \left(\frac{D}{2}\right)^{-\frac{4}{3}} + b \frac{n}{6} \left(\frac{D}{2}\right)^{-\frac{n+3}{3}} (\delta_1(n) + \beta \delta_2(n)).$$

Die Kompressibilität κ ist dann definiert durch

$$\frac{1}{\kappa} = -D \frac{dp}{dD} = -\frac{a}{36} \left(\frac{D}{2}\right)^{-\frac{4}{3}} + b \frac{n(n+3)}{18} \left(\frac{D}{2}\right)^{-\frac{n+3}{3}} (\delta_1(n) + \beta \delta_2(n)).$$

Setzt man hier den aus (8) folgenden Wert

$$b = \frac{a}{8n} \left(\frac{D}{2}\right)^{\frac{n-1}{3}} \frac{1}{\delta_1(n) + \beta \delta_2(n)}$$

ein, so erhält man

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{a}{36} \cdot \frac{n-1}{4} \left(\frac{D}{2}\right)^{-\frac{4}{3}} = \frac{a(n-1)}{9\delta^4},$$

also

$$(9) \quad \kappa = \frac{9\delta^4}{a(n-1)} = \frac{9}{13,94(n-1)} \cdot \frac{\delta^4}{e^2},$$

übereinstimmend mit unserer früheren Berechnung.

Die Elastizitätskonstanten c_{11} und c_{12} hängen bekanntlich mit κ durch die Relation¹⁾

$$(10) \quad c_{11} + 2c_{12} = \frac{3}{\kappa}$$

zusammen; es genügt also, die eine von ihnen zu berechnen (vgl. § 4).

§ 3. Die ultraroten Eigenschwingungen (Reststrahlen).

Bei Kristallen des regulären Systems sind die Schwingungen parallel zu den Würfelkanten miteinander nicht gekoppelt. Sind u_1 und u_2 die Amplituden der beiden Atomarten bei einer parallel zur x -Achse schwingenden Welle von der Frequenz ω , so gelten Gleichungen der Form²⁾

$$\begin{aligned} m_1 \omega^2 u_1 + D \Delta (u_2 - u_1) &= 0, \\ m_2 \omega^2 u_2 + D \Delta (u_1 - u_2) &= 0, \end{aligned}$$

1) Vgl. W. Voigt, Kristallphysik § 372, S. 738, Formeln (442), (444).

2) Vgl. D. K. Formeln (150), S. 62; vgl. auch M. Born (zitiert Anm. 3, S. 87), Formel (27), ff., woher die Bezeichnung D übernommen ist.

wo der Koeffizient D von den Molekularkräften abhängt; daraus folgt für die Frequenz:

$$(11) \quad \omega^2 = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) D \Delta^1.$$

Um D zu berechnen, bilde man zunächst aus den Potentialen (8) die Größen¹⁾:

$$(12) \quad \begin{cases} P_{kk'}^{(l)} = \left(\frac{1}{r} \frac{d\varphi_{kk'}}{dr} \right)_{r_{kk'}^{(l)}}, \\ Q_{kk'}^{(l)} = \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[\frac{1}{r} \frac{d\varphi_{kk'}}{dr} \right] \right)_{r_{kk'}^{(l)}} \end{cases}$$

und daraus die von den Ionen der ersten auf die der zweiten Art pro Volumeneinheit ausgeübte Kraft²⁾:

$$(13) \quad D = \frac{1}{\Delta} \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ ungerade}} (P_{12}^{(l)} + Q_{12}^{(l)} x_{12}^{(l)}) .$$

Doch gelten diese Formeln ohne weiteres nur für den zweiten Term der potentiellen Energie, der die Abstoßung darstellt und einer höheren als der (-1) ten Potenz der Entfernung proportional ist. Der elektrische Anteil der potentiellen Energie erfordert wegen der endlichen Fortpflanzungsgeschwindigkeit der elektromagnetischen Schwingungen eine besondere Behandlung [vgl. Anhang, Formel (b)]; man findet, daß er zu $D \Delta$ den Beitrag

$$- \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{e^2}{\Delta} = - \frac{2\pi}{3} e^2 \left(\frac{\delta}{2} \right)^{-3}$$

liefert. Daher erhält man:

$$\begin{aligned} D \Delta = & - \frac{2\pi}{3} e^2 \left(\frac{\delta}{2} \right)^{-3} - n b \left(\frac{\delta}{2} \right)^{-(n+2)} \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ ungerade}} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{-\frac{n+2}{2}} \\ & + n(n+2) b \left(\frac{\delta}{2} \right)^{-(n+2)} \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ ungerade}} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{-\frac{n+4}{2}} l_1^2 . \end{aligned}$$

Nun ist offenbar

$$3 \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ ungerade}} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{-\frac{n+4}{2}} l_1^2 = \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ ungerade}} (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{-\frac{n+2}{2}} = S_1(n+2) .$$

1) Vgl. D. K., Formeln (14), S. 21.

2) Vgl. D. K., Formeln (18) und (25); die hier D genannte Größe heißt dort $A_0^{(1,2)}$.

Folglich wird

$$D \Delta = -\frac{2\pi}{8} e^2 \left(\frac{\delta}{2}\right)^{-3} + \frac{n(n-1)}{3} b S_1(n+2) \left(\frac{\delta}{2}\right)^{-(n+2)}.$$

Setzt man hier den Ausdruck (8) für b ein, so bekommt man

$$D \Delta = \frac{1}{3} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{-3} \left\{ -2\pi e^2 + \frac{(n-1)a}{8} \cdot \frac{S_1(n+2)}{S_1(n) + \beta S_2(n)} \right\}.$$

Indem man noch den Wert (4) für a einführt, erhält man für das Quadrat der Frequenz nach (11):

$$(14) \quad \omega^2 = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \frac{e^2}{\delta^3} \cdot f(n),$$

wo

$$(15) \quad f(n) = \frac{1}{3} \left(13,94 \frac{(n-1) S_1(n+2)}{S_1(n) + \beta S_2(n)} - 16\pi \right)$$

gesetzt ist.

§ 4. Die Elastizitätskonstanten.

Von den Elastizitätskonstanten c_{11} , c_{12} läßt sich c_{11} direkt berechnen, weil der elektrische Anteil nach der Methode von Madelung gewonnen werden kann; für c_{12} ist das nicht ohne weiteres möglich, aber auch nicht nötig, weil durch die Formel (10) c_{12} auf c_{11} und κ zurückgeführt wird.

c_{11} wird durch folgende Summe dargestellt¹⁾:

$$(16) \quad c_{11} = \frac{1}{2A} \sum_k \sum_{k'} \sum_l Q_{kk'}^{(l)} x_{kk'}^{(l)4}.$$

Der elektrische Anteil davon wird im Anhang besonders berechnet; er hat den Wert $-20,42 e^2 \delta^{-4}$ [Anhang, Formel (k)].

Führt man nun die Summen

$$(17) \quad \left\{ \begin{aligned} C_1(n) &= \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ ungerade}} (l_1^3 + l_2^3 + l_3^3)^{-\frac{n}{2}} l_1^4 \\ &= 2 \left\{ 1 + 4 \cdot 3^{-\frac{n}{2}} + 68 \cdot 5^{-\frac{n}{2}} + 213 \cdot 9^{-\frac{n}{2}} + \dots \right\} \\ C_2(n) &= \sum_{l_1+l_2+l_3 \text{ gerade}} (l_1^3 + l_2^3 + l_3^3)^{-\frac{n}{2}} l_1^4 \\ &= 2 \left\{ 4 \cdot 2^{-\frac{n}{2}} + 16 \cdot 4^{-\frac{n}{2}} + 72 \cdot 6^{-\frac{n}{2}} + 64 \cdot 8^{-\frac{n}{2}} + \dots \right\} \end{aligned} \right.$$

1) Vgl. D. K., Formeln (18), (26), (42), (51), (57). Es sind hier die Größen $\alpha_1^{(k)}$, ... sämtlich gleich Null und die α_{11} , ... direkt die Elastizitätskonstanten.

ein, so erhält man:

$$c_{11} = -20,42 e^2 \delta^{-4} + \frac{1}{d} n(n+2) \left(\frac{\delta}{2}\right)^{-n} b (C_1(n+4) + \beta C_2(n+4)).$$

Mit dem Wert (8) von b wird das zu:

$$(18) \quad c_{11} = \frac{e^2}{\delta^4} f_1(n),$$

wo

$$(19) \quad f_1(n) = 13,94(n+2) \frac{C_1(n+4) + \beta C_2(n+4)}{S_1(n) + \beta S_2(n)} - 20,42$$

gesetzt ist. Aus (10) folgt dann

$$(20) \quad c_{12} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{x} - c_{11} \right) = \frac{e^2}{\delta^4} f_2(n),$$

wo

$$(21) \quad f_2(n) = \frac{1}{2} \left(\frac{13,94(n-1)}{3} - f_1(n) \right).$$

§ 5. Zusammenstellung der Formeln.

Die Formeln (14), (15), (18), (19), (20), (21) enthalten die Lösung des in der Einleitung gestellten Problems. Wir bringen sie jetzt in eine für die numerische Rechnung geeignete Gestalt.

Die Dichte des Kristalls ist

$$(22) \quad \rho = \frac{m_1 + m_2}{d} = 4 \frac{m_1 + m_2}{\delta^3}.$$

Ist N die Avogadro'sche Zahl, so sind die Atomgewichte

$$(23) \quad \mu_1 = N m_1, \quad \mu_2 = N m_2$$

und

$$(24) \quad F = e N = 2,90 \cdot 10^{14} \text{ E.S.E.}$$

ist die Faradaysche Konstante. Daher wird nach (14)

$$\omega^2 = \frac{e F^2}{4 \mu_1 \mu_2} f(n);$$

daraus folgt für die Wellenlänge

$$(25) \quad \lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{4\pi c}{F} \sqrt{\frac{\mu_1 \mu_2}{e f(n)}},$$

mißt man sie in $\mu = 10^{-4} \text{ cm}$, so wird

$$(25') \quad \lambda = 13,0 \sqrt{\frac{\mu_1 \mu_2}{e f(n)}}.$$

Die Elastizitätskonstanten haben den Faktor

$$(26) \quad \frac{e^2}{\delta^4} = e^2 \left(\frac{Nq}{4(\mu_1 + \mu_2)} \right)^{\frac{4}{3}} = \left(\frac{\sqrt{e} F q}{4(\mu_1 + \mu_2)} \right)^{\frac{4}{3}};$$

für $e = 4,774 \cdot 10^{-10}$ wird dieser:

$$(26') \quad \frac{e^2}{\delta^4} = 1,842 \cdot 10^{13} \left(\frac{q}{\mu_1 + \mu_2} \right)^{\frac{4}{3}}.$$

Mit Hilfe der Formel (9) kann man nun aus den gemessenen Werten der Kompressibilität den Abstoßungsexponenten n bestimmen¹⁾; man findet

$$(27) \quad n - 1 = \frac{9}{13,94 \pi} \cdot \frac{\delta^4}{e^2} = 3,505 \cdot 10^{-13} \cdot \frac{1}{\pi} \left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{q} \right)^{\frac{4}{3}}.$$

Die Elastizitätskonstanten ergeben sich aus (26') durch Multiplikation mit $f_1(n)$ und $f_2(n)$; es genügt, c_{11} anzugeben:

$$(28) \quad c_{11} = 1,842 \cdot 10^{13} \cdot \left(\frac{q}{\mu_1 + \mu_2} \right)^{\frac{4}{3}} f_1(n).$$

Ferner erhält man aus (9) und (18) die Relation:

$$(29) \quad \pi c_{11} = \frac{9 f_1(n)}{13,94(n-1)};$$

diese ist explizite unabhängig von der Wahl der Zahlenwerte für e und δ und wird von diesen nur insoweit beeinflusst, als sie in die Bestimmung von n aus (27) eingehen.

Zur Orientierung über den Verlauf der Summen S und C als Funktionen von n dient die folgende kleine Tabelle²⁾; der Bereich von n ist so gewählt, daß er die im folgenden vorkommenden Werte von n enthält.

Tabelle 1.

n	$S_1(n)$	$S_2(n)$	$S_1(n+2)$	$C_1(n+4)$	$C_2(n+4)$
7	6,231	1,149	6,065	2,028	0,1913
8	6,144	0,785	6,036	2,015	0,1314
9	6,065	0,544	6,020	2,007	0,0910
10	6,036	0,381	6,011	2,004	0,0636

1) Vgl. M. Born und A. Landé (a. a. O. Anm. 1, S. 1). Indem wir hier einen moderneren Wert für das elektrische Elementarquantum benutzen, fallen die numerischen Faktoren etwas anders aus als in der zitierten früheren Arbeit.

2) Die Tabelle ist von Frl. Dr. E. Bormann berechnet, die mich bei dieser Arbeit in liebenswürdiger Weise unterstützt hat.

Hieraus geht hervor, daß die Konstante β keinen sehr großen Einfluß auf die Funktionen $f(n)$, $f_1(n)$, $f_2(n)$ hat.

§ 6. Vergleich mit den Messungen.

Wir bestimmen zunächst n aus (27); die folgende Tabelle enthält die Kompressibilitäten nach Richards und Jones¹⁾ nebst Atomgewichten und Dichten und die daraus berechneten Werte von n .

Tabelle 2.

	μ_1	μ_2	ϱ	$\alpha_{\text{beob.}}$	n
NaCl	23,0	35,5	2,17	$4,1 \cdot 10^{-12}$	7,91
NaBr	23,0	79,9	3,01	5,1	8,63
NaJ	23,0	126,9	3,55	6,9	8,47
KCl	39,1	35,5	1,98	5,0	9,85
KBr	39,1	79,9	2,70	6,2	9,80
KJ	39,1	126,9	3,07	8,6	9,33
TiCl	204,0	35,5	7,02	4,7	9,25
TiBr	204,0	79,9	7,54	5,1	9,67
TiJ	204,0	126,9	7,06	6,7	9,84

Der Mittelwert der für n gefundenen Werte ist $n = 9,20$. Macht man die Annahme, daß n ganzzahlig sein soll, so wird man

$$n = 9$$

setzen, einen Wert, der auch durch theoretische Spekulationen über die Atomstruktur gestützt wird.²⁾

Auch die Konstanten λ und c_{11} wird man zunächst mit diesem Werte $n = 9$ berechnen. Dabei ist noch die Konstante β unbekannt; zum Zwecke einer ersten Übersicht über die Brauchbarkeit der Formeln wird man den naheliegenden Ansatz

$$\beta = 1$$

machen, der nach (6) bedeutet, daß für dieselbe Entfernung die Abstoßung zweier Atome verschiedener Art gleich ist dem arithmetischen Mittel der Abstoßung je zweier gleich-

1) Th. W. Richards und Gr. Jones, Journ. Amer. Chem. Soc. **31**. S. 158. 1909. Zitiert nach W. Voigt, Lehrbuch der Kristallphysik, § 362, S. 720.

2) Vgl. M. Born, Verh. d. D. Phys. Ges. **20**. S. 230. 1918 und A. Landé, ebenda, **21**. S. 2. 1919.

artiger Atome. Für $n = 9$, $\beta = 1$ hat man nach (15) und (19) mit Benutzung der Tabelle 1:

$$f(9) = \frac{1}{3} \left(13,94 \frac{8 \cdot S_1(11)}{S_1(9) + S_2(9)} - 16 \pi \right) = 17,10,$$

$$f_1(9) = 13,94 \cdot 11 \frac{C_1(13) + C_2(13)}{S_1(9) + S_2(9)} - 20,42 = 28,26.$$

Die Formeln (25'), (27), (28), (29) liefern nun:

$$(25'') \quad \lambda = 3,14 \sqrt{\frac{\mu_1 \mu_2}{\varrho}},$$

$$(27') \quad \kappa = 4,38 \cdot 10^{-14} \left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{\varrho} \right)^{\frac{4}{3}},$$

$$(28') \quad c_{11} = 5,21 \cdot 10^{13} \left(\frac{\varrho}{\mu_1 + \mu_2} \right)^{\frac{4}{3}},$$

$$(29') \quad \kappa c_{11} = 2,28.$$

Die folgende Tabelle enthält die mit den Daten der Tab. 2 berechneten Werte von λ , κ , c_{11} . Zum Vergleich sind daneben eingetragen die Wellenlängen der Reststrahlen λ_R , soweit sie bekannt sind, die Kompressibilitäten $\kappa_{\text{beob.}}$ nach Richards und Jones (vgl. Tab. 2) und die Konstanten $c_{11\text{beob.}}$ nach Voigt¹⁾, die leider nur für zwei Kristalle vorliegen, endlich das Produkt $\kappa c_{11\text{beob.}}$ aus den gemessenen Werten.

Tabelle 3.

	$\lambda_{\text{ber.}}$	λ_R	$10^{12} \kappa_{\text{ber.}}$	$10^{12} \kappa_{\text{beob.}}$	$10^{-11} c_{11\text{ber.}}$	$10^{-11} c_{11\text{beob.}}$	$\kappa c_{11\text{beob.}}$
NaCl	60,9	52,0	3,54	4,1	6,44	4,68	1,92
NaBr	77,5	—	4,86	5,1	4,69	—	—
NaJ	90,0	—	6,44	6,9	3,54	—	—
KCl	83,0	63,4	5,53	5,0	4,12	3,68	1,84
KBr	107,0	82,6	6,82	6,2	3,35	—	—
KJ	126,1	94,1	8,96	8,6	2,54	—	—
TlCl	101,0	91,6	4,85	4,7	4,71	—	—
TlBr	146,0	117,0	5,53	5,1	4,12	—	—
TlJ	190,0	151,8	7,40	6,7	3,08	—	—

Die Wellenlängen der Reststrahlen (Maxima des Reflexionsvermögens) entsprechen wegen der Absorption nicht genau den

1) W. Voigt, Kristallphysik, § 373, S. 744. Die Angaben Voigts sind durch Multiplikation mit 981 in C.G.S.-Einheiten umgerechnet.

Eigenschwingungen; vielmehr sind die Wellenlängen der letzteren merklich länger. Für Steinsalz haben Rubens und Nichols¹⁾ aus der Dispersionskurve die Eigenschwingung $\lambda = 56,1$ abgeleitet; dieser Wert liegt dem berechneten $\lambda = 60,9$ ziemlich nahe. Für die übrigen Salze ist die Übereinstimmung schlechter, und zwar ist die Abweichung immer im selben Sinne und im großen und ganzen um so größer, je höhere Atomnummern die den Kristall bildenden Atome tragen. Das muß man wohl so verstehen, daß die der Theorie zugrunde liegende Annahme, die Atome seien punktförmige Kraftzentra, um so schlechter erfüllt ist, je größer die den Kristall bildenden Atome sind; denn dann werden Drehungen und Deformationen der Atome auf die Eigenfrequenz Einfluß gewinnen. Die Theorie stellt also den idealen Grenzfall sehr kleiner Atome dar.

Die Übereinstimmung der Elastizitätskonstanten c_{11} muß von demselben Gesichtspunkt aus als befriedigend bezeichnet werden. Auch ist zu berücksichtigen, daß die Sicherheit der gemessenen Werte nicht sehr groß ist.²⁾ Für das Produkt κc_{11} folgen aus den Beobachtungen Werte, die etwas kleiner sind als die theoretische Zahl 2,28. Es wäre sehr zu wünschen, daß durch neue Bestimmungen der Elastizitätskonstanten eine umfangreichere Prüfung der Theorie ermöglicht würde.

Man kann nun versuchen, auf zwei Weisen den Anschluß an die Messungen zu verbessern, ohne den Rahmen der hier gegebenen Theorie zu verlassen. Einmal kann man nämlich, statt mit $n = 9$ zu rechnen, die in Tab. 2 angegebenen n -Werte benutzen, die sich aus der Kompressibilität für jeden Kristall ergeben; man findet, daß das bei einigen Kristallen hilft, bei anderen schadet. Sodann kann man versuchen, ob sich die

1) Rubens und Nichols, Wied. Ann. d. Phys. 60. S. 452. 1897.

2) Voigt (Lehrbuch der Kristallphysik, § 372, S. 742) hebt hervor, daß sich für KCl (Sylvin) aus den von ihm gemessenen Werten von c_{11} und c_{22} die Kompressibilität $\kappa = 7,38$ ergibt, während nach den direkten Messungen von Richards und Jones $\kappa = 5,0$ sein soll. Das Kristallmaterial scheint nicht einheitlich zu sein. Unter diesen Umständen ist es auch überflüssig, die gemessenen Werte auf den absoluten Nullpunkt zu reduzieren, für den die Theorie eigentlich gilt; übrigens wird diese Ungenauigkeit zum größten Teil dadurch kompensiert, daß in die Formeln nicht die Dichte beim absoluten Nullpunkt, sondern bei normalen Temperaturen eingesetzt wird.

Konstante β so bestimmen läßt, daß die Übereinstimmung mit den Beobachtungen verbessert wird; es zeigt sich, daß auch das nicht zum Ziel führt, denn wenn man für die Kristalle NaCl und KCl durch geeignete Wahl von β die Übereinstimmung der Wellenlängen λ verbessert, wird die Abweichung der Elastizitätskonstanten c_{11} größer. In der vorliegenden rohen Form ist also die Theorie nicht geeignet, Aufschluß über das Verhältnis der Kräfte zwischen gleichartigen und ungleichartigen Atomen zu geben. Der Grund ist wohl, daß die Vernachlässigung der Drehbarkeit und Deformierbarkeit der Atome alle feineren Zusammenhänge verdeckt.¹⁾

Zum Schlusse vergleichen wir die Formel (25') für die Wellenlänge der ultraroten Eigenschwingungen mit der in der Einleitung erwähnten Relation von Dehlinger

$$(\varepsilon - \varepsilon_0) \omega^2 = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{e^2}{d},$$

die man auch in der Form

$$\lambda = \frac{4\pi c}{F} \sqrt{\frac{\mu_1 \mu_2 K}{16\pi q}}, \quad K = \varepsilon - \varepsilon_0$$

schreiben kann; sie wäre also mit der neuen Formel (25) identisch, wenn $K = 16\pi/f(n)$ wäre. Dabei ist K die Konstante der Dispersionsformel

$$n^2 = n_0^2 + \frac{K}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2}},$$

die den Einfluß der ultraroten Eigenfrequenz ω_0 auf den Brechungsindex n darstellt. Es ist also $K = \varepsilon - \varepsilon_0$, wo ε die statische Dielektrizitätskonstante, d. h. der Wert von n^2 für $\omega = 0$, und $n_0 = \sqrt{\varepsilon_0}$ der Wert des Brechungsindex im Ultraroten vor der langwelligen Eigenfrequenz ist. Es wurde damals gezeigt, daß diese Formel zwar für die Salze NaCl, KCl, KBr, KJ einigermaßen stimmt, daß sie aber für die

1) W. Voigt hat kürzlich (Nachr. d. K. Ges. d. Wiss. zu Göttingen, Math.-phys. Kl. 1918) den Einfluß der Drehungen der Atome auf die Elastizitätskonstanten untersucht; in einigen Fällen konnte er dabei zu Schätzungen einer β analogen Größe gelangen. Man wird suchen müssen, diese Überlegungen mit der hier gegebenen Theorie zu verschmelzen.

Thallium- und Silbersalze¹⁾ unter der Annahme einfach geladener Ionen vollständig versagt (vgl. Einleitung, S. 89, insbesondere Anm. 4, S. 89). Die neue Formel (25) liefert weitaus bessere Werte für λ , obwohl ihre Begründung viel spekulativer ist, als die der Formel von Dehlinger. An dem Versagen dieser kann also nicht, wie ich früher glaubte²⁾, die Vernachlässigung der Drehbarkeit und Deformierbarkeit der Atome schuld sein, denn diese macht auch die vorliegende Theorie; es scheint mir vielmehr, daß nur die Bestimmung von K aus der empirischen Dispersionskurve den Fehler bewirken kann. Einmal ist die Wahl des Wertes $\epsilon_0 = n_0^2$ überhaupt sehr willkürlich; sodann handelt es sich um stark gedämpfte Schwingungen, was bei dem Ansatz der Dispersionsformel nicht zum Ausdruck gebracht ist. Jedenfalls ist die neue, direkte Berechnung der ultraroten Frequenzen aus den Atomkräften erfolgreicher als die anscheinend so hypothesenfreie aus dem Verlaufe der Dispersion.

Anhang.

Berechnung der elektrischen Wechselwirkungen zwischen den Atomen.

Eine ausführliche Theorie der elektrodynamischen Vorgänge in einem Gitter habe ich a. a. O.³⁾ gegeben. Für die Berechnung der Wechselwirkungen hat man die Fälle zu unterscheiden, ob der Mittelwert der elektrischen Feldstärke über eine Zelle des Gitters verschwindet oder nicht. Im ersten Falle hat man elastische (akustische und thermische) Vorgänge, im zweiten Falle eigentlich elektromagnetische (optische). Im ersten Falle kann man mit gewöhnlichen elektrostatischen (Coulombschen) Kräften rechnen; im zweiten Falle muß man die endliche Fortpflanzungsgeschwindigkeit der

1) Die Silbersalze verhalten sich gegenüber der neuen Theorie merkwürdig; die Formel (27) liefert mit $n = 9$ viel zu große Kompressibilitäten, dagegen stimmen die mit $n = 9$ aus (25') berechneten Wellenlängen gut mit den Reststrahlen überein. Die amorphe Struktur dieser Substanzen mag vielleicht erklären, daß sie sich elastisch anomal verhalten, während ihre optischen Eigenschaften unserer Theorie entsprechen.

2) M. Born, D.K., zit. Anm. 1, S. 89.

3) D. K., 2. Teil, § 22—31.

elektromagnetischen Störungen in Rechnung setzen und die Kräfte als Lösungen der Wellengleichung bestimmen.

Betrachten wir zunächst den Fall der optischen Vorgänge.

Die an den Partikeln angreifenden elektrischen Kräfte leiten sich aus einem Hertzschen Vektor ab, der der Wellengleichung genügt; dieser besteht aus zwei Anteilen, die von den positiven und negativen Ionen herrühren. Die auf ein negatives Ion wirkende Kraft in der x -Richtung ist gleich dem Werte von $-e \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}$ an der Stelle des Ions, wobei φ die von den positiven Ionen herrührende Wirkung darstellt; φ genügt der Wellengleichung und wird an allen positiven Partikeln unendlich wie $e r^{-1}$. Entwickelt man nun unter der Annahme, daß der Mittelwert des Feldes über eine Zelle nicht verschwindet, nach Potenzen der reziproken Wellenlänge, so erhält man in erster Näherung (unendlich lange Wellen) für φ die Differentialgleichung

$$(a) \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \frac{4\pi e}{A}.$$

Da nun aus Symmetriegründen in jedem negativen Gitterpunkte

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}$$

ist, so folgt für die Kraft auf ein Ion

$$(b) \quad -e \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi e^2}{3A};$$

da D die Kraft auf die Ionen einer Art in der Volumeneinheit bedeutet, so ist der gefundene Wert der elektrische Anteil zu $D A$, wie im Text S. 95 angegeben.¹⁾

Bei der Berechnung der elektrischen Beiträge zu den Elastizitätskonstanten braucht die endliche Fortpflanzungsgeschwindigkeit nicht berücksichtigt zu werden. Es handelt sich also um eine rein elektrostatische Aufgabe.

Eine ebenso elegante wie weitreichende Methode zur Berechnung der Potentiale unendlicher Gitter hat Madelung²⁾ angegeben. Er hat danach selbst den Wert der potentiellen Energie eines Gitters vom Typus des NaCl pro Elementarwürfel ermittelt; A. Landé und ich haben diesen Wert eben-

1) Vgl. auch D. K., 2. Teil, § 31, S. 98.

2) A. a. O. S. 6, Anm. 2.

falls berechnet und benutzt.¹⁾ Für die Kantenlänge 1 (gerechnet zwischen zwei Atomen der gleichen Art) hat diese Energie den auf S. 92, Formel (4) mitgeteilten Wert

$$(c) \quad a = 13,94 e^2.$$

Wir haben hier also nur noch den Beitrag der elektrischen Kräfte zu der Elastizitätskonstanten c_{11} zu bestimmen. Nach der Gittertheorie²⁾ beträgt dieser:

$$(d) \quad c_{11}^{(e)} = \frac{1}{2A} \sum_k \sum_{k'} \sum_l \left(\frac{\partial^3 \varphi_{kk'}^{(l)}}{\partial x^3} \right) r_{kk'}^{(l)} \cdot z_{kk'}^{(l)},$$

wobei

$$(e) \quad \varphi_{kk'}^{(l)} = (-1)^{l_1+l_2+l_3} \frac{e^2}{r_{kk'}^{(l)}}$$

das elektrostatische Potential zwischen zwei Gitterpunkten ist. Nun hat offenbar die Summe

$$(f) \quad C = \sum_{k'} \sum_l \left(\frac{\partial^3 \varphi_{kk'}^{(l)}}{\partial x^3} \right) r_{kk'}^{(l)} \cdot z_{kk'}^{(l)}$$

in den beiden Gitterpunkten $k=1$ und $k=2$ einer Zelle denselben Wert; daher liefert die Summation nach k einfach den Faktor 2. Beziehen wir außerdem C auf ein Gitter mit der Ionenladung 1, bei dem benachbarte Atome verschiedener Art den Abstand 1 haben, so wird

$$(g) \quad c_{11}^{(e)} = \frac{1}{2A} \cdot 2 \cdot \frac{e^2}{\delta/2} C = \frac{2e^2}{\delta A} C = \frac{8e^2}{\delta^4} C.$$

Es bleibt also nur noch die numerische Konstante C zu berechnen. Wir setzen die Summe C aus den Beiträgen zusammen, die die Netzebenen $z = \text{konst.}$ liefern. Da die Ebene $z = 0$ nichts zu der Summe beiträgt, kann man schreiben:

$$C = 2 \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} z^2 \right)_{0,0,p} \cdot (-1)^p;$$

dabei ist Φ das elektrostatische Potential der Netzebene $z=0$ in einem Aufpunkte x, y, z , und es sind $x=0, y=0$ und für z der Reihe nach alle positiven ganzen Zahlen p zu setzen.

1) A. a. O. S. 6, Anm. 1.

2) Vgl. D. K. Formeln (26), (42), (51), (57).

Nach Madelung¹⁾ ist das Potential der Netzebene $z = 0$ im Punkte x, y, z :

$$\Phi = 8 \sum_{\substack{m \\ \text{ungerade}}} \sum_n \frac{e^{-\pi \sqrt{m^2 + n^2} \cdot |z|}}{\sqrt{m^2 + n^2}} \cos m \pi x \cos n \pi y.$$

Daher wird

$$(h) \quad C = 16 \pi^2 \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p p^2 \sum_{\substack{m \\ \text{ungerade}}} \sum_n \sqrt{m^2 + n^2} e^{-\pi \sqrt{m^2 + n^2} \cdot p}.$$

Die Reihe konvergiert außerordentlich rasch; um C genauer als auf $1/\infty$ zu erhalten, genügt es, die Indizes $m, n = 1, 8$ und $p = 1, 2$ zu berücksichtigen. Man findet

$$(i) \quad C = -2,644.$$

Setzt man das in (g) ein, so erhält man den auf S. 96 benutzten Wert

$$(k) \quad c_{11}^{(e)} = -20,42 \frac{e^2}{g^4}.$$

1) E. Madelung (a. a. O. S. 6, Anm. 2). Die angegebene Formel findet sich auf S. 532 unter 8. Das Feld eines gemischten (flächenzentrierten) rechtwinkligen ebenen Punktgitters; man hat $a = b = 2$, also $k_{mn} = \frac{1}{2} \sqrt{m^2 + n^2}$, und $E = 1$ zu setzen.

(Eingegangen 26. Juli 1919.)