

Über die strahlende Rekombinationswahrscheinlichkeit B von eigenleitendem Silizium

Th. Wasserrab *

Z. Naturforsch. **34 a**, 656–658 (1979);
eingegangen am 31. März 1979

On the Radiative Recombination Probability B in Intrinsic Silicon

In 1974 a theory of the radiative recombination including the Coulomb interaction and the exciton recombination was published by Schlangenotto et al. Now, a quantitative evaluation of this theory was carried out for Si: it shows a strong enhancement of the recombination probability, compared with the theory of van Roosbroeck and Shockley, and yields a remarkable agreement with the measurements.

In einer kürzlich erschienenen Notiz [1] hat der Autor zeigen können, daß die bisher zwischen den berechneten B -Werten von Varshni [2] und den Meßwerten von Schlangenotto et al. [3] bestehende Diskrepanz in der Temperaturabhängigkeit weitgehend auf Ungenauigkeiten bei der Berechnung der Eigenleitungs-Trägerdichte n_i zurückgeführt werden kann. (Varshni hatte sowohl für den Bandabstand E_g als auch für die effektiven Massen überholte Zahlenwerte verwendet.) Indessen blieb auch nach dieser qualitativen Korrektur immer noch eine quantitative Differenz bestehen; über einen Versuch zu deren Beseitigung soll nachstehend berichtet werden.

Schlangenotto et al. [3] haben bereits ausführlich darauf hingewiesen, daß zu der von van Roosbroeck und Shockley [4] entwickelten Rekombinationstheorie für Band-Band-Übergänge noch die Coulomb-Wechselwirkung im e-h-Plasma und die Rekombination über Exzitonen hinzugefügt werden muß. Die quantenmechanische Berechnung dieser beiden, die gesamte Rekombinationsstrahlung erheblich verstärkenden Effekte wurde analog zu den Untersuchungen von Elliot [5] und McLean [6] durchgeführt und führte auf die folgenden einfachen Näherungsformeln [3]:

1. Coulomb-Wechselwirkung (C-WW)

Bezeichnet man die Rekombinationswahrscheinlichkeit ohne C-WW (nach van Roosbroeck und

Shockley [4], mit B_0 und die Rekombinationswahrscheinlichkeit mit C-WW mit B_{bb} , dann gilt für den Coulomb-Verstärkungsfaktor

$$B_{bb}/B_0 \approx 4 \sqrt{\pi} \sqrt{\Delta E_x/k_B T} \quad (1)$$

(Exzitonen-Bindungsenergie $\Delta E_x = 14,7$ meV, Boltzmann-Konstante $k_B = 8,6 \cdot 10^{-5}$ eV/K).

2. Exzitonen-Rekombination

Für die Rekombinationswahrscheinlichkeit der Exzitonen B_x ergab sich

$$\frac{B_x}{B_{bb}} \approx 2 \frac{\Delta E_x}{k_B T} \exp\left(\frac{\Delta E_x}{k_B T}\right), \quad (2)$$

damit folgt für die resultierende strahlende Rekombinationswahrscheinlichkeit B :

$$B = B_{bb} + B_x = B_0 \frac{B_{bb}}{B_0} \left(1 + \frac{B_x}{B_{bb}}\right), \quad (3)$$

wobei B_0 nach Hall [7] wie folgt berechnet werden kann

$$B_0 = 2,17 \cdot 10^{-20} A n_b^2 \left(\frac{m_0^2}{m_e m_h}\right)^{3/2} E_g^2 \coth \frac{\Theta}{2T} \quad (4)$$

(Brechungsindex $n_b \approx 3,5$; aus dem Absorptionskoeffizienten ermittelte Konstante $A \approx 2682 \text{ cm}^{-1} (\text{eV})^{-2}$ (nach Varshni [2]); effektive Zustandsdichtemasse $(m_e m_h/m_0^2)^{1/2}$ [8] (siehe Tabelle 1); äquivalente Temperatur der assistierenden (TO-) Phononen $\Theta = 670$ K.)

Gleichung (4) erhält man übrigens ebenfalls, wenn man nach dem Vorgehen von Varshni die Band-Band-Rekombinationswahrscheinlichkeit $B_0 = R_i/n_i^2$ mittels der Rekombinationsrate ([2], Gl. (60))

$$R_i = 2,64 \cdot 10^{28} (k_B T)^3 (E_g)^2 \exp(-E_g/k_B T) \cdot \coth \Theta/2T \quad (5)$$

und dem Quadrat der Trägerdichte [9]

$$n_i^2 = 6,3 \cdot 10^{38} \left(\frac{m_e m_h}{m_0^2}\right)^{3/2} \left(\frac{T}{300 \text{ K}}\right)^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad (6)$$

berechnet.

Wertet man die vorstehenden Gleichungen für einige markante Temperaturen aus, so erhält man unter Verwendung neuer Daten für den Bandabstand E_g [10, 11] und die effektive Zustandsdichtemasse (entsprechend dem Barber-Fulkerson-Kompromiß [8]), die in Tab. 1 eingetragenen Zahlenwerte.

* Prof. em. Dr. Th. Wasserrab, Institut für Stromrichtertechnik und Elektrische Antriebe der RWTH Aachen, Jägerstraße 17 b, D-5100 Aachen.

Tab. 1. Temperaturabhängigkeit von Bandabstand E_g , der effektiven Zustandsdichtemasse $m_e m_h / m_0^2$ und den Rekombinationswahrscheinlichkeiten B_0 , B_{bb} , B_x und B .

T	100	200	300	400	K
E_g	1,1649	1,1483	1,1242	1,095	eV
$\frac{m_e m_h}{m_0^2}$	0,8	0,95	1,11	1,25	—
$B_0 \cdot 10^{15}$	1,35	1,09	0,95	0,89	cm ³ /s
$B_{bb} \cdot 10^{15}$	12,46	7,128	5,06	4,09	cm ³ /s
$B_x \cdot 10^{15}$	233,7	28,5	10,12	5,31	cm ³ /s
$B \cdot 10^{15}$	246,1	35,6	15,1	9,4	cm ³ /s

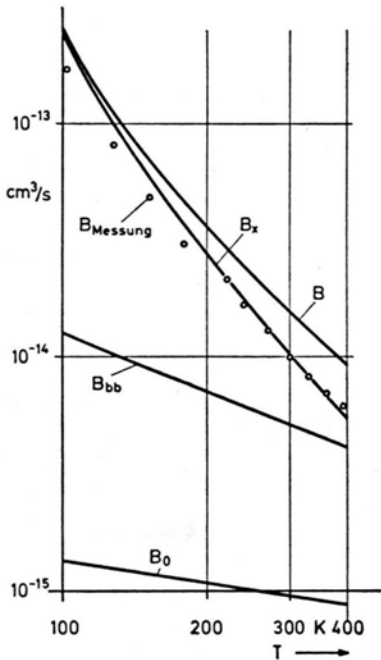


Abb. 1. Berechnete Rekombinationswahrscheinlichkeiten B_0 , B_{bb} , B_x und B sowie Meßwerte B_{Messung} von Schlangenotto et al. [3] in Abhängigkeit von der Temperatur T .

Wie Abb. 1 zeigt, ergeben die nach den vorstehenden Gleichungen berechneten Rekombinationswahrscheinlichkeiten in der Tat eine beachtliche quantitative Übereinstimmung mit den Meßwerten [3], obwohl es sich ja bei den Gln. (1) und (2) nur um erste Näherungen handelt. Dieses Ergebnis ist auch insofern bemerkenswert, weil in die Gleichungen nur der temperaturunabhängige Zahlenwert $\Delta E_x = 14,7$ meV für die Bindungsenergie der Exzitonen eingeführt wurde.

In Abb. 2 ist die Temperaturabhängigkeit der Zahlenverhältnisse von Gln. (1) und (2) dar-

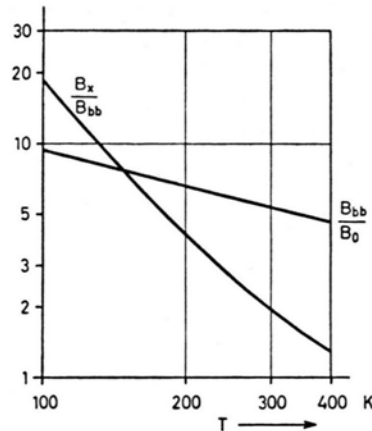


Abb. 2. Vergrößerung der Rekombinationswahrscheinlichkeit durch Coulomb-Wechselwirkung B_{bb}/B_0 und Exzitonenrekombination B_x/B_{bb} in Abhängigkeit von der Temperatur T . (Quantenmechanische Ableitung der Näherungsformeln für B_{bb}/B_0 und B_x/B_{bb} durch Schlangenotto et al. [3].)

gestellt. Daraus wird ersichtlich, daß durch Coulomb-Wechselwirkung die Band-Band-Rekombination um mehr als das 5-fache verstärkt wird. Die Exzitonen-Rekombinationswahrscheinlichkeit B_x überwiegt B_{bb} bei $T = 300$ K um das 2-fache (in Übereinstimmung mit Nolle [12]), bei $T = 100$ K sogar um das 20-fache. Gleichung (2) beschreibt offenbar die bekannte spektroskopische Erfahrung, wonach bei niedrigen Temperaturen nur die Linien der indirekten Exzitonenübergänge mit Phononenassistenz beobachtet werden.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß die bisher bestehenden Unterschiede zwischen den Rechnungen von Varshni und den Messungen von Schlangenotto et al. beseitigt werden konnten. Dieses Ergebnis wurde dadurch erzielt, daß sowohl genauere Daten für den Bandabstand und die effektive Zustandsdichtemasse verwendet, als auch mittels zweier von Schlangenotto et al. angegebenen Näherungsgleichungen zusätzlich die Coulomb-Wechselwirkung im e-h-Plasma und die Exzitonenstrahlung berücksichtigt wurden. Der derart berechnete Summenwert der strahlenden Rekombinationswahrscheinlichkeit B zeigt nunmehr eine bemerkenswerte Übereinstimmung mit den Meßwerten von Schlangenotto et al., und zwar sowohl in bezug auf die absoluten Zahlenwerte als auch die Temperaturabhängigkeit. Dabei sei nochmals besonders hervorgehoben, daß dieses Ergebnis erzielt wurde, ohne daß eine Temperaturabhängigkeit der Bindungsenergie der Exzitonen angenommen werden mußte.

- [1] Th. Wasserrab, Z. Naturforsch. **33 a**, 1097 (1978).
- [2] Y. P. Varshni, phys. stat. sol. **19**, 459 (1967).
- [3] H. Schlangenotto, H. Maeder u. W. Gerlach, phys. stat. sol. (a) **21**, 357 (1974).
- [4] W. van Roosbroeck u. W. Shockley, Phys. Rev. **94**, 1558 (1954).
- [5] R. J. Elliot, Phys. Rev. **108**, 1384 (1957).
- [6] T. P. McLean, Progr. Semicond. **5**, 53 (1960).
- [7] R. N. Hall, Proc. IEE London **106 B** Suppl. 17, 923 (1959).
- [8] Th. Wasserrab, Z. Naturforsch. **32 a**, 746 (1977).
- [9] E. Spenke, Elektronische Halbleiter, Springer-Verlag, Berlin 1965.
- [10] W. Bludau, A. Onton u. W. Heinke, J. Appl. Phys. **45**, 1846 (1974).
- [11] Th. Wasserrab, Arch. Elektrotechn. **59**, 1 (1977).
- [12] E. L. Nolle, Sov. Phys. — Solid State **9**, 90 (1967).