

Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Übung 10: Leitfähigkeit

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

Unter der „klassischen Behandlung der metallischen Leitfähigkeit“ ist die Herangehensweise zu verstehen, die Leitfähigkeit eines Metalls allein auf der Grundlage der klassischen Mechanik zu analysieren, d. h. ohne jeglichen Bezug zur Fermi-Verteilung und zur quantenmechanischen Beschreibung mit Wellenfunktionen.

Obwohl das letzten Endes nicht klappt, ist es lehrreich, es trotzdem zu versuchen, denn dabei zeigt sich, wie weit man mit der „klassischen Denkweise“ kommen kann und woran sie im Detail scheitert. Spielen Sie also den „advocatus diaboli“ und versuchen Sie, die klassische Denkweise zu verteidigen, so weit es nur geht. Was bringt sie wirklich zu Fall? (Hinweis: Sie ist nicht einfach zu Fall zu bringen!)

Gegeben sind folgende Materialdaten/-parameter von Kupfer bei tiefen Temperaturen (genauer: bei 78 K): fcc-Kristallstruktur (einautomige Basis), spezifischer Widerstand: $\rho \approx 0,2 \cdot 10^{-6} \Omega\text{cm}$ (Quelle: Kaye/Laby, „Tables of Physical and Chemical Constants“¹), Gitterkonstante: $a = 0,3605 \text{ nm}$ (Quelle: H.-J. Ullrich, „Precision Lattice Parameter Measurements by Interference ...“²). Berechnen Sie folgende weitere Eigenschaften von Kupfer (wenige Stellen Genauigkeit genügen):

- Ermitteln Sie aus dem spezifischen Widerstand ρ die Beweglichkeit μ (in cm^2/Vs) unter der Voraussetzung, daß jedes Kupferatom ein Leitungselektron bereitstellt.
(Hinweise: Wir wissen schon, daß letzteres nicht stimmt, jedoch beruht dieses Wissen auf der Quantenmechanik; hier geht es dagegen um eine rein klassische Rechnung. Die Elementarladung beträgt $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$.)
- Schätzen Sie daraus die Driftgeschwindigkeit für eine Feldstärke ab, die einer Stromdichte von 5 kA/cm^2 entspricht.
- Ermitteln Sie aus der zuvor erhaltenen Beweglichkeit μ die Stoßzeit τ .
- Verwenden Sie den Gleichverteilungssatz, angewandt auf alle Leitungselektronen (d. h. rechnen Sie so, als ob sie sich wie die Teilchen eines idealen Gases bei der gegebenen Temperatur verhielten), um die mittlere thermische Geschwindigkeit von „klassischen“ Elektronen (d. h. von Elektronen, die als klassische Teilchen behandelt werden) bei $T = 78 \text{ K}$ abzuschätzen.
(Hinweise: Aus dem Gleichverteilungssatz bekommen Sie direkt nur den Mittelwert für das Quadrat der thermischen Geschwindigkeit, $\langle v_{\text{th}}^2 \rangle$, nicht den Mittelwert der Geschwindigkeit, $\langle |v_{\text{th}}| \rangle$; die gewinkelten Klammern stehen für die Mittelwertbildung. Verwenden Sie dann näherungsweise $v_{\text{th}} \approx \sqrt{\langle v_{\text{th}}^2 \rangle}$. Sie können den Näherungswert $k_B = 86 \mu\text{eV/K}$ verwenden.)
- Welche mittlere freie Weglänge l ergibt sich aus der klassisch berechneten mittleren thermischen Geschwindigkeit? Wie groß ist l im Vergleich zur Gitterkonstante a ?

¹ <https://web.archive.org/web/20190506031327/http://www.kayelaby.npl.co.uk/>

² Physica Status Solidi **20** (1967), K113–K117 (DOI: 10.1002/pssb.19670200254)

Als nächstes versuchen wir, die klassisch berechnete mittlere freie Weglänge [Aufgabenteil d)] anschaulich zu deuten, um zu prüfen, ob sie realistisch ist. Die freie Weglänge wird (unter anderem) von den Defekten des Materials begrenzt. Dazu zunächst dies: Die Versetzungsdichte in Kupfer-Einkristallen beträgt im besten Fall (d. h. minimal) etwa 10^4 cm^{-2} und kann bei starker Verformung bis auf etwa 10^{11} cm^{-2} ansteigen. Auf den Nanometermaßstab umgerechnet, betragen diese Versetzungsdichten zwischen $10^4 \text{ cm}^{-2} = 10^4 \cdot (10^7 \text{ nm})^{-2} = 10^{-10} \text{ nm}^{-2}$ und 10^{-3} nm^{-2} . Zum Vergleich mit der freien Weglänge betrachten wir vereinfacht ein Elektron, das sich in der Ebene quer zur Versetzungslinie eine freie Weglänge weit in eine beliebige Richtung bewegen kann.

- f) Wieviele Versetzungen befinden sich unter diesen vereinfachten Verhältnissen in der „Reichweite“ des Elektrons? Was bedeutet das für die Relevanz der Versetzungen als Defekte, welche die freie Weglänge begrenzen?

Wenn man von Gitterschwingungen absieht (später mehr dazu), bleiben noch Fremdatome („Verunreinigungen“ des Kupfers) als Defekte, die sich auf die freie Weglänge auswirken. Fremdatome stören die ideale Symmetrie des Gitters, daher stellen sie Hindernisse dar, gegen welche die Elektronen prallen können, woraufhin sie in irgendeine Richtung gestreut (d. h. in diese Richtung abgelenkt) werden – weshalb man ein solches Fremdatom auch Streuzentrum nennt. Die Streuwirkung tritt nur auf, wenn das Elektron dem Streuzentrum „nah genug“ kommt.

Wie groß aber ist die „Reichweite“ eines Streuzentrums, d. h. wie nah muß ein Elektron an einem Fremdatom vorbeikommen, so daß es an diesem gestreut wird? Der „Wirkradius“ r des Fremdatoms kann auf unterschiedliche Weise abgeschätzt werden. Wegen der dichtesten Kugelpackung der fcc-Struktur ersetzt ein Fremdatom immer ein Kupferatom auf dessen Gitterplatz. Der kleinste sinnvolle Wert für r ergibt sich daraus, daß man für das „Wirkvolumen“ des Fremdatoms das mittlere Kupfer-Atomvolumen V_A ansetzt; $r = \sqrt[3]{3V_A/(4\pi)}$ ist dann einfach der Radius der volumengleichen Kugel.

- g) Wie groß ist V_A ? Geben Sie eine allgemeine Formel an, und rechnen Sie den Wert für Kupfer explizit aus.

Für die weiteren Überlegungen betrachten wir zunächst eine gegebene Dichte n_{Streu} von Streuzentren. Was bedeutet das für die freie Weglänge l ? Um auf den Zusammenhang zwischen l und n_{Streu} zu kommen, schaut man sich an, wieviele Streuzentren ein Elektron auf seinem Weg durch den Kristall effektiv „einsammelt“. Von dem sich bewegenden Elektron aus betrachtet, ragen die Streuzentren mit ihrem „Wirkvolumen“ in seine Bahn hinein, d. h. es kollidiert mit all jenen Streuzentren, die maximal einen Reichweiten-Radius r querab zur Bahn des Elektrons entfernt liegen.

Um herauszubekommen, wieviele das sind, betrachtet man umgekehrt die Bahn des Elektrons als die Mitte eines Zylinders, dessen Radius r gleich der Reichweite eines Streuzentrums ist. Die Querschnittsfläche dieses Zylinders nennt man den Wirkungsquerschnitt $A_{\text{eff}} = \pi r^2$. In einer gegebenen Zeitspanne Δt bewegt sich das Elektron um die Strecke $v_{\text{th}}\Delta t$, und während dieser Zeit kollidiert es mit allen Streuzentren, deren Zentrum sich innerhalb des zylindrischen Volumens $A_{\text{eff}}v_{\text{th}}\Delta t$ befinden, das die Bahn des Elektrons umgibt. Die Anzahl der Kollisionen in der Zeit Δt ist das zylindrische Bahnvolumen mal der Streuzentrendichte, d. h. $n_{\text{Streu}}A_{\text{eff}}v_{\text{th}}\Delta t$. Die mittlere freie Weglänge ist einfach die in der Zeit Δt zurückgelegte gesamte Wegstrecke geteilt durch die Anzahl aller Kollisionen in dieser Zeit, d. h. $l = v_{\text{th}}\Delta t / (n_{\text{Streu}}A_{\text{eff}}v_{\text{th}}\Delta t) = 1/(n_{\text{Streu}}A_{\text{eff}})$.

Wir kennen nun allerdings nicht n_{Streu} , sondern l , daher gehen wir den umgekehrten Weg und ermitteln eine zu unserer freien Weglänge l passende Streuzentrendichte n_{Streu} . Die kann dann mit dem tatsächlichen Reinheitsgrad des Materials verglichen werden.

- h) Berechnen Sie aus der freien Weglänge die zugehörige Streuzentrendichte für den Fall, daß das „Wirkvolumen“ eines Streuzentrums gleich einem Atomvolumen ist.
- i) Wieviel Prozent der Atome wären in diesem Fall keine Kupferatome? Was bedeutet das für den Reinheitsgrad des Kupfers?

Zum Vergleich: Sauerstofffreies Kupfer kann eine Reinheit von 99,99 % (und besser) haben.

- j) Was bedeutet diese Reinheit für die Streuzentrendichte? Um welchen Faktor weicht die zuvor berechnete Dichte von diesem realistischen Wert ab?

Um die aus der Beweglichkeit erhaltene freie Weglänge l mit der Reinheit des Kupfers und also der geringeren Streuzentrendichte in Einklang zu bringen, müßten die Streuzentren wegen des oben hergeleiteten Zusammenhangs $l = 1/(n_{\text{Streu}} A_{\text{eff}})$ einen wesentlich größeren Wirkungsquerschnitt haben.

- k) Um welchen Faktor müßte der „Wirkradius“ im Vergleich zu Aufgabenteil h) zunehmen, um sowohl einer Reinheit des Kupfers von 99,99 % als auch der im Aufgabenteil e) berechneten freien Weglänge gerecht zu werden?

Ein Fremdatom kann einen deutlich größeren Wirkungsquerschnitt haben, als es seiner eigenen Größe entspricht, indem es das Gitter der Kupferatome lokal deformiert, d. h., daß benachbarte Kupferatome gezwungen werden, von ihren regulären Gitterplätzen abzuweichen; Kupferatome, die auf ihren Gitterplätzen sitzen, haben keine Streuwirkung auf die Elektronen.

- l) Vergleichen Sie den resultierenden Wirkradius [Aufgabenteil k)] mit der Gitterkonstante: Kommt Ihnen das Ergebnis realistisch vor? (Hinweise: Hier haben Sie die volle Freiheit, mit ja/nein/vielleicht zu antworten; versuchen Sie, Ihre Antwort zu begründen. Wenn Sie sich zu keiner klaren Antwort durchringen können, geben Sie an, nach welchen weiteren Informationen Sie suchen würden, um die Situation besser einschätzen zu können. Diese Suche brauchen Sie aber nicht auszuführen! Es kommt hier nur darauf an, daß Sie mitdenken.)

Bislang haben wir die Situation bei $T = 78 \text{ K}$ betrachtet, um einen eher geringen Einfluß der Phononen zu haben. Gehen Sie nun gedanklich zu noch tieferen Temperaturen über.

- m) Unabhängig davon, welchen spezif. Widerstand Kupfer bei noch tieferen Temperaturen hat (Supraleitung sei ausgeschlossen): Welche Inkonsistenz ergibt sich bei der bislang verfolgten Herangehensweise im Extremfall $T \rightarrow 0 \text{ K}$?