

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ



دانشکده فیزیک
بخش فیزیک

پایان نامه تحصیلی برای دریافت درجه کارشناسی ارشد رشته فیزیک اتمی مولکولی

افزایش بازده در سلولهای خورشیدی نانوساختار نقاط کوانتومی با استفاده از باند
میانی

استاد راهنما:

دکتر محمد حسین زندی

استاد مشاور:

دکتر مجید تراز

مؤلف:

محمد هوشمند

تابستان 1390



دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه تحصیلی برای دریافت درجه کارشناسی ارشد رشته فیزیک گرایش اتمی
و مولکولی

دانشجو: محمد هوشمند

استاد راهنما: دکتر محمد حسین زندی

استاد مشاور: دکتر مجید تراز

داور 1: دکتر علیرضا بهرام پور

داور 2: دکتر مجید رهنما

معاونت پژوهشی و تحصیلات تکمیلی دانشکده:

تقديم به:

همسرم

سپاسگزاری

سپاس خدایی را سزااست که بر بنده منت نهاد، هستی ام بخشید و توفیقم داد تا در مسیر کسب علم و تجربه قرار گیرم.

بدینوسیله زحمات ارزشمند اساتید بزرگ دکتر محمد حسین زندی، دکتر علیرضا بهرام پور و دوست و راهنمای خوبم دکتر نیما اسحاقی گرجی را ارج می نهم و از راهنمایی های استادانه ایشان سپاسگزارم.

از پدر و مادرم که موفقیتم را مدیون آنها می باشم، تشکر می نمایم.

از همسرم که مرا در تمام مراحل تهیه و تدوین این پایان نامه یاری کردند، تشکر و قدردانی می نمایم و موفقیت ایشان را از درگاه خداوند منان آرزومندم.

و همچنین از دوستان عزیزم محمد علی پناه و مصطفی رستمی و آرش آقاسی نیا کمال تشکر را دارم.

در پایان از خداوند منان برای روح بلند مهندس علیرضا افضلی پور علو درجات را مسئلت دارم.

توفیق رفیق راهشان باد

محمد هوشمند.

چکیده:

نرخ انتقال بین بانندی و باز ترکیب سطحی حامل ها در نقاط کوانتومی، به عنوان دو پارامتر موثر برای بهینه سازی فوتو جریان و بازدهی سلول های خورشیدی باند میانی بطور کلاسیک مورد مطالعه قرار گرفته اند. فرمول سازی برای این نرخ ها نشان می دهد که آن ها به طول عمر باز ترکیب حامل ها وابسته اند. این وابستگی می تواند نقش باز ترکیبی یا مراکز تولیدی را به نقاط کوانتومی بدهد. ما این نرخ ها را برای دو مقدار متفاوت طول عمر باز ترکیب محاسبه کرده ایم. چنین استنباط می کنیم که برای طول عمر طولانی تر، نقاط کوانتومی به عنوان مراکز تولید حامل عمل می کنند و فوتو جریان و بازدهی سلول خورشیدی را بهبود می بخشد و نشان داده شده است که یک تعداد بهینه برای لایه های نقاط کوانتومی انباشته برای مشارکت در ناحیه میانی¹ به منظور تولید حداکثر فوتو جریان وجود دارد. همچنین خصوصیات J-V و بازدهی به عنوان تابعی از ضخامت ناحیه فعال سلول های خورشیدی نوار میانی محاسبه شده است. ما در ادامه این پایان نامه ما کزیمم نقطه بازده سه سلول مختلف را که از مواد مشهوری ساخته شده اند را مقایسه کردیم. هر سلول شامل یک اندازه مختلف از نقطه کوانتومی در ناحیه میانی است که موجب ایجاد ترازهای باند میانی مختلفی در شکاف باند نیمه رسانای میزبان می شود. به اضافه، اشاره شده که با افزایش شدت نور برخورد در محدوده تابش، ما کزیمم بازدهی نیز افزایش می یابد.

واژه های کلیدی: سلول خورشیدی باند میانی، نقاط کوانتومی، بازده، طول عمر باز ترکیب، گذار بین بانندی، باز ترکیب سطحی

¹ i-region

فهرست

- فصل اول : مقدمه ۱
- فصل دوم : مفاهیم نظری ۵
- 1-2 اثر فوتو ولتایی 6
- 2-2- نیمه رسانا 8
- 3-2 آرایش نیمه رسانا 11
- 4-2 پیوند گاه p-n 12
- 5-2 پیش ولت دادن به پیوند گاه p-n 14
- 6-2 جریان اشباع 15
- 7-2 اصطلاحات مربوط به حامل 17
- 8-2 پتانسیل خود ساخته 18
- 9-2 سوق و پخش 19
- 10-2 جریان سوق و پخش در نیمرساناها 21
- 11-2 جریان تولیدی توسط نور 22
- 12-2 جداسازی و جمع کردن بارها با تحریک نوری 24
- 13-2 تولید، باز ترکیب و تزریق حامل ها 27
- 14-2 باز ترکیب غیر مستقیم 29
- 15-2 معادلات پیوستگی 33
- 16-2 فرآیند تبدیل انرژی نوری به انرژی الکتریکی در یک پیوند گاه p-n 36
- 17-2 نقاط کوانتومی 38
- 18-2 بررسی خواص نقاط کوانتومی 40

42.....	19-2 روش ساخت نقاط کوانتومی
43.....	20-2 نقاط کوانتومی و سلولهای خورشیدی
۴۴.....	فصل سوم : بررسی روشها
45.....	1-3 انطباق طیف خورشید و گاف انرژی نیتراها
48.....	2-3 ساختار سلول خورشیدی نقاط کوانتومی
۶۵.....	فصل چهارم : نتایج و بحث
66.....	1-4 نتایج و بحث
۸۶.....	فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهاد
۸۹.....	منابع :

Error! Bookmark not defined. Abstract:

فهرست شکل

شکل	صفحه
شکل (1-2)	الکترونهای رسانش و ظرفیت 9
شکل (2-2)	سیلیسیم نوع p و نوع n قبل از تماس 13
شکل (3-2)	توزیع پتانسیل یک پیوند یک پیوندگاه پله ای یک طرفه تحت 16
شکل (4-2)	نوار انرژی تحت، شکل بالا، بایاس مستقیم و شکل پایین، بایاس معکوس 17
شکل (5-2)	ساختار پیوند p-n و پایین، نوار انرژی در حالت تعادل 19
شکل (6-2)	تجسم رانش حامل 20
شکل (7-2)	جریان سوق در یک میله نیم رسانا 22
شکل (8-2)	مثالهایی از ساختارهای متفاوت سلول خورشیدی بر پایه مواد نانوکریستالی 25
شکل (9-2)	روند جذب اپتیکی در نیمرسانا 26
شکل (10-2)	تولید و باز ترکیب از طریق حالت های واسط 30
شکل (11-2)	عمل باز ترکیب در نیمرسانا: چپ، باز ترکیب مستقیم. وسط، باز ترکیب غیرمستقیم. راست، پدیده اوزه 31
شکل (12-2)	شارش الکترونی در یک حجم کوچک برای بررسی معادله پیوستگی 34
شکل (13-2)	واحدهای الکترونیکی برای (چپ)، نیمرسانای حجمی، (راست)، نقاط کوانتومی 43
شکل (1-3)	تغییرات پیوسته گاف انرژی $In_xGa_{1-x}N$ با تغییرات شدت In و طیف خورشید در استاندارد 1.5 AM 47
شکل (2-3)	انطباق گاف انرژی InGaN و GaN با طیف خورشید 47
شکل (3-3)	همپوشانی توابع موج نقاط کوانتومی آرایه شده 49
شکل (4-3)	تولید باند میانی (I) در گاف انرژی نیمرسانا 49
شکل (5-3)	شماتیک فرآیند تولید و باز ترکیب در ماده ای با باند میانی ناشی از نقاط کوانتومی 50
شکل (6-3)	ساختار سلول خورشیدی نقاط کوانتومی با اندازه های یکسان 56
شکل (7-3)	نوار انرژی سلول خورشیدی نقاط کوانتومی p-i-n 57
شکل (8-3)	فرایندهای مدل SRH در نقاط کوانتومی 57
شکل (1-4)	نمودار بازده بر حسب ضخامت برای سلول 1 با $E_H=1.28 eV$ و $E_L=0.74 eV$ 67

- شکل (2-4) نمودار جریان-ولتاژ برای سلول 1 با $E_H=1.28\text{ eV}$ و $E_L=0.74\text{ eV}$ 68
- شکل (3-4) نمودار بازده بر حسب ضخامت برای سلول 2 با $E_H=1.10\text{ eV}$ و $E_L=0.57\text{ eV}$ 69
- شکل (4-4) نمودار جریان-ولتاژ برای سلول 2 با $E_H=1.10\text{ eV}$ و $E_L=0.57\text{ eV}$ 70
- شکل (5-4) نمودار بازده بر حسب ضخامت برای سلول 3 با $E_H=0.99\text{ eV}$ و $E_L=0.49\text{ eV}$ 71
- شکل (6-4) نمودار جریان-ولتاژ برای سلول 3 با $E_H=0.99\text{ eV}$ و $E_L=0.49\text{ eV}$ 72
- شکل (7-4) نمودار مقایسه حداکثر بازده بر حسب ضخامت برای هر سه سلول 73
- شکل (8-4) نرخ باز ترکیب سطحی موثر بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=100\text{ ps}$ 76
- شکل (9-4) نرخ باز ترکیب بین بانندی موثر بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=100\text{ ps}$ 77
- شکل (10-4) نرخ باز ترکیب کلی بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=100\text{ ps}$ 78
- شکل (11-4) چگالی فوتو جریان بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=100\text{ ps}$ 79
- شکل (12-4) نرخ باز ترکیب سطحی موثر بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=1\text{ ps}$ 80
- شکل (13-4) نرخ باز ترکیب بین بانندی موثر بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=1\text{ ps}$ 81
- شکل (14-4) نرخ باز ترکیب کلی بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=1\text{ ps}$ 82
- شکل (15-4) چگالی فوتو جریان بر حسب تعداد لایه های نقاط کوانتومی (M) برای $\tau_r=1\text{ ps}$ 83

فصل اول : مقدمه

در نبود سوخت‌های فسیلی، یکی از منابع مهم تولید انرژی الکتریکی، تابش خورشید است. به دلیل افزایش نیاز بشر به منابع انرژی پاک، صنعت تولید سلول‌های خورشیدی با سرعت بسیاری در حال گسترش است. مشکل اصلی سلول خورشیدی کنونی، هزینه بالا و کارایی کم آنهاست. سلول‌های خورشیدی از مواد نیمه‌رسانا تشکیل شده‌اند که با جذب نور خورشید، الکترون‌ها را به ترازهای باند رسانش هدایت می‌کنند و به نحوی باعث ایجاد نیروی محرکه الکتریکی می‌شوند. بازدهی سلول‌های خورشیدی توسط طیف جذبی آنها که جزو خواص ذاتی نیمه‌رساناهای توده‌ای است تعیین می‌شود.

سلول‌های خورشیدی سیلیکونی متعارف توانایی لازم برای تبدیل تمام انرژی فوتون‌های جذب شده به الکترون‌ها و حفره‌های آزاد و در نهایت تولید الکتریسیته را ندارند. از سوی دیگر، به علت قیمت بالای مواد خام نیمه هادی و نیز فرآیندهایی که برای تبدیل مواد خام به سلول‌های کاربردی نیاز است هزینه‌ی تولید این سلول‌ها بسیار بالا است. نقاط کوانتومی انقلابی را در تولید سلول‌های خورشیدی ارزان قیمت با بازدهی بالا آغاز کرده است. انواع مختلف نقاط کوانتومی که به منظور تطبیق یافتن و جذب نور طیف خورشید طراحی شده‌اند را می‌توان در یک سلول خورشیدی گردآوری نمود. نقاط کوانتومی با استفاده از اندازه منحصر به فردشان از قابلیت‌های مهمی برای برقراری تعامل نوری با منبع نور برخوردار هستند. در سیلیکون‌ها، یک فوتون نوری، یک الکترون از مدار اتم‌رها می‌سازد. در اواخر دهه 90 میلادی آرتور نوزیک از محققان ارشد آزمایشگاه ملی منابع تجدیدپذیر انرژی در کلرادو آمریکا بر این فرض بود که نقاط کوانتومی مواد خاص نیمه هادی‌ها هستند که می‌توانند به هنگام برخورد با فوتون‌های دارای سطح انرژی بالا دو یا تعداد بیشتری الکترون آزاد کنند. در واقع با طراحی نقاط کوانتومی که بیشتر همپوشانی را در طیف جذبی با طیف نور خورشید داشته باشند، می‌توان بازدهی سلول‌های خورشیدی را تا بیش از 90 درصد افزایش داد [1 و 2]. سلول خورشیدی نوار میانی نقاط کوانتومی نوع جدیدی از سلول خورشیدی است که می‌تواند از ماکزیمم محدوده بازده تبدیل انرژی ترمودینامیکی یا محدوده شاکلی کوایزر² تجاوز کند البته با استفاده از تراز باند میانی آن [3]. نقاط کوانتومی در ماده میزبان

² Shockey-Queissar

ترازهای انرژی محدودی را ایجاد می کند که موقعیت آنها، به سائز، شکل نقاط کوانتومی و نوع مواد استفاده شده بستگی دارد [4]. محاسبات تئوری تحت شرایط ایده آل نشان داده اند که سلول های خورشیدی باند میانی می توانند تا 63/2% بازده تبدیل انرژی داشته باشند [3]. سلول خورشیدی نقاط کوانتومی دو عنصر مهم برای تحقیق دارد: ابتدا، مواد استفاده شده در ساختارشان به عنوان نقاط کوانتومی یا حامل ها، ثانیاً اثر مستقیم پارامتر بهینه سازی روی فوتوجریان و بازدهی سلول. با تشکیل آرایه ای از نقاط، طیف های فوتو-جذبی به سمت طول موج های بلندتر از گاف انرژی حامل گسترش می یابند، و بازده کوانتومی با افزایش تعداد لایه های انباشته افزایش می یابد [5 و 6]. در سلول خورشیدی نقاط کوانتومی، فوتون های با انرژی کمتر از گاف انرژی نیمه هادی ها می توانند بوسیله باند میانی که در میانه گاف انرژی قرار دارد، جذب شوند. متأسفانه، مقادیر آزمایشگاهی بازده های این نوع از ساختارها بطور عمده کمتر از میزان پیش بینی شده تئوری هستند [7 و 8]. این کاهش بازدهی از کاهش ولتاژ مدار باز که مربوط است به کاهش در ولتاژ روشنایی یک دیود در شرایط تاریک و یا از طول عمر کوتاه تر باز ترکیب حامل ها در مواد ناشی می شود. همچنین این کاهش می تواند به دلیل ناتوانی در ساخت ساختار مناسب باند میانی باشد که باند میانی را به خوبی از سایر باندها هدایت با چگالی حالت خالص صفر جدا می کند [9 و 10]. وابستگی نرخ باز ترکیب سطحی، نرخ انتقال بین باندها، نرخ کلی باز ترکیب و چگالی فوتوجریان روی طول عمر باز ترکیب حامل ها در نقاط کوانتومی مطالعه شده و مقادیر آن ها برای یک طول عمر به قدر کافی طولانی برای رسیدن به بازده تبدیل انرژی بالاتر، بهینه شده است. این عمل نشان می دهد که در شرایط مناسب، انتقال بین باندها و باز ترکیب سطحی در نقاط کوانتومی می تواند نقش تولید کننده حامل به نقاط کوانتومی بدهد و بنابراین بازده سلول را بهبود بخشد. نتیجه کار آزمایشگاهی روی سلول خورشیدی نقاط کوانتومی ثابت کرده است به دلیل کرنش درونی و نابجایی ای که از طریق لایه های اضافی به سمت سطح تحمیل می شود [5 و 10]، که کیفیت کریستال نقاط کوانتومی، مثل اندازه و شکل نقاط، با افزایش تعداد لایه های نقاط کوانتومی کاهش می یابد. بنابراین همه پارامترها را در مقابل تعداد لایه های نقاط کوانتومی بهینه کرده ایم.

بازده سلول خورشیدی باند میانی به مقدار 2 زیر شکاف باند و عرض باند میانی بستگی دارد. فوتون هایی که انرژی کمتر از انرژی شکاف باند دارند یک جفت حفره الکترونی را با پمپ کردن یک الکترون از نوار ظرفیت (VB) به باند میانی (IB) و همچنین یک الکترون از باند میانی به نوار رسانش (CB) ایجاد می کند. به هر حال، پیش بینی شده است که سلول خورشیدی باند میانی، بازدهی تبدیل ماکزیمم انرژی را افزایش داده و هزینه سلول های خورشیدی را کاهش می دهد [5]. این هدف با معرفی متمرکز کننده های نور امکان پذیر و شدنی می باشد [11 و 12].

فصل دوم : مفاهیم نظری

1-2 اثر فوتو ولتایی

ساز و کار تبدیل انرژی نوری به انرژی الکتریکی را اثر فوتو ولتایی می گویند. فوتو دیود و باتری خورشیدی مفیدترین قطعات از این نوع اند. ساز و کار معکوس، یعنی، تبدیل انرژی الکتریکی به انرژی نوری اثر فوتو الکترو لومینسان نامیده می شود [13].

اثر فوتو ولتایی برای اولین بار در سال 1839 توسط بکورل دانشمند فرانسوی مشاهده شد. او متوجه شد هنگامی که نور بطور مستقیم از یکسو وارد سلول باطری ساده می شود، جریان تولید گشته دارای افزایش خواهد بود. در اواسط قرن بیستم در یک برنامه فضایی سلولهای خورشیدی سیلیکون بلورین توسعه یافت [14].

نیمرسانهای آلی، مواد اصلی در صنعت اپتوالکترونیک هستند. اساسا، قیمت ساخت کمتر و روش ساخت ساده تر مواد آلی نسبت به قطعات مشابه از نیمرسانهای غیر آلی آنها را مورد توجه قرار داده است.

قسمت عمده انرژی در نور خورشید در ناحیه مرئی و توان کل رسیده به زمین در سطح دریا تقریبا $100mw/cm^2$ است. معلوم شده است که تعداد کل فوتون های خورشیدی در سطح دریا در شرایط (AM_1) ، $4/8 \times 10^{17} cm^{-2}s^{-1}$ می باشد و بیشینه تعداد فوتون هایی که می توانند در سیلیسیم معمولی جذب شوند $3/7 \times 10^{17} cm^{-2}s^{-1}$ و $1/5 \times 10^{17} cm^{-2}s^{-1}$ است. [3]

(AM_1) وضعیتی که در آن خورشید در سمت الراس و قطعه آزمایشی در سطح دریا زیر آسمان صاف است. البته به دلیل چرخش زمین با زاویه $23/5$ درجه این میزان انرژی در مکان ها و فصل ها متفاوت می باشد.

سلول های خورشیدی به صورت متوالی به هم وصل می شوند تا بتوانند ولتاژ و جریان مورد نظر را بدست آورند و از آن ها با قرار دادن در بین شیشه و یک رزین سخت محافظت بعمل می آید.

این روند با استفاده از استیل ضدزنگ یا قالب آلومینیومی جهت تشکیل یک ماژول انجام می‌پذیرد. این ماژول‌ها معمولاً از 30 سلول فوتولتائیک تشکیل شده است.

از موارد استفاده از سیستم‌های فوتولتائیک می‌توان به پمپاژ آب به هنگام ساعات وجود نور خورشید و ذخیره آن به این روش یا باتری خورشیدی نام برد. از دیگر کاربردها می‌توان به سیستم‌های مرکب تولید نیرو نام برد که از سه قسمت تولید نیرو در کنار هم استفاده می‌کنند، یک آرایه خورشیدی فوتولتائیک، یک ژنراتور بادی و یک ژنراتور دیزلی، که امکان تولید انرژی را در هر شرایط آب و هوایی می‌دهد.

همچنین در آبگرمکن‌های خورشیدی و به تازگی در کولر گازی‌های ترکیبی که قسمتی از انرژی‌شان از انرژی خورشید تهیه می‌شود یا منابع تولید انرژی چراغ‌های راهنمایی و رانندگی در سطح کلان شهرها قطعاً فوتولتائیک هستند که منبع انرژی آنها را مستقل از برق شهر قرار می‌دهند تا در مواقع اضطراری اختلالی در آمد و شد شهروندان پیش نیاید.

اما هنوز به دلیل هزینه تولید، استفاده از منبع ارزان و فراوان انرژی خورشیدی به طور چشمگیری عملی نشده است. هم‌اکنون دو فناوری در ساخت سلول‌های خورشید بیشتر استفاده می‌شود، فناوری نسل اول و نسل دوم. فناوری نسل اول بر پایه ویفرهای سیلیکونی با ضخامت 300-400 میکرومتر است که ساختاری بلوری یا چند بلوری دارند که یا از بریدن شمش بدست می‌آیند یا با کمک خاصیت موینگی رشد داده می‌شوند. تکنولوژی نسل دوم یا تکنولوژی لایه نازک، براساس لایه نشانی نیمه هادی روی بسترهای شیشه‌ای، فلزی یا پلیمری، در ضخامت‌های 3-5 میکرومتر است.

هزینه مواد اولیه در تکنولوژی لایه نشانی، کمتر است و اندازه سلول تا 100 برابر بزرگتر از اندازه سلول ساخته شده با تکنولوژی نسل اول است اما بازدهی سلول‌های نسل اول به دلیل کیفیت بالاتر مواد، از نسل دوم بیشتر است.

در سال 1961، شاکلی و کوایزر با در نظر گرفتن یک سلول خورشیدی پیوندی به شکل یک جسم سیاه با دمای 300 کلوین نشان دادند که بیشترین بازدهی یک سلول خورشیدی صرف نظر از

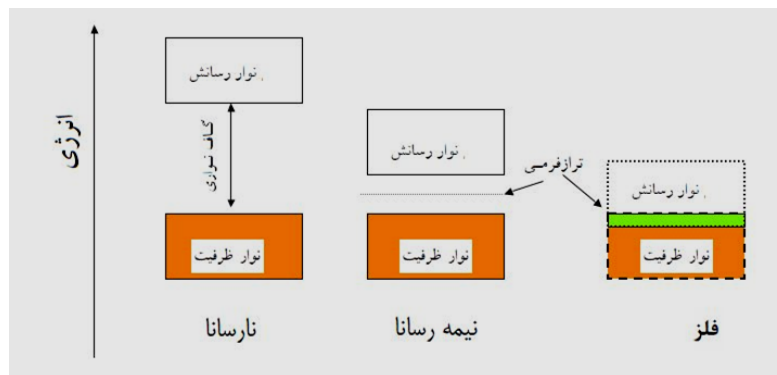
نوع تکنولوژی بکار رفته در آن، 30% است که در انرژی شکاف 1.4 eV یعنی انرژی شکاف گالیم آرسناید بدست می‌آید. بنابراین بازدهی سلول‌های خورشید نسل اول و دوم حتی در بهترین حالت نمی‌تواند از حوالی 30% بیشتر شود. این در حالی است که حد کارنو برای تبدیل انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی 95% است و این مقدار تقریباً سه برابر بیشتر از بازدهی نهایی سلول‌های نسل اول و دوم است. بنابراین دستیابی به سلول‌هایی با بازدهی‌هایی دو تا سه برابر بازدهی‌های کنونی، امکان‌پذیر است. سلول‌های خورشیدی که دارای چنین بازدهی‌هایی باشند، نسل سوم سلول‌های خورشیدی نامیده می‌شوند. سلول‌های چندلایه‌ای، سلول‌های خورشیدی چاه کوانتومی، سلول‌های خورشیدی نقطه کوانتومی، سلول‌های حامل داغ، نسل سوم سلول‌های خورشیدی را تشکیل می‌دهند [15 و 16].

اکنون امیدواریم که فضای جدیدی موسوم به نقاط کوانتومی امکان استفاده از انرژی خورشید را مهیا سازد.

2-2- نیمه رسانا

یکی از ویژگی‌های جالب مواد نیمه‌رسانا، که آنها را از مواد رسانا متمایز می‌کند، چگونگی تغییر مقاومت ویژه الکتریکی آنها با تغییرات دما است. همانطور که می‌دانیم افزایش دما موجب افزایش مقاومت ویژه الکتریکی مواد رسانا می‌شود. علت این پدیده نیز افزایش تعداد و شدت برخورد الکترون‌های آزاد با اتم‌های در حال نوسان در جسم رسانا است. با افزایش دما، جنبش ذرات تشکیل‌دهنده‌ی جسم بیشتر می‌شود و بنابراین تعداد و شدت برخورد الکترون‌های آزاد با اتم‌های جسم افزایش می‌یابد. یعنی الکترون‌ها که حاملان بار الکتریکی در جسم جامد رسانا هستند، برای انتقال بار الکتریکی با موانع بیشتری برخورد می‌کنند و در نتیجه رسانایی الکتریکی جسم کاهش می‌یابد [13].

آزمایش نشان می‌دهد، برخلاف رسانا، در نیمه رسانا، در نیمه رسانا افزایش دما موجب کاهش مقاومت ویژه الکتریکی نیمه‌رسانا می‌شود. توجه این پدیده در نیمه‌رسانا تنها با استفاده از نظریه‌ی نواری امکان‌پذیر است.



شکل 1-2: الکترونهای رسانش و ظرفیت

در شکل (1-2) ساختار نواری یک نیمه‌رسانا نشان داده شده است. همان‌گونه که در تصویر می‌بینیم در دماهای پایین نوار ظرفیت نیمه‌رسانا کاملاً پر از الکترون و نوار رسانش کاملاً خالی از الکترون است. از این رو نه نوار ظرفیت در رسانش نقشی دارد (چون نوار کاملاً پر است و هیچ الکترونی امکان‌گذار درون نوار را ندارد) و نه در نوار رسانش الکترونی هست تا موجب رسانایی الکتریکی شود. بنابراین در دماهای پایین، نیمه‌رسانا مشابه نارسانا رفتار می‌کند. با افزایش دما، تعدادی از الکترون‌های نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار می‌کنند. بدین ترتیب هم الکترون‌هایی که در نوار رسانش قرار می‌گیرند، موجب رسانایی الکتریکی می‌شوند و هم تعدادی تراز خالی در نوار ظرفیت ایجاد می‌شود. از این رو امکان‌گذار برای الکترون‌های نوار ظرفیت نیز (در همان نوار) فراهم می‌شود. به بیان دیگر، در این حالت هم نوار رسانش در رسانایی الکتریکی نقش دارد و هم نوار ظرفیت. به همین ترتیب با افزایش دما هم تعداد الکترون‌های نوار رسانش بیشتر می‌شود و هم ترازهای خالی نوار ظرفیت افزایش می‌یابد. این مسئله سبب افزایش رسانایی الکتریکی نیمه‌رسانا می‌شود [۱۳ و ۱۷].

آزمایش‌های گوناگون نشان می‌دهد که مقدار جریان الکتریکی در نیمه‌رسانا بیشتر از آن است که فقط با عبور الکترون‌ها ایجاد شده باشد. این پدیده ایده‌ی وجود ذرات دیگری را به عنوان

حامل بار الکتریکی مطرح می‌کند. به عبارت دیگر ما تا کنون فقط الکترون‌ها را به عنوان حاملان بار الکتریکی در نظر می‌گرفتیم، اما آزمایش‌های دقیق‌تر نشان می‌دهد ذراتی با بار مثبت و هم‌جرم الکترون نیز در رسانایی الکتریکی نیمه‌رساناها نقش دارند.

این اتفاق با استفاده از نظریه‌ی نواری این چنین توجیه می‌شود؛ در نیمه‌رسانا علاوه بر الکترون‌هایی که در نوار رسانش قرار می‌گیرند و در رسانایی الکتریکی نقش دارند، جای خالی ایجاد شده در نوار ظرفیت نیز (که به دلیل گذار الکترون‌ها به نوار رسانش تشکیل شده)، موجب رسانایی الکتریکی می‌شود.

با گذار الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش، تعدادی جای خالی الکترون در نوار ظرفیت ایجاد می‌شود. جای خالی الکترون در نوار ظرفیت را حفره می‌گوییم. حالا با ایجاد این جاهای خالی در نوار ظرفیت، الکترون‌های این نوار هم می‌توانند گذار انجام دهند و از تراز انرژی پایین‌تر به تراز انرژی بالاتر بروند. این مسئله موجب رسانایی الکتریکی می‌شود.

گذار الکترون از تراز اولیه‌ی خود به تراز خالی، مشابه آن است که بگوییم حفره از تراز بالاتر به تراز اولیه‌ی الکترون گذار کرده است. بنابراین به جای آن که بگوییم الکترون درون نوار ظرفیت گذار کرده است، می‌گوییم حفره تراز خود را تغییر داده است. در واقع زیاد بودن تعداد الکترون‌ها، بررسی گذار آن‌ها را دشوار می‌کند؛ اما چون تعداد حفره‌ها کم است، در نظر گرفتن آن‌ها ساده‌تر است. نکته دیگری که باید به آن اشاره کرد، نحوه تعیین بار حفره‌های نوار ظرفیت است. از آنجاییکه حفره‌ها، برخلاف الکترون‌ها، از تراز بالاتر به تراز پایین‌تر گذار می‌کنند؛ قرارداد می‌کنیم که بار آنها را مثبت در نظر بگیریم [13 و 17].

پس در نیمه‌رسانا دو نوع حامل بار الکتریکی داریم؛ یکی الکترون‌های نوار رسانش و دیگری حفره‌های نوار ظرفیت.