





دانشکده فیزیک شیمی

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

فیزیک ماده چگال

بررسی اثر آلابیدگی نقره بر خواص نانو ذرات CdS

استاد راهنما:

دکتر رضا ثابت داریانی

دانشجو:

زهرا امامی

آبان ۱۳۹۳

«کلیه دستاوردهای این پژوهش متعلق

به دانشگاه الزهراء (س) است.»

چکیده

در این پژوهش نانوذرات CdS با پیش‌ماده‌های کاتیونی کادمیوم‌نیترات و آنیونی سدیم‌سولفید به روش سیلار روی زیرلایه‌های شیشه‌ای در دمای اتاق نشانده شدند. به منظور ساخت نمونه‌های مختلف، زیرلایه‌ها به مدت زمان مشخص و با تعداد چرخه غوطه‌وری مشخص در محلول‌ها قرار گرفتند. نمونه‌های CdS آلاینده به Ag با پیش‌ماده‌های کاتیونی کادمیوم‌نیترات و نقره‌نیترات و پیش‌ماده آنیونی سدیم‌سولفید با میزان آلاینده‌گی ۱۰٪ نقره نسبت به کادمیوم ساخته شدند. برای بررسی ویژگی‌های ساختاری و مورفولوژی نمونه‌ها از آنالیز XRD و میکروسکوپ الکترونی استفاده کردیم. جذب اپتیکی لایه‌ها با دستگاه اسپکتروفوتومتر اندازه‌گیری گردید سپس ضریب جذب اپتیکی و گاف انرژی محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش تعداد چرخه غوطه‌وری زیر لایه در محلول، اندازه گاف انرژی کاهش یافته است و به علاوه شدت قله‌های الگوی XRD افزایش می‌یابد. با افزایش تعداد دفعات غوطه‌وری در محلول، ذرات فرصت بیشتری برای انباشته شدن روی هم و اتصال به یکدیگر دارند لذا ذراتی با اندازه بزرگ‌تر تشکیل می‌گردد و اندازه گاف انرژی کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش زمان غوطه‌وری، اندازه گاف انرژی کاهش می‌یابد زیرا ذرات وقت بیشتری برای شکل‌گیری در کنار هم و اتصال به یکدیگر دارند لذا ذراتی با اندازه بزرگ‌تر تشکیل می‌گردد که سبب کاهش اندازه گاف انرژی می‌گردد. برای دو نمونه با شرایط ساخت مشابه در صورتی که نقره آلاینده شود اندازه گاف انرژی نسبت به نمونه بدون آلاینده‌گی نقره کاهش پیدا می‌کند. به نظر می‌رسد آلاینش نقره سبب ایجاد ترازهای میانی در گاف انرژی می‌شود و این امر سبب کاهش اندازه گاف انرژی می‌گردد. با ساخت نمونه با نسبت‌های S به Cd متفاوت مشاهده کردیم که نمونه با نسبت S:Cd برابر با ۳:۱ دارای بیشترین ارتفاع قله در الگوی XRD و بهترین استوکیومتری می‌باشد.

کلمات کلیدی: CdS، استوکیومتری، آلاینده‌گی نقره، گاف انرژی، روش سیلار.



فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۴	فصل ۱- نیم رساناها
۵	۱-۱ رسانندگی نیم رساناها
۷	۲-۱ مدل پیوند کووالانسی جسم جامد
۹	۳-۱ نوارهای انرژی
۱۳	۴-۱ تزریق حامل
۱۵	۵-۱ سازوکارهای باز ترکیب
۱۵	۱-۵-۱ باز ترکیب مستقیم
۱۸	۲-۵-۱ باز ترکیب غیر مستقیم
۲۳	۶-۱ اثر ناخالصی
۲۵	فصل ۲- مشخصات CdS کپه ای و نانو ذرات CdS
۲۶	۱-۲ اهمیت CdS
۲۷	۲-۲ ساختار بلور

۲۹	۳-۲ خواص بلوری CdS
۳۰	۴-۲ گوگرد S
۳۲	۵-۲ کادمیوم Cd
۳۴	۶-۲ ویژگی های فیزیکی CdS
۳۷	۷-۲ نانو CdS
۴۲	فصل ۳- مروری بر مقالات دیگران
۴۳	۱-۳ روش های مختلف لایه نشانی CdS و پیش ماده های به کار برده شده برای تشکیل CdS
۴۵	۲-۳ بررسی اثر زمان و تعداد چرخه غوطه وری
۵۲	۳-۳ بررسی اثر آلابیدگی عناصر مختلف در مقالات
۶۶	۴-۳ بررسی اثر پخت
۷۱	فصل ۴- کار های تجربی انجام شده
۷۲	۱-۴ ساخت نانو CdS
۷۵	۲-۴ مشخصات ساختاری و ریخت شناسی نمونه های CdS
۹۲	۳-۴ آنالیز عنصری نمونه ها
۹۵	۴-۴ اندازه گیری انرژی گاف نمونه های CdS
۱۰۵	۵-۴ ساخت نانو CdS آلابیده به نقره

۶-۴	مشخصات ساختاری و ریخت شناسی نمونه های CdS آلاینده به نقره.....	۱۰۶
۷-۴	اندازه گیری انرژی گاف نمونه های CdS آلاینده به نقره	۱۱۳
	نتیجه گیری و پیشنهادات	۱۱۸
	مراجع	۱۲۰

فصل اول:

نیم رساناها

۱-۱ رسانندگی نیم رساناها

مطالعه نیم رساناها در اوایل قرن ۱۹ شروع شد و در طول سال ها نیم رساناهای فراوانی مورد بررسی قرار گرفتند. نیم رساناها دارای رسانندگی بین نارساناها و رساناها هستند. رسانندگی یک نیم رسانا به طور کلی نسبت به دما، روشنایی، میدان مغناطیسی و مقدار دقیق ناخالصی اتم ها حساسیت دارد و این حساسیت، نیم رساناها را به یکی از مهم ترین مواد برای کاربردهای الکترونیکی تبدیل می کند.

جدول ۱-۱ رسانندگی مواد [۱].

10^{-18} تا 10^{-8}	رسانندگی خیلی کم (عایق)	نارسانا	مواد جامد
10^{-8} تا 1	رسانایی بالا	رسانا	
1 تا 10^{-8}	رسانندگی بین رساناها و نارساناها	نیم رسانا	

یک تحقیق بسیار عالی توسط لوف^۱ در روسیه انجام شده است که خواص عمده مواد نیم رسانا بدین صورت ذکر گردیده است [۲]:

۱. ضریب دمایی مقاومت منفی: در فلزات با افزایش دما رسانندگی فلز کم می شود اما در مواد نیم رسانا با افزایش دما رسانندگی نیز افزایش می یابد.
۲. توان ترمو الکترونیک بالا، نسبت به فلزات چه مثبت چه منفی
۳. اثرات یکسوسازی

¹ A. F. Loffe

۴. حساسیت ویژه به نور یا ایجاد فوتولتایک یا تغییر در مقاومت

۵. حساسیت به میدان مغناطیسی

از مواد نیم رسانا در کلیدهای LED، سلول های خورشیدی، دیودهای لیزری، عملیات کلیدزنی و ساخت قطعات الکترونیکی بسیار دیگر می توان بهره برد.

جدول ۱-۲ محل قرارگیری نیم رساناها را در جدول تناوبی نشان می دهد. عناصر نیم رسانا مانند سیلیکان Si و ژرمانیوم Ge در گروه چهار جدول تناوبی قرار دارند. نیم رساناهای ترکیبی از دو یا چند عنصر تشکیل می شوند. مانند گالیوم آرسنید GaAs که یک ترکیب ۵-۳ است. در جدول ۱-۳ بعضی از نیم رساناهای مرکب ارائه شده اند.

جدول ۱-۲ محل قرارگیری نیم رساناها در جدول تناوبی [۱].

ستون دوره	۲	۳	۴	۵	۶
۲		B	C	N	
۳	Mg	Al	Si	P	S
۴	Zn	Ga	Ge	As	Se
۵	Cd	In	Sn	Sb	Te
۶	Hg		Pb		

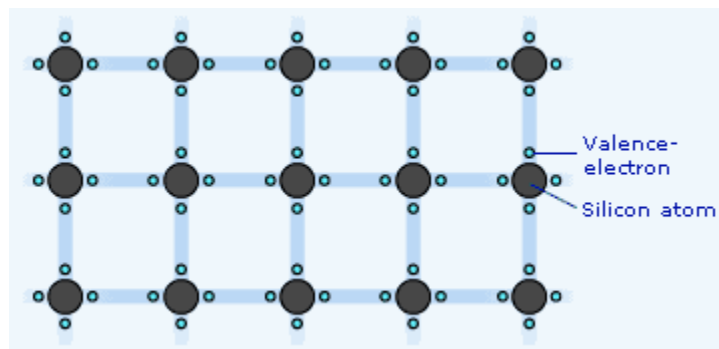
جدول ۳-۱ نیم رساناهای ترکیبی [۱].

ترکیب ۴-۶	ترکیب ۲-۶	ترکیب ۳-۵	ترکیب ۴-۴
PbS	CdS	AlAs	SiC
PbTe	CdSe	AlSb	
	CdTe	BN	
	ZnS	GaAs	
	ZnSe	GaP	
	ZnTe	GaSb	
		InAs	
		InP	
		InSb	

۲-۱ مدل پیوند کووالانسی جسم جامد

در شبکه بلور در هر اتم، هسته با بار مثبت توسط الکترون های مداری با بار منفی احاطه شده است. اگر اتم ها تنگاتنگ هم چیده شوند، مدار الکترون های لایه های خارجی روی هم می افتند تا نیروهای بین اتمی قدرتمندتری به وجود آورند. خارجی ترین الکترون ها، به نام الکترون های ظرفیت، در تعیین خواص الکتریکی جامد بسیار اهمیت دارند. در مواد رسانای فلزی، الکترون های ظرفیت در میان تمام اتم های موجود در جامد مشترک اند و در رسانش شرکت می کنند. در مواد نارسانا تقریباً تمام الکترون های ظرفیت قویاً در قید اتم های

تشکیل دهنده هستند و در رسانش جریان شرکت نمی کنند. در نیم رساناهای بلورین مانند Si هر اتم دارای چهار الکترون ظرفیت است که در شبکه الماسی هر اتم با چهار تا نزدیک ترین همسایه خود که با فاصله ای مساوی در گوشه های یک چهار وجهی قرار دارند احاطه شده است. هر اتم در مدار خارجی دارای چهار الکترون است و هر اتم، این الکترون های ظرفیت را با چهار همسایه اش به اشتراک می گذارد. این اشتراک گذاری الکترون ها به پیوند کووالانت مشهور است. هر جفت الکترون یک پیوند کووالانت تشکیل می دهند. نمودار پیوند دویعدی ساده شده برای چهار وجهی در شکل ۱-۱ نشان داده شده است.



شکل ۱-۱ پیوند کووالانت اتم سیلیکان [۳].

پیوند کووالانت بین اتم های یک نوع عنصر و یا بین اتم های عناصر متفاوت که دارای پیکربندی یکسانی در پوسته خارجی هستند اتفاق می افتد و دو الکترون بیشتر وقت خود را در فاصله میان دو هسته می گذرانند. نیروی جاذبه هر دو هسته بر الکترون ها، دو اتم را به یکدیگر می چسباند. برای شبکه زینک بلند نظیر GaAs یا CdS قسمت اعظم نیروی پیوندی از پیوند کووالانت ناشی می شود. علاوه بر این به عنوان مثال GaAs دارای پیوند یونی کوچکی هم هست که نیروی جاذبه الکتروستاتیکی بین هر یون Ga^{-} و چهار یون As^{+} همسایه می باشد یا بین هر یون As^{+} و چهار یون Ga^{-} همسایه است.

در دمای پایین، الکترون ها در شبکه چهاروجهی مربوط به خودشان محدود می شوند در نتیجه برای رسانش مناسب نیستند. در دمای بالاتر، ارتعاشات گرمایی ممکن است پیوندهای کووالانت را بشکنند. وقتی پیوندی

شکسته می شود یک الکترون از پیوند خارج می شود که می تواند در جریان رسانش شرکت کنند بنابراین نیم‌رسانا در دمای پایین نظیر عایق و در دمای بالا نظیر رسانا رفتار می کند. در این حالت در پیوند کووالانت کمبود یک الکترون ایجاد می شود که این کمبود می تواند با یکی از الکترون های همسایه پر شود که این روند منجر به سوق محل کمبود از محلی به محل دیگر می شود. این کمبود الکترون به صورت یک ذره غیر واقعی شبیه به الکترون، به نام حفره در نظر گرفته می شود که بار مثبت حمل می کند و تحت نفوذ میدان الکتریکی اعمال شده در راستای مخالف حرکت الکترون، حرکت می کند. حرکت حفره شبیه به حرکت حباب در مایع است. اگر چه در واقع این مایع است که حرکت می کند اما آسان تر آن است که حرکت را به حباب نسبت دهیم.

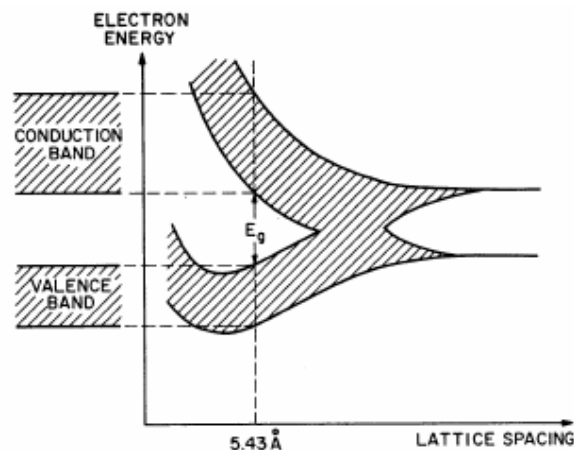
۳-۱ نوارهای انرژی

حفره یا الکترونی که در یک پیوند کووالانت گیر نیفتاده باشد (الکترون رسانش) نسبتاً آزاد است که مشابه الکترون در خلأ، درون نیم رسانا حرکت می کند. با این وجود الکترون یا حفره تحت تأثیر پتانسیل تناوبی مغزی های اتمی باردار (مغزی های یونی) قرار دارد در نتیجه جرم مؤثر یک الکترون رسانش با جرم الکترون آزاد در خلأ متفاوت است. بر خلاف الکترون در خلأ، الکترون در جامد فقط می تواند مقادیر محدودی از انرژی را بپذیرد. برای یک اتم منفرد، الکترون های اتم دارای ترازهای انرژی مجزا هستند. مثلاً ترازهای انرژی اتم هیدروژن منزوی با مدل بوهر از رابطه ۱-۱ به دست می آید [۱]. که n عدد درست مثبت است.

$$E_H = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad (1-1)$$

حال دو اتم یکسان را در نظر می‌گیریم. فقط آنها خیلی از هم دورند. ترازهای انرژی مجاز برای یک عدد کوانتومی اصلی معین مثلاً $n=1$ شامل یک سطح تبهگن دوگانه است. یعنی به ازای $n=1$ هر اتم دقیقاً انرژی برابر 13.6 eV دارد. با نزدیک کردن دو اتم به هم تراز انرژی تبهگن دوگانه در اثر برهمکنش بین اتم‌ها به دو تراز تقسیم می‌شوند. وقتی N اتم را برای تشکیل بلور به هم نزدیک کنیم، تراز انرژی تبهگن N تایی به خاطر برهمکنش اتمی به N تراز اما با فواصل خیلی نزدیک تقسیم می‌شوند. این امر به تراز انرژی اساساً پیوسته منجر می‌شود.

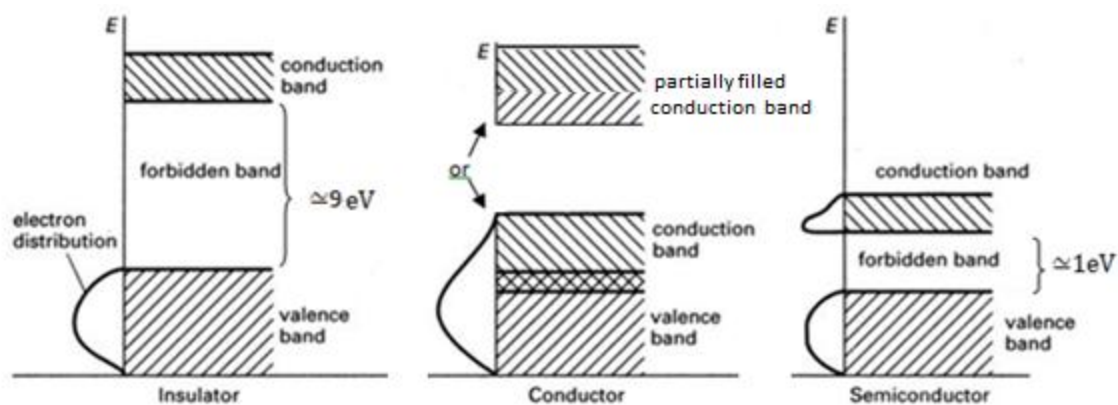
جزئیات ساختارهای نوار انرژی جامدات بلورین با استفاده از مکانیک کوانتومی محاسبه شده‌اند. شکل ۱-۲ نمودار ترسیمی تشکیل بلور شبکه الماسی از اتم‌های مجزای Si است. هر اتم مجزا دارای سطوح انرژی مجزای خود می‌باشد، دو تراز که در انتها الیه سمت راست‌اند. ضمن کاهش فواصل بین اتمی، هر تراز انرژی تبهگن برای تشکیل نوار تقسیم می‌شود. وقتی فاصله بین اتم‌ها به فواصل بین اتمی در حال تعادل شبکه الماسی نزدیک می‌شود این نوار مجدداً به دو نوار تقسیم می‌شود. این نوارها توسط ناحیه‌ای با انرژی‌های خاص که الکترون‌های جامدات نمی‌توانند دارای آن انرژی‌ها باشند از هم جدا می‌شوند. این ناحیه گاف نواری E_g نامیده می‌شود.



شکل ۱-۲ تشکیل نوار انرژی برای شبکه بلور الماسی برای دو اتم سیلیکان که به هم نزدیک می‌شوند [۴].

هر نوار انرژی مجاز شامل تعداد محدودی حالت است که می توانند تعداد معینی الکترون را در خود جای دهند. در نیم رسانا الکترون های ظرفیت گرد هم می آیند تا نواری از ترازهای انرژی موسوم به نوار ظرفیت را اشغال کنند (در شکل نوار پایین تر، نوار ظرفیت است). نوار ترازهای انرژی مجاز بعدی موسوم به نوار رسانش به اندازه گاف ممنوع انرژی از نوار قبلی فاصله دارد (در شکل نوار بالاتر، نوار رسانش است).

نمودار نوار انرژی برای سه رده از جامدات در شکل ۱-۳ نشان داده شده است.



شکل ۱-۳ نوار انرژی جامدات [۱۵].

در نارساها (عایق ها) تعداد حالت ها در نوار پایینی درست به اندازه ای است که می تواند الکترون های ظرفیت عرضه شده توسط اتم ها را در خود جای دهد. نوار ظرفیت کاملاً پر شده است و نوار رسانش خالی است.

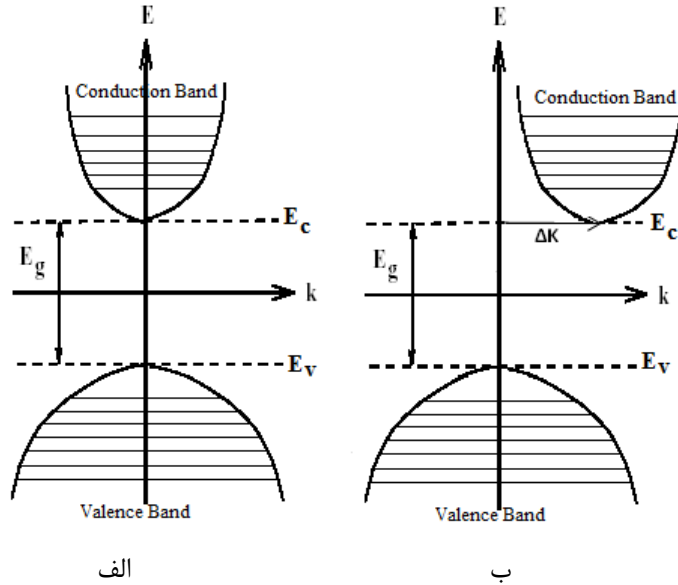
از اصول مکانیک کوانتومی می دانیم که نمی توان هیچ تکانه خالصی به الکترون های یک نوار کاملاً پر نسبت داد. بنابراین، یک نوار کاملاً پر در شارش جریان شرکت نمی کند. بر حسب نمودار نواری، انرژی اضافه شده به جامد به طور گرمایی یا توسط یک میدان اعمال شده خارجی، باید آن قدر انرژی به الکترون های نوار ظرفیت پر بدهد تا آن ها بتوانند به نوار رسانش بپرند و در تولید شارش جریان شرکت کنند. وقتی E_g زیاد باشد احتمال چنین گذاری بسیار کم است. در مواد عایق $E_g > 5eV$ است.

در نیم رسانا پیوندهای اتم های همسایه فقط به طور متوسط قوی هستند. بنابراین ارتعاشات گرمایی چنین پیوندهایی را خواهند شکست. وقتی پیوندی شکسته می شود، یک الکترون آزاد همراه با یک حفره آزاد حاصل می شود. در تصویر نوار انرژی حفره عبارت است از یک تراز انرژی خالی یا اشغال نشده در نوار ظرفیت. گاف نواری نیم رسانا به بزرگی گاف نواری نارسانا نمی باشد. به همین خاطر، تعدادی الکترون قادر خواهند بود از نوار ظرفیت به نوار رسانش منتقل شوند، که در نتیجه در نوار ظرفیت حفره هایی به جا می گذارند. وقتی میدان الکتریکی اعمال می شود، هم الکترون ها در نوار رسانش و هم حفره ها در نوار ظرفیت انرژی جنبشی به دست خواهند آورد و الکتریسیته را هدایت خواهند کرد .

در رساناها همچون فلزات، نوار رسانش یا به طور جزئی پر است یا با نوار ظرفیت روی هم می افتند به طوری که هیچ گاف نواری وجود ندارد. در نتیجه، بالاترین الکترون های واقع در نوار به طور جزئی پر یا الکترون های واقع در قسمت بالای نوار ظرفیت وقتی انرژی جنبشی کسب می کنند می توانند به نوار انرژی مناسب بالاتر بعدی حرکت کنند. بنابراین در رساناها هدایت جریان به سهولت برگزار می شود .

نمودار نوار انرژی شکل ۱-۳ نمایش ساده ای از یک ساختار سه بعدی پیچیده است. شکل ۱-۴ نمودارهای نوار انرژی قدری پیچیده تر را برای دو حالت نیم رسانا با گاف مستقیم و گاف غیر مستقیم نشان می دهد که در آن انرژی برحسب تکانه خطی بلوری رسم شده است.

در مواد با گاف غیر مستقیم وقتی الکترون گذاری از نوار ظرفیت به نوار رسانش انجام می دهد، نه تنها تغییر انرژی ($\geq E_g$) بلکه تغییری در تکانه ی بلور نیز لازم است. اما در مواد با گاف مستقیم گذار از نوار ظرفیت به نوار رسانش احتیاجی به تغییر تکانه بلوری الکترون ندارد.



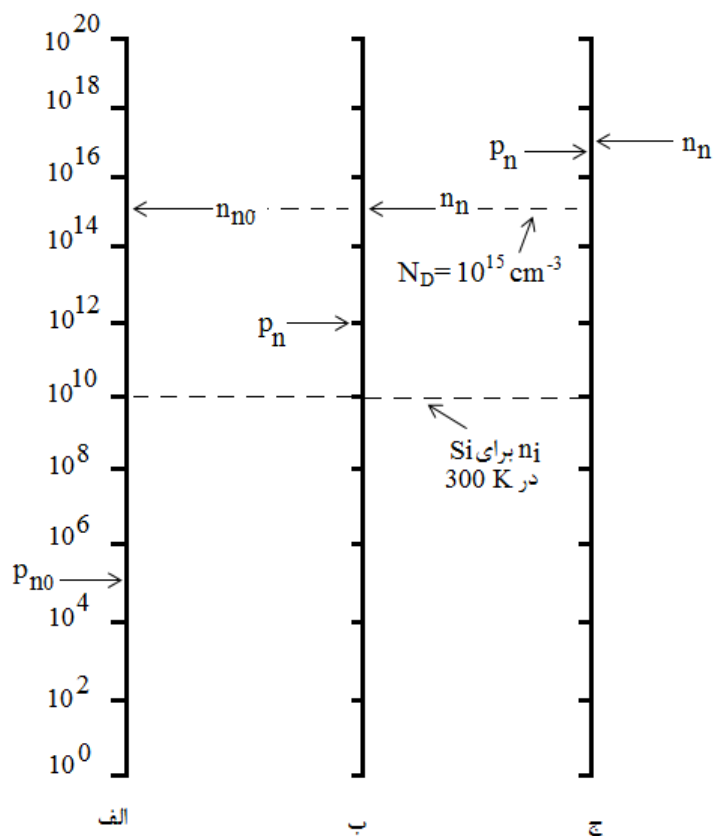
شکل ۴-۱ نمودار انرژی-تکانه، الف) نیم رسانا با گاف مستقیم و ب) نیم رسانا با گاف غیر مستقیم [۶].

۴-۱ تزریق حامل

در تعادل گرمایی رابطه ی $np = n_i^2$ برقرار است که n_i چگالی حامل ذاتی، p چگالی حفره ها در نوار ظرفیت و n چگالی الکترون ها در نوار رسانش است. اگر حامل اضافی به نیم رسانا افزوده گردد وضعیت غیر تعادلی می گردد که در این حالت $np > n_i^2$ می باشد. به افزودن حامل اضافی، تزریق حامل می گویند. حامل ها با روش های مختلفی از جمله تحریک اپتیکی و بایاس مستقیم پیوندگاه p-n تزریق می شوند.

در حالت تحریک اپتیکی، به نیم رسانا نور تابانده می شود. اگر انرژی فوتون تابانده شده از E_g (انرژی گاف نواری) بیشتر باشد، فوتون توسط نیم رسانا جذب می شود و زوج الکترون-حفره تولید می گردد. این تحریک، تراکم الکترون و حفره را به میزانی بالاتر از حالت تعادل افزایش می دهد که به حامل های اضافه شده، حامل های تزریقی گفته می شود. شکل ۱-۵-الف مربوط به حالت تعادل گرمایی سیلیکان نوع n با $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ است که در آن تراکم حامل اکثریت قریباً با تراکم دهنده برابر است یعنی $n_{n0} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

می‌باشد و تراکم حامل اقلیت نیز برابر $P_{n0} = \frac{n_i^2}{n_{n0}} = 1/45 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ است. شکل ۱-۵-ب مربوط به حالتی است که آن را تزریق تراز پایین می‌نامند. در این حالت به اندازه 10^{12} cm^{-3} حامل اقلیت (حفره) افزوده و تراکم حفره ها $\frac{10^{12}}{10^5} = 10^7$ برابر شده است. در همین زمان به اندازه 10^{12} cm^{-3} حامل اکثریت (الکترون) افزوده شده است چون $\Delta p = \Delta n$ اما این میزان در مقایسه با مقدار اولیه که 10^{15} cm^{-3} بوده است ناچیز است. در این وضعیت حامل تزریقی در مقایسه با تراکم آرایش کوچک است $\Delta p = \Delta n \ll N_D$. شکل ۱-۵-ج مربوط به حالتی است که آن را تزریق تراز بالا می‌نامند. در این حالت تعداد حامل های تزریقی با تعداد حامل های دهنده قابل مقایسه است. در این حالت تراکم حامل تزریق شده، ممکن است بر تراکم حامل اکثریت غلبه کند و p_n قابل مقایسه با n_n باشد.



شکل ۱-۵-۱ تراکم حامل ها برای Si نوع n (الف) در تعادل گرمایی (ب) در شرایط تزریق پایین (ج) در شرایط تزریق بالا [۱].

۱-۵ سازوکارهای بازترکیب

هرگاه در حالت تعادل گرمایی اختلالی ایجاد شود ($np \neq n_i^2$) ممکن است الکترون های اضافی واقع در نوار رسانش با حفره های نوار ظرفیت بازترکیب شوند تا فرآیندهایی برای بازگرداندن دستگاه به حالت تعادل (n_i^2) $np=$ به وجود آید. بسته به طبیعت فرآیند بازترکیب حامل ها، انرژی آزاد شده حاصل از بازترکیب می تواند به صورت فوتون تابش شود یا به صورت گرما به شبکه داده شود تا نیم رسانا دوباره به حالت تعادل برسد. وقتی فوتون گسیل می شود، فرآیند بازترکیب تابشی نامیده می شود. در غیر این صورت بازترکیب غیرتابشی گفته می شود.

پدیده های بازترکیب را می توان به صورت روندهای مستقیم و غیرمستقیم دسته بندی کرد. بازترکیب مستقیم را، بازترکیب نوار به نوار می گویند که معمولاً در نیم رساناهای گاف نواری مستقیم نظیر GaAs یا CdS غالب است. در حالی که بازترکیب غیرمستقیم از طریق مراکز بازترکیب گاف نواری در نیم رساناهای گاف نواری غیرمستقیم نظیر Si غالب است.

۱-۵-۱ بازترکیب مستقیم

در نیم رسانا با گاف نواری مستقیم ارتعاش گرمایی اتم های شبکه سبب می شود بعضی از پیوندهای بین اتم های همسایه شکسته شود که در نتیجه شکسته شدن پیوند، زوج الکترون-حفره به وجود می آید. برحسب نمودار نواری، انرژی گرمایی باعث می شود الکترون ظرفیت گذار رو به بالایی به داخل نوار رسانش انجام دهد و در نوار ظرفیت یک حفره به جای گذارد. این فرآیند تولید حامل با آهنگ تولید G_{th} نشان داده می شود که G_{th} نشان دهنده تعداد زوج الکترون-حفره ایجاد شده در cm^3 در ثانیه است. وقتی الکترون از نوار رسانش به نوار ظرفیت، گذار رو به پایین انجام می دهد، یک زوج الکترون-حفره نابود می شود. این فرآیند وارون بازترکیب

با R_{th} نشان داده می شود. در حالت تعادل گرمایی میزان تولید با آهنگ بازترکیب باید برابر باشد تا تراکم حامل ها ثابت بماند.

وقتی حامل های افزونی به یک نیم رسانا با گاف نواری مستقیم وارد می شود، این احتمال که الکترون ها و حفره ها مستقیماً بازترکیب شوند، بالا می رود زیرا انتهای پایینی نوار رسانش و انتهای بالایی نوار ظرفیت هم خط اند و هیچ اندازه حرکت بلوری اضافی برای گذار از گاف نواری لازم نیست. انتظار می رود میزان بازترکیب مستقیم R با تعداد الکترون های قابل دسترس در نوار رسانش و تعداد حفره های قابل دسترس در نوار ظرفیت متناظر باشد. یعنی:

$$R = \beta np \quad (2-1)$$

که β ضریب تناسب است. همان طور که ذکر شد در تعادل گرمایی میزان بازترکیب با میزان تولید برابر است. پس برای یک نیم رسانای نوع n داریم:

$$G_{th} = R_{th} = \beta n_{n_0} p_{n_0} \quad (3-1)$$

که n_{n_0} و p_{n_0} چگالی الکترون و حفره در نیم رسانای نوع n در تعادل گرمایی است. که در ادامه برای اختصار نوع نیم رسانا را ذکر نمی کنیم و برای حالت کلی می نویسیم n_0 و p_0 .

وقتی یک منبع نور اعمال شود تا زوج های الکترون-حفره را با آهنگ G_L تولید کند چگالی حامل ها بیشتر از مقدار تعادلی آن ها می شود و آهنگ تولید و بازترکیب به صورت زیر در می آیند.

$$G = G_{th} + G_L \quad (4-1)$$

$$R = \beta np = \beta (n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) \quad (5-1)$$

که Δn و Δp چگالی بار اضافی اند و چنین تعریف می شوند: