

CONDUCTIVIDAD TÉRMICA EN METALES, SEMICONDUCTORES, DIELÉCTRICOS Y MATERIALES AMORFOS

FREDDY FERNÁNDEZ-ROJAS¹, CARLOS J. FERNÁNDEZ-ROJAS¹, KEYFFER J. SALAS P.¹, VÍCTOR J. GARCÍA¹, ERNESTO E. MARINERO²

¹Universidad de los Andes, Facultad de Ciencias, Departamento de Física, Grupo de Física de la Materia Condensada.
La Hechicera, Mérida 5101 Venezuela. e-mail: freddyf@ula.ve

² San Jose Research Center 3403 Yerba Buena Road San Jose CA 95135.

Recibido: noviembre de 2007

Recibido en forma final revisado: abril de 2008

RESUMEN

Se estudia la física de la conductividad térmica y sus aspectos más importantes en una variedad de materiales. La conductividad térmica es influenciada por diferentes mecanismos de dispersión de fonones o electrones, los cuales limitan el transporte de energía térmica en el sólido. La conductividad térmica a una temperatura cercana al 80% de la temperatura de fundición es elevada en metales (~300 W/mK) y en semiconductores (~22 W/mK); es baja en dieléctricos (~6 W/mK) y es muy baja en materiales amorfos (~1,5 W/mK). En particular, en materiales amorfos la muy baja conductividad térmica es consecuencia del desorden atómico y de la ocurrencia de procesos de dispersión asociados a la existencia de potenciales de pozo doble asimétricos y a la presencia de modos vibracionales localizados. El propósito de este estudio es revisar las teorías existentes para explicar la conductividad térmica en sólidos y así identificar aspectos o procesos físicos relevantes en el régimen de muy altas temperaturas y antes de la temperatura de fundición, que nos permita articular las conclusiones en un referencial que nos sirva de guía para la especificación y preparación de materiales que puedan ser usados en la elaboración de la nueva generación de barreras térmicas. Nuestro interés se restringe al estudio de la conductividad térmica en sólidos dieléctricos a muy altas temperaturas, en donde hemos encontrado que la contribución de los fonones con un camino libre medio del orden de las dimensiones de las constantes de la red es muy importante y en algunos casos también se logra identificar una contribución relevante por parte de los electrones y/o fonones localizados (fractones localizados).

Palabras clave: Conductividad térmica, Fonones, Electrones, Fractones, Fonones localizados, Barreras térmicas.

THERMAL CONDUCTIVITY IN METALS, SEMICONDUCTORS, DIELECTRICS AND AMORPHOUS MATERIALS

ABSTRACT

We studied the physics underlying thermal conductivity and the most important thermal properties in a myriad of materials. Thermal conductivity is determined by different phonons or electron scattering mechanisms that limit the transport of thermal energy inside the solid. For the sake of the analysis, thermal conductivity close to 80% of melting point in metals is elevated (~300 W/mK) and low in semiconductors (~22 W/mK); is lower in dielectrics (~6 W/mK) and is very low in amorphous materials (~1,5 W/mK). The very low thermal conductivity in amorphous materials is a consequence of the atomic disorder, the occurrence of scattering processes associated with the existence of asymmetric double-well potential and localized vibrational modes. The purpose of this study is to review existing theories explaining the thermal conductivity of solids and so identify issues or relevant physical processes with regard to conditions of very high temperature and near to the melting point that could be important when studying thermal conductivity. This would allow us to place the findings in a framework that could guide the functionalization and preparation of materials that can be used in the elaboration of the new generation of thermal barrier coatings. Our interest is restricted to the study of thermal conductivity at very high temperatures in dielectric solids, where we found that the contribution of phonons with a free path of the order of an interatomic spacing is very important and in some cases we also found relevant the contribution of electrons and/or localized phonons (fractons).

Keywords: Thermal conductivity, Phonons, Electrons, Fractons, Localized phonons, Thermal barriers coating.

En la región I o temperatura por debajo del «plateau» (< 3 K), dominan fonones de baja energía, la fuente principal de dispersión de fonones en este rango de temperatura se debe a la presencia de estados de tunelamiento. La dispersión resonante ocurre entre dos niveles de baja energía del potencial de pozo doble asimétrico. El camino libre medio de los fonones en cada evento de dispersión varía con la temperatura de acuerdo a la siguiente expresión, $l \propto \coth(\hbar\omega/2k_B T)$, para fonones de bajas frecuencias, el camino libre medio es proporcional a la temperatura ($l \propto T$) y la conductividad térmica es proporcional a T^2 . En la región II a temperaturas entre 3 y 15 K, la conductividad se hace constante. Orbach *et al.* (1986) sugieren un modelo para explicar este comportamiento basado en las interacciones anarmónicas entre fractones (longitud de onda corta) y fonones (longitud de onda larga). El modelo de Orbach introduce la idea de fonones propagándose a baja frecuencia ($\hbar\omega < k_B T$) y fractones localizados espacialmente a alta frecuencia con temperatura $T \approx \hbar\omega_c/k_B$, donde; ω_c es la frecuencia umbral de separación entre un fonón y un fractón. Los fractones no portan energía térmica debido a que representan modos vibracionales localizados. Por lo tanto, los fonones de muy corto camino libre medio ($l_{\text{fonón}}$) son el único medio de transporte de energía térmica. Considerando que el camino libre medio del fonón es independiente de la temperatura, la conductividad térmica se hace constante (Alexander *et al.* 1986). En esta región el principal proceso de dispersión del fonón es la interacción entre fractones y fonones del tipo:



A temperaturas por arriba del «plateau» o región III, la conducción de energía térmica es debido a fonones inducidos y mecanismos de salto «hopping» del fractón, conduciendo a una conductividad térmica que se incrementa con la temperatura. Las interacciones anarmónicas en esta región son del tipo:



La conservación de la energía puede ser satisfecha considerando $\omega_{\text{fonón}} \ll \omega_{\text{fractón}}$. En la región III, el inverso del tiempo de vida del fractón (mecanismo de salto «hopping») se incrementa linealmente con la temperatura $\tau_{\text{fractón}}^{-1} \propto T$ y el calor específico ($C_\alpha(T)$) a temperaturas por arriba de la región de «plateau» es constante. Así, la conductividad térmica representada por la ecuación (5) es proporcional a T.

Considerando el mecanismo de salto del fractón como un mecanismo extra para la conducción de energía térmica, podemos expresar a temperaturas por arriba de la región de «plateau», a la conductividad térmica como proporcional a la temperatura ($\kappa_{\text{fractón}} \propto T$).

La figura 7 muestra la conductividad térmica en función de la temperatura normalizada con respecto al punto de fundición para algunos sólidos amorfos.

De lo anteriormente expuesto surge una estrecha relación entre los principales procesos físicos que se manifiestan en los materiales estudiados a muy altas temperaturas. A continuación se menciona este comportamiento y se analiza la conductividad térmica a muy altas temperaturas para varios sólidos, en especial, para dieléctricos y amorfos.

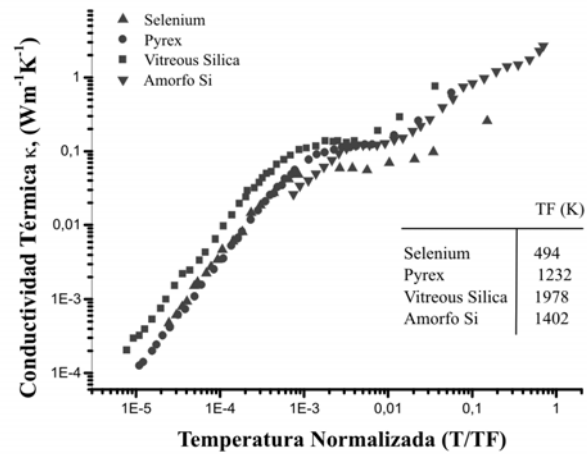


Figura 7. Conductividad térmica en función de la temperatura normalizada con respecto al punto de fundición. Datos tomados de: selenium, pirex, vitreous silica, (Zeller y Pohl, 1971; Srivastava, 1990); a-Si, (Phillpot & McGaughey, 2005).

INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS EXPERIMENTALES A ALTAS TEMPERATURAS

En la región de altas temperaturas ($T > \theta_D$) y antes de la temperatura de fundición, los principales portadores que contribuyen a la conductividad térmica son; fonones y electrones (interacción electrón-fonón) en metales; fonones, electrones (par electrón-hueco, electrones, huecos) y fotones en semiconductores y para el caso de dieléctricos, los fonones (procesos de tres, cuatro y más fonones), la radiación térmica y posiblemente los electrones en un muy bajo porcentaje. Fractones y fonones en sólidos amorfos.

En la figura 8 se observa que la conductividad térmica a una temperatura cercana al 80% de la temperatura de fundición es elevada en metales (~ 300 W/mK) y en semiconductores (~ 22 W/mK); es baja en dieléctricos (~ 6 W/mK) y es muy baja en materiales amorfos ($\sim 1,5$ W/mK).

La figura 9 muestra que el valor de la conductividad térmica a muy altas temperaturas en sólidos dieléctricos y materiales amorfos parece «converger» o se aproxima a un valor límite,

- OLSON, J. R., & POHL, R. O. (1993). *Physical Review B*, 47 (22); 14850-14856.
- OLSON, J.R., POHL, R.O., VANDERSANDE, J.W., ZOLTAN, A., ANTHONY, T.R., BANHOLZER, W.F. (1993). *Physical Review B*, 47 (22); 14850-14856.
- OMINI, M., & SPARAVIGNA, A. (2000). *Physical Review B*, 61 (10); 6677-6688.
- PARROT, J.E., & STUCKES, A.D. (1975). *Thermal Conductivity of Solids*. London: Pion Ltd.
- PHILLPOT, S.R., & MCGAUGHEY, J.H. (2005). *Materialstoday*; 18-20.
- PIERLS, R. (1929). *Ann. der Phys*, 3; 1055.
- SRIVASTAVA, G. P. & VERMA, G.S. (1974). *Physical Review B*, 10(1); 219-225.
- SPAVIERI, G., CABREA, F., MARCANO, G., ROMERO, H. (1980). *Physical Review B*, 21 (4); 1610-1616.
- SLACK, G.A. (1972). *Physical Review B*, 6 (10); 3791-3800.
- SRIVASTAVA, G.P. (2001). *Materials Research Society Bulletin*, 26 (6); 445-450.
- SRIVASTAVA, G.P. (1990). *The Physics of Phonons*. Bristol: Adam Hilger.
- ZELLER, R. C., & POHL, R.O. (1971). *Physical Review B*, 4 (6); 2029-2041.
- ZIMAN, J.M. (1960). *Electrons and Phonons* (First Edition ed.). Clarendon: Oxford.