

Die Temperaturabhängigkeit der elektronischen Kenngrößen des eigenleitenden Siliciums

Th. Wasserrab

Institut für Stromrichtertechnik und Elektrische Antriebe,
Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen

(Z. Naturforsch. **32 a**, 746–749 [1977]; eingegangen am 28. April 1977)

The Temperature Dependence of the Electronic Properties of Intrinsic Silicon

From phenomenological equations for the electric resistance and the electron and hole mobilities, the intrinsic carrier concentration is calculated ($n_i=1.02 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ at $T=300 \text{ K}$) and its temperature dependence is derived. Correlation with a well-known quantum-statistical equation delivers the temperature dependence of the density-of-states effective masses.

Zur Verifizierung theoretischer Untersuchungen pflegt man die quantitativen Ergebnisse von Rechnungen mit einschlägigen Meßwerten zu vergleichen. Dazu benötigt man bei Halbleitern möglichst zuverlässige Zahlenwerte für die maßgeblichen elektronischen Kenngrößen des betreffenden Werkstoffes, wie z. B. den Bandabstand E_g , die Inversionsdichte n_i , die Trägerbeweglichkeiten b_n und b_p usw. Obwohl Si der meistverwendete Werkstoff der gegenwärtigen Halbleitertechnologie ist, waren seine Kenndaten bisher keineswegs mit der wünschenswerten Genauigkeit bekannt, worauf kürzlich in einer Notiz¹ hingewiesen wurde.

Bei den erwähnten Kenndaten kommt der Präzisierung des Bandabstandes besondere Bedeutung zu, weil E_g in der Regel im Exponenten auftritt und daher schon geringe Änderungen starke Auswirkungen haben. Für den praktisch wichtigen Temperaturbereich von 200 K bis 600 K konnte neuerdings eine wesentliche Verbesserung in bezug auf die Genauigkeit von $E_g(T)$, in Übereinstimmung mit den neuesten Meßwerten, erreicht werden. Damit ist nunmehr die Voraussetzung gegeben, zusammen mit weiteren modernen Meßergebnissen eine neuerliche Berechnung von n_i vorzunehmen.

1. Die Auswertung von Widerstandsmessungen

Das einfachste Verfahren zur Bestimmung der Inversionsdichte n_i besteht darin, den spezifischen Widerstand ϱ_i und die Trägerbeweglichkeiten b_n , b_p von eigenleitendem Si zu messen und n_i mittels der Beziehung

$$n_i = 1/e(b_n + b_p) \varrho_i \quad (1.1)$$

zu berechnen (e bezeichnet die Elementarladung).

Da man in der Literatur bevorzugt die Meßergebnisse von Morin und Maita² zitiert, werden diese nachstehend ausgewertet und den entsprechenden Daten von Fulkerson und Mitarb.³ gegenübergestellt. Letztere haben ihre ϱ_i -Meßwerte durch die Gleichung

$$\varrho_i(T) = 5,66 \cdot 10^{-5} \exp\{6733 \text{ K}/T\} \Omega \text{cm} \quad (1.2)$$

beschrieben. Da Morin-Maita ihr Meßergebnis jedoch nur graphisch dargestellt haben, so wurde dieses für den vorliegenden Zweck ebenfalls algebraisiert:

$$\varrho_i(T) = 5,25 \cdot 10^{-5} \exp\{6721 \text{ K}/T\} \Omega \text{cm} \quad (1.3)$$

In jedem Falle ist zu beachten, daß die Eigenleitung erst bei $T > 450 \text{ K}$ die Störstellenleitung hinreichend übertraf und die ϱ_i -Werte bei Raumtemperatur nur durch Extrapolation erhalten werden konnten:

$$\text{Morin-Maita: } \varrho_i(300 \text{ K}) = 2,817 \cdot 10^5 \Omega \text{cm}, \quad (1.4)$$

$$\text{Fulkerson u. Mit.: } \varrho_i(300 \text{ K}) = 3,161 \cdot 10^5 \Omega \text{cm}. \quad (1.5)$$

Morin und Maita² haben für die Trägerbeweglichkeiten von eigenleitendem Si folgende Beziehungen angegeben:

$$\text{Elektronen: } b_n = 1450 \left(\frac{300 \text{ K}}{T}\right)^{2.6} \text{ cm}^2/\text{Vs}, \quad (1.6)$$

$$\text{Löcher: } b_p = 500 \left(\frac{300 \text{ K}}{T}\right)^{2.3} \text{ cm}^2/\text{Vs}, \quad (1.7)$$

deren Summe im Bereich $200 \text{ K} < T < 500 \text{ K}$ durch

$$b_n + b_p \approx 1950 \left(\frac{300 \text{ K}}{T}\right)^{2.52} \quad (1.8)$$

approximiert werden kann.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Geht man mit (1.3) und (1.8) in (1.1), so erhält man für die Inversionsdichte im Bereich $200 \text{ K} < T < 500 \text{ K}$

$$n_i(T) = 6,10 \cdot 10^{19} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{2,52} \exp \left\{ - \frac{6721 \text{ K}}{T} \right\} \text{ cm}^{-3} \quad (1.9)$$

und für Raumtemperatur

$$n_i(300 \text{ K}) = 1,14 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}. \quad (1.10)$$

Morin und Maita haben diese Auswertung ihrer $\rho_i(T)$ -Messung selbst nicht vorgenommen, sondern vielmehr versucht, aus den Meßergebnissen die Temperaturabhängigkeit des Bandabstandes E_g zu ermitteln. Diese Frage soll jedoch erst im nächsten Abschnitt behandelt werden. Vorerst soll die Gegenüberstellung der Meßergebnisse fortgeführt werden.

Zur Auswertung der Fulkerson-Messung (1.2) soll die neueste zusammenfassende Darstellung der bisherigen Messungen der Trägerbeweglichkeiten herangezogen werden. Ottaviani und Mitarb.⁴ haben für den Bereich $150 \text{ K} < T < 400 \text{ K}$ folgende phänomenologischen Gleichungen angegeben:

$$\text{Elektronen: } b_n = 1450 \left(\frac{300 \text{ K}}{T} \right)^{2,42} \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}, \quad (1.11)$$

$$\text{Löcher: } b_p = 480 \left(\frac{300 \text{ K}}{T} \right)^{2,20} \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}, \quad (1.12)$$

womit sich für deren Summe näherungsweise

$$b_n + b_p \approx 1930 \left(\frac{300 \text{ K}}{T} \right)^{2,365} \text{ cm}^2/\text{Vs} \quad (1.13)$$

ergibt. Mit (1.5) folgt dann aus (1.1) für die Temperaturabhängigkeit der Inversionsdichte

$$n_i(T) = 5,71 \cdot 10^{19} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{2,365} \cdot \exp \left\{ - 6733 \text{ K}/T \right\} \text{ cm}^{-3} \quad (1.14)$$

und bei Raumtemperatur

$$n_i(300 \text{ K}) = 1,02 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}. \quad (1.15)$$

Die vorstehenden Zahlen zeigen bemerkenswerte Übereinstimmungen. Die Fulkerson-Zahlen sind für $\rho_i(300 \text{ K})$ nur um etwa 12% größer und für $n_i(300 \text{ K})$ nur um ca. 10% kleiner als die entsprechenden Morin-Maita-Werte. Noch besser ist die Übereinstimmung der Beweglichkeitszahlen. Damit kann diesen Daten ein gewisses Vertrauen entgegengebracht werden, wobei man dazu neigen wird, den Fulkerson-Zahlen, als den neueren Meßergebnissen, eine größere Genauigkeit einzuräumen. Für die Inversionsdichte bei Raumtemperatur wird der früher

angegebene Schätzwert¹ von $n_i(300 \text{ K}) \approx 1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ durch (1.15) überraschend gut bestätigt.

Ergänzend zu dieser Gegenüberstellung seien noch die in der Literatur üblicherweise zitierten Daten von Morin und Maita² angeführt:

$$n_i(T) = 2,01 \cdot 10^{20} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{1,5} \cdot \exp \left\{ - 7021 \text{ K}/T \right\} \text{ cm}^{-3}, \quad (1.16)$$

$$n_i(300 \text{ K}) = 1,38 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}. \quad (1.17)$$

[Die Auswertung von (1.16) liefert nicht $n_i(300 \text{ K}) = 1,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, wie Conwell⁵ u. a. angeben; die genaue Rechnung ergibt vielmehr $\exp \left\{ - 1,21/2kT \right\} = \exp \left\{ - 7021 \text{ K}/T \right\}$, während häufig (z. B. Adler, Smith, Longini⁶) mit $\exp \left\{ - 7000 \text{ K}/T \right\}$ gerechnet wird.]

2. Die quanten-statistische Berechnung

Das Bändermodell liefert bekanntlich (vgl. z. B. Spenke⁷) für die Inversionsdichte n_i die Bestimmungsgleichung:

$$\frac{n_i(T)}{\text{cm}^{-3}} = 2,51 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_n m_p}{m_0^2} \right)^{3/4} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{3/2} \cdot \exp \left\{ - \frac{E_g}{2kT} \right\}, \quad (2.1)$$

wobei m_n und m_p die effektiven Massen der Elektronen an den Bandrändern des Leitungs- und Valenzbandes, m_0 die Masse der freien Elektronen und k die Boltzmann-Konstante bedeuten. Auf die Zahlenwerte und die Temperaturabhängigkeit dieser effektiven „Zustandsdichtemassen“ wird weiter unten näher eingegangen; vorerst wird für den diesbezüglichen Term lediglich die Abkürzung

$$(m_n m_p / m_0^2)^{1/2} = [m]$$

eingeführt. Die Temperaturabhängigkeit des Bandabstandes E_g kann im Temperaturbereich $200 \text{ K} < T < 400 \text{ K}$ durch die lineare Approximation⁸

$$E_g(T)/\text{eV} = 1,207 - 2,73 \cdot 10^{-4} T/\text{K} \quad (2.2)$$

beschrieben werden. Geht man damit in (2.1), so folgt

$$\frac{n_i/\text{cm}^{-3}}{[m]^{3/2}} = 1,22 \cdot 10^{20} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{1,5} \exp \left\{ - \frac{7003,6 \text{ K}}{T} \right\}. \quad (2.3)$$

Setzt man für n_i die oben ermittelten empirischen Gleichungen in (2.3) ein, so erhält man

$$\text{Morin-Maita}^2 \quad \begin{cases} (1.9) & (200 < T < 500 \text{ K}) : [m] = 0,629 (T/300 \text{ K})^{0,68} \exp \{188,4 \text{ K}/T\}, & (2.4) \\ (1.16) & (T > 450 \text{ K}) : [m] = 1,394 \exp \{-11,6 \text{ K}/T\}, & (2.5) \end{cases}$$

$$\text{Fulkerson et al.}^3 \quad (1.14) \quad (T > 450 \text{ K}) : [m] = 0,602 (T/300 \text{ K})^{0,576} \exp \{180,4 \text{ K}/T\}. \quad (2.6)$$

Beachtet man überdies, daß (2.3) nur im Bereich $200 \text{ K} < T < 400 \text{ K}$ mit guter Genauigkeit verwendet werden kann, so wird man die vorstehenden Beziehungen nur für $T \approx 400 \text{ K}$ als gültig betrachten dürfen. In Abb. 1 sind die derart ermittelten relativen effektiven Massen $[m] = \sqrt{m_n m_p}/m_0$ für $350 \text{ K} < T < 450 \text{ K}$ dargestellt. Barber⁹ hat bereits 1967 die Temperaturabhängigkeit der effektiven Zustandsdichtemassen näherungsweise berechnet und für $T = 300 \text{ K}$: $m_n = 1,18 m_0$ und $m_p = 0,81 m_0$ erhalten. Aus seinen Resultaten, denen Meßergebnisse von Stradling und Zhukov¹⁰ sowie Ukhanov und Mal'stev¹¹ zugrunde liegen, wurde $[m]$ berechnet und ebenfalls in Abb. 1 eingetragen. Man erkennt, daß die Auswertung der Fulkerson-Messung den Barber-Daten am nächsten kommt. Der noch verbleibende Differenzfaktor von ca. 1,2 kennzeichnet offenbar die begrenzte Genauigkeit aller verwendeten Messungen.

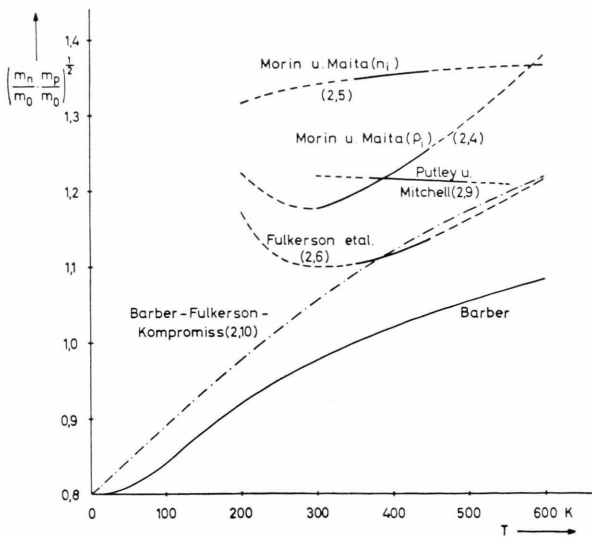


Abb. 1. Temperaturabhängigkeit des geometrischen Mittelwertes der effektiven Zustandsdichtemassen $[m] = (m_n/m_0 \cdot m_p/m_0)^{1/2}$ von eigenleitendem Silicium.

Es ist bedauerlich, daß Morin und Maita ihre ρ_i -Messung (1.2) nicht selbst, mittels der von ihnen angegebenen Beweglichkeitsdaten (1.6), (1.7), aus-

gewertet haben. Wie Abb. 1 zeigt, gewinnt man auf diesem Wege ein wesentlich genaueres Ergebnis (ρ_i -Kurve) als die Autoren mit ihrer Gl. (1.16) erhielten (n_i -Kurve).

Zieht man zur Vervollständigung noch die Messung von Putley und Mitchell¹² heran, die im Bereich $370 \text{ K} < T < 500 \text{ K}$ für die Inversionsdichte

$$n_i = 1,6 \cdot 10^{20} (T/300 \text{ K})^{1,5} \exp \{-6998 \text{ K}/T\} \text{ cm}^{-3} \quad (2.7)$$

und

$$n_i(300 \text{ K}) = 1,19 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3} \quad (2.8)$$

ermittelt haben, dann erhält man aus (2.3)

$$[m] = 1,20 \exp \{5,73 \text{ K}/T\} \quad (2.9)$$

und damit zahlenmäßig ein zwischen (2.4) und (2.6) liegendes Ergebnis.

Thurmond¹³ hat die Diskrepanz zwischen den $[m]$ -Daten von Barber¹⁰ und den älteren Messungen von Morin und Maita² sowie Putley und Mitchell¹² damit zu erklären versucht, daß Barber in seiner Rechnung die Excitonenenergie von 14,7 meV vernachlässigt habe. In der Tat, geht man mit dem Barberschen Zahlenwert $[m(300 \text{ K})] = 0,976$ in die Gl. (2.1), so erhält man $n_i(300 \text{ K}) = 0,857 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, ein gegenüber den Meßwerten (1.17) und (2.8) erheblich zu kleines Ergebnis.

Indessen besteht keine Veranlassung, die Ursache für diese Differenz ausschließlich bei der Barber-Rechnung zu suchen. Die in Abb. 1 dargestellten Kurven legen vielmehr den Schluß nahe, daß alle früheren Messungen noch mit merklichen Ungenauigkeiten behaftet waren. Durch die obige Auswertung der Meßergebnisse von Fulkerson und Mitarb.³ sind jedoch mit (2.6) nunmehr $[m]$ -Werte gefunden worden, die etwa in der Mitte zwischen der Barber-Kurve und den älteren Meßwerten^{2, 12} liegen, womit die bisherige Diskrepanz als beseitigt gelten kann. Es ist daher naheliegend, diese neuen Daten auch für die Berechnung der Temperaturabhängigkeit der effektiven Massen heranzuziehen.

Da die Meßwerte von Lax und Mavroides¹⁴ bei $T = 4 \text{ K}$ offenbar als gesichert gelten^{5, 9}, kann der

Grenzwert bei $T = 0$ K: $[m] = 0,80$ unverändert beibehalten werden. Dagegen muß die Temperaturabhängigkeit etwa um den Faktor 1,5 gegenüber der Barber-Kurve vergrößert werden. Eine derart korri-

gierte Abhängigkeit (Barber-Fulkerson-Kompromiß) könnte formal z. B. durch

$$[m(T)] \approx 0,8 + 0,55 \tanh(T/600 \text{ K}) \quad (2.10)$$

beschrieben werden. In Abb. 1 ist der Verlauf dieser Näherungsgleichung strichpunktiert eingetragen, die mit wachsender Temperatur dem Grenzwert $[m] \approx 1,35$ zustrebt.

Abschließend sind die derzeitigen „Bestwerte“, wie sie sich aus den vorstehenden Ausführungen ergeben, zusammengestellt.

Durch die vorgelegte Analyse bekannter Meßergebnisse konnte zwar der Genauigkeitsgrad einiger wichtiger Kenngrößen merklich verbessert werden. Die verbleibenden Unsicherheiten lassen jedoch weitere Messungen als sehr wünschenswert erscheinen.

Herrn Dipl.-Phys. H. Lehning dankt der Verfasser für die sorgfältige Nachrechnung der Zahlenwerte.

Tab. 1. Spezifischer Widerstand ρ_i , Summe von Elektronen- und Löcherbeweglichkeit $b_n + b_p$, Trägerdichte n_i , Bandabstand E_g und geometrischer Mittelwert der effektiven Zustandsdichtemassen $[m]$ von eigenleitendem Silicium für $T = 300, 400, 500$ K.

T	300	400	500	K
ρ_i (1,2)	$3,16 \cdot 10^5$	$1,16 \cdot 10^3$	$4,0 \cdot 10^1$	$\Omega \text{ cm}$
$b_n + b_p$ (1,13)	1930	977	577	cm^2/Vs
n_i (1,14)	$1,02 \cdot 10^{10}$	$5,52 \cdot 10^{12}$	$2,71 \cdot 10^{14}$	cm^{-3}
E_g^*	1,125	1,095	1,058	eV
$[m]$ (2,10)	$\approx 1,055$	$\approx 1,12$	$\approx 1,175$	—

* Für die Berechnung wurde nicht die Näherung (2.2), sondern die genauere Gleichung des Verfassers⁸ verwendet: $E_g(T)/\text{eV} = 1,1701 - 8,45 \cdot 10^{-4} (T/\text{K})^2 / (T/\text{K} + 1390)$.

¹ Th. Wasserrab, Z. Naturforsch. **31 a**, 505 [1976].

² F. J. Morin u. J. P. Maita, Phys. Rev. **96**, 28 [1954].

³ W. Fulkerson, J. P. Moore, R. K. Williams, R. S. Graves u. D. L. McElroy, Phys. Rev. **167**, 765 [1968].

⁴ C. Jacoboni, C. Canali, G. Ottaviani u. A. Alberigi Quaranta, Solid-State El. **20**, 77 [1977].

⁵ E. M. Conwell, Proc. IRE **46**, 1281 [1958].

⁶ R. B. Adler, A. C. Smith u. R. L. Longini, Introduction to Semiconductor Physics, J. Wiley, New York 1964.

⁷ E. Spenke, Elektronische Halbleiter, Springer-Verlag, Berlin 1965.

⁸ Th. Wasserrab, Arch. für Elektrotechn. **59**, 1 [1977].

⁹ H. D. Barber, Solid-State El. **10**, 1039 [1967].

¹⁰ R. A. Stradling u. V. V. Zhukov, Proc. Phys. Soc. London **87**, 263 [1966].

¹¹ Yu. I. Ukhanov u. Yu. V. Mal'stev, Sov. Phys. Sol. State **5**, 2144 [1964].

¹² E. H. Putley u. W. H. Mitchell, Proc. Phys. Soc. London **A 72**, 193 [1958].

¹³ C. D. Thurmond, J. Electrochem. Soc. **122**, 1133 [1975].

¹⁴ B. Lax u. J. G. Mavroides, Phys. Rev. **100**, 1650 [1955].