بسم الله الرحمن الرحیم

دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک
(گرایش حالت جامد)

افزایش بهره وری قطعات ترموالکتریک با استفاده از نانوساختارهای چاه کوانتومی

از:
هاجر زمینی

استاد راهنما:
دکتر حمید رحیم پور سلیمانی

استاد مشاور:
میثم باقری

بهمن۱۳۹۱

تقدیم به

همسرم

الگو و همراه همیشگی ام در کسب دانش،

و به مادر و پدرم

که تحسین آموزگارانم بوده اند.

تقدیر و تشکر

از پروردگار دانا سپاسگزارم که توفیق را رفیق راهم ساخت تا بتوانم تحصیلات خود را در این مقطع به پایان برسانم.

از استاد راهنمای گرامی، آقای دکتر حمید رحیم پور، به پاس آموزش های دقیق و نظرات ارزشمند ایشان، کمال تشکر و امتنان را دارم.

از اساتید مشاور گرامی، آقای میثم باقری و خانم سحر ایزدی، که وقت و اطلاعات گران بهای خود را در اختیارم قرار دادند، بسیار سپاسگزارم.

از همسر گرامی ام، سینا آریامنش، به پاس راهنمایی های سودمند، خصوصا در امر تدوین پایان نامه، بسیار ممنونم.

سپاس فراوان از اساتید داور گرامی، آقای دکتر سید محمد روضاتی و آقای دکتر حنیف هادی پور، که داوری این پایان نامه را پذیرفتند.

از حضور آقای دکتر سعید مهدوی فر، نماینده تحصیلات تکمیلی، در جلسه دفاع سپاسگزارم.

در انتها، از دوستان عزیزم که در مراحل تحصیل از مشورت با ایشان بهره بردم، متشکرم.

چکیده

افزایش بهره وری قطعات ترموالکتریک با استفاده از نانوساختارهای چاه کوانتومی

در این پایان نامه، کارایی تبدیل توان گرمایی به توان الکتریکی یا کمیت شایستگی (ZT) در نانو ساختارهای دو بعدی مورد مطالعه قرار گرفته است. در صورتی که بتوان به کمیت شایستگی بالایی دست یافت، ماده ای وجود خواهد داشت که بوسیله ی آن می توان گرما را به الکتریسیته تبدیل کرد، واضح است که به این ترتیب می توان از گرمای اتلافی به خوبی استفاده نمود. به این منظور، با حل معادله انتقال بولتزمن و تابع توزیع غیر تعادلی، ویژگی های ترموالکتریکی موثر بر کمیت شایستگی، مانند توان ترموالکتریکی (ضریب سی بک)، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی فونونی و رسانندگی گرمایی الکترونی محاسبه شده است. در تقریب زمان واهلش، با در نظر گرفتن زمان واهلش وابسته به انرژی به صورت $\tau = \tau_0 E^r$ ، ویژگی های ترموالکتریکی کادمیوم سولفید در حالات دو بعدی در حضور پراکندگی های ناشی از فونون آکوستیکی ، فونون اپتیکی و ناخالصی یونیزه به دست آمده است. در بررسی نتیجه، مشاهده گردید که کمیت شایستگی در پراکندگی ناخالصی یونیزه نسبت به پراکندگی های دیگر بیشتر است. علاوه برآن کمیت شایستگی بیسموت تلوراید با محاسبه ی نرخ پراکندگی فونونی با استفاده از قائده ی طلایی فرمی بدست آمده است. نتایج نشان می دهد که کمیت شایستگی در حضور پراکندگی ناشی از فونون اپتیکی غیر قطبیده با دما افزایش یافته و در دمای $300\,\mathrm{K}$ به حالت نهایی خود ، حدود۰/۹ رسیده، در حالی که در حضور پراکندگی ناشی از فونون آکوستیکی در همین دما، به مقدار قابل توجه۱/۲ می رسد.

واژه های کلیدی :
چاه کوانتومی، نانوساختار، معادله ی انتقال بولتزمن، تقریب زمان واهلش، کمیت شایستگی، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، ضریب سی بک.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده ی فارسی ..... د

چکیده ی انگلیسی..... ذ

فصل اول : مقدمه و مفاهیم پایه

۱-۱) مقدمه ۲

۱-۲) کمیت شایستگی ۳

۱-۳) مفاهیم پایه ۵

۱-۳-۱) نیمه رسانا ۵

۱-۳-۲) چند پیوندی ها ، چند ساختاری ها و تشکیل چاه کوانتومی ۹

فصل دوم : تابع توزیع غیر تعادلی و معادله ی انتقال بولتزمن

۲-۱) معادله ی بولتزمن ۱۴

۲-۱-۱) تابع توزیع غیر تعادلی ۱۴

۲-۱-۲) معادله ی بولتزمن برای الکترون ها ۱۶

۲-۱-۳) ترم برخوردی برای پراکندگی توسط نقایص شبکه ۱۹

۲-۱-۴) معادله بولتزمن برای فونون ها ۲۰

۲-۱-۵) سیستم جفت شده ی الکترون – فونون ۲۲

۲-۲) تقریب زمان واهلش ۲۵

۲-۲-۱) زمان واهلش ۲۵

۲-۲-۲) تابع توزیع (ناترازمند-غیرتعادلی) در تقریب زمان واهلش ۲۸

۲-۲-۳) ساده سازی تابع توزیع غیر تعادلی در موارد خاص.....۳۲

فصل سوم : فرآیندهای پراکندگی

۳-۱) پراکندگی فونون ۳۵

۳-۱-۱) پراکندگی فونون اکوستیکی ۳۶

۳-۱-۲) پراکندگی فونون اپتیکی غیر قطبیده ۴۲

۳-۲) پراکندگی در یک گاز الکترونی شبه دو بعدی ۴۵

۳-۲-۱) پراکندگی های آکوستیکی و اپتیکی غیر قطبیده در دو بعد ۴۵

فصل چهارم : پارامتر های ترموالکتریکی دو بعدی و کمیت شایستگی

۴-۱) پارامترهای ترموالکتریکی و کمیت شایستگی ۵۲

۴-۱-۱) انتقال به وسیله الکترون ۵۲

۴-۱-۲) رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی.....۵۷

۴-۱-۳) توان ترمو الکتریکی.....۶۰

۴-۲) شکل کلی پارامترهای ترموالکتریکی ۶۲

۴-۳) رسانندگی گرمایی فونونی.....۶۵

۴-۴) پارامترهای ترموالکتریکی و زمان واهلش وابسته به انرژی $\left(\tau = \tau_0 E^{r}\right)$.....۶۵

۴-۴-۱) حالات سه بعدی.....۶۵

۴-۴-۲) حالات دو بعدی.....۶۸

۴-۵) پارامترهای ترموالکتریکی و کمیت شایستگی برای ترکیبات $II - VI$ ۷۲

۴-۶) پارامترهای ترموالکتریکی مربوط به زمان واهلش دقیق حاصل از نرخ پراکندگی ۷۷

فصل پنجم : نتیجه گیری

۵-۱)خلاصه مطلب و نتیجه گیری.....۸۲

۵-۲) پیشنهاداتی برای کارهای آینده.....۸۳

مراجع.....۸۴
پیوست ۱.....۸۶
پیوست ۲.....۹۲
پیوست ۳.....۹۴
پیوست ۴.....۹۶

فهرست شکل ها

شکل۱-۱: طرحی از نوارهای انرژی.....۶

شکل۱-۲ : ساختار نواری جامدات.....۷

شکل۱-۳ : نیمه رساناها الف) با گاف مستقیم ب) با گاف غیر مستقیم.....۸

شکل۱-۴ : دو نیمه رسانای مختلف با گاف های نواری متفاوت به هم وصل شده اند و ساختار چندگانه تشکیل داده اند.....۹

شکل۱-۵ : پتانسیل یک بعدی $V(z)$ در نوار رسانش و ظرفیت که در یک ساختار چندگانه، بین دو ماده ی مختلف اتفاق می افتد.....۱۰

شکل۱-۶ : پتانسیل یک بعدی $V(z)$ در نوار های رسانش و ظرفیت برای یک تک چاه کوانتومی نوعی (چپ) و برای یک چاه کوانتومی پله ای(راست).....۱۰

شکل۱-۷ : پتانسیل های یک بعدی $V(z)$ در نوارهای رسانش و ظرفیت برای یک تک چاه کوانتومی نوع I در مقایسه با نوع II.....۱۱

شکل۲-۱: فرآیند واپاشی و ترکیب شامل سه فونون که تابع توزیع فونون با بردار موج q را تغییر می دهد.....۲۱

شکل۲-۲: فرآیندهای پراکندگی الکترون با جذب و گسیل فونون که تعداد الکترون ها با بردار موج $\vec{k}$ را افزایش یا کاهش می دهد.....۲۲

شکل۲-۳ : مسیرهای نیمه کلاسیکی الکترون ها ی رانده شده به یک همسایگی کوچک یک نقطه ی دلخواه در فضای فاز در زمان t.....۲۹

شکل۳-۱: مکانیسم پراکندگی در نیمه رساناها.....۳۵

شکل ۳-۲ : تغییرات نوار انرژی ناشی از تغییرشکل شبکه ی کریستال.....۳۷

شکل۳-۳: تعریف زاویه ی قطبی θ' بین $\vec{k}$ و $\vec{q}$ ، و θ بین $\vec{k}$ و $\vec{k}'$ ۳۹

شکل۳-۴: یک شکل از پراکنـــدگی فونون آکوســـتیکی $W\left(\vec{k}\right)$ به ازای انرژی الکترون E_k برای الکترون هایی در دره ی Γ از GaAs در $300K$ و $77K$.....۴۲

شکل۳-۵: نرخ پراکندگی فونون اپتیکی غیرقطبیده برای الکترون ها در GaAs کپه ای. اندازه گیری انرژی از کف دره ی Γ ۴۵

شکل۳-۶ : ترم $\left|G_{m,n}\left(q_z\right)\right|^2$برای چاه مربعی بی نهایت.....۴۹

شکل۳-۷ :طرحی ساده از چاه کوانتومی دو گانه $AlGaAs-GaAs$.....۵۰

شکل۳-۸: نرخ پراکندگی فونون آکوستیکی گاز الکترونی دو بعدی $AlGaAs-GaAs$.....۵۰

شکل۴-۱: طرح تابع توزیع نسبت به $\left(E-E_f\right)/kT$.....۵۳

شکل۴-۲: طرح نوار انرژی ساده.....۵۴

شکل۴-۳: چگالی حالات برای سه و دو بعد.....۵۵

شکل۴-۴: طرح نوار انرژی برای ۱) یک عایق ۲) یک نیمه رسانای ذاتی۳) یک نیمه رسانای نوع n ۴) یک نیمه رسانای نوع p ۵۶

شکل۴-۵: مدار برای اندازه گیری اختلاف ولتاژ های ترموالکتریکی ایجاد شده در دو فلز متفاوت که در هر یک، دمـــا از T_2 تا T_1 تغییر می کند.....۶۱

شکل۴- ۶: تغییرات رسانندگی الکنتریکی بر حسب انرژی فرمی کاهش یافته به ازای پارامترهای پراکندگی مختلف.....۶۹

شکل۴-۷: تغییرات رسانندگی گرمایی بر حسب انرژی فرمی کاهش یافته.....۷۰

شکل۴-۸: تغییرات توان ترمو الکتریکی به ازای پراکندگی های مختلف.....۷۱

شکل۴-۹: تغییرات ZT نسبت به انرژی فرمی کاهش یافته به ازای پراکندگی های مختلف.....۷۲

شکل۴-۱۰: رسانندگی بر حسب دما.....۷۴

شکل۴-۱۱: رسانندگی گرمایی برحسب دما.....۷۵

شکل۴-۱۲: توان گرمایی بر حسب دما.....۷۵

شکل۴-۱۳: کمیت شایستگی ZT برحسب دما.....۷۶

شکل۴-۱۴: تغییرات رسانندگی الکتریکی برای پراکندگی فونون آکوستیکی و پراکندگی فونون اپتیکی

برای ماده ی Bi_2Te_3 بر حسب دما.....۷۸

شکل۴-۱۵: تغییرات رسانندگی گرمایی بر حسب دما.....۷۹

شکل۴-۱۶: تغییرات توان ترموالکتریکی بر حسب دما.....۷۹

شکل۴-۱۷: تغییرات کمیت شایستگی بر حسب دما.....۸۰

فصل اول

مقدمه و مفاهیم پایه

۱-۱ مقدمه

در دهه های اخیر شاهد پیشرفت فیزیک حالت جامد به واسطه ی جایگزینی تدریجی بلورهای کپه ای با فیلم های نازک[1] و ساختارهای چندین لایه ای[2] بودیم. در این سیستم ها ، بیشتر خواص الکترونی به طور قابل توجهی متفاوت بوده و تعدادی خواص جدید به وجود می آیند، به این ترتیب که در ساختارهای کوانتومی نیمه رساناها، حرکت حامل ها شدیدا در راستای یکی از مختصات در یک محدوده بسیار کوچک و کمتر از چند هزار آنگستروم مقید می شود. اگر این پهنا قابل مقایسه با طول موج دوبروی حامل ها باشد، در این صورت یک نوع پدیده ی فیزیکی ظاهر می شود که اثر اندازه کوانتومی[3] نام دارد. این پدیده ها اکثر خواص الکترونیکی سیستم را به شدت تغییر داده و باعث ساخت وسایل الکترونیکی نوین شده اند[1].

فعالیت های تحقیقاتی جدی در ساختارهایی با ابعاد کاهش یافته صورت گرفته و جستجو برای توسعه ی مواد ترموالکتریکی از طریق بعضی ویژگی های این ساختارها مورد توجه قرار گرفته است. ساختارهایی که چنین شرایطی بر آن ها حاکم باشد، می توانند به صورت چاه کوانتومی [2-9]، سیم کوانتومی و نقطه ی کوانتومی ساخته شوند[10] ، که به ترتیب دارای محدودیت در یک، دو و سه بعد هستند. در این موارد، چگالی حالات الکترونی، تغییر یافته و تغییرات سهمی وار که در مواد کپه ای وجود دارد، مشاهده نمی شود[11].

مهم ترین تغییری که در خواص ساختارهای اندازه کوانتومی رخ می دهد این است که حامل ها در یک محدوده با اندازه ای از مرتبه ی طول موج دوبروی مقید می شوند. در این وضعیت قوانین مکانیک کوانتومی به کار آمده و موجب تغییر بیشتر مشخصه های اصلی سیستم الکترون - بیناب انرژی آن می شود. این مساله باعث عـــدم پیوستگی در امتداد راستای مختصـات مقید شده می شود. تحت تاثیر میدان های خارجی و پراکندگی ها (فونون ها ، ناخالصی ها و غیره) فقط دو مولفه از سه مولفه ی تکانه ی حامل ها می توانند تغییر کنند. در نتیجه، رفتار حامل ها شبیه رفتار یک گاز دو بعدی است، حتی اگر سیستم دارای گستردگی محدود در امتداد هر سه مختصات باشد.

---

[1] Thin films

[2] Multilayers

[3] Quantum size effect

ساختارهای گاز الکترون دو بعدی (چاه کوانتومی نیمه رسانا) دارای برخی خواص منحصر به فرد هستند که در سیستم هایی از الکترون ها و حفره های سه بعدی معمولی مشاهده نمی شود.

فیزیک سیستم های الکترونی دو بعدی به طور پیوسته پیشرفت سریع خود را ادامه می دهد و موقعیت پیشتازی خود را در فیزیک حالت جامد حفظ می کند و می توان مطمئن بود که پیشرفت سریع علوم آن را رد نخواهد کرد[1] .

۱-۲ کمیت شایستگی[1]

امروزه، مطالعه خصوصیات گرما الکتریکی نانو ساختارها[2] به موضوعی بسیار داغ و جذاب برای مهندسین و فیزیک دانان سرتاسر دنیا تبدیل شده است. دلیل این نکته افزایش قیمت حامل های انرژی و هچنین نیاز به استفاده فراوان انرژی در سطح جهان می باشد. به این دلیل، با توجه به اینکه استفاده وجایگزین کردن منابع تولید انرژی های نوین نیز به صورت کوتاه مدت امکان پذیر نمی باشد، نیاز به بهینه سازی تولید ومصرف انرژی بیشتر از هر زمان دیگر احساس می شود.

قطعات ترمو الکتریکی قادر به تبدیل مستقیم اختلاف دما به الکتریسیته می باشند و می توانند حجم بسیار زیاد انرژی گرمایی تلف شده در هنگام تولید یا مصرف انرژی را دوباره بازیابی کنند. از این رو، ساخت قطعات ترمو الکتریکی در ابعاد نانو بسیار مورد توجه قرار گرفته است و این امید وجود دارد که بتوان با استفاده ازنانو ساختارها کارایی پایین مواد ترموالکتریک را به نحو چشمگیری افزایش داد[12,13] .

در سال های ۱۹۰۹ و ۱۹۱۱، آلتنریچ[3] نظریه مربوط به مواد ترموالکتریک و کارایی آن ها را توضیح داد. او نشان داد که برای دستیابی به کارایی بهینه در مواد ترموالکتریک، لازم است ضریب سی بک[4] بزرگ و در مقابل، رسانش گرمایی ضعیف باشد تا گرما در اتصالات حفظ شود. بنابراین یک ماده در صورتی دارای خواص خوب تبدیل انرژی گرمایی به الکتریسته و یا ترموالکتریکی خواهد بود که دارای کمیت شایستگی ZT بالایی باشد[14]. این کمیت برابر است با:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_{ph} + \kappa_e} \qquad (۱.۱)$$

[1] Figure of merit

[2] Nano structure

[3] Altenkrich

[4] Seebeck coefficient

در این رابطه S توان توان ترموالکتریکی[1] (ضریب سی بک) (V/K) ، σ رسانندگی الکتریکی[2] $(1/\Omega m)$، κ_{ph} رسانندگی گرمایی فونونی[3] ، κ_e رسانندگی گرمایی الکترونی[4] (W/mK) و T دمای مطلق است. در این کار، بررسی خواص ترموالکتریک به حالت نیمه رساناها محدود شده است[6,15-19] .

کارایی کل ماده ترموالکتریکی تابع کارایی کارنو[5] (بیشینه کارایی ترمودینامیکی) و کمیت شایستگی است. و به صورت زیر تعریف می شود:

$$\eta = \eta_c \frac{\sqrt{1+ZT}-1}{\sqrt{1+ZT}+\frac{T_c}{T_h}}. \qquad (۱.۲)$$

در عمل افزایش توان ترموالکتریکی منجر به کاهش خود به خودی رسانندگی الکتریکی شده و همچنین افزایش در رسانندگی الکتریکی منجر به افزایش در سهم الکترونی در رسانندگی گرمایی خواهد شد. از این رو شاهد تغییر محسوسی در ZT خصوصا برای مواد در حالت کپه ای نخواهیم بود. در حالی که، برآورد های نظری و تجربی نشان می دهد که امکان افزایش این کارایی در ساختار دو بعدی، که دارای محدودیت کوانتومی می باشند، وجود دارد[20].

به عنوان یک مثال دو بعدی، یک چاه کوانتومی[6] از ماده ای مثل $GaAs$ که بین دو لایه از ماده ای با گاف انرژی عریض تر قرار دارد تشکیل می شود، حامل ها در این ساختار تنها در دو راستا آزادی حرکت داشته و در راستای z محدودند. با مطالعات انجام شده مشخص شده است که امکان افزایش کارایی تبدیل در چاه های کوانتومی به علت وجود محدودیت حامل ها در دو بعد وجود دارد[17].

[1] Thermopower

[2] Electrical conductivity

[3] Phonon thermal conductivity

[4] Electron thermal conductivity

[5] Carnot efficiency

[6] Quantum well

برای محاسبات فرض می شود که الکتـــرون در پایین ترین زیر نوار[1] چاه کوانتومی قرار دارد $(n=1)$ و تونل زنی وجود ندارد. می توان از پراکندگی خارجی حد فاصل لایه ها در فرا شبکه[2] چشمپوشی کرد که در اینصورت تحرک پذیری حامل ها در راستای موازی لایه بی تغییر می ماند[21]. با در نظر گرفتن مراحل فوق می توان اثر پراکندگی داخلی را برای ثابت های شبکه مختلف آزمود. با بررسی این پراکندگی در چاه کوانتومی که تاثیر مهمی بر κ_{ph} دارد می توان تغییرات کمیت شایستگی را مورد مطالعه قرار داد. در صورتی که بتوان با فرضیات مختلفی به کمیت شایستگی بالایی دست یافت، ماده ای خواهیم داشت که بوسیله ی آن می توان گرما را به خوبی به الکتریسیته تبدیل کرد، واضح است که به این ترتیب می توان از گرمای اتلافی به نحو احسن استفاده نمود.

برای بررسی پدیده انتقال در حالت های متفاوت روش های بسیار گسترده ای وجود دارد . در اینجا، بررسی محدود به معادله انتقال بولتزمن، در حالت های غیر تعادلی نیمه کلاسیکی می شود. می توان میدان الکتریکی را میدان یکنواخت ایستا در نظر گرفت و با اعمال گرادیان دما، تابع توزیع غیر تعادلی را به دست آورد. با قرار دادن این تابع در چگالی جریان و در نظر گرفتن تغییرات آنتروپی در ماده می توان چگالی جریان تعداد (مربوط به الکترون ها) و چگالی جریان گرما را محاسبه کرد و با استفاده از آن ها متغیرهای ترموالکتریکی را محاسبه نمود و تغییرات آن ها را در بهینه سازی ZT بررسی کرد.

۱-۳ مفاهیم پایه

۱-۳-۱ نیمه رسانا[3]

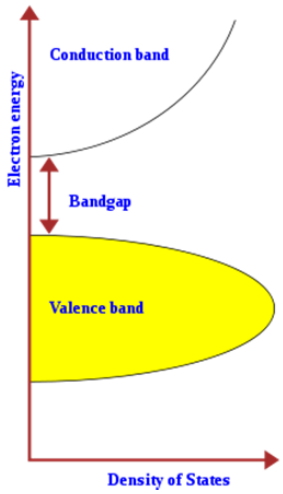
برای شناختن نیمه رسانا از دیگر مواد نیاز است که ساختار نواری آن ها بررسی شود که مفهومی مهم و دقیق است. در معرفی ساختار نواری می توان گفت که وقتی اتم های تشکیل دهنده ی ماده در کنار هم قرار می گیرند تا ملکول تشکیل دهند، اگر جداشدگی میان اتم ها بی نهایت باشد اتم ها مستقل از هم هستند و دارای ترازهای انرژی اتمی خواهند بود. اما اگر آن ها به هم نزدیک شوند، الکترون ها تحت تاثیر هسته ی مجاور و الکترون های همسایه قرار می گیرند. به تدریج با نزدیک شدن اتم ها ،

[1] Subband

[2] Super lattice

[3] Semiconductor

الکترون ها تاثیر بیشتری بر یکدیگر گذاشته و هر تراز اتمی به ترازهای ملکولی چندتایی شکافته می شود، این پدیده «پهن شدگی تراز » نام دارد. این ترازهای انرژی پیوسته، پهنای انرژی مشخصی داشته و به عنوان « نوار انرژی »[1] معروفند. هر نوار انرژی نیز توسط یک گاف نواری[2] از نوار انرژی همسایه اش جدا شده است؛ گاف نواری همان منطقه ای است که الکترون حق حضور در آن را ندارد.



شکل۱-۱: طرحی از نوارهای انرژی[22] .

پر شدن این نوارهای انرژی همان کلیدی است که رسانا، نیمه رسانا، یا نارسانا بودن ماده را تعیین می کند. اکنون که بحث بر سر الکترون هاست باید توجه شود که پر شدن نوارها بر اساس اصل طرد پائولی[3] صورت می گیرد. فرض می شود بلور در حالت پایه قرار داشته باشد و تحت تاثیر هیچ نوع پراکندگی نیز نباشد (دمای پایین). در این شرایط وقتی الکترون ها به طور کامل درون ترازها جای گرفته اند، بالاترین نوار انرژی که کاملا پرشده باشد، نوار ظرفیت[4] و نوار بعد از آن که انرژی بیشتری دارد و ممکن است خالی یا نیمه پر باشد، نوار رسانش[5] نام دارد.

---

[1] Energy band

[2] Band gap

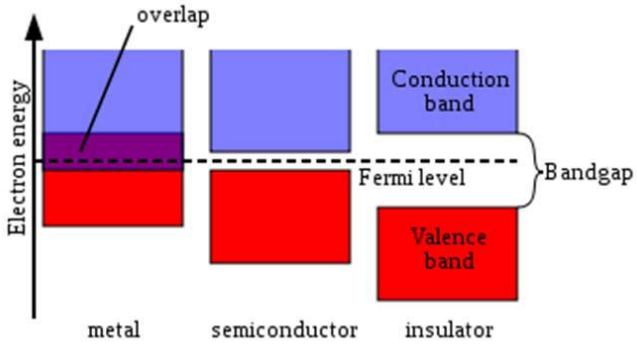
[3] Pauli exclusion principle

[4] Valence band

[5] Coduction band

اکنون می توان بلورها را دسته بندی کرد: اگر نوار رسانش، قسمتی پر و قسمتی خالی باشد، بلور یک فلز است و اگر نوار رسانش خالی باشد، نارسانا است. فلزات رساناهای الکتریکی خوبی هستند چون وقتی الکترون ها توسط میدان الکتریکی یا عوامل دیگر تحریک می شوند، به راحتی از حالت اشغال شده در نوار رسانش خارج شده و به حالات اشغال نشده در همان نوار می روند که چنین گذارهایی به گذارهای میان نواری[1] معروف اند.

در نارساناها اختلاف انرژی بین نوار ظرفیت و نوار رسانش بسیار زیاد است و عوامل تحریک قادر به تامین انرژی برای گذارهای بین نواری[2] نیستند و امکان گذارهای میان نواری هم وجود ندارد، چون هیچ حالت اشغال نشده ای در نوار ظرفیت وجود ندارد. از این رو نارساناها از هدایت الکتریکی خوبی برخوردار نیستند ودر صورتی که گاف بین نوارهای ظرفیت و رسانش حدود $1\ ev$ باشد، در اکثر موارد بلور، یک بلور نیمه رسانا خواهد بود که در صورت تحریک، الکترون های نوار ظرفیت امکان گذار بین نواری پیدا خواهند کرد. شکل ۱-۲ ساختارهای مختلف نوار انرژی را نشان می دهد.



شکل ۱-۲ : ساختار نواری جامدات[22].

نیمه رساناها انواع مختلفی دارند که بعضی در نور مرئی، از رسانایی خوبی برخوردارند و بعضی نارساناهای ایده آل هستند. تمایز بین نیمه رساناهای گاف پهن و نارساناها هنوز به وضوح شناخته نشده است و دلیل این پیچیدگی، خواص رسانشی یکسانی است که از خود بروز می دهند. موضوع قابل توجه درباره ی تحریک حامل ها در ساختار های جامد این است که در دماهای بالا، حامل ها می توانند از نوار ظرفیت به نوار رسانش بروند، که احتمال چنین گذاری متناسب با $\exp\left(-E_g/k_BT\right)$ می باشد؛ E_g گاف نواری می باشد. رساناها، نارساناها و نیمه رساناها را می توان از روی خواص نوری منحصر به فردشان نیز از هم تشخیص داد.

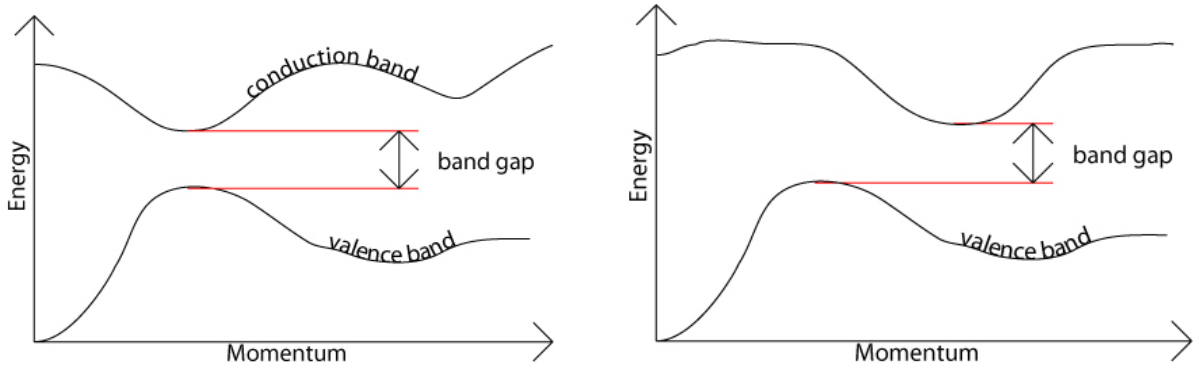
[1] Intersubband

[2] Interband

برخی نارساناها و نیمه رساناها در انرژی های کمتر از انرژی گاف نوارشفاف اند چون فوتون، انرژی کافی برای گذار ندارد و از درون بلور عبور می کند اما اگر انرژی فوتون تابشی، برابر یا بالاتر از انرژی گاف نواری باشد سبب گذار بین نواری شده و در این صورت بلور جاذب خواهد بود. این پدیده به «فوتو رسانش»[1] مشهور است. در عوض رساناها (فلزات) که هدایت الکتریکی خوبی دارند، نور را به جز در فرکانس های خیلی بالا (در فرابنفش) از خود عبور نمی دهند[22].

نیمه رساناها خود بر دو نوع اند: نیمه رساناهای با گاف مستقیم و گاف غیر مستقیم. وقتی در فضای k ،کمینه نوار رسانش دارای اندازه حرکتی مشابه با اندازه حرکت بیشینه نوار ظرفیت باشد، نیمه رسانا یک نیمه رسانای گاف مستقیم نامیده می شود. بسیاری از موادی که با ترکیبات عناصر گروه های $III-V$ یا $II-VI$ جدول تناوبی ساخته شده اند در این رده جای می گیرند از قبیل $Cds, InSb, GaAs$ به شکل(۱-۳ الف) توجه کنید.

از سوی دیگر وقتی کمینه نوار رسانش، در محلی غیر از بیشینه نوار ظرفیت در فضای k قرار گیرد، یک نیمه رسانای گاف غیر مستقیم خواهیم داشت. مهم ترین نمونه از نیمه رساناهای گاف غیر مستقیم ، نیمه رساناهای تک اتمی Si و Ge هستند. به شکل (۱-۳ ب) توجه کنید.



(الف) (ب)

شکل۱-۳ : نیمه رساناها الف) با گاف مستقیم ب) با گاف غیر مستقیم[22].

از آنجا که جذب و تابش فوتون ها باید قانون بقای اندازه حرکت و بقای انرژی را رعایت کند لذا در گذارهای مستقیم، قوانین بقا به صورت زیر است.

قانون بقای انرژی

$$\varepsilon_i + \hbar\omega = \varepsilon_f \qquad (۱.۳)$$

[1] Photo conduction

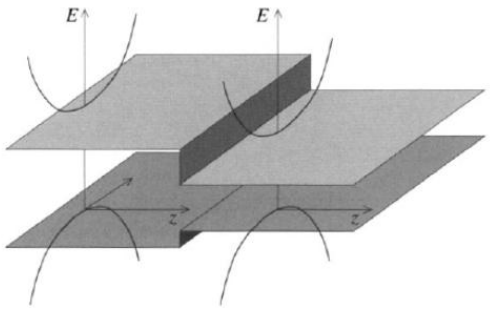
قانون بقای اندازه حرکت

$$\hbar k_i + \hbar q = \hbar k_f \qquad (۱.۴)$$

که در آن ها به ترتیب ε_i و ε_f انرژی های اولیه و نهایی الکترون، k_i و k_f بردار موج های اولیه و نهایی الکترون بوده و $\hbar\omega$ و q انرژی و بردار موج فونون می باشد.

۱-۳-۲ چند پیوندی ها[1]،چند ساختاری ها[2] و چاه کوانتومی

وقتی دو یا چند ماده کنار یکدیگر رشد داده می شوند، یک ساختار چند پیوندی (چندگانه) به وجود می آید. بنابر این گاف های نواری مواد نیز می توانند متفاوت باشند به شکل۱-۴ نگاه کنید.



شکل۱-۴ : دو نیمه رسانای مختلف با گاف های نواری متفاوت کنار هم رشد داده شده و ساختار چندگانه تشکیل داده اند[23].

ناپیوستگی موجود در هر نوار رسانش یا نوار ظرفیت را می توان با یک جمله ی ثابت به نام پتانسیل بیان کرد که معمولا آن را با $V(x,y,z)$ نمایش می دهند. در واقع $V(x,y,z)$ نمایش دهنده ی انرژی پتانسیل ساختار به صورت تابعی از مختصات فضایی است اگر بخواهیم آن را فقط در یک راستا محدود می کنیم.

[1] Hetrojunction

[2] Hetrostructure