

Zur Theorie der Wärmeleitfähigkeit isotroper Halbleiter im Magnetfeld

Von OTFRIED MADELUNG

Aus dem Forschungslaboratorium der Siemens-Schuckertwerke AG., Erlangen
(Z. Naturforsch. **11 a**, 478–481 [1956]; eingegangen am 29. März 1956)

Herrn Professor TRENDelenburg zum 60. Geburtstag gewidmet

Die Theorie der Wärmeleitfähigkeit isotroper Halbleiter im Magnetfeld wird für den isothermen und den adiabatischen Fall entwickelt und diskutiert. Der elektronische Anteil der Wärmeleitfähigkeit sinkt für kleine Magnetfelder zunächst proportional $(\mu B)^2$ und verschwindet im Grenzfall unendlich hoher Magnetfelder völlig. Der Effekt ist in nicht entarteten Halbleitern am größten im Störleitungsgebiet und nimmt beim Übergang zum Eigenleiter ab. Ebenso verschwindet er mit wachsender Entartung.

Die Untersuchung der Wärmeleitfähigkeit von Halbleitern und der damit verbundenen Effekte hat in der letzten Zeit an Interesse gewonnen. Während bei Metallen die Wärmeleitfähigkeit mit der elektrischen Leitfähigkeit durch das WIEDEMANN-FRANZsche Gesetz verknüpft ist, treten in Halbleitern zusätzliche Erscheinungen auf, die eine Gültigkeit dieses Gesetzes nur in wenigen Fällen zulassen. Einmal ist hier neben dem elektrischen Anteil der Wärmeleitung der Energietransport durch das Gitter selbst nicht vernachlässigbar, ja letzterer überwiegt sogar in den meisten Fällen. Zum anderen findet man in gemischten Halbleitern einen starken zusätzlichen Energietransport durch „ambipolare Thermodiffusion“, d. h. auch bei verschwindendem elektrischem Gesamtstrom kann unter dem Einfluß eines Temperaturgradienten ein Teilchenstrom von Elektron-Loch-Paaren (ohne Ladungstransport) fließen, der neben der kinetischen Energie der Teilchen einen der Breite der verbotenen Zone ΔE proportionalen Energieanteil mit sich führt.

Die Änderung der Wärmeleitung in einem transversalen Magnetfeld ist dagegen noch wenig untersucht. Lediglich an Metallen liegen ausgedehnte experimentelle und theoretische¹ Untersuchungen vor. An Halbleitern wurden merkliche Effekte bisher nur an Te² und HgSe³ festgestellt. Da alle galvano-magnetischen und thermomagnetischen Effekte in Halbleitern proportional dem Produkt aus magnetischer Induktion und Beweglichkeit sind, liegen jetzt jedoch in den III-V-Verbindungen InSb und InAs weitere Halbleiter vor, die einen größeren Einfluß

eines Magnetfeldes auf deren Wärmeleitung erwarten lassen. Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist, die Theorie der Wärmeleitung im Magnetfeld in allgemeiner Form für den isotropen Halbleiter zu entwickeln und zu diskutieren. Hier wurde bisher nur der Fall des Störstellenhalbleiters bei thermischer Streuung theoretisch behandelt⁴.

I. Die Grundgleichungen

Die allgemeinen Ausdrücke für die elektrische Stromdichte und die Energiestromdichte in isotropen Halbleitern unter dem Einfluß beliebiger elektrischer und magnetischer Felder sowie eines Temperaturgradienten wurden bereits in einer früheren Arbeit⁵ angegeben. Diese Grundgleichungen sind jedoch zur vollständigen Erfassung der thermischen Effekte in zwei Punkten zu ergänzen. Sie enthalten zunächst nicht die gerichtete Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern und dem Gitter, also die Übertragung der mit der Gitterwärmeleitung verbundenen Vorzugsrichtung der Phononen von heißen zu kälteren Stellen des Halbleiters auf die Ladungsträger (*phonon drag*⁶), sowie den umgekehrten Effekt der Übertragung der durch ein elektrisches Feld hervorgerufenen Vorzugsrichtung der freien Ladungsträger auf die Phononen bei ihrer gegenseitigen Streuung. Wir wollen diese Effekte, die nur bei tiefen Temperaturen wesentlich werden, hier nicht in die Theorie einbeziehen⁷. Wichtiger

¹ M. KOHLER, Ann. Phys., Lpz. **42**, 110 [1942], **6**, 18 [1949]; E. GRÜNEISEN, K. RAUSCH u. K. WEISS, ibid. **7**, 1 [1950] u. a.

² P. J. WOLD, Phys. Rev. **7**, 169 [1916].

³ CH. I. AMIRCHANOW, A. S. DAIBOW u. W. P. SHUSE, Dokl. Akad. Nauk SSSR **98**, 557 [1954].

⁴ K. B. TOLPYGO, Trudy Inst. Phys. Akad. Nauk Ukrainsk. SSR. **52** [1952].

⁵ O. MADELUNG, Z. Naturforsch. **9 a**, 667 [1954].

⁶ C. HERRING, Phys. Rev. **95**, 954 [1954], dort auch weitere Literaturangaben.

⁷ Vgl. hierzu O. MADELUNG, Halbleiter, in Handbuch der Physik, Bd. 20, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, im Druck.



ist hier jedoch die Berücksichtigung des früher vernachlässigten „potentiellen“ Anteils der Energiedichte. Bei Mitnahme dieses Anteils lauten die Grundgleichungen⁷:

$$\begin{aligned} i &= M_{13+}\mathfrak{E} + M_{22-}[\mathfrak{B}\mathfrak{E}] + M_{31+}\mathfrak{B}(\mathfrak{B}\mathfrak{E}) \\ &\quad + S_{13-}\text{grad } T + S_{22+}[\mathfrak{B}\text{grad } T] \\ &\quad + S_{31-}\mathfrak{B}(\mathfrak{B}\text{grad } T), \\ \mathfrak{c} &= -N_{13-}\mathfrak{E} - N_{22+}[\mathfrak{B}\mathfrak{E}] - N_{31-}\mathfrak{B}(\mathfrak{B}\mathfrak{E}) \quad (1) \\ &\quad - (L_{13+} + z_L)\text{grad } T - L_{22-}[\mathfrak{B}\text{grad } T] \\ &\quad - L_{31+}\mathfrak{B}(\mathfrak{B}\text{grad } T) \end{aligned}$$

mit

$$S_{ik} = \left(\frac{T}{e} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\zeta}{T} \right] + \frac{\partial \alpha}{\partial T} \right) M_{ik} + \frac{1}{T} M_{i,k+2},$$

$$N_{ik} = M_{i,k+2} + \alpha M_{ik}, \quad L_{ik} = S_{i,k+2} + \alpha S_{ik}, \quad (2)$$

$$\alpha_n = E_L/e, \quad \alpha_p = -E_V/e,$$

während alle weiteren Bezeichnungen ungeändert aus der früheren Arbeit⁵ zu entnehmen sind.

II. Wärmeleitung ohne Magnetfeld

Für $\mathfrak{B}=0$ lautet der Ausdruck für die Energiedichte im n-Leiter:

$$\mathfrak{c} = -N_{13n}^0\mathfrak{E} - (L_{13n}^0 + z_L)\text{grad } T. \quad (3)$$

Fordert man noch speziell $i=0$, so wird:

$$\mathfrak{E} = -\frac{S_{13n}^0}{M_{13n}^0}\text{grad } T, \quad (4)$$

$$\mathfrak{c} = -(z_L + z_n)\text{grad } T, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} z_n &= L_{13n}^0 - N_{13n}^0 S_{13n}^0 / M_{13n}^0 \\ &= \frac{1}{T} (M_{17n}^0 - [M_{15n}^0]^2 / M_{13n}^0) \sim \left(\frac{k}{e} \right)^2 \sigma_n T. \quad (6) \end{aligned}$$

Es stelle sich also eine Gegenspannung \mathfrak{E} ein, die einen Stromfluß der Ladungsträger unter dem Einfluß des Temperaturgradienten verhindert. Der Wärmeleitkoeffizient z_n setzt sich aus zwei Gliedern zusammen, von denen das eine den Anteil eines unter dem Einfluß des Temperaturgradienten fließenden unbehinderten „Thermostromes“, das andere den Anteil des kompensierenden „Feldstromes“ repräsentiert. Da beide Stromanteile verschiedene Energie mit sich führen, verschwindet der elektronische Anteil von \mathfrak{c} nicht, sondern wird proportional $(k/e)^2 \sigma_n T$ (WIEDEMANN-FRANZSCHES Gesetz).

Im gemischten Halbleiter ist neben z_n und einem entsprechenden Löheranteil z_p noch ein weiteres Glied zu berücksichtigen. Gefordert wird hier ja

nur das Verschwinden des elektrischen Gesamtstromes. Dies schließt aber nicht aus, daß ein Teilchenstrom von Elektron-Loch-Paaren (ohne Ladungstransport) in Richtung des negativen Temperaturgradienten fließt. Für diesen (Teilchen-) Strom ergibt sich aus (1):

$$\begin{aligned} j &= \frac{i_n}{-e} = \frac{i_p}{e} \\ &= -\frac{1}{eT} \frac{M_{13n}^0 M_{13p}^0}{M_{13n}^0 + M_{13p}^0} \left(\frac{\Delta E}{e} + \frac{M_{15n}^0}{M_{13n}^0} + \frac{M_{15p}^0}{M_{13p}^0} \right) \text{grad } T \quad (7) \end{aligned}$$

und für die zusätzliche Energiedichte:

$$\mathfrak{c}_{\text{Paar}} = \left[e \left(\frac{M_{15n}^0}{M_{13n}^0} + \frac{M_{15p}^0}{M_{13p}^0} \right) + \Delta E \right] j, \quad (8)$$

also

$$\mathfrak{c} = \mathfrak{c}_{\text{Gitter}} + \mathfrak{c}_n + \mathfrak{c}_p + \mathfrak{c}_{\text{Paar}}. \quad (9)$$

Die in (8) auftretenden Glieder $e M_{15}^0 / M_{13}^0$ sind Ausdrücke der Form (vgl. l. c.⁵):

$$e \frac{M_{15}^0}{M_{13}^0} = \frac{\int \frac{1}{2} m v^2 \dots dE}{\int \dots dE}, \quad (10)$$

wo die Integrale jeweils über alle besetzten Terme des Bandes zu erstrecken sind. Sie geben also die mittlere kinetische Energie der am Stromfluß beteiligten Ladungsträger. $\mathfrak{c}_{\text{Paar}}$ setzt sich somit zusammen aus der kinetischen Energie der Elektron-Loch-Paare und ihrer gemeinsamen „potentiellen“ Energie ΔE ⁸.

Für den Spezialfall des gemischten nicht-entarteten Halbleiters bei thermischer Streuung folgt dann aus (5) bis (9) unter Zuhilfenahme der Tab. 2, l. c.⁵:

$$z = z_L + 2 \left(\frac{k}{e} \right)^2 \sigma T \left[1 + \frac{\sigma_n \sigma_p}{2 \sigma^2} \left(\frac{\Delta E}{kT} + 4 \right)^2 \right]. \quad (11)$$

III. Wärmeleitung im Magnetfeld

Bei allen thermomagnetischen Effekten ist zwischen dem *isothermen* und dem *adiabatischen* Fall zu unterscheiden, je nachdem, ob senkrecht zum primären Temperaturgradienten und zum Magnetfeld ein Wärmestrom fließen darf oder ob die Oberflächen in dieser Richtung adiabatisch abgeschlossen sind. Im letzteren Fall entsteht in dieser Richtung ein den Wärmefluß kompensierender Temperaturgradient (RIGHI-LEDUC-Effekt).

Eine ähnliche Unterscheidung existiert bei den galvanomagnetischen Effekten. Hier ist in breiten

⁸ P. J. PRICE, Phil. Mag. **46**, 1252 [1955].

Präparaten ein Stromfluß senkrecht zum angelegten elektrischen Feld und zum Magnetfeld zugelassen, während in schmalen Stäben der transversale Stromfluß durch das Auftreten der HALL-Spannung kompensiert wird.

$$\kappa_{Bi} = \frac{1}{M_{13+}^2 + M_{22-}^2 B_z^2} [M_{13+}^2 (L_{13+} + \kappa_L) - M_{13+} N_{13} - S_{13-} + B_z^2 (M_{22-}^2 (L_{13+} + \kappa_L) + M_{13+} N_{22+} S_{22+} - M_{22-} N_{22+} S_{13-} - M_{22-} N_{13-} S_{22+})] \quad (12)$$

und im Grenzfall kleiner Magnetfelder:

$$\begin{aligned} \kappa_{Bi} = \kappa_0 - \frac{B_z^2}{\sigma_0^2 T} & \left\{ \left[(M_{31+}^0 - (M_{22-}^0)^2 / M_{13+}^0) (M_{15-}^0)^2 + 2 M_{15-}^0 (M_{22-}^0 M_{24+}^0 - M_{13+}^0 M_{33-}^0) + M_{13+}^0 [M_{13+}^0 M_{35+}^0 - (M_{24+}^0)^2] \right] + \frac{\Delta E}{e} \left[M_{13+}^0 (M_{13n}^0 M_{33p}^0 + M_{33n}^0 M_{13p}^0) + M_{15-}^0 (M_{13n}^0 M_{31p}^0 - M_{31n}^0 M_{13p}^0) \right. \right. \\ & \left. \left. + ((M_{15-}^0 - M_{22-}^0) / M_{13+}^0) (M_{13n}^0 M_{22p}^0 + M_{22n}^0 M_{13p}^0) \right] + \left(\frac{\Delta E}{e} \right)^2 [(M_{13n}^0)^2 M_{31p}^0 + (M_{13p}^0)^2 M_{31n}^0 - (1/M_{13+}^0) (M_{13n}^0 M_{22p}^0 + M_{22n}^0 M_{13p}^0)^2] \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

In dem anderen Grenzfall sehr großer Magnetfelder gehen alle M_{ik} , N_{ik} , S_{ik} und L_{ik} mit B_z^{-2} gegen Null, in (12) bleibt dann nur noch der Gitteranteil übrig. Bei unendlich hohem Magnetfeld verschwindet also der elektronische Anteil der Wärmeleitfähigkeit.

Wir geben nun noch den der Gl. (11) entsprechenden Ausdruck für den Koeffizienten der Wärmeleitfähigkeit des nicht entarteten Halbleiters bei thermischer Streuung, beschränken uns dabei aber auf reine Störstellenleiter:

$$\begin{aligned} \kappa_{Bi} &= \kappa_0 - 2 \left(\frac{e}{k} \right)^2 \sigma T \left(\frac{4}{\pi} - \frac{1}{8} \right) \left(\frac{3\pi}{8} \mu B_z \right)^2 \\ &= \kappa_0 \left[1 - 1,15 \frac{\kappa_{0 el}}{\kappa_L + \kappa_{0 el}} (\mu_H B_z)^2 \right], \end{aligned} \quad (14)$$

wo μ_H die HALL-Beweglichkeit $R \sigma = \frac{3\pi}{8} \mu$ bedeutet.

Für den gemischten Halbleiter wird der explizite Ausdruck sehr kompliziert, so daß wir hier auf seine Wiedergabe verzichten. Man gewinnt ihn leicht aus (13), wenn man (im Anschluß an Tab. 2, l. c.⁵) für die M_{ik}^0 die folgenden Werte einsetzt:

$$\begin{aligned} M_{13+}^0 &= e(n\mu_n + p\mu_p), \\ M_{15-}^0 &= 2kT(n\mu_n - p\mu_p), \\ M_{22-}^0 &= \frac{3\pi e}{8} (n\mu_n^2 - p\mu_p^2), \\ M_{24+}^0 &= \frac{9\pi}{16} kT(n\mu_n^2 + p\mu_p^2), \\ M_{31+}^0 &= \frac{9\pi}{16} e(n\mu_n^3 + p\mu_p^3), \end{aligned}$$

Zur expliziten Berechnung des Wärmeleitungs-Koeffizienten legen wir das Magnetfeld in die z -Richtung, den primären Temperaturgradienten in die x -Richtung und fordern $i=0$. Dann ergibt sich im *isothermen* Fall:

$$\begin{aligned} M_{33-}^0 &= \frac{9\pi}{16} kT(n\mu_n^3 - p\mu_p^3), \\ M_{35+}^0 &= \frac{9\pi}{8} \frac{(kT)^2}{e} (n\mu_n^3 + p\mu_p^3). \end{aligned} \quad (15)$$

Eine Diskussion dieses Falles zeigt, daß der numerische Faktor 1,15 der Gl. (14) beim Übergang in die Eigenleitung stark absinkt, daß also dort nur eine schwächere Beeinflussung der Wärmeleitung durch das Magnetfeld möglich ist.

Umgekehrt wächst der numerische Faktor in (14) mit zunehmendem Einfluß der Streuung an ionisierten Störstellen. Liegt dieser Streumechanismus allein vor, so erhält man

$$\kappa_{Bi} = \kappa_0 \left[1 - 11,5 \frac{\kappa_{0 el}}{\kappa_L + \kappa_{0 el}} (\mu_H B_z)^2 \right], \quad (16)$$

wo jetzt μ_H durch $\frac{315}{512} \mu$ gegeben ist.

Wie im magnetfeldfreien Fall läßt sich auch hier der Wärmestrom in verschiedene Anteile aufteilen. Aus (1) folgt durch Umformung:

$$\begin{aligned} c_x = -\kappa_L \frac{\partial T}{\partial x} &= \left[(L_{13n} - N_{22n} Q B_z^2) \right. \\ &\quad \left. - N_{13n} \left(\frac{S_{13n}}{M_{13n}} - \frac{M_{22n}}{M_{13n}} Q B_z^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + (L_{13p} - N_{22p} Q B_z^2) - N_{13p} \left(\frac{S_{13p}}{M_{13p}} - \frac{M_{22p}}{M_{13p}} Q B_z^2 \right) \right] \frac{\partial T}{\partial x} \\ &\quad + \left[e \left(\frac{M_{15n}}{M_{13n}} + \frac{M_{15p}}{M_{13p}} \right) + \Delta E \right] j_x(B_z). \end{aligned} \quad (17)$$

Läßt man zunächst außer acht, daß alle in (17) auftretenden Größen das Magnetfeld noch implizit enthalten, so erkennt man eine weitgehende Analogie

zum magnetfeldfreien Fall. Die ersten beiden Zeilen von (17) geben wieder die Gitterwärmeleitung und die Anteile der sich kompensierenden Elektronenströme bzw. Löcherströme, die dritte Zeile den Anteil des unkompenzierten Elektron-Loch-Paarstromes. Dieser letzte Anteil ist formal identisch mit dem entsprechenden Anteil des magnetfeldfreien Falles. Die kompensierte Teilströme enthalten dagegen sämtlich Zusatzglieder, die proportional dem isothermen NERNST-Koeffizienten Q sind. Daß die Teilströme von Q , also von der durch den Temperaturgradienten erzeugten transversalen Spannung beeinflußt werden, ist einleuchtend. Da Q noch vom Leitungstyp abhängt, ist hier eine Separation des Wärmestromes in den Gitteranteil, zwei dem reinen n-Leiter bzw. p-Leiter zugehörige Anteile und einen beim gemischten Leiter hinzukommenden Anteil nicht möglich. Vor allem ist hier zu beachten, daß Q bei Störstellenleitern positiv, im gemischten Leiter dagegen negativ ist.

$$\chi_{Ba} \approx \chi_0 \left\{ 1 - 1,15 \frac{\chi_{0 el}}{\chi_L + \chi_{0 el}} (\mu_H B_z)^2 \left(1 - 0,67 \frac{\chi_{0 el}}{\chi_L + \chi_{0 el}} \right) \right\}. \quad (20)$$

Solange $\chi_0 \gg \chi_{0 el}$ ist, kann der Unterschied zwischen dem adiabatischen und dem isothermen Fall vernachlässigt werden. Bei einem überwiegenden elektronischen Anteil der Wärmeleitung ist der Einfluß des Magnetfeldes im adiabatischen Fall dagegen kleiner als im isothermen Fall.

Schließlich sei hier noch erwähnt, daß man den isothermen Wärmeleitungskoeffizienten bei Kenntnis des NERNST-Koeffizienten Q und des ETTINGSHAUSEN-Koeffizienten P durch die BRIDGMAN-Beziehung

$$\chi_{Bi} = \frac{Q}{P} T \quad (21)$$

gewinnen kann.

IV. Diskussion

Aus der im letzten Abschnitt entwickelten Theorie folgt, daß der elektronische Anteil der Wärmeleitung eines Halbleiters durch ein Magnetfeld reduziert werden kann. Die Reduktion ist proportional dem Produkt aus Beweglichkeit und magnetischer Induktion sowie dem Quotienten aus elektronischem Anteil des Wärmeleitfähigkeits-Koeffizienten und dem gesamten Wärmeleitfähigkeits-Koeffizienten.

Die Änderung des Wärmeleitfähigkeits-Koeffizienten im Magnetfeld bleibt also solange klein, solange die Gitterwärmeleitung einen beträchtlichen Anteil

Die Berechnung des *adiabatischen* Koeffizienten der Wärmeleitung im Magnetfeld ist wesentlich komplizierter, da in diesem Falle zusätzlich ein Temperaturgradient senkrecht zum primären Temperaturgradienten und zum Magnetfeld auftritt. Bei Kenntnis des RIGHI-LEDUC-Koeffizienten S kann χ_{Ba} jedoch aus χ_{Bi} durch die Beziehung⁵

$$\chi_{Ba} = \chi_{Bi} (1 + S^2 B_z^2) \quad (18)$$

gewonnen werden.

Für S , auf dessen Theorie wir hier nicht näher eingehen wollen, ergibt sich beispielsweise in der Näherung kleiner Magnetfelder für den nicht entarteten Halbleiter bei thermischer Streuung:

$$S = \mp \frac{21}{32} \pi \left(\frac{k}{e} \right)^2 \frac{\mu T}{\chi_0} \sigma_0 = \mp \frac{7}{8} \frac{\chi_{0 el}}{\chi_L + \chi_{0 el}} \mu_H, \quad (19)$$

wo das obere Vorzeichen für den n-Leiter, das untere für den p-Leiter gilt. Einsetzen von (14) und (19) in (18) liefert dann in erster Näherung:

$$\frac{\chi}{\sigma} = \frac{\chi_0}{\sigma_0} \cdot \frac{1 - a \frac{\chi_{0 el}}{\chi_L + \chi_{0 el}} (\mu_H B_z)^2}{1 - b (\mu_H B_z)^2}. \quad (22)$$

der gesamten Wärmeleitung beträgt. Dies ist in Halbleitern jedoch meist der Fall.

In vielen Fällen, wie beispielsweise bei der thermoelektrischen Kühlung, interessiert das Verhältnis zwischen Wärmeleitung und elektrischer Leitfähigkeit, welches dort zur Erzielung eines guten Wirkungsgrades möglichst klein gehalten werden soll. Hierfür gilt:

$$\frac{\chi}{\sigma} = \frac{\chi_0}{\sigma_0} \cdot \frac{1 - a \frac{\chi_{0 el}}{\chi_L + \chi_{0 el}} (\mu_H B_z)^2}{1 - b (\mu_H B_z)^2}. \quad (22)$$

Eine Erniedrigung dieses Koeffizienten ist möglich, wenn $\chi_{0 el} > (b/a) \chi_0$ gilt. Für reine Ionenstreuung ist $b/a = 0,05$, für thermische Streuung in Störstellenleitern $b/a = 0,25$, während dieser Quotient beim Eigenleiter (unter der Annahme $\mu_n = \mu_p$) größer als 1 wird. In diesem Fall ist also keine Erniedrigung des Quotienten χ/σ möglich. Auch in den beiden anderen Fällen liegen die Verhältnisse ungünstig, da dort der Gitteranteil der Wärmeleitung im allgemeinen zu groß ist.

Geht man zum Grenzfall starker Entartung über, so verschwindet der Einfluß des Magnetfeldes sowohl auf die elektrische Leitfähigkeit wie auch die Wärmeleitung eines isotropen Halbleiters. Dies erkennt man leicht aus (13) unter Zuhilfenahme der Tab. 2, l. c.⁵, unter Benutzung der Beziehung $F_a = (\chi + 1)^{-1} (\zeta/kT)^{\chi+1}$ (für $\zeta/kT > 20$).