

Lösungen zur Übung 4.1-3

Grenzflächenenergie pro Atom

Illustration

Berechne die Grenzflächenenergie γ_{Atom} pro Atom.

Entscheidend ist die Dichte ρ_G der Atome pro m^2 Grenzfläche.

- Für einen fcc Kristall mit der Gitterkonstante a , und einer {100} Ober- oder Grenzfläche haben wir 2 Atome pro a^2
- Gitterkonstanten zwischen 0.3 nm und 0.5 nm umfassen die meisten fcc Elementkristalle; wir haben also

$$\rho_G = \frac{2}{0.09} \dots \frac{2}{0.025} \approx (20 \dots 80) \text{ nm}^{-2} \approx (2 \dots 8) \cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}$$

Wir haben also $(2 \dots 8) \cdot 10^{19}$ Atome auf einem m^{-2} {100} Fläche. Für andere Flächen wird es nicht sehr viel anders sein können, wir nehmen diesen Wertebereich als repräsentativ.

Weiterhin gilt

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$
$$1 \text{ mJ} = 6 \cdot 10^{15} \text{ eV}$$

Mit diesen Zahlenwerten erhalten wir

$$\gamma_{\text{Atom}} = \begin{cases} \frac{6 \cdot 10^{16} \text{ eV}}{(2 \dots 8) \cdot 10^{19}} = (0.8 \dots 3) \cdot 10^{-3} \text{ eV} & \text{für } \gamma = 10 \text{ mJ/m}^2 \\ \frac{6 \cdot 10^{18} \text{ eV}}{(2 \dots 8) \cdot 10^{19}} = (0.8 \dots 3) \cdot 10^{-1} \text{ eV} & \text{für } \gamma = 1000 \text{ mJ/m}^2 \end{cases}$$

Das sind recht vernünftige Werte!

- Im "worst case", d.h. für maximal gestörte Bindungen, landen wir bei ca. 0.1 0,3 eV pro Atom.
- Das ist weniger als die typische Bildungsenergie für Leerstellen, aber es sind auch immer noch Atome in der unmittelbaren Nachbarschaft vorhanden. Bindungen sind also nicht vollständig ungesättigt, sondern allenfalls sub-optimal.