

Академик А. Ф. ИОФФЕ

К ОЦЕНКЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Существующие теории теплопроводности не дают возможности предвычислить ее величину для данного вещества, хотя довольно хорошо описывают ее температурный ход. Знание теплопроводности для многих применений полупроводников часто столь же необходимо, как и определение их электрических свойств.

Можно утверждать, что теплопроводность K аддитивно складывается из теплопроводности K_1 кристаллической решетки полупроводника и теплопроводности K_2 , обязанной, как и в металлах, диффузии электронов:

$$K = K_1 + K_2. \quad (1)$$

Величина K_2 пропорциональна электропроводности σ :

$$K_2 = A\sigma,$$

причем теория дает

$$A = A_1 = 2 \frac{k^2}{e^2} T \cong 1 \cdot 10^{-6} \sigma \frac{\text{кал} \cdot \text{ом}}{\text{град} \cdot \text{сек}} \quad \text{при } T = 290^\circ \text{ абс.}$$

для невырожденной системы электронов;

$$A = A_2 = 3,3 \frac{k^2}{e^2} T \cong 1,65 \cdot 10^{-6} \sigma \frac{\text{кал} \cdot \text{ом}}{\text{град} \cdot \text{сек}} \quad \text{при } T = 290^\circ \text{ абс.} \quad (2)$$

для вырожденной системы носителей тока.

Граница между A_1 и A_2 должна лежать при концентрации носителей тока около $2,5 \cdot 10^{19}$ в 1 см^3 .

Эти ожидания подтверждаются нашими опытами.

Так, Ю. П. Маслаковец и Ю. А. Дунаев, измеряя теплопроводность сернистого свинца с различным избытком свинца, установили линейный ход теплопроводности с электропроводностью при коэффициенте A , близком к теоретическому.

Е. Д. Девяткова получила такую же зависимость для теллуристого свинца различной электропроводности, причем коэффициент A с переходом в область вырождения вырос почти в 2 раза.

А. В. Иоффе и А. Ф. Иоффе на примере серии сплавов с электропроводностью от 1500 до $4400 \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ получили такой же результат: удельная теплопроводность могла быть выражена как $K = 2,3 \cdot 10^{-3} + A\sigma$, причем A в сплавах с концентрацией электронов менее $2 \cdot 10^{19}$ имело значение около $0,9 \cdot 10^{-6}$, а выше $3 \cdot 10^{19}$ — около $1,4 \cdot 10^{-6}$. Опыты эти носили качественный характер, так как самый состав сплава изменялся от образца к образцу.

Хотя все еще нет прецизионных измерений, связывающих теплопроводность полупроводников с их электропроводностью, можно не сомневаться, что качественное согласие с теорией имеет место.

Менее ясен вопрос о той части теплопроводности, которая обязана тепловому движению самой решетки.

Рассматривая тепловое движение как совокупность всевозможных собственных колебаний твердого тела, Дебай приписывал теплопроводность рассеянию упругих волн, создаваемых тепловыми колебаниями. Центрами рассеяния наряду со структурными неоднородностями служат сами ангармоничные тепловые колебания. Теория Дебая была исправлена и дальше разработана как квантовая теория Пайерлсом.

Теплопроводность можно рассматривать в самом грубом приближении как диффузию фононов, рассеиваемых фононами же. Для такого процесса справедливо выражение, аналогичное формуле кинетической теории газов:

$$K_1 = \frac{1}{3} cv\lambda. \quad (3)$$

Здесь c — теплоемкость 1 см^3 ; v — скорость звука, равная $\sqrt{E/\rho}$, где E — модуль упругости, а ρ — плотность; λ — средняя длина свободного пробега фононов.

Формула (3) дает удобное средство оценить величину K_1 в каждом конкретном случае. Поэтому проверка ее на опыте представляет практический интерес. В этой формуле первые два множителя c и v могут быть легко оценены и измерены. В тех случаях, когда имеются независимые данные о величине λ , можно проверить формулу (3).

Такую возможность дают аморфные тела и стекла, в которых можно ожидать, что при низких температурах рассеивать будут хаотически расположенные молекулы.

Действительно, вычисление по формуле (3) дает для λ значение (6—10) Å как для стекол, так и для аморфных серы и селена. В то же время для монокристаллов или их агрегатов λ получает значения от 20 до 100 Å.

Для стекол температурный ход K при низких температурах должен определяться и фактически определяется ходом теплоемкости c .

В согласии с формулой (3) оказывается, что для графита с ничтожно слабым тепловым движением при низких температурах λ близко совпадает с размерами кристалликов. То же имеет место и для алмаза ниже 30° абс.

Во всех случаях, когда можно пренебречь процессами переброски Пайерлса или рассеянием на тепловых флуктуациях и когда можно непосредственно оценить длину свободного пробега фононов, формула (3) дает для λ вполне удовлетворительные результаты.

Это дает основание применять ее и для кристаллических тел, для которых λ нам заранее неизвестно, чтобы оценить условия, определяющие эффективность процессов рассеяния фононов.

Важнейшим вопросом в таком случае является определение длины свободного пробега λ .

Поскольку рассеяние вызывается флуктуациями теплового движения, а основная масса фононов обладает длиной волны, близкой к длине волны электронов в металле, — менее 10^{-7} см, можно и для фононов принять тот же закон рассеяния, как для электронов в металле. Среднюю длину свободного пробега λ можно положить обратно пропорциональной общей энергии теплового движения

$$\lambda = \frac{B}{T \int_0^T c dT}. \quad (4)$$

Коэффициент B должен, в отличие от металлов, зависеть от степени ангармоничности колебаний при классическом описании или от числа квантов $h\nu$ в сталкивающихся фонах в корпускулярной картине явления. И в том и в другом способе рассмотрения B может расти с температурой. B можно назвать коэффициентом ангармоничности.

Что касается знаменателя выражения (4), то для него имеются численные таблицы, определяющие значение интеграла при заданном θ .

Для температур, значительно превышающих температуру Дебая θ , можно с достаточным приближением принять:

$$\int_0^T c dT = c \left(T - \frac{\theta}{2} \right) = 3k \left(T - \frac{\theta}{2} \right). \quad (5)$$

Внося в формулу (3) значения ν и λ , получаем:

$$K_1 = \frac{1}{3} c \sqrt{\frac{E}{\rho}} \frac{B}{T - \frac{\theta}{2}}, \quad (6)$$

или, приближенно:

$$K_1 = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \frac{B}{T - \frac{\theta}{2}}.$$

Для температуры θ предложено было несколько полуэмпирических выражений, из которых мы остановимся на хорошо оправдывающейся формуле Эйнштейна:

$$\theta = \frac{1,8 \cdot 10^{-3}}{A^{1/2} \rho^{1/6} \chi^{1/2}}, \quad (7)$$

где A — атомный вес, а для молекулярных кристаллов — молекулярный вес; ρ — плотность; χ — сжимаемость, равная $1/E$.

Формула (6) принимает в этом случае следующий вид:

$$K_1 = \frac{1}{3} B \sqrt{\frac{E}{\rho}} \frac{1}{T - \frac{0,9 \cdot 10^{-3} E^{3/2}}{A^{1/2} \rho^{1/6}}}. \quad (6a)$$

Для оценки теплопроводности тела нужно знать его упругие свойства, плотность и атомный вес. Коэффициент B , как можно ожидать, зависит от температуры, но мало изменяется от одного вещества к другому.

Интересно сравнить с величиной λ для фононов длину l пробега электронов и экситонов в том же веществе. Для электронов металла порядок величины l около (20—100) Å, как и λ фононов. Для экситонов получены ориентировочные данные: 103 Å для германия и 12 Å для NaCl. В полупроводниках, электроны которых обладают длиной волны на порядок величины больше, чем основная масса фононов, можно ожидать различия в условиях рассеяния. Это различие можно свести к смещению вниз температуры Дебая θ для электронов.

Измерив теплопроводности K_1 различных материалов, определив для них E , ρ и A , можно будет судить о величине коэффициента ангармоничности и о пригодности формулы (6a) в целом.

Исходя из приведенных соображений, следует ожидать, что теплопроводность материала будет тем больше, чем меньше его атомный вес и чем больше твердость. Можно указать некоторые факты, под-

тверждающие этот естественный вывод. Теплопроводность K_1 элементов и соединений, находящихся в начале периодической системы и обладающих большой твердостью, — алмаз, бор и бериллий (если вычесть из его теплопроводности часть, обязанную электронам), измеряется десятками $\frac{\text{кал}}{\text{см} \cdot \text{сек} \cdot \text{град}}$. Теплопроводность убывает в ряду элементов 4-го столбца: алмаз и графит, кремний, германий.

В средней части системы Менделеева теплопроводность K_1 часто выражается сотнями, а в нижней части системы тысячными, принимая особо малые значения для мягких материалов. Однако данные эти разрознены и иногда противоречивы.

Лаборатория полупроводников
Академии наук СССР

Поступило
1 X 1952