بسم الله الرحمن الرحيم

١٤٤٣/٢

دانشگاه شهید بهشتی

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان‌نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته فیزیک ماده چگال

عنوان :

بررسی اثر گان در نیم‌رساناهای دو لایه‌ای

استاد راهنما:

دکتر فرشاد ابراهیمی

استاد مشاور:

دکتر ماهیار نوشیروانی

دانشجو:

حدیثه صفدری

سال تحصیلی ۸۹-۸۸

۱۳۸۹/۷/۲۴

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
قسمت مدارک

۱۴۲۳۰۲

تاریخ .....
شماره .....
پیوست.....

دانشگاه شهید بهشتی

بسمه تعالی

«صورتجلسه دفاع پایان نامه دانشجویان دوره کارشناسی ارشد»

تهران ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳ اوین
تلفن: ۲۹۹۰۱

بازگشت به مجوز دفاع شماره۱۶۲۲/ ۲۰۰ / ۷ مورخ ۸۹/۴/۲۲ جلسه هیأت داوران ارزیابی پایان نامه خانم حدیثه صفدری به شماره شناسنامه ۱۶۲۹ صادره از تربت حیدریه متولد ۱۳۶۴ دانشجوی دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته فیزیک – حالت جامد

با عنوان :

بررسی اثر گان در نیم رساناهای دو لایه ای

به راهنمائی:

آقای دکتر فرشاد ابراهیمی

طبق دعوت قبلی در تاریخ۳ /۵/ ۸۹ تشکیل گردید و براساس رأی هیأت داوری و با عنایت به ماده ۲۰ آئین نامه کارشناسی ارشد مورخ ۷۵/۱۰/۲۵ پایان نامه مزبور با نمره ۱۸ درجه عالی مورد تصویب قرار گرفت.

۱ -استاد راهنما : آقای دکترفرشاد ابراهیمی

۲ استاد مشاور : آقای دکتر ماهیار نوشیروانی

۳- استاد داور : آقای دکترسید ادریس فیض آبادی

۴-استاد داور و نماینده تحصیلات تکمیلی: خانم دکتر ترانه وظیفه شناس

تقدیم به

آنانی که چون چراغی روشن بر صحنه زندگیم نور تاباندند و روشنای زندگی ام بودند

کسانیکه سیمرغ وار بال و پر گشودند و با دستانی مهربان نوازشگر روزهای جاهلی ام بودند

آنان که گاه با لبخند و گاه با نگاه ملامت امیز درس درست زیستن به من اموختند

زبان واندیشه ام هرگز توانایی آن را ندارد که عظمت و رحمت

شما خوبان را در قالب کلماتی برایتان بیان نمایم و تنها میتوانم بگویم که باز

تشنه محبت تان، هستم

شما ید که قلبی به پاکی و زلالی چشمه ساران دارید و بر دیدگانتان نقشی از رحمت الهی نقش بسته است

آغاز گران اندیشه ام

مادر و پدرم

تقدیر و تشکر

امروز سپاسگذارم از خدا به خاطر همه خوبی ها و اینکه هرگز تنهایم نمی گذارد،

و از پدر و مادرم که دستانشان به سخاوت بهار است،

و نیز از استاد محترم جناب آقای دکتر فرشاد ابراهیمی به خاطر زحمات بیشائبه ایشان نهایت تقدیر و تشکر را دارم. دستان نیازمند خویش را بر آسمان نیلوفرین یگانه شاهد شریف آفرینش می گشایم و آرزومند سلامتی و وجود سبزشان، هستم.

تشکر فراوان از آقای دکتر بابک نوشیروانی،

سپاس ویژه از دوست بسیار گرامی و گرانسنگ خانم طاهره پروینی که مساعدت های بی دریغش هرگز فراموشم نخواهد شد،

و امتنان بسیار از تمامی دوستان مهربانم که بدون یاری شان پیمودن این راه میسرم نبود،

به ویژه سمیه های عزیز، مطهره و زینب.

چکیده

در این پایان‌نامه دینامیک غیرخطی وابسته به فضا و زمان چگالی حامل‌ها در دایودهای دولایه‌ای گان در حضور یونش برخوردی و بازترکیب الکترون‌ها و حفره‌ها به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفته است. بدین منظور حل معادلات پیوستگی چگالی جریان الکترون‌ها و حفره‌ها در هر یک از لایه‌ها و نیز معادله‌ی پوآسون در تقریب ناپایداری‌های خطی انجام شده است. از حل معادله دیفرانسیل مربوط به تابع گرین برای بدست آوردن میدان‌الکتریکی در فضا استفاده شده است. قطعه‌ی مورد نظر، نیم-رسانایی متشکل از دولایه‌ی جفت شده ازInSb است که در فاصله‌ای از مرتبه نانومتر از یکدیگر قرار گرفته‌اند. شروع و رشد ناپایداری‌ها در نمونه توسط نمودارهای پاشندگی چگالی بار نمایش داده شده اند.

کلید واژه ها: دیود گان، دینامیک وابسته به فضا و زمان، معادله پیوستگی، معادله پوآسون.

فهرست مطالب

مقدمه ۱

فصل یکم فیزیک نیم‌رساناها ۴

۱-۱ساختار بلورها ۵

۱-۲ نوارهای انرژی ۸

۱-۳ تابع چگالی حالت ۱۰

۱-۴ بحث آماری ۱۲

۱-۴-۱ غلظت حامل ها و سطح فرمی ۱۳

۱-۵ انتقال حامل ها ۱۷

۱-۵-۱ جریان ۱۷

۱-۵-۲ معادله ی پیوستگی ۲۰

فصل دوم الکترونیک اثر گان ۲۲

۲-۱ اثر انتقال الکترون ۲۳

۲-۱-۱ فرآیندهای پراکندگی و توزیع الکترون ۲۴

۲-۱-۲ نمودار مشخصه سرعت سوق – میدان ۳۲

۲-۲ حوزه بار- فضای دو قطبی ۳۷

۲-۲-۱ تشکیل و رشد اولیه بار –فضا ۴۱

۲-۲-۲ نمونه ایده آل ۴۱

۲-۲-۳ نمونه های عملی ۴۳

۲-۳ دینامیک حوزه‌ی دوقطبی ۴۴

۲-۳-۱. توصیف کلی ۴۴

۲-۳-۲. معادلات مقدماتی ۴۵

۲-۳-۳. شکل حوزه های پایدار ۴۶

۲-۳-۴. دینامیک حوزه‌های مثلثی شکل ۴۹
۲-۳-۴-الف. فرمول‌بندی ریاضی کلی ۴۹
۲-۳-۵ انتشار حوزه پایا ۵۴
فصل سوم مدل سازی بررسی اثر گان در دو لایه ۵۸
۳-۱ مدل سازی بررسی اثر گان در دو لایه ۵۹
۳-۲ تحلیل خطی ۶۵
۳-۲-۱ تحلیل خطی بدون در نظر گرفتن حفره ۶۵
۳-۲-۲ تحلیل خطی با در نظر گرفتن حفره ۸۰
نتیجه گیری ۹۸
منابع و مواخذ ۹۹

فهرست تصویرها

تصویر۱-۱ ..... ۶

تصویر۱-۲ ..... ۷

تصویر۲-۱ ..... ۲۴

تصویر۲-۲ ..... ۲۶

تصویر۲-۳ ..... ۳۰

تصویر۲-۴ ..... ۳۲

تصویر۲-۵ ..... ۳۳

تصویر۲-۶ ..... ۳۵

تصویر۲-۷ ..... ۳۶

تصویر۲-۸ ..... ۳۸

تصویر۲-۹ ..... ۴۰

تصویر۲-۱۰ ..... ۴۸

تصویر۲-۱۱ ..... ۵۲

تصویر۲-۱۲ ..... ۵۴

تصویر۲-۱۳ ..... ۵۵

تصویر۲-۱۴ ..... ۵۶

تصویر۲-۱۵ ..... ۵۷

تصویر۳-۱ ..... ۷۳

تصویر۳-۲ ..... ۷۴

تصویر۳-۳ ..... ۷۵

تصویر۳-۴ ..... ۷۶

تصویر۳-۵ ..... ۷۷

تصویر۳-۶ ..... ۷۸
تصویر۳-۷ ..... ۷۹
تصویر۳-۸ ..... ۹۲
تصویر۳-۹ ..... ۹۲
تصویر۳-۱۰ ..... ۹۴
تصویر۳-۱۱ ..... ۹۴
تصویر۳-۱۲ ..... ۹۵
تصویر۳-۱۳ ..... ۹۵
تصویر۳-۱۴ ..... ۹۶
تصویر۳-۱۵ ..... ۹۷

مقدمه

چندین نوع از دیودهای فعال دارای دو پایانه هستند که قابلیت نوسان‌سازی و نیز تقویت بهره در فرکانس‌های میکروموج و امواج میلی‌متری را دارند. هرچند که این قطعات می‌توانند از طیف وسیعی از مواد نیم‌رسانا ساخته شوند عموماGaAs و InP مورد استفاده قرار می‌گیرند. رایج‌ترین دیودهای فعال عبارتند از دیودهای گان، TUNNEL ، IMPATT، TRAPATT وBARITT . این قطعات به این علت که سرعت اشباع یک الکترون، یعنی بیشینه سرعت الکترون‌ها در یک میدان‌الکتریکی بسیار قوی، درون نیم-رسانا بالا است، دارای قابلیت فرکانس‌های بالا هستند. همچنین زمان گذار، زمان مورد نیاز الکترون‌ها برای پیمودن طول نمونه، در این دیودها کوچک است چراکه طول ناحیه‌ی حرکت الکترون را می‌توان در حدود یک میکرومتر یا کمتر ساخت. توانایی ساخت قطعاتی دارای لایه‌هایی با ضخامتی در این مقیاس، عملکرد آن‌ها در فرکانس‌هایی دقیقا در طیف امواج میلی‌متری را تسهیل می-کند. با استفاده از دیودهای IMPATT، فرکانس نوسانی از مرتبه‌ی۴۰۰GHz بدست آمده است و دیودهای گان نوسان‌هایی تا ۱۵۰GHz تولید کرده‌اند.

این قطعه‌ها از دهه‌ی شصت میلادی مورد استفاده قرار گرفته‌اند و در دسترس بودن آن‌ها امکان طراحی و ساخت گستره‌ی وسیعی از اجزای سیستم‌های الکترونیکی را فراهم آورده است.

چندین نمونه از دیودها دارای خاصیت رسانندگی منفی یا به عبارتی رفتار غیرخطی جریان بر حسب میدان‌الکتریکی هستند؛ این قطعه‌ها در دو گروه طبقه‌بندی می‌شوند: گروهی که عملکرد آن‌ها بر اساس " اثر انتقال الکترون " (TED) است نظیر دیودهای گان، و قطعه‌هایی که بر اساس "اثر زمان گذار" (TTE) عمل می‌کنند مانند دیودهای IMPATT،TRAPATTوBARITT . ذیود-های TUNELL به هیچ یک از این دودسته تعلق ندارند؛ با این وجود خاصیت رسانندگی منفی از خود نشان می‌دهند.

از این میان ما به بررسی دیودهای گان علاقه‌مندیم که از پرتوان‌ترین قطعه‌های میکروموج است که طیف فرکانسی ۱-۱۰۰GHz دارد. این دیود اساسا جهت تولید و تقویت توان میکروموج بکار می‌رود قطعه‌ی مذکور دارای رسانندگی جزئی منفی است که ولتاژ ثابت کنترل شده‌ای به آن اعمال می‌شود، اما خاصیت منحصر به فرد آن‌ها در این است که کارکرد آن‌ها به خواص ماده‌ی حجیم بستگی دارد نه به سطوح یا اتصال‌ها.

دیود گان الزاما از نیم‌رسانای نوع-n ساخته می‌شود به این علت که اثر انتقال الکترون در مورد الکترون‌ها بکارمی‌رود. ماده‌ی فعال باید شدیدا یکنواخت بوده و کیفیت بالایی داشته باشد.

در برخی نیم‌رساناهای خاص نوار رسانش علاوه بر کمینه‌ی مرکزی کمینه‌های چندگانه‌ای موسوم به ستلایت دارد. الکترون‌ها در میدان‌های الکتریکی بزرگ می‌توانند به اندازه‌ی کافی انرژی کسب کرده و به کمینه‌ی ستلایت وارد شوند. اگر حامل‌ها در این کمینه‌ها دارای تحرک‌پذیری کمتر و سرعت اشباع باشند رابطه‌ی جالبی میان سرعت حامل‌ها و میدان‌الکتریکی حاصل می‌شود که منجر به رسانندگی جزنی منفی خواهد شد.

وقتی دیود گان در ناحیه‌ی رسانندگی منفی قرار می‌گیرد، توزیع بار-فضا و میدان‌الکتریکی از درون ناپایدار می‌شود، این یک خاصیت منحصر به فرد قطعه‌هایی با عملکرد بر اساس انتقال الکترون است چراکه سایر قطعه‌های دارای رسانندگی منفی به‌صورت خارجی ناپایدار می‌شوند. این ناپایداری در دیود گان با یک حوزه‌ی دو قطبی شامل الکترون‌های اضافی شروع می‌شود. این دو قطبی بار-فضا میدانی بزرگ‌تر را برای الکترون‌ها در این ناحیه فراهم می‌آورد. به‌دلیل رسانندگی منفی دو قطبی شروع به رشد کرده و میدان ناحیه‌ی مربوط به آن نیز رشد می‌کند؛ این رشد موجب کاهش میدان در نقاط خارج از این ناحیه می‌گردد. در هر زمان معین تنها یک حوزه می‌تواند شکل گیرد و به این سبب میدان بالایی مورد نیاز است.

رسانندگی منفی در GaAs و سایر نیم‌رساناهای مرکب برای تولید یا تقویت سیگنال‌های میکروموج بکار می‌رود. قطعاتی با طول کوتاه و آلایش نسبتا کم به عنوان تقویت کننده‌ی میکروموج و نمونه‌هایی با آلایش بالا و طول بلند معمولا به عنوان نوسان-سازهایی با عملکرد در فرکانس میکروموج استفاده می‌شوند.

برای داشتن یک اثر انتقال الکترون موثر گاف انرژی باید از تفاوت میان انرژی کمینه‌های ستلایت و مرکزی بزرگ‌تر باشد تا از پدیده شکست جلوگیری به عمل آید. اما در بعضی از نیم‌رساناها نظیر InSb که در این پروژه بررسی می‌شود گاف انرژی کوچکتر است؛ بنابراین امکان یونش برخوردی و بازترکیب الکترون‌ها و حفره‌ها وجود دارد. علی‌رغم وجود خاصیت رسانندگی منفی در این نوع از نیم‌رساناها، در شرایط معمولی به علت افزایش سریع جمعیت الکترون‌ها و حفره‌ها، اثر گان مشاهده نمی‌شود؛ به عنوان مثال نیاز به اعمال فشار هیدروستاتیکی است تا اثر یونش برخوردی را کاهش دهد و اثر گان رویت شود.

بررسی‌های انجام شده در این پروژه برروی قطعه نیم‌رسانای دولایه‌ای متشکل از دو لایه‌ی InSb است که در فاصله‌ی نانومتری از یکدیگر قرار گرفته‌اند. در انجام محاسبات در فصل سوم، ابتدا از حضور حفره‌ها صرف‌نظر کردیم و معادلات حاکم بر این اثر یعنی

معادلات پیوستگی چگالی جریان و پوآسون حل شدند تا ناپایداری بار-فضای تولید شده مورد تحلیل قرار گیرند؛ دیده می‌شود که این ناپایداری‌ها با افزایش میدان رشد می‌کنند و این ناشی از افزایش حرکت الکترون‌ها به سمت کمینه‌های ستلایت است. در ادامه با وارد کردن حفره‌ها، یونش برخوردی و بازترکیب را نیز خواهیم داشت. بنابراین معادلات پیوستگی برای حفره‌ها را به همراه معادلات مربوط به الکترون‌ها و معادله‌ی پوآسون حل کردیم و مشاهده شد که ناپایداری‌ها رشد بیشتری داشته و این به علت افزایش در جمعیت الکترون‌ها و حفره‌ها است. بررسی‌ها برای حدی که دو لایه در فاصله‌ی بی‌نهایت از یکدیگر قرار گرفته‌اند نیز انجام شد. نتایج نشان می‌دهند که رشد بار-فضا در حالت دو لایه افزایش یافته است.

فصل یکم :

فیزیک نیم‌رساناها

۱-۱ساختار بلورها

یک بلور توسط جایگاه‌های گسسته‌ی دوره‌ای دارای نظم ساختاری و جهت‌گیری یکسان برای اتم‌ها مشخص می‌شود. کوچکترین ساختار اتم‌ها که می‌تواند با تکرار خود تمام فضای بلور را بدون همپوشانی اشغال کند یاخته‌ی بسیط نام دارد و دارای ابعاد ثابت شبکه می‌باشد. تصویر۱-۱ چند یاخته‌ی بسیط مهم را نشان می‌دهد[٥٤].

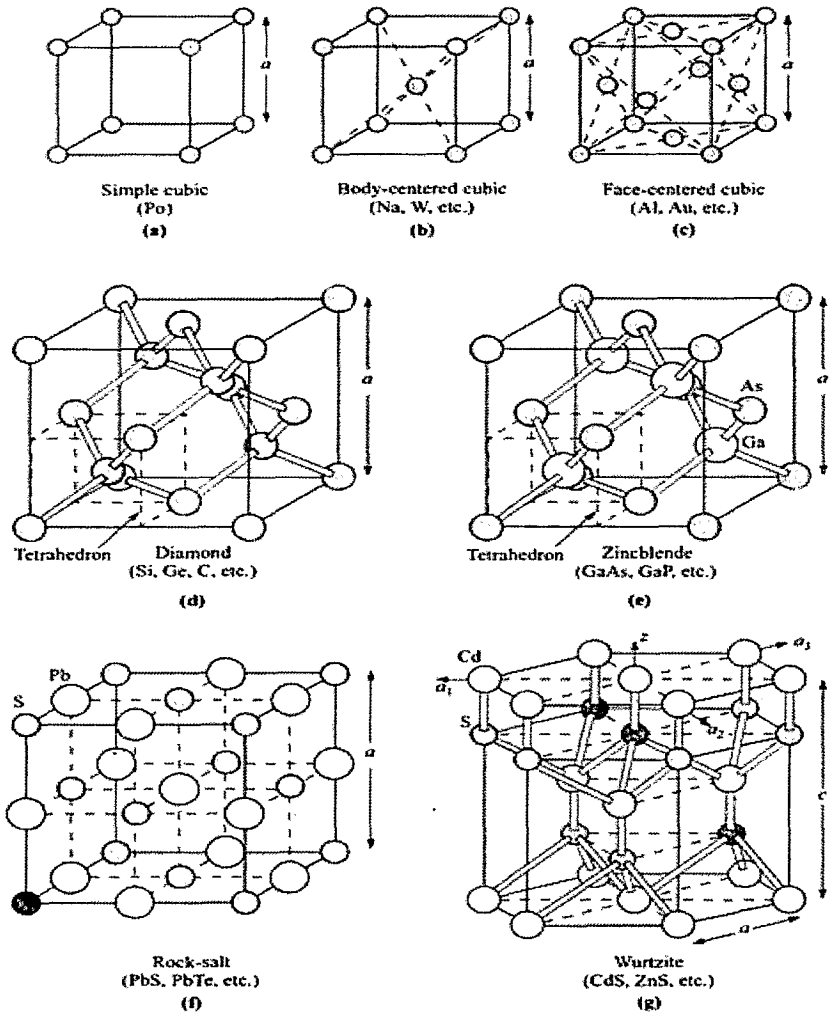
بسیاری از نیم‌رساناهای مهم دارای ساختار شبکه‌ی الماسی یا زینک‌بلند[۱] هستند که این ساختارها متعلقند به چهاروجهی‌ها[۲]. در این شبکه‌ها هر اتم دارای چهار نزدیک‌ترین همسایه است. پیوند میان هر دو نزدیک‌ترین همسایه توسط الکترون‌هایی با اسپین مخالف برقرار می‌شود. شبکه‌های زینک بلند و الماسی را می‌توان به‌صورت دو شبکه‌ی درهم فرورفته با ساختار مرکز سطحی در نظرگرفت. در ساختار شبکه‌ی الماسی نظیر سیلیکون همه‌ی اتم‌ها یکسان‌اند در حالیکه در ساختار زینک‌بلند مانند گالیم‌آرسنایدیکی از زیرشبکه‌ها از اتم‌های گالیم و دیگری متشکل از اتم‌های آرسنایدند(تصویر۱e-۱). GaAs یک ترکیب از عناصر گروه-های $III-V$است. اکثر ترکیب‌های $III-V$ ساختار زینک‌بلند دارند اما بعضی از ترکیب‌ها(حتی از گروه‌های $III-V$) با ساختار شش گوشه‌ای سولفید روی یا نمک‌سنگی مشخص می‌شوند. تصویر۱f-۱ شبکه‌ی نمک‌سنگی را نشان می‌دهد که در واقع دو شبکه‌ی مرکز سطحی هستند که در یکدیگر فرورفته‌اند. تصویر۱g-۱ساختار سولفید روی را نشان می‌دهد که تشکیل شده است از

---

[۱] (Zincblende)

[۲] (Tetrahedral)

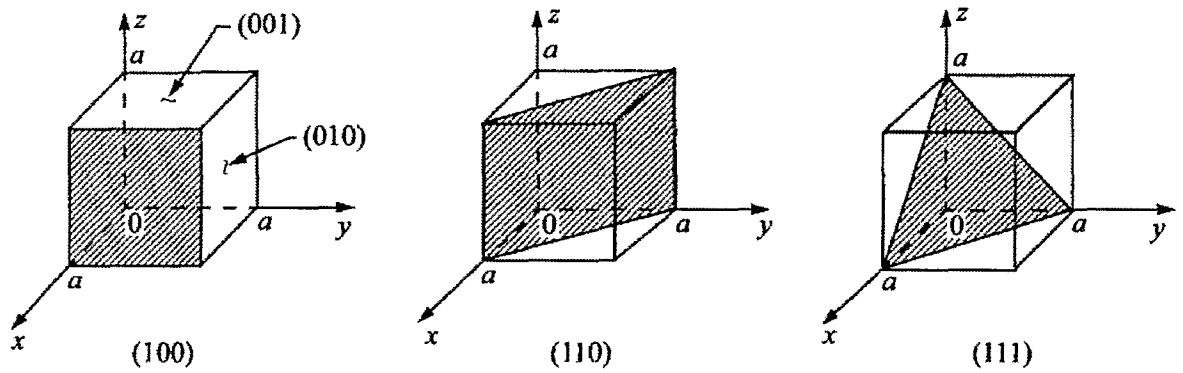
دو شبکه‌ی تنگ پکیده‌ی شش گوشی[1] (برای مثال زیر شبکه‌ها دارای اتم‌های کادمیم و سولفور هستند.). در این تصویر برای هر زیرشبکه S و Cd دو صفحه‌ی مربوط به لایه‌های مجاور به‌صورت افقی جابجا شده‌اند چنان‌که فاصله‌ی میان این دو صفحه حداقل مقدار ممکن است(به‌ازای فاصله‌ی ثابت بین مرکز دو اتم)؛ به این جهت است که تنگ پکیده نام گرفته است. ساختار سولفید روی نظیر ساختار زینک‌بلند دارای آرایش چهاروجهی برای چهار نزدیک‌ترین همسایه‌اش است.



[1] (hexagonal close-packed lattices)

تصویر۱-۱. چند نمونه از یاخته‌های بسیط مهم و عناصر آن‌ها[۵۴] .

به این دلیل که قطعه‌های نیم‌رسانا در نزدیکی یا بر روی سطح نیم‌رسانا ساخته می‌شوند، جهت‌گیری و ویژگی‌های صفحات بلوری سطح بسیار حائز اهمیت اند. یک شیوه‌ی متداول برای تعریف صفحات در یک بلور، شاخص میلر[۱] است. به منظور تعریف این صفحات ابتدا باید محل تقاطع هر صفحه را با سه محور اصلی بر حسب ثابت‌های شبکه پیدا کرد. سپس این اعداد را معکوس کرده و آن‌ها را به سمت عدد صحیح کوچک‌تری که نسبت آن‌ها را بیان می‌دارد تقریب زد. تصویر۱-۲ شاخص‌های میلر را برای صفحات مهم در بلورهای مکعبی نشان می‌دهد.



تصویر ۱-۲. شاخص‌های میلر مربوط به چند نمونه از صفحات مهم در شبکه‌ی مکعبی[۵۴].

سه بردار پایه‌ی بسیط[۲] a,b,c مربوط به یک یاخته‌ی بسیط، یک بلور جامد را توصیف می‌کنند؛ چنانکه ساختار شبکه تحت انتقال توسط هر برداری که مجموع مضارب صحیحی از این بردارهای پایه است، ناوردا خواهد بود. به عبارتی دیگر نقاط شبکه‌ی مستقیم توسط رابطه‌ی زیر داده می‌شوند:

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c} \qquad (۱-۱)$$

[۱] (Miller index)

[۲] (Primitive basis vectors)

m, n, p اعداد صحیح هستند.

به‌ازای هر مجموعه از بردارهای بسیط شبکه مستقیم، می‌توان یک مجموعه از بردارهای بسیط در شبکه وارون تعریف کرد.

$$\vec{a}^{*} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a}.(\vec{b} \times \vec{c})} \qquad \vec{b}^{*} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a}.(\vec{b} \times \vec{c})} \qquad \vec{c}^{*} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a}.(\vec{b} \times \vec{c})}$$

بردار شبکه وارون را در حالت کلی می‌توان این‌گونه نوشت:

$$\vec{G} = h\vec{a}^{*} + k\vec{b}^{*} + l\vec{c}^{*} \qquad (۲-۱)$$

که h ، k و l اعداد صحیح هستند.

۱-۲ نوارهای انرژی

رابطه‌ی انرژی-تکانه، $E-k$، برای حامل‌ها در شبکه بسیار مهم است، به عنوان مثال در برهمکنش آن‌ها با فوتون‌ها یا فونون‌ها که انرژی باید پایسته بماند و یا در برهمکنش الکترون‌ها و حفره‌ها با یکدیگر که منجر به تشکیل نوارهای ممنوعه می‌شود از اهمیت بالایی برخوردارند.

ساختار نواری بلورهای جامد یعنی رابطه‌ی $E-k$ انرژی-تکانه عموما با حل معادله‌ی شرودینگر حاصل می‌شود.

$$[-\frac{\hbar^2}{2m^{*}}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})]\psi(\vec{r},\vec{k}) = E(\vec{k})\psi(\vec{r},\vec{k}) \qquad (۳-۱)$$

قضیه‌ی بلاخ که یکی از مهمترین تئوری‌ها در مورد ساختار نواری است، بیان می‌دارد که اگر انرژی پتانسیل، $V(\vec{r})$،در فضای شبکه‌ی مستقیم تناوبی باشد، آنگاه پاسخ‌های تابع موج برای معادله‌ی شرودینگر باید از نوع توابع موج بلاخ باشند:

$$\psi(\vec{r},\vec{k}) = \exp(i\vec{k}.\vec{r})U_b(\vec{r},\vec{k}) \qquad (۴-۱)$$

b شاخص نوار است و $U_b(\vec{r},\vec{k})$ و $\psi(\vec{r},\vec{k})$ توابعی با دوره‌ی شبکه‌ی مستقیم, R ,هستند؛ بدین‌منظور $k.R$ باید مضرب صحیحی از 2π باشد. با استفاده از قضیه بلاخ می‌توان نشان داد که $E(k)$ در فضای شبکه وارون تناوبی است یعنی $E(k) = E(k+G)$ که G بردار بسیط شبکه وارون است.

به‌منظور مشخص کردن انرژی‌های یک نوار معین بصورت منحصر به فرد کافی است که تنها kهای موجود در یاخته‌ی بسیط شبکه وارون را در نظر بگیریم. شیوه‌ی متداول این است که از یاخته‌ی ویگنر سایتس در شبکه وارون استفاده شود. این یاخته منطقه بریلوئن یا منطقه اول بریلوئن نام دارد. واضح است که می‌توانیم هر بردار تکانه، k، در فضای وارون را با یک بردار انتقال شبکه وارون وارد منطقه اول بریلوئن کرد؛ جاییکه هر حالت انرژی را می‌توان با یک شاخص در نمایشی موسوم به منطقه‌ای کاهش یافته مشخص کرد.

ساختار نواری جامدها به‌صورت نظری توسط روش‌های مختلفی مطالعه شده‌اند. در مورد نیم‌رساناها سه روش به‌صورت متداول-تر بکار می‌روند که عبارتند از: روش موج تخت متعامد، opw، شبه پتانسیل و روش $k.p$. برای هر نیم‌رسانا طیفی از انرژی وجود دارد که حضور حالت‌های انرژی مجاز در آن‌ها امکان‌پذیر نمی‌باشد و نواحی انرژی مجاز پایین‌تر و بالاتر از این نواحی قرار دارند؛ نوارهای بالایی رسانش و نوارهای پایینی نوار ظرفیت هستند. فاصله‌ی بین پایین‌ترین نوار رسانش و بالاترین نوار ظرفیت را با عنوان نوار انرژی ممنوعه یا گاف انرژی می‌شناسیم E_g، که یکی از مهمترین کمیت‌ها در فیزیک نیم‌رساناها است. نتایج تجربی نشان می-دهند که گاف انرژی اکثر قطعه‌های نیم‌رسانا با افزایش دما کاهش می‌یابند و تغییرات این گاف انرژی نسبت به دما را می‌توان با تقریب زیر بیان کرد[۵۳]:

$$E_g(T) \approx E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta} \qquad (۵-۱)$$

که α و β ثابت‌هایی هستند که برای هر ماده معین هستند.

۱-۳ تابع چگالی حالت مدل گاز الکترونی آزاد

یکی از مهمترین مفاهیم در نیم‌رساناها که در این‌جا نیز علاقه‌مند به بحث در مورد آن هستیم، نمودار مشخصه‌ی جریان-ولتاژ است. از آن‌جایی که جریان حاصل از شارش بار است، یکی از گام‌های اساسی در تعیین این رابطه مشخص کردن تعداد الکترون‌ها و حفره‌های قابل دسترس یک نیم‌رسانا در فرآیند رسانش است.

طبق اصل پائولی تنها یک الکترون می‌تواند در یک حالت کوانتومی قرار گیرد؛ از این‌رو تعداد حامل‌هایی که می‌توانند در فرآیند رسانش شرکت کنند تابعی از تعداد حالت‌های کوانتومی در یک نوار مجاز انرژی است. ترازهای انرژی مجاز گسسته هستند و برای داشتن غلظت الکترون‌ها و حفره‌ها باید تعداد این حالت‌های مجاز را بصورت تابعی از انرژی بیابیم؛ بدین‌منظور نیازمند یک مدل-سازی ریاضی مناسب هستیم. خواص الکترونیکی نیم‌رساناها اساسا توسط تعداد الکترون‌های برانگیخته شده در نوار رسانش و حفره‌های بجای مانده در نوار ظرفیت مشخص می‌شوند. اغلب الکترون‌ها در ترازهای نزدیک کمینه‌ی نوار رسانش یافت می‌شوند درحالیکه حفره‌ها مقید به بیشینه‌ی نوار ظرفیت هستند. ازاین‌رو رابطه‌ی انرژی بر حسب بردار موج را می‌توان عموما به‌صورت چندجمله‌ای درجه‌ی دو تقریب زد که به ترتیب برای الکترون‌ها وحفره‌ها داریم:

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2}\sum_{\mu\upsilon} k_\mu (M^{-1})_{\mu\upsilon} k_\upsilon \qquad (۱-۶\text{-الف})$$

$$E(\vec{k}) = E_v - \frac{\hbar^2}{2}\sum_{\mu\upsilon} k_\mu (M^{-1})_{\mu\upsilon} k_\upsilon \qquad (۱-۶\text{-ب})$$

E_c انرژی لبه‌ی پایینی نوار رسانش و E_v انرژی بالایی نوار ظرفیت است. در این‌جا مبداء فضای k را منطبق بر اکسترمم نوار در نظر می‌گیریم. اگر بیش از یک بیشینه یا کمینه وجود داشته باشد، برای هرکدام از این نقاط یک چنین جمله‌ای وارد می‌شود؛ از آن‌جا که M^{-1} حقیقی و متقارن است می‌توان یک مجموعه از محورهای اصلی و متعامد برای هر یک از این نقاط یافت که برحسب آن‌ها انرژی به‌صورت قطری باشد: