Les densités de centres occupés N_{ro} et de centres vides N_{rv} sont respectivement donnés par:

$$N_{ro} = N_r . f_n(E_r) \qquad N_{rv} = N_r .(1 - f_n(E_r)) \quad \text{avec} \quad f_n(E_r) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_r - E_F}{kT}\right)}$$

Capture d'un électron de la bande de conduction par un piège vide

Le taux de recombinaison des électrons sur le centre piège (cas a – cas b) s'écrit: $r_n = C_n . n . N_{rv} - E_n . N_{ro}$

De même pour les trous qui se recombinent: $r_p = C_p . p . N_{ro} - E_p . N_{rv}$

Soit: $r_n = N_r (C_n . n (1 - f_n(E_r)) - E_n . f_n(E_r))$ (1) et $r_p = N_r (C_p . p\, f_n(E_r) - E_p .(1 - f_n(E_r)))$ (2)

A l'équilibre thermodynamique $n = \bar{n}$ $\quad p = \bar{p}$ et $r_n = r_p = 0$

(1) devient $C_n . \bar{n} (1 - f_n(E_r)) - E_n . f_n(E_r) = 0$ soit $E_n = C_n . \bar{n} \frac{(1 - f_n(E_r))}{f_n(E_r)} = 0$

$$E_n = C_n . N \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \left(\frac{1 - \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_r - E_F}{kT}\right)}}{\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_r - E_F}{kT}\right)}} \right) = C_n . N \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \exp\left(\frac{E_r - E_F}{kT}\right) = C_n . N \exp\left(-\frac{E_c - E_r}{kT}\right) = C_n n^* \quad \text{avec} \quad n^* = N \exp\left(-\frac{E_c - E_r}{kT}\right)$$

De même $E_p = C_p . N \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right) \exp\left(\frac{E_r - E_F}{kT}\right) = C_p . N \exp\left(-\frac{E_r - E_V}{kT}\right) = C_p p^*$ avec $p^* = N \exp\left(-\frac{E_r - E_V}{kT}\right)$

Donc $r_n = N_r C_n \left[n(1 - f_n(E_r)) - n^* . f_n(E_r) \right]$ (3) et $r_p = N_r C_p \left[p\, f_n(E_r) - (1 - f_n(E_r)) p^* \right]$ (4)

Le centre de recombinaisons provoque la recombinaison d'une paire électron-trou de sorte que $r_n = r_p$. On en déduit la probabilité d'occupation du centre:

$$C_n\left[n(1-f_n(E_r))-n^*.f_n(E_r)\right]=C_p\left[p\,f_n(E_r)-(1-f_n(E_r))p^*\right]$$ soit $$f_n(E_r).(C_n.n+C_n.n^*+C_p.p+C_p.p^*)=C_n.n+C_p.p^*$$

Donc $$f_n(E_r)=\frac{C_n.n+C_p.p^*}{C_n.(n+n^*)+C_p(p+p^*)}$$

En explicitant $f_n(E_r)$ dans les éq.(3) et (4), on obtient $r_n = r_p = r = N_r C_n \frac{n\left[C_n.(n+n^*)+C_p(p+p^*)-C_n.n-C_p.p^*\right]-n^*(C_n.n+C_p.p^*)}{C_n.(n+n^*)+C_p(p+p^*)}$

$$r=N_r C_n C_p \frac{np-n^*p^*}{C_n.(n+n^*)+C_p(p+p^*)}$$ or $$n^*.p^*=n_i^2=N^2\exp\left(-\frac{E_C-E_V}{kT}\right)$$

Donc $$r=N_r C_n C_p \frac{np-n_i^2}{C_n.(n+n^*)+C_p(p+p^*)}=\frac{np-n_i^2}{\tau_{p0}(n+n^*)+\tau_{n0}(p+p^*)}$$ Avec $$\tau_{p0}=\frac{1}{C_pN_r} \quad et \quad \tau_{n0}=\frac{1}{C_nN_r}$$

Remarque: si $C_n = C_p = C$, les pièges sont des centres de recombinaison et $\tau_{p0}=\tau_{n0}=\tau=\frac{1}{C\,N_r}$

$$r=\frac{C^2(n\,p-n_i^2)}{C.\tau.C(\,n+\,n^*+\,p+p^*)}=\frac{n\,p-n_i^2}{\tau(\,n+n^*+\,p+p^*)}$$

Si $C_n > C_p$ ce sont des pièges à électrons.
Si $C_p > C_n$ ce sont des pièges à trous.
Si $E_r = E_{FI}$ (piège situé au milieu de la bande interdite, alors: $$\boxed{r=\frac{n\,p-n_i^2}{\tau(\,n+\,p+2n_i\,)}}$$ Formule de Shockley-Read

Car $$n^*=p^*=n_i=N.\exp\left(-\frac{E_C-E_V}{2kT}\right)$$ avec $$n^*=N.\exp\left(-\frac{E_C-E_{FI}}{kT}\right)$$ et $$p^*=N.\exp\left(-\frac{E_{FI}-E_V}{kT}\right)$$