

Beitrag zur Berechnung der strahlenden Rekombinationswahrscheinlichkeit B von eigenleitendem Silicium

Th. Wasserrab
Technische Hochschule Aachen

Z. Naturforsch. **33a**, 1097–1098 (1978);
eingegangen am 23. Juni 1978

Contribution to the Calculation of the Radiative Recombination Probability B in Intrinsic Silicon

Quantitative calculations of Varshni, using the theory of radiative recombination of van Roosbroeck and Shockley yielded a slight increase of the recombination probability B with temperature T . Measurement of Schlangenotto et al demonstrated in contrast a strong decrease of B with T . It is pointed out, that this discrepancy is only a consequence of using approximative n_i values (intrinsic carrier concentration) by Varshni. Introduction of new, corrected data of n_i yields now a remarkable agreement between calculation and measurement.

Van Roosbroeck und Shockley [1] haben bekanntlich für den Fall des thermodynamischen Gleichgewichts und ausgehend vom Prinzip des detaillierten Gleichgewichts die Zahl der strahlenden Rekombinationsvorgänge je Zeit- und Volumeneinheit berechnet. Sie erhielten (mit der Abkürzung $u = h\nu/k_B T$) für die Rekombinationsrate R_i

$$R_i = 8\pi c \left(\frac{k_B \cdot T}{h \cdot c} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{a n_b^2 u^2}{e^u - 1} du \quad (1)$$

(Lichtgeschwindigkeit c , Boltzmann-Konstante k_B , Frequenz ν , Temperatur T , Wirkungsquantum h , Absorptionskoeffizient α , Brechungsindex n_b).

Bei Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht (mit der Trägerdichte n_i) gilt bei injizierter Trägerdichte ($n = p \gg n_i$) für die Rekombinationsrate

$$R = n \cdot p (R_i/n_i^2) = n^2 \cdot B, \quad (2)$$

wobei $B = R_i/n_i^2$ als Rekombinationswahrscheinlichkeit bezeichnet wird.

Varshni [2] hat (1) für Si quantitativ ausgewertet und R_i numerisch für diejenigen Temperaturen berechnet, für die auf die sorgfältigen Messungen des Absorptionskoeffizienten α von Macfarlane et al. [3] zurückgegriffen werden konnte. Varshni hat sodann für die Ermittlung von B die Eigenleitungs-Trägerdichte n_i in Modifizierung einer diesbezüglichen Formel von Morin und Maita [4] nach der Beziehung

$$n_i^2 = 1,575 \cdot 10^{31} T^3 \exp(-[E_g(k_B T)]) \quad (3)$$

berechnet, mit Zahlenwerten für den Bandabstand E_g von Macfarlane und Roberts [5]. Damit erhielt er die in Tab. 1 eingetragenen Zahlen.

Die von Varshni berechneten B -Werte sind auch in Abb. 1 eingetragen worden und zeigen einen schwachen Anstieg mit der Temperatur. Ergänzend sei erwähnt, daß auch Hall [6] einen nahezu übereinstimmenden Zahlenwert von $B = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^3/\text{s}$ für $T = 300 \text{ K}$ angegeben hatte. Es ist daher verständlich, daß diese Zahlenwerte seither allgemein akzeptiert wurden (vgl. z. B. Michaelis und Pilkuhn [7]). Um so unverständlich war das Ergebnis einer von Schlangenotto, Maeder und Gerlach [8] kürzlich veröffentlichten Messung, wonach, wie ebenfalls in Abb. 1 ersichtlich, die B -Meßwerte eine mit T stark fallende Tendenz aufweisen. Diese krasse Diskrepanz – die anfangs zu der Auffassung führte, daß eine wesentliche Verbesserung der Theorie erforderlich wäre –, findet jedoch eine einfache Aufklärung, wenn man statt der von Varshni verwendeten n_i -Formel (3) eine der vom Autor [9] angegebenen genaueren Beziehungen

$$n_i = 5,71 \cdot 10^{19} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{2,365} \cdot \exp(-6733 \text{ K}/T) \text{ cm}^{-3} \quad (4)$$

	T	90	195	290	K
Varshni, Tabelle 2	R_i	$5,9 \cdot 10^{-42}$	$3,4 \cdot 10^{-6}$	$9,2 \cdot 10^4$	$\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$
	n_i	$6,8 \cdot 10^{-14}$	$4,9 \cdot 10^4$	$7,2 \cdot 10^9$	cm^{-3}
	B	$1,27 \cdot 10^{-15}$	$1,43 \cdot 10^{-15}$	$1,79 \cdot 10^{-15}$	cm^3s^{-1}
Gl. (4)	n_i	$1,0 \cdot 10^{-14}$	$2,0 \cdot 10^4$	$4,3 \cdot 10^9$	cm^{-3}
	B	$5,9 \cdot 10^{-14}$	$8,5 \cdot 10^{-15}$	$5,0 \cdot 10^{-15}$	cm^3s^{-1}
Gl. (5)	n_i	$6,0 \cdot 10^{-15}$	$1,4 \cdot 10^4$	$3,4 \cdot 10^9$	cm^{-3}
	B	$1,64 \cdot 10^{-13}$	$1,7 \cdot 10^{-14}$	$8,0 \cdot 10^{-15}$	cm^3s^{-1}

Tab. 1. Von Y. P. Varshni [2] und dem Autor berechnete Zahlen für die Rekombinationsrate R_i , die Trägerdichte n_i und die Rekombinationswahrscheinlichkeit B für eigenleitendes Si.

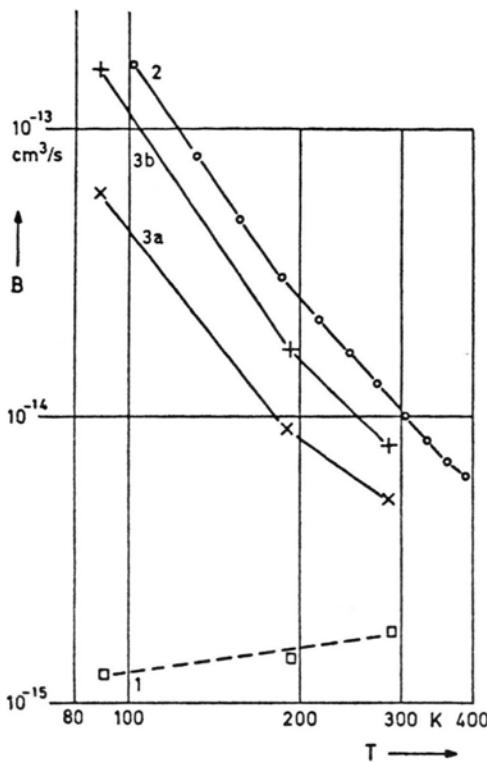


Abb. 1. Strahlende Rekombinationswahrscheinlichkeit B von eigenleitendem Si in Abhängigkeit von der Temperatur T .

- 1: Rechnung von Varshni [2] mit approximierten n_i -Zahlen.
- 2: Messung von Schlangenotto et al [8].
- 3a, b: Rechnung mit korrigierten n_i -Zahlen [9].

- [1] W. van Roosbroeck and W. Shockley, Phys. Rev. **94**, 1558 (1954).
- [2] Y. P. Varshni, phys. stat. sol. **19**, 459 (1967).
- [3] G. G. Macfarlane, T. P. McLean, J. E. Quarrington, and V. Roberts, Phys. Rev. **111**, 1245 (1958).
- [4] F. J. Morin and J. P. Maita, Phys. Rev. **96**, 28 (1954).
- [5] G. G. Macfarlane and V. Roberts, Phys. Rev. **98**, 1865 (1955).

und

$$n_i = 1,22 \cdot 10^{20} \left(\frac{m_n m_p}{m_0^2} \right)^{0,75} \left(\frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{1,5} \cdot \exp(-7003 \text{ K}/T) \text{ cm}^{-3} \quad (5)$$

verwendet. (Sie sind in der erwähnten Arbeit mit (1.14) und (2.3) bezeichnet.) Die nach diesen Gleichungen berechneten B -Zahlenwerte sind ebenfalls in Tab. 1 und Abb. 1 eingetragen und zeigen nunmehr die gleiche Temperaturabhängigkeit wie die Meßwerte [8]. Damit dürfte der wesentliche Schritt zur Annäherung von Messung und Rechnung getan sein. Indessen sind noch weitere Untersuchungen nötig, um auch die noch verbleibende quantitative Differenz zu verringern. Wie die beiden vorstehenden n_i -Gleichungen (4), (5) zeigen und wie bereits in [9] ausführlicher dargelegt wurde, bedarf die von Barber [10] angegebene Temperaturabhängigkeit der effektiven Massen noch der sorgfältigen Verifizierung.

Die Rechnung liefert B als Quotienten von zwei sehr stark temperaturabhängigen Zahlen. Demgemäß können schon geringe Abweichungen von R_i und n_i erheblichen Einfluß auf B haben. Insofern ist die direkte Messung von B nicht nur für die quantitative Erfassung der strahlenden Rekombination, sondern auch für die Präzisierung wichtiger Kenngrößen von großem Wert.

- [6] R. N. Hall, Proc. IEE (London) **106B**, Suppl. 17, 923 (1959).
- [7] W. Michaelis and M. H. Pilkuhn, phys. stat. sol. **36**, 311 (1969).
- [8] H. Schlangenotto, H. Maeder, and W. Gerlach, phys. stat. sol. (a) **21**, 357 (1974).
- [9] Th. Wasserrab, Z. Naturforsch. **32a**, 746 (1977).
- [10] H. D. Barber, Solid State El. **10**, 1039 (1967).