

Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Lösungen zu Übung 10: Leitfähigkeit

Aufgabe 24: Versuch der klassischen Behandlung der metallischen Leitfähigkeit – Kristalldefekte und Beweglichkeit

- a) Aus der Beziehung $\sigma = ne\mu$ ergibt sich die Beweglichkeit zu $\mu = \sigma/(ne)$, wobei der spezifische Leitwert σ der Kehrwert des spezifischen Widerstands ρ ist; die Elektronendichte n ist laut Aufgabenstellung gleich der Atomdichte, d. h. $n = 4/a^3$ (fcc-Struktur). Damit hat man:

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{a^3/4}{\rho e} = \frac{(0,3605 \text{ nm})^3/4}{0,2 \cdot 10^{-6} \Omega\text{cm} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}} \\ &= \frac{0,01171}{0,2 \cdot 1,6} \cdot \frac{10^{-27} \text{ m}^3}{10^{-8} \Omega\text{m} \cdot 10^{-19} \text{ C}} \\ &= 0,03659 \frac{\text{A m}^3}{\text{V m As}} = 0,03659 \frac{\text{m}^2}{\text{Vs}} \approx 366 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}.\end{aligned}$$

(Anmerkung: Hier und in den folgenden Rechnungen werden die Zahlenfaktoren nur als Zwischenrechnungswerte mit vielen Stellen angegeben. Wegen mehrerer gegebener Zahlenwerte, die nur zwei Stellen Genauigkeit haben, hat auch das Endergebnis nur zwei gültige Stellen; die dritte Stelle wird lediglich mit angegeben, um Rundungsfehler klein zu halten.)

- b) Nach $j = \sigma E$ entspricht eine Stromdichte von $5 \frac{\text{kA}}{\text{cm}^2}$ in Kupfer bei 78 K einer elektrischen Feldstärke von $E = \frac{j}{\sigma} = \rho j = 0,2 \cdot 10^{-6} \Omega\text{cm} \cdot 5 \frac{\text{kA}}{\text{cm}^2} = 1,0 \frac{\text{mV}}{\text{cm}}$. Die Driftgeschwindigkeit ergibt sich daraus zu $v_D = \mu E = 366 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} \cdot 1,0 \frac{\text{mV}}{\text{cm}} = 0,366 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \approx 3,7 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$.
- c) Die Stoßzeit ist $\tau = \frac{m}{e} \mu = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}} \cdot 366 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}} = 2082 \cdot 10^{-12} \frac{\text{cm}^2 \text{kg}}{\text{VAs}^2} = 2,082 \cdot 10^{-9} \frac{\text{cm}^2 \text{kg}}{\text{Js}}$.
 Nebenrechnung: $1 \text{ J} = 1 \text{ Nm} = 1 \frac{\text{kg m}^2}{\text{s}^2}$; damit weiter: $\tau = 2,082 \cdot 10^{-9} (10^{-2} \text{ m})^2 \frac{\text{kg s}^2}{\text{kg m}^2 \text{ s}} = 2,082 \cdot 10^{-13} \text{ s} \approx 0,21 \text{ ps}$.
- d) Die drei Raumrichtungen stellen unabhängige Freiheitsgrade für die Bewegung dar. Daher gilt nach dem Gleichverteilungssatz, daß die mittlere thermische Energie eines Elektrons $\frac{3}{2}k_B T$ ist, was gleich seiner mittleren kinetischen Energie ist: $\frac{1}{2}mv_{\text{th}}^2 = \frac{3}{2}k_B T$. Daraus ergibt sich die mittlere thermische Geschwindigkeit zu $v_{\text{th}} \approx \sqrt{3k_B T/m}$, bei $T = 78 \text{ K}$ also $v_{\text{th}} \approx \sqrt{3 \cdot 86 \mu\text{eV} \cdot 78 / (9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg})}$. Nebenrechnung: $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$; damit $v_{\text{th}} \approx \sqrt{3 \cdot 86 \cdot 1,6 \cdot 10^{-25} \cdot 78 / (9,1 \cdot 10^{-31})} \sqrt{\text{kg m}^2 / (\text{s}^2 \text{ kg})} = \sqrt{3538 \cdot 10^6} \text{ m/s} = 59,48 \cdot 10^3 \text{ m/s} \approx 59 \text{ km/s}$.
- e) Die mittlere freie Weglänge ist $l = 2v_{\text{th}}\tau = 2 \cdot 59 \text{ km/s} \cdot 0,21 \text{ ps} = 24,78 \cdot 10^3 \cdot 10^{-12} \text{ m} \approx 25 \text{ nm}$. Das sind ca. 68,7 Gitterkonstanten.
- f) In der Ebene quer zur Versetzungslinie hat das Elektron eine „Reichweite“, die der Kreisfläche mit dem Radius (von seinem Startpunkt aus betrachtet) der freien Weglänge entspricht. Diese Fläche beträgt ca. $\pi \cdot (25 \text{ nm})^2 = 1963 \text{ nm}^2$. Entsprechend der gegebenen Versetzungsdichten finden sich in dieser Fläche zwischen $1963 \text{ nm}^2 \cdot 10^{-10} \text{ nm}^{-2} \approx 2 \cdot 10^{-7}$ bzw. $1963 \text{ nm}^2 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^{-2} \approx 2$ Versetzungen, d. h. so gut wie keine bzw. knapp zwei. Daher spielen Versetzungen für diesen Wert der mittleren freien Weglänge praktisch keine Rolle.

- g) Das mittlere Volumen pro Atom, V_A , ist das Volumen, das zu einer bekannten Anzahl von Atomen gehört, geteilt durch die Anzahl der Atome. Allgemein wird das durch den Kehrwert der Dichte angegeben: $V_A = 1/n$. Wegen der fcc-Struktur von Kupfer wissen wir zudem ganz direkt, daß es pro Einheitswürfel genau vier Kupferatome gibt, und den Wert haben wir in Aufgabenteil a) schon mal berechnet: $V_A = a^3/4 = 0,01171 \text{ nm}^3 = 11,7 \cdot (0,1 \text{ nm})^3$.
- h) Der effektive Kugelradius eines Streuzentrums beträgt in diesem Fall $r = \sqrt[3]{3V_A/(4\pi)} = \sqrt[3]{35,1/12,6} \cdot 0,1 \text{ nm} = 0,14 \text{ nm}$, der zugehörige Wirkungsquerschnitt ist $A_{\text{eff}} = \pi r^2 = 0,062 \text{ nm}^2$, und die freie Weglänge führt zu einer Dichte der Streuzentren von $n_{\text{Streu}} = 1/(A_{\text{eff}} l) = 1/(0,062 \text{ nm}^2 \cdot 25 \text{ nm}) = 0,645 \text{ nm}^{-3}$.
- i) Der Anteil der Fremdatome ist der Quotient aus Streuzentrendichte und Kupfergitterplatzdichte, $n_{\text{Streu}}/n = n_{\text{Streu}} \cdot V_A$ [siehe die Formel aus Teil g)]. Weil beide pro Kubiknanometer angegeben sind, bekommen wir dafür einfach $0,645 \cdot 0,0117 = 0,00755$, d. h. 0,755 %. Das Kupfer hätte also eine Reinheit von 99,245 %.
- j) Bei einer Reinheit von 99,99 % des Kupfers sind 0,01 % Fremdatome. Im Vergleich dazu ist die zuvor ermittelte Streuzentrendichte um einen Faktor 75,5 größer.
- k) Zu einer um den Faktor 75,5 geringeren Streuzentrendichte gehört bei gleicher freier Weglänge ein um eben diesen Faktor größerer Wirkungsquerschnitt, d. h. der effektive Radius müßte um $\sqrt{75,5} = 8,69$ größer sein und also 1,22 nm betragen.
- l) Das Ergebnis von k) entspricht knapp 3,4 Gitterkonstanten; wegen der fcc-Gitterstruktur bedeutet die einfache Gitterkonstante eine Nachbarschaft von 2 Atomen, d. h. im Abstand von knapp 3,4 Gitterkonstanten befindet sich das sechsnächste Nachbaratom. Einerseits scheint das viel zu sein, denn die lokale Deformation durch das Fremdatom verteilt sich auf immer mehr Atome, je weiter man vom Fremdatom weg ist. Andererseits bedeutet die fcc-Struktur eine dichteste Packung, und also ist, anschaulich gesprochen, wenig Platz zum Ausweichen da. Um die Situation besser einschätzen zu können, müßte man also nach detaillierten Informationen über diese lokalen Gitterdeformationen suchen.¹
- m) Für $T \rightarrow 0 \text{ K}$ geht auch $v_{\text{th}} = \sqrt{3k_B T/m}$ gegen null. Die mittlere freie Weglänge $l = 2v_{\text{th}}\tau$ ginge nur dann nicht gegen null, wenn die Stoßzeit τ entsprechend größer würde – d. h., sie müßte gegen unendlich gehen. Das bedeutete, daß auch die Beweglichkeit gegen unendlich bzw. der spezifische Widerstand gegen null ginge. Das ist aber wegen der vorhandenen Fremdatome nicht möglich.

Bei dieser Betrachtung wurde allerdings nicht berücksichtigt, daß $l = 2v_{\text{th}}\tau$ eine Näherungsformel für thermische Geschwindigkeiten ist, die groß gegenüber der Driftgeschwindigkeit sind; ohne diese Näherung ist die mittlere freie Weglänge durch $l = 2(v_{\text{th}} + v_D)\tau$ gegeben, und im Fall $T \rightarrow 0 \text{ K}$ erhält man daher formal $l = 2v_D\tau$ (*). Damit landet man bei folgendem Widerspruch: Für eine gegebene Dichte an Streuzentren sind sowohl $l = 1/(A_{\text{eff}} n_{\text{Streu}})$ als auch $\tau = \mu m/e = m/(\rho n e^2)$ konstant, aber v_D hängt von der Feldstärke ab; weil damit die Gleichung (*) unerfüllbar ist, bricht die klassische Physik an dieser Stelle zusammen.

¹ Als ein Beispiel sei eine theoretische Arbeit zur lokalen Deformation des Kupfergitters in der Nähe einer Leerstelle genannt; Verschiebungen der Atome wurden bis zu den 6. Nachbarn gefunden: <https://doi.org/10.1002/pssb.2221020217>