

С.А. Федосов, О.В. Гуда, Л.В. Ящинський, Т.А. Крадінова, В.М. Тимошук

Луцький національний технічний університет

## СТАТИСТИКА НОСІЇВ ЗАРЯДУ В ВИРОДЖЕНОМУ І НЕВИРОДЖЕНОМУ НАПІВПРОВІДНИКУ

*Електрони в зоні провідності та дірки у валентній зоні можна розглядати як ідеальний Фермі-газ. У напівпровідниках при не дуже низьких температурах кінетична енергія електронів більша за кулонівську енергію, тому електрони можна розглядати як вільні. Для ідеального Фермі-газу ймовірність заповнення стану з енергією  $E$  при температурі  $T$  знаходиться за допомогою розподілу Фермі.*

*Для виродженого і невиродженого напівпровідника знайдено вирази для обчислення концентрацій носіїв заряду, електронів у зоні провідності і дірок у валентній зоні, коли відомо положення рівня Фермі. Вирази для концентрацій електронів і дірок значно спрощуються, якщо напівпровідник є невироджений.*

*Ключові слова:* електрон, дірка, зона провідності, валентна зона, концентрація носіїв заряду, енергія Фермі.

S. Fedosov, O. Huda, L. Yashchynskyy, T. Kradinova, V. Tymoshchuk

## STATISTICS OF CHARGE CARRIERS IN A DEGENERATE AND NON-DEGENERATE SEMICONDUCTOR

*Electrons in the conduction band and holes in the valence band can be considered as an ideal Fermi gas. In semiconductors at not very low temperatures, the kinetic energy of electrons is greater than the Coulomb energy, so electrons can be considered as free. For an ideal Fermi gas, the probability of filling a state with energy  $E$  at temperature  $T$  is found using the Fermi distribution.*

*For a degenerate and non-degenerate semiconductor, expressions have been found for calculating the concentrations of charge carriers, electrons in the conduction band, and holes in the valence band, when the position of the Fermi level is known. The expressions for the concentrations of electrons and holes are greatly simplified if the semiconductor is non-degenerate.*

*Keywords:* electron, hole, conduction band, valence band, charge carrier concentration, Fermi energy.

**Постановка проблеми.** Носіями заряду (струму) у напівпровіднику є електрони зони провідності та дірки валентної зони. Загалом же у напівпровіднику можуть бути домішки як донорного, і акцепторного типів. У цьому випадку при  $T > 0$  К у результаті теплового збудження електрони переходитимуть у зону провідності і на акцепторні рівні.

У результаті теплових переходів (знизу вгору за енергією) утворюються носії заряду. Якби теплові переходи були єдиними, то концентрація носіїв заряду безперервно зростала з часом і була б  $10^{22} \div 10^{23}$  см<sup>-3</sup>, проте експерименти дають менше значення. Це пов'язано з тим, що поряд з тепловим збудженням одночасно протікає зворотний процес – процес рекомбінації (переходи носіїв зверху до низу). За час  $t \approx 10^{-12}$  с встановлюється динамічна рівновага між процесами. У цьому випадку кількість переходів за одиницю часу знизу вгору дорівнює кількості переходів зверху вниз.

У рівноважному стані температура кристала однакова у всіх його точках. В адиабатичному наближенні вважається, що тепловий рух кристалічної ґратки впливає на ймовірність заповнення носіями заряду станів у зонах, але не на самі стани. У напівпровідниках, як і металах, ймовірність заповнення електроном енергетичного рівня з енергією  $E$  визначається функцією розподілу Фермі-Дірака.

Задачі пов'язані із статистичними методами знаходження концентрації носіїв заряду у напівпровідниках були і залишаються актуальним [1-5] при розгляді властивостей електронної системи у виродженому і невиродженому напівпровіднику.

**Постановка завдань.** В роботі поставлено мету – розглянути методи знаходження концентрації електронів у зоні провідності, дірок у валентній зоні, знайти вирази для обчислення концентрацій електронів і дірок для виродженого і невиродженого напівпровідника за відомим положенням рівня Фермі.

**Викладення основного матеріалу.** Поведінка будь-якої системи, яка складається з великої кількості частинок описується статистичними законами. Для розгляду вибирають деяку підсистему, яка є частиною значно більшої системи-термостата і слабо з нею взаємодіє. Важливим поняттям статистичної фізики є функція розподілу, яка характеризує розподіл частинок по координатах і імпульсах. Оскільки кожен такий розподіл визначає стан системи, то можна сказати, що функція розподілу характеризує різні стани системи, яка складається з багатьох частинок. У випадку, якщо система складається з  $N$  частинок, то її стан повністю визначається заданням координат і імпульсів всіх частинок системи. Ймовірність даного стану системи визначається з допомогою функції

розподілу. З допомогою функції розподілу можна визначити середнє значення будь-якої фізичної величини.

При розгляді властивостей електронної системи у напівпровіднику часто доводиться визначати експериментальні величини, що залежать від кількості дозволених станів електронів, які приходяться на одиничний інтервал енергії. В інтервалі енергії  $dE$  може міститися різна кількість станів, що має бути пропорційною  $dE$ , і коефіцієнт пропорційності має залежати від величини енергії, в околі якої визначається елементарний інтервал  $dE$ . Отже, знаючи густину станів  $N(E)$  можна знайти кількість електронів  $dn$ , що займають стани з енергією від  $E$  до  $E + dE$ :

$$dn = f_n(E) \cdot N(E) \cdot dE,$$

де  $f_n(E) = \left[ \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}$  – функція розподілу Фермі або імовірність того, що стан з

енергією  $E$  зайнятий електроном;  $E_F$  або  $F$  – хімічний потенціал або енергія Фермі (рис. 1).

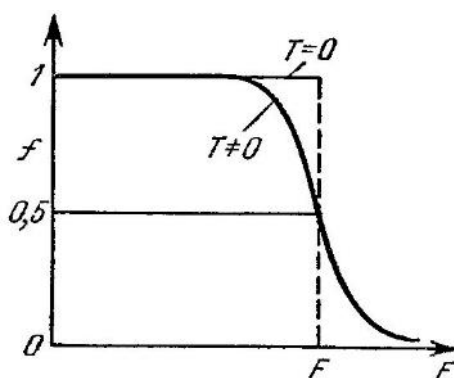


Рис. 1. Функція Фермі-Дірака

Концентрація електронів у зоні провідності обчислюється як:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f_n(E) \cdot N(E) \cdot dE.$$

У якості верхньої межі інтегрування необхідно взяти енергію електронів верхнього краю зони провідності. Але оскільки при  $E > E_F$  функція розподілу дуже швидко спадає з ростом  $E$ , то заміна верхньої межі на  $\infty$  практично не впливає на значення даного інтегралу. Перш ніж обчислювати концентрацію  $n$ , оговоримо деякі властивості функції розподілу (див. рис. 1).

При  $T \rightarrow 0$ , для значень енергії  $0 \leq E < E_F$ ,  $f \rightarrow 1$  (або для електронів, як  $f_n(E) \rightarrow 1$ ), для  $E > E_F$ ,  $f_n(E) \rightarrow 0$ . Це означає, що всі рівні з енергією  $< E_F$  зайняті електронами, а при  $E > E_F$  – вільні.

Для випадку  $T > 0$ , при  $E = E_F$ ,  $f = 1/2$ . Тобто при температурі  $T > 0$  рівень Фермі є рівнем, імовірність заповнення якого рівна  $1/2$ . Імовірність того, що даний рівень не зайнято електроном (зайнято діркою) буде рівна:

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = 1 - \left[ \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1 \right]^{-1} = \left[ \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}$$

або

$$f_p(E) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1}.$$

Отже, функція розподілу для дірок аналогічна функції розподілу для електронів, тільки енергія відраховується від рівня Фермі в протилежному напрямі, ніж для електронів. Напівпровідникові матеріали, в яких вільні носії заряду описуються функцією розподілу Фермі-Дірака називають виродженими.

Для електронів, енергія яких  $E - E_F \gg kT$ :

$$f_n(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \approx e^{\frac{E_F-E}{kT}} = C \cdot e^{\frac{-E}{kT}},$$

де  $C = e^{\frac{E_F}{kT}}$ , а отже співпадає з функцією розподілу Максвела-Больцмана. Якщо носії заряду в напівпровіднику підлягають розподілу Больцмана, то такі напівпровідники називають невідродженими.

Знайдемо концентрацію електронів у зоні провідності:

$$n = \int_{E_C}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \frac{(2m_n)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (E - E_C)^{1/2} dE.$$

Введемо нову змінну інтегрування

$$x = \frac{E - E_C}{kT}$$

і позначення  $\eta = \frac{E_F - E_C}{kT}$ , причому  $dx = \frac{dE}{kT}$ . Тоді

$$(E - E_C)^{1/2} = (kT)^{1/2} \left( \frac{E - E_C}{kT} \right)^{1/2} = x^{1/2} (kT)^{1/2} \quad \text{і} \quad dE = d \left( \frac{E - E_C}{kT} \right) kT = kT dx,$$

а

$$e^{\frac{E-E_F}{kT}} = e^{\frac{(E-E_C)-(E_F-E_C)}{kT}} = e^{x-\eta}, \quad \text{при } E = E_C \Rightarrow x = 0.$$

Як результат перетворень, отримаємо:

$$\begin{aligned} n &= \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x-\eta} + 1} \frac{(kT)^{1/2} (2m_n)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} kT dx = \frac{(2m_n kT)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x-\eta} + 1} dx = \\ &= 2 \times \frac{(2\pi m_n kT)^{3/2}}{(2\pi \hbar)^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x-\eta} + 1} dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \Phi_{1/2}(\eta), \end{aligned}$$

де  $N_C = 2 \left( \frac{m_n kT}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$  – ефективна густина станів в зоні провідності, а  $\Phi_{1/2}(\eta) = \int \frac{x^{1/2} \cdot dx}{e^{x-\eta} + 1}$  –

інтеграл Фермі порядку  $1/2$ . Його значення залежить від параметра  $\eta$  і порядку. В загальному вигляді він не виражається через елементарні функції, а його значення визначається з таблиць.

Проводячи аналогічні міркування можна знайти вираз для визначення концентрації дірок у валентній зоні. Відмінність полягає в тому, що підраховувати потрібно тільки число незайнятих станів, та інтегрування вести в межах валентної зони:

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} N_V(E) f_p(E) dE.$$

У цьому випадку:

$$p = 2 \left( \frac{m_p kT}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x-\eta^*} + 1} dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_V \Phi_{1/2}(\eta^*),$$

де  $x = \frac{E_V - E}{kT}$ ;  $\eta^* = \frac{E_V - E_F}{kT}$ ;  $N_V = 2 \left( \frac{2\pi m_p kT}{(2\pi \hbar)^2} \right)^{3/2}$  – ефективна густина станів у валентній

зоні;  $\Phi_{1/2}(\eta^*) = \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^{x-\eta^*} + 1}$  – інтеграл Фермі.

Вирази для концентрації електронів і дірок значно спрощуються, якщо напівпровідник невідроджений. На графіках рис. 2 зображено даний випадок, де зображено залежності від енергії: густини станів  $N_C(E)$ , функції Фермі  $f(E)$  і  $\frac{dn}{dE}(E)$ , де  $dn$  – концентрація електронів з енергією

від  $E$  до  $E + dE$ . У даному випадку істотним є тільки «хвіст» розподілу Фермі, який апроксимується розподілом Больцмана.

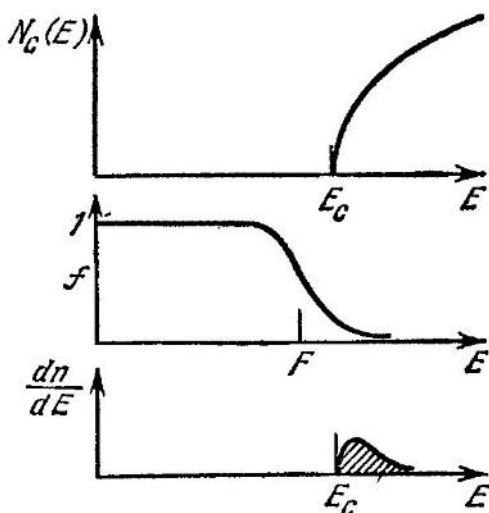


Рис. 2. Схематичний хід функцій  $N_C(E)$ ,  $f(E)$  і  $\frac{dn}{dE}(E)$  для невідродженого напівпровідника  $n$ -типу

Для невідродженого напівпровідника  $\eta < -1$ , тоді інтеграл Фермі:

$$\Phi_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} \cdot dx}{1 + e^{x-\eta}} = e^{\eta} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^{\infty} e^{-x} x^{1/2} dx = e^{\eta} \frac{2}{\sqrt{\pi}} 2 \int_0^{\infty} e^{-z^2} z^2 dz = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{\eta} = e^{\eta},$$

отже

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right).$$

Аналогічно для концентрації дірок в невідродженому напівпровіднику, одержано:

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right).$$

Покладаючи, наприклад,  $T = 300$  К,  $m_n = m_0$ , отримаємо  $N_{C(V)} = 2,5 \times 10^{19}$  см<sup>-3</sup>.

Знайдемо добуток  $np$ :

$$np = N_C \exp\frac{E_F - E_C}{kT} N_V \exp\frac{E_V - E_F}{kT} = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n_i^2,$$

де  $n_i$  – концентрація електронів в умовах, коли  $n = p$ , тобто у власному напівпровіднику. Отже, добуток  $np$  не залежить від положення рівня Фермі. Дане співвідношення часто використовують для визначення ширини забороненої зони.

У випадку коли  $\eta > 5$ , рівень Фермі лежить в середині зони провідності (рис. 3). У цьому випадку  $e^{x-\eta} \ll 1$ , в якості верхньої межі інтегрування можна взяти  $x_m = \frac{E_F - E_C}{kT}$ , оскільки функція Фермі дуже швидко спадає при  $E > E_F$ . Тоді отримаємо наступний вираз для концентрації:

$$n = N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{x_m} x^{1/2} dx = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C x_m^{3/2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} N_C \left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right)^{3/2}.$$

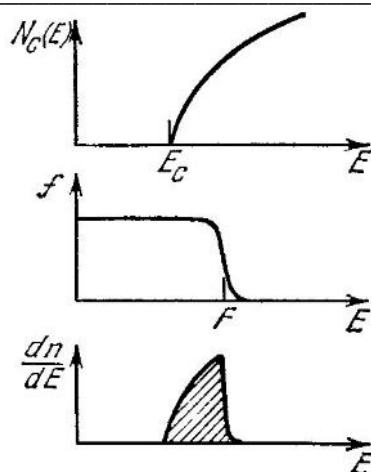


Рис. 3. Схематичний хід функцій  $N_C(E)$ ,  $f(E)$  і  $\frac{dn}{dE}(E)$  для сильно виродженого напівпровідника n-типу

При температурі абсолютного нуля всі стани в зоні, енергія яких  $E > E_F$  зайняті електронами, а при  $E > E_F$  – вільні. Тоді хімічний потенціал  $\eta = E_F - E_C$  є максимальна енергія електронів при  $T = 0$  К, її ще називають енергією Фермі. В перехідній області  $-1 < \eta < 5$ ,

$$\Phi_{1/2}(\eta) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{0,25 + e^{-\eta}}, \quad \text{а} \quad n = N_C \frac{1}{0,25 + e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}}.$$

**Висновки.** Знайдено вирази для обчислення концентрацій носіїв заряду, як концентрації електронів у зоні провідності, так і дірок у валентній зоні для виродженого і невиродженого напівпровідника, коли відомо положення рівня Фермі. Вирази для концентрації електронів і дірок значно спрощуються, якщо напівпровідник невироджений. Але рівень Фермі може змінювати своє положення в залежності від температури і концентрації домішок. Вводячи домішки в напівпровідник, в забороненій зоні напівпровідника утворюються дискретні рівні. Розподіл носіїв зарядів по цих рівнях регулюється зміною положення рівня Фермі.

#### Список використаних джерел:

1. Nenshev A. V., Gebhard E., Meerholz K., Baranovskii S. D. Computation of the spatial distribution of charge-carrier density in disordered media. *Entropy*. 2024. Vol. 26, №5. 356.
2. Tarkhanyan R. H., Niarchos D. G. Thermoelectric figure of merit in transverse magnetic field under adiabatic and isothermal conditions *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2020. Vol. 493. 165660.
3. Karkri A., Chetouani A., Moussaid D., Elqebbaj S. E., Benaichi M. Investigation of tunneling effects modeling in degenerate semiconductors. *Journal of Materials and Environmental Science*. 2017. Vol. 8, № 3. P. 809–815.
4. Emtsev V. V., Ambrosimov N. V., Kozlovskii V. V., Oganessian G. A. Vacancy-donor pairs and their formation in irradiated n-Si. *Semiconductors*. 2014 Vol. 48, № 11. P. 1438–1443.
5. Mohammad S. N. Boundary conditions and current-voltage relations for heavily doped p-n diodes. *Solid State Electronics*. 1987. Vol. 30, № 7. P. 713–718.