



دانشکده فیزیک

گروه فیزیک اتمی و مولکولی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک (گرایش اتمی و مولکولی)

عنوان:

بررسی خواص اپتیکی نانو لایه دی اکسید تیتانیوم تولید شده به روش اسپاترینگ

استاد راهنمای اول:

دکتر حسن مهدیان

استاد راهنمای دوم:

دکتر سید محمود سادات کیایی

پژوهشگر:

محمد رنجبر

اسفند 1391

در این پروژه لایه‌های نازک دی‌اکسید تیتانیوم به روش لایه نشانی اسپاترینگ جریان مستقیم از هدف فلزی بر روی زیر لایه‌های شیشه‌ای، لایه نشانی شده‌اند. قبل از لایه نشانی زیر لایه‌ها ابتدا توسط آب مقطر و سپس با اتانول شسته و خشک شدند. قبل از لایه نشانی محفظه تا فشار 10^{-5} torr تخلیه شد و برای لایه نشانی محفظه با ترکیب 75 % گاز اسپاترینگ (هلیوم) و 25 % گاز واکنشی (اکسیژن) تا فشار $2.5 Pa$ پر شد.

نمونه‌های تولد شده پس از لایه نشانی برای مدت 2 ساعت در دماهای 450، 350، 250، 150 و 550 درجه سانتیگراد بازپخت داده شدند. طیف‌های عبوری، جذبی و بازتابی نمونه‌ها در گستره طول موجی $300 - 1100 nm$ با استفاده از *UV visible* بدست آمد. در طیف‌های بدست آمده برای نمونه‌ی اولیه ناهنجاری‌های غیر منتظره‌ای مشاهده می‌شود که با باز پخت نمونه‌ها در دماهای بیشتر از 350 درجه سانتیگراد این ناهنجاری‌ها از بین می‌رود. میزان عبور و ضریب خاموشی نمونه‌ها با افزایش دمای بازپخت به ترتیب افزایش و کاهش می‌یابد. ضریب شکست برای نمونه‌های اولیه و بازپخت شده در طول موج 550 نانومتر در گستره 2.2 - 2 قرار دارد.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
1	فصل 1- مقدمه ای بر نیمه رساناها.....
2	1-1 ساختار بلوری
3	2-1 پیوند اتمی.....
3	1-2-1 پیوند یونی
4	2-2-1 پیوند کووالانسی.....
5	3-2-1 پیوند وان دروالس
5	4-2-1 پیوند فلزی
6	3-1 نوارهای انرژی
10	4-1 جرم مؤثر
12	5-1 تراکم حامل ها
15	6-1 چگالی حامل ها
17	مراجع.....
18	فصل 2- دی اکسید تیتانیوم.....
19	1-2 ویژگی های کلی.....
20	2-2 کاربردها

20.....	1-2-2 رنگدانه.....
21.....	2-2-2 کرم‌های ضد آفتاب و لایه‌های جاذب UV.....
22.....	3-2-2 فتوکاتالیست.....
24.....	1-3-2-2 مکانیسم عمل فتوکاتالیستی.....
25.....	3-2 روتایل.....
27.....	4-2 آناتاز.....
29.....	5-2 بروکیت.....
31.....	مراجع.....
33.....	فصل 3- تولید لایه نازک.....
34.....	1-3 مقدمه.....
34.....	2-3 پمپ‌های خلأ.....
37.....	1-2-3 پمپ روتاری.....
38.....	2-2-3 پمپ روت.....
39.....	3-2-3 پمپ دیفیوژن.....
42.....	3-3 اندازه‌گیری خلأ.....
44.....	4-3 روش‌های تولید لایه نازک.....
45.....	1-4-3 لایه نشانی تبخیری.....
45.....	1-1-4-3 چشمه‌های تبخیر مقاومت حرارتی.....
47.....	2-4-3 تبخیر با باریکه الکترونی.....

48.....	اسپاترینگ	5-3
52.....	لایه نشانی اسپاترینگ.....	1-5-3
56.....	اسپاترینگ DC	1-1-5-3
57.....	اسپاترینگ RF	2-1-5-3
57.....	اسپاترینگ واکنشی	3-1-5-3
59.....	مراجع.....	
60.....	فصل 4- مقدمه‌ای بر اپتیک لایه‌های نازک.....	
61.....	مقدمه	1-4
64.....	خواص اپتیکی مواد.....	2-4
65.....	انتشار امواج الکترومغناطیسی در دی‌الکتریک.....	3-4
70.....	معادله پاشندگی کوشی.....	1-3-4
71.....	خواص اپتیکی دی‌الکتریک‌ها و نیمه رساناها	2-3-4
73.....	انتشار امواج الکترومغناطیسی در فلز.....	4-4
78.....	ویژگی‌های اپتیکی فلزات	1-4-4
79.....	تداخل در سطح لایه نازک	5-4
85.....	ماتریس تبدیل لایه	1-5-4
92.....	بدست آوردن ثابت‌های اپتیکی.....	6-4
92.....	ضریب جذب	1-6-4
94.....	ضریب خاموشی.....	2-6-4

96 3-6-4 انرژی گاف
99 4-6-4 ضریب شکست
102 1-4-6-4 عوامل مؤثر بر ضریب شکست
107 مراجع
109 فصل 5- نتایج و تحلیل‌ها
110 1-5 بررسی خواص ساختاری نمونه‌ها
112 2-5 بررسی خواص اپتیکی
113 1-2-5 بررسی طیف عبور
115 2-2-5 بررسی طیف بازتاب
117 3-2-5 جذب
118 4-2-5 ضریب جذب و ضریب خاموشی
120 5-2-5 ضریب شکست
122 6-2-5 گاف انرژی
130 3-5 نتایج و پیشنهاده‌ها

مقدمه‌ای بر نیمه رسانه‌ها

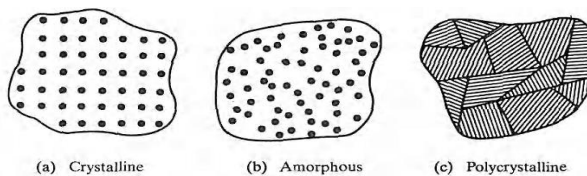
در این فصل، خواص بنیادی نیمرساناها را مورد بحث قرار می‌دهیم. بحث را با ساختار بلور شروع می‌کنیم سپس مدل پیوند اتمی را بیان می‌کنیم و بعد از آن تراکم حامل‌ها و تراز فرمی را برای هر دو نیمرسانا ذاتی و غیر ذاتی مورد بررسی قرار می‌دهیم، سازو کار پراکندگی و ترابری بار را معرفی می‌کنیم.

نیمرساناها گروهی از مواد می‌باشند که هدایت الکتریکی آنها بین فلزات و عایق قرار دارد. ویژگی مهم این مواد این است که رسانایی آنها با تغییر دما، تحریک نوری و میزان ناخالصی به نحوه قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند.

در مطالعه قطعات الکترونیک حالت جامد، نخست به رفتار الکتریکی مواد جامد علاقه مندیم. انتقال بار از طریق یک فلز یا یک نیمرسانا نه تنها به خواص الکترون بلکه به آرایش اتم‌ها در جامد نیز وابسته است [1].

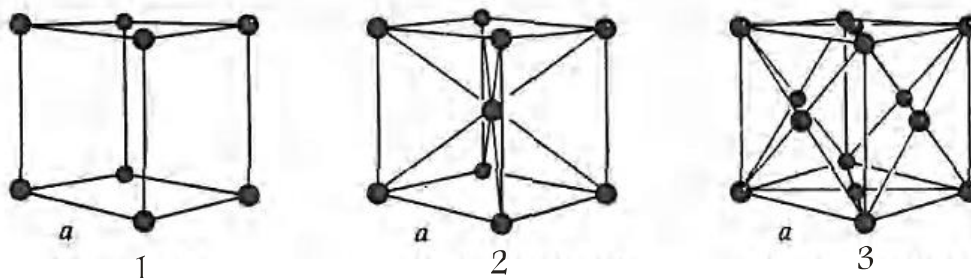
1-1 ساختار بلوری:

بیشتر اتم‌ها به دلیل آرایش منظم اتم‌هایشان، بلوری اند. آنها خاصیتی دارند که نظم بلند برد نامیده می‌شود، چرا که این نظم می‌تواند به سرتاسر بلور گسترش یابد. در مقایسه با این مواد، مواد بی‌شکل مانند شیشه و موم، فاقد نظم بلند برد هستند اما دارای نوعی نظم هستند که نظم کوتاه برد نام دارد، به این معنی که محیط موضعی هر اتم، مشابه با محیط دیگر اتم‌های معادلش است، اما این نظم در مسافت‌های قابل ملاحظه پایدار نیست [2].



شکل 1: (a) بلوری، (b) بی‌شکل، (c) چند بلوری [1]

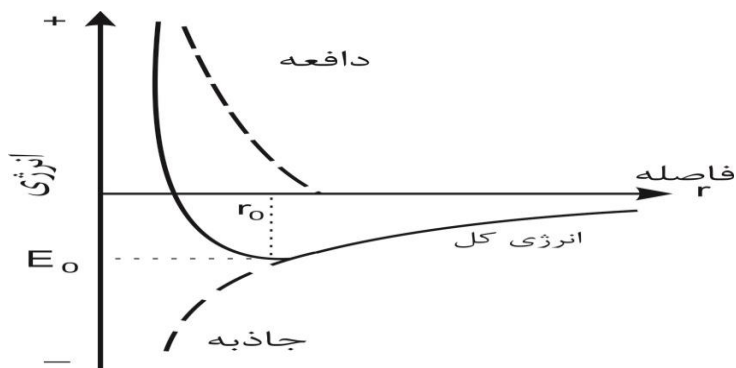
یک ساختار بلوری از به هم پیوستن یک شبکه و آرایش منظمی از اتم‌ها یا مولکول‌ها تشکیل می‌شود. که در این جامدات، می‌توان یک سلول واحد مشخص کرد که از تکرار آن در سه بعد، جامد بلوری بدست می‌آید. سلول واحد محتوای اطلاعات کاملی پیرامون آرایش اتم‌هاست. از مهمترین شبکه‌های بلورها می‌توان به مکعبی ساده (SC)، مرکز حجمی (BCC)، مرکز سطحی (FCC) و ساختار الماسی نام برد [3].



شکل 2: سلول‌های واحد برای سه نوع شبکه بلوری (1) مرکز سطحی (2) مرکز حجمی (3) مکعبی ساده [1]

1-2 پیوند اتمی:

1-2-1 پیوند یونی: اتم‌های با انرژی‌های یونیزاسیون پائین (عنصر گروه 1) نسبت به اتم‌های با بستگی شدید الکترونی (عنصر گروه 7) راحت‌تر الکترون از دست می‌دهند. این پروسه منجر به انتقال الکترون و شکل‌گیری یون‌های باردار می‌شود. بلور یونی بوسیله یون‌هایی که در یک پیکربندی در حال تعادل در کنار هم جمع می‌شوند، بوجود می‌آیند. شکل 3 نشان می‌دهد که چطور یک ساختار در حال تعادل ایجاد می‌شود. یک جداسازی اتمی r_0 ، در جایی که تعادل بین نیروهای الکتروستاتیکی جاذب و دافع وجود دارد، داریم. نیروهای دافع بین الکترون‌های دارای بار همانند اطراف اتم‌ها و البته هسته‌های اتمی دارای بارهای همنام وجود دارد. نیروهای جاذب بین یون‌هایی که بوسیله ی انتقال الکترون‌ها ایجاد شده‌اند وجود دارد.

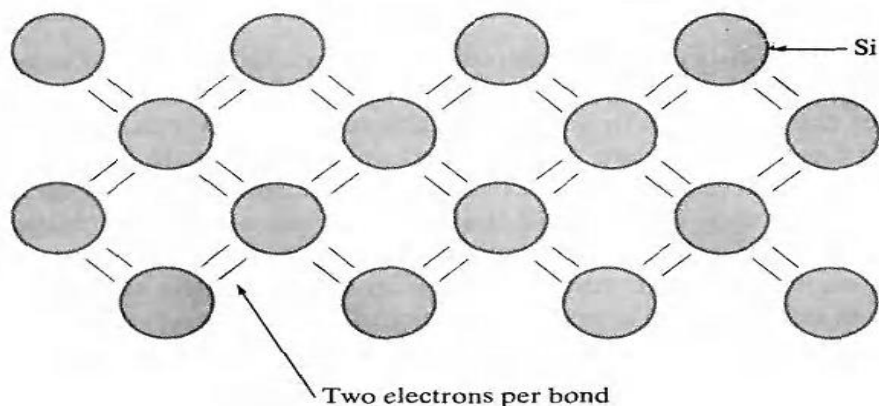


شکل 3: تعادل در شبکه بلوری

استحکام و شدت پیوند یونی در بلورها در نقطه ذوب بالا و سختی آنها منعکس شده است. اگرچه سختی در بلورهای یونی بدین معنی است که آنها گرایش به تردی و شکنندگی دارند بدین سبب که ساختار آنها اجازه جابه جایی بین اتمی زیادی را به سبب اینکه اتم‌ها بسیار مرتب و منظم سر جای خود قرار گرفته اند را نمی‌دهد.

1-2-2 پیوند کوالانسی: در یک شبکه بلوری، در هر اتم، یک هسته با بار مثبت توسط الکترون‌های مداری با بار منفی احاطه شده است. اگر اتم‌ها تنگاتنگ هم چیده شده باشند، مدار الکترون‌های لایه خارجی روی هم می‌افتند تا نیروهای بین اتمی قدرتمندی به وجود آورند. خارجی ترین الکترون‌ها، به نام الکترون‌های ظرفیت در تعیین خواص الکتریکی جامد از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. در رساناهای فلزی، الکترونهای ظرفیت در میان تمام اتم‌های موجود در جامد مشترک اند. این الکترون‌ها قید اتم‌ها نیستند و آزادند بر اثر اعمال میدان الکتریکی در رسانش جریان مشارکت می‌کند. در نیمرساناها بلوری، هر اتم دارای چهار الکترون ظرفیت است که آنها را با چهار اتم همسایه نزدیک خود به اشتراک می‌گذارد. الکترون‌های ظرفیت در میان ساختار زوجی که به پیوند والانسی معروف است مشترک اند. هرگاه یک الکترون ظرفیت در یک نیمرسانا آزاد شود، یک حفره در پیوند کوالانسی، باقی

می‌گذارد. این حفره ممکن است توسط یکی از الکترونهای ظرفیت مجاورش پر شود، که نتیجه آن تغییر مکان حفره است. چنین تصور می‌شود که حفره در داخل ساختار بلوری در حال حرکت است [4].



شکل 4: پیوند کوالانسی در بلور Si

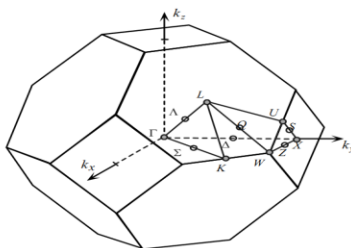
1-2-3 پیوند وان دروالس: مولکول‌های گروه زیادی از مواد جامد توسط نیروی ضعیف مولکولی که وان دروالس نامیده می‌شود در کنار یکدیگر می‌مانند. این پیوند بر اثر نیروی برهمکنش بارهای دوقطبی-دوقطبی بین مولکول‌های که در کل خنثی هستند اما به صورت منطقه‌ای دارای بارهای مثبت یا منفی می‌باشند، اتفاق می‌افتد. مولکول‌های آلی مانند متان و اتم‌های گازهای بی‌اثر دارای پیوند ضعیف توسط این بارها در جامد می‌باشند. این جامدات دارای نقطه جوش پایین و به لحاظ مکانیکی ضعیف هستند.

1-2-4 پیوند فلزی: در فلزات، الکترون بیرونی نوار ظرفیت هر اتم تشکیل بخشی از ابر الکترونی آزاد یا گاز الکترونی بصورت بهم پیوسته را می‌دهد که به تمام شبکه نفوذ می‌کند. گرچه نیروی بین الکترون-الکترون دافعه است، نیروی جاذبه الکترواستاتیک بین گاز الکترون آزاد و یون‌های مثبت هسته اتم باعث پیوند می‌شود. در فلزات توانایی الکترون‌های آن در عکس‌العمل نشان دادن نسبت به میدان الکتریکی خارجی، شیب دمایی و تابش نور است. این ویژگی باعث رسانش الکتریکی و حرارتی

بسیار بالا و همچنین بازتابش نوری بسیار بالای آن است. در فلزات ضریب دمایی مقاومت ویژه فلزات مثبت است، بنابراین با افزایش دما رسانش الکتریکی آنها کاهش می‌یابد [5].

3-1 نوارهای انرژی:

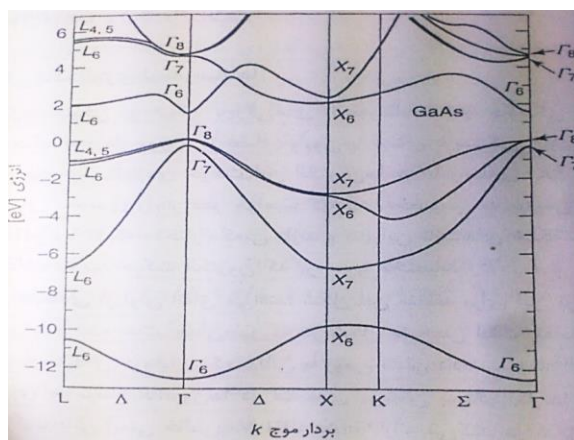
ساختار انواع بلورها در فضای معمولی آنها موضع اتم را مشخص می‌کند. برای بحث درباره الکترون های رسانش لازم است نوع متفاوتی از فضا را در نظر بگیریم که « فضای دوگان » نسبت به فضای مختصاتی نامیده می‌شود. برای یک موج مادی یا موج وابسته به الکترون های رسانش اندازه حرکت $p = mv$ برای الکترونی به جرم m با رابطه $p = \left(\frac{h}{2\pi}\right) k$ داده میشود که در آن h ثابت پلانک است. بنابراین در این حالت ساده اندازه حرکت با بردار موج k متناسب است و k با طول موج نسبت عکس دارد. برای توصیف حرکت الکترون ها می‌توان یک فضای وارون تعریف کرد که « فضای k » نامیده می‌شود. خواص الکتریکی، اپتیکی و دیگر ویژگی های نیمه رساناها به چگونگی رابطه ی انرژی الکترون های متحرک به بردار موج k در فضای k بستگی زیادی دارد، حرکت الکترون ها برحسب مختصات k_x, k_y, k_z فضای وارون بیان می‌شود، درمنطقه ی بریلوئن اتفاق می‌افتد؛ همانطور که در شکل 5 مشخص شده است، نقاط با تقارن زیاد درمنطقه ی بریلوئن به وسیله ی حروف یونانی نشان داده شده اند.



شکل 5: منطقه بریلوئن نیمه‌رسانا که در آن نقاط با تقارن بالای Γ, K, L, U, W, X و خطوط با تقارن بالای $\Delta, \Lambda, \Sigma, Q, S, Z$ نشان داده شده است [6].

نوارهای انرژی به موضع الکترون‌ها در منطقه ی بریلوئن بستگی دارد، در شکل 6 می بینیم که نوارهای مختلف در نقطه ی مرکزی Γ از منطقه ی بریلوئن کمینه ها و بیشینه های برجسته ای دارند. گاف انرژی یا ناحیه ای که هیچ نوازی در آن ظاهر نمی شود، از صفر انرژی در نقطه ی Γ_8 تا نقطه ی Γ_6 که مستقیم بالای گاف و در انرژی $E_g = 1.35 \text{ eV}$ است، امتداد دارد. نوارهای واقع در زیر نقطه ی Γ_8 نوار ظرفیت را بوجود می آورند و آنهای که در بالای Γ_6 هستند نوار هدایت را تشکیل میدهند. بنابراین Γ_6 نقطه ی با پایین ترین انرژی در نوار هدایت و Γ_8 نقطه ی با بالاترین انرژی در نوار ظرفیت است .

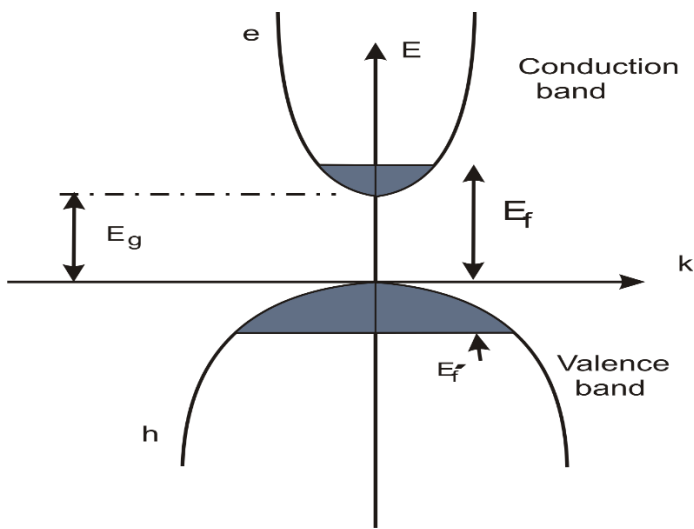
در صفر مطلق همه ی نوارهای انرژی واقع در زیرگاف پر از الکترون و همه ی نوارهای بالای گاف ، خالی اند؛ در نتیجه، در دمای صفر مطلق کلین، ماده یک عایق است. و در دمای اتاق گاف به اندازه کافی کوچک است؛ بنابراین تعدادی از الکترون ها به صورت گرمایی از نوار ظرفیت به نوار هدایت برانگیخته می شوند؛ این تعداد نسبتا کم از الکترون ها در ناحیه ای از نوار هدایت که بلافاصله بالای نقطه ی کمینه اش در نقطه ی Γ_6 است جمع می شوند. این الکترون ها می توانند حامل مقدار جریان الکتریکی باشند؛ بنابراین ماده یک نیمه رسانا است.



شکل 6: ساختار نوازی نیمرسانای *GaAs* که با روش شبه پتانسیل محاسبه شده است.

در شکل 6 یک «نیمه رسانای گاف-مستقیم» نامیده می شود؛ زیرا بالاترین نقطه ی نوار ظرفیت با پایین ترین نقطه ی نوار هدایت هر دو در همان نقطه مرکزی منطقه ی بریلوئن (Γ) قرار دارند. الکترون ها در نقطه ی Γ_8 از نوار ظرفیت می توانند به صورت گرمایی و بدون هیچ تغییری در بردار موج k به نقطه Γ_6 از نوار هدایت برانگیخته شوند. در بعضی از نیمه رساناها مانند Si, Ge در شکل 8 بالاترین نقطه نوار ظرفیت در مکانی از منطقه بریلوئن است که با پایین ترین نقطه نوار هدایت متفاوت می باشد؛ این مواد را «نیمه رسانای گاف-غیرمستقیم» می نامند.

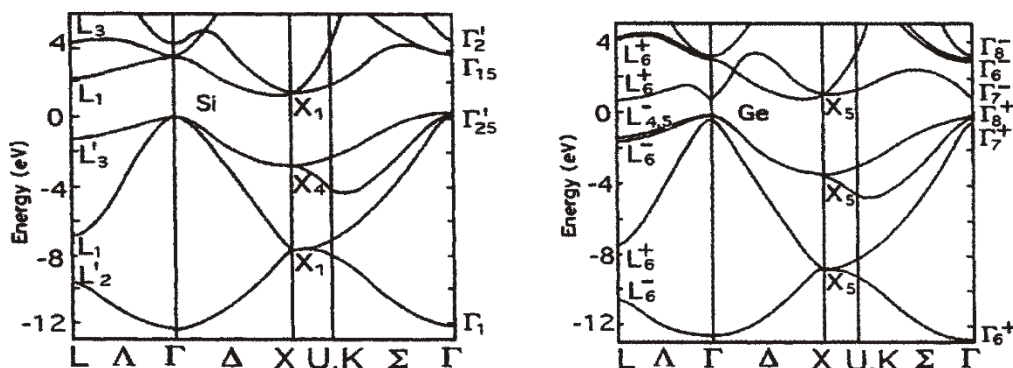
در شکل 7 برای نقطه Γ از یک «نیمه رسانای گاف-مستقیم» وضعیتی را که در دمای بالاتر از صفر مطلق است را نشان می دهد؛ در این شکل نوار های انرژی با سهمی های تقریب زده شده اند.



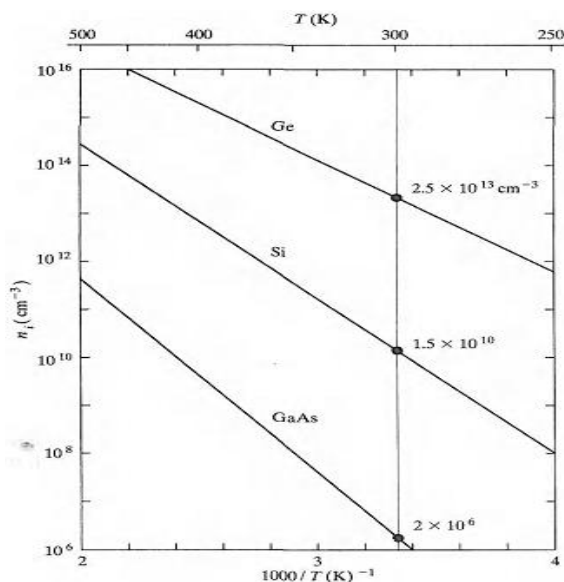
شکل 7: طرحی از نوار ظرفیت و نوار هدایت برای یک نیمه رسانا، منطقه شامل حفره ها در نوار ظرفیت و شامل الکترون در نوار هدایت با هاشور نشان داده شده است. انرژی فرمی E_f, E_f' به ترتیب نشان دهنده ی پایین ترین تراز اشغال نشده ی نوار ظرفیت و بالاترین تراز اشغال شده ی نوار هدایت هستند.

در دره نوار هدایت در نقطه ی Γ_6 توسط الکترون ها تا سطح فرمی که به عنوان انرژی بالاترین حالت اشغال شده تعریف می شود. پر شده است. الکترون های برانگیخته در مناطق مجاور به بالاترین نقطه

نوار ظرفیت، حالت های خالی را جا می گذارند که اگر نبودند نوار ظرفیت پر بود؛ این حالت های خالی مانند بارهای مثبت رفتار می کنند و حفره نامیده می شوند. این ترازهای حفره ای بالای انرژی $-E_f$ وجود دارند. از آنجا که نیمه رسانا های ذاتی یا خالص، درست به همان تعدادی که در نوار ظرفیت خود حفره دارند در نوار هدایتش الکترون موجود است، در فضای k حجم های متناظری که با این الکترون ها و حفره ها پر شده اند با هم برابرند. این الکترون ها و حفره ها حامل های بار جریان هستند و وابستگی دمایی تراکم آنها برای $Si, Ge, GaAs$ در شکل 9 نشان داده شده است.



شکل 8: نمودار ساختار نواری برای نوار های انرژی نیمه رساناهای گاف غیر مستقیم Si, Ge [7].



شکل 9: وابستگی دمایی چگالی حامل ذاتی نیمه رساناهای $Si, Ge, GaAs$ [1].

در هریک از نیمه رساناهای شامل Si, Ge بالاترین نقطه ی نوار ظرفیت در مرکز منطقه ی بریلوئن است؛ اما در نیمه رساناهای گاف غیر مستقیم در فضای k پایین ترین دره در نوار هدایت در مکان متفاوتی نسبت به Γ قرار می گیرند [2].

1-4 جرم موثر:

حرکت الکترون در داخل شبکه بلوری مانند حرکت الکترون در خلا نیست. اگر یک نیروی خارجی را به الکترون در داخل شبکه بلوری اعمال کنیم، مثلا با اعمال یک ولتاژ در طول بلور، در این صورت الکترون شتاب خواهد گرفت، اما با میزان متفاوت تری نسبت به الکترون آزادی که همان میدان الکتریکی را تجربه می کند. الکترون در داخل بلور در طول شبکه بلور حرکت کند و این لازمه برهمکنش با همه پتانسیل های مختلف است. که به جهت حرکت بلور وابسته است. آنچه تعجب آور است این است برهمکنش های پیچیده ای بین الکترون و شبکه باید به حساب آورده شود و ما می توانیم از معادلات حاکم بر الکترون آزاد استفاده کنیم به شرطی که جرم الکترون را از جرم واقعی اش در خلا تعویض کنیم. این جرم تغییر یافته، جرم موثر الکترون در بلور نامیده می شود و بستگی دارد به جهتی که الکترون در بلور حرکت می کند [4]. وقتی به رابطه انرژی- بردار موج الکترون های آزاد، $\mathcal{E} = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)k^2$ بنگریم، مشاهده می کنیم که ضریب k^2 انحنا ی \mathcal{E} بر حسب k را تعیین می کند. همانطور که از پاسخ های معادله موج در نزدیکی مرز منطقه بر می آید، برای الکترون های واقع در یک نوار ناحیه های در نزدیکی گاف نواری در مرز منطقه می توانند وجود داشته باشد که در آنها انحنا بطور غیر عادی زیاد باشد. اگر گاف انرژی در مقایسه با انرژی الکترون آزاد، λ در مرز کوچک باشد، انحنا با ضریب λ/E_g افزایش می یابد و جرم وارون نیز با همان ضریب زیاد می شود. اگر جرم موثر حامل از جرم الکترون آزاد کوچکتر باشد، نه وزن بلور کمتر می شود و نه قانون دوم نیوتون، برای یک بلور به صورت یک کل نقض می شود. نکته مهم این است که در میدان الکتریکی یا مغناطیسی الکترون در پتانسیل دوره ای نسبت به شبکه چنان شتابدار می شود که گویی جرم آن برابر با جرم موثری است که اکنون تعریف می کنیم.

در مورد سرعت گروه داریم

$$v_g = \hbar^{-1} d\epsilon/dk \quad 1-1$$

اگر از رابطه بالا مشتق بگیریم

$$\frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{d^2\epsilon}{dk dt} = \hbar^{-1} \left(\frac{d^2\epsilon}{dk^2} \frac{dk}{dt} \right) \quad 1-2$$

و با استفاده از $\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}$ داریم

$$\frac{dv_g}{dt} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\epsilon}{dk^2} \right) ; \text{ or } F = \frac{\hbar^2}{d^2\epsilon/dk^2} \frac{dv_g}{dt} \quad 1-3$$

اگر رابطه زیر به عنوان جرم بشناسیم ،

$$m = \frac{\hbar^2}{d^2\epsilon/dk^2} \quad 1-4$$

شکل قانون دوم نیوتون را به خود می گیرد و جرم موثر با رابطه زیر تعریف می کنیم [8].

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\epsilon}{dk^2} \quad 1-5$$

وابستگی بردار موج k به جرم موثر m^* را می توان با مشتق گیری روی منحنی های ساختاری نوارها محاسبه کرد. با مقایسه شیب ها در مجاورت نقطه ی کمینه نوار هدایت و نقطه ی بیشینه نوار ظرفیت در نقطه ی Γ برای GaAs در شکل 6 و 7 می بینیم که نوارهای الکترونی بالایی شیب های تندتری دارند. در نتیجه ، نسبت به نوارهای حفره پایین تر با شیب های کندتر دارای جرم های سبک تری هستند [2].

1-5 تراکم حامل ها:

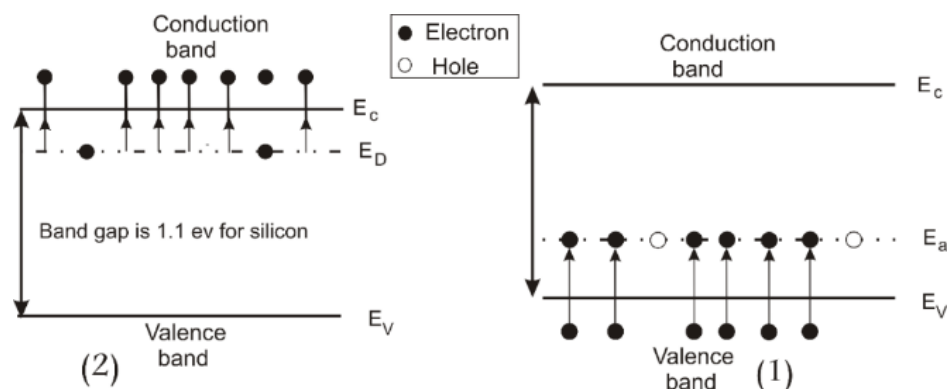
در نیمرساناهایی خالص، تراکم الکترون و حفره یکسان است زیرا فرآیند تولید یک الکترون در نوار رسانش، یک حفره در نوار ظرفیت می آفریند. این تراکم ها را تراکم های حامل ذاتی n_i می نامند.

رسانندگی ذاتی در اکثر نیمرساناها کم است به همین دلیل با اضافه کردن ناخالصی رسانندگی بلور را کنترل می کنند. به آن نیمرسانا غیر ذاتی گفته می شود. دارای دو نوع است.

(1) پذیرنده یا نوع p : که در این نوع نیم رساناها یک الکترون کم خواهد داشت. بنابراین، همراه بار منفی غیر متحرک باقیمانده در اتم ناخالصی یک حفره تولید می شود تعداد حفره ها برابر اتم های ناخالصی است. در این نوع نیمرساناها عمده مکانیزم هدایت الکتریکی توسط حفره انجام می شود.

(2) دهنده یا نوع n : در این نوع نیمرساناها الکترون های آزاد بار منفی حمل می کنند و یک بار مثبت غیر متحرک در اتم های ناخالص جانشین شده، بر جای می گذارند. بنابراین شرط خنثی بار حفظ شده و هیچ حفره تولید نمی شود. در دمای اتاق انرژی گرمایی کافی است تا تمام اتم های ناخالص را یونیده کند، بطوریکه تعداد الکترون های اضافی با اتم های ناخالصی برابر است.

نمودار نوار انرژی برای هر دو نیمرسانا n, p در شکل 10 نشان داده شده است.



شکل 10 : نمودار نوار انرژی (1) نیمرسانای نوع p (2) نیمرسانای نوع n

تراز انرژی E_a که از روی انرژی لبه نوار ظرفیت E_v اندازه گرفته می شود انرژی یونش نا خالص پذیرنده نامیده می شود. مقدار آن کم است، چون نا خالصی پذیرنده می تواند یک الکترون بپذیرد. انرژی یونش کم، تراز انرژی نا خالص را نزدیک لبه نوار ظرفیت و داخل گاف ممنوعه قرار می دهد. تراز انرژی E_a انرژی یونش دهنده، از لبه نوار E_c است و نشانگر انرژی اندکی است که برای آزاد کردن الکترون اضافی در یک اتم دهنده لازم است.

برای تعیین رفتار الکتریکی یک نیمرسانا، لازم است از تعداد الکترون ها و حفره ها برای رسانش جریان اطلاع داشته باشیم برای این منظور تابع چگالی حالت ها $N(E)$ ، چگالی قابل دسترس از حالت های انرژی که توسط یک الکترون اشغال شوند. دومین تابع، تابع توزیع $f(E)$ ، احتمال اشغال این حالت های انرژی قابل دسترس را بدست می دهد.

چگالی حالت ها قابل دسترس $N(E)$ به صورت تابعی از انرژی $(E - E_c)$ در نوار رسانش عبارت است از

$$N(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} \quad 1-6$$

که در آن h ثابت پلانک است و در نوار ظرفیت عبارت از:

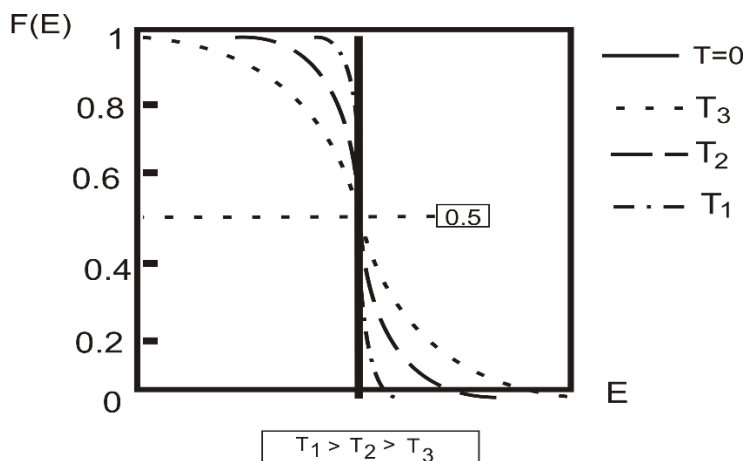
$$N(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_h)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}} \quad 1-7$$

که در آن انرژی لبه نوار ظرفیت E_v نمایشگر انرژی پتانسیل حفره، $(E_v - E)$ انرژی جنبشی حفره است.

تابع توزیع: احتمال اینکه تراز انرژی E توسط یک الکترون اشغال شود با تابع توزیع فرمی-دیراک به دست می آید.

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/kT} + 1} \quad 1-8$$

که در آن E_f تراز فرمی، k ثابت بولتزمن، T دما بر حسب کلوین است.



شکل 11: تابع توزیع فرمی - دیراک در دماهای مختلف

در شکل 11 تابع احتمال را در دماهای $0, T_1, T_2, T_3$ و k نشان می دهد. با در نظر گرفتن این شکل چند نکته جالب توجه را می توان ملاحظه کرد.

(1) در $0, k$ $f(E)$ به ازای تمام انرژی کمتر از E_f مساوی واحد است. این نشان می دهد که تمام

ترازهای انرژی زیر E_f اشغال شده اند و تمام ترازهای انرژی بزرگتر از E_f خالی اند.

(2) احتمال اشغال برای $T > 0, k$ در $E = E_f$ همیشه $1/2$ است و مستقل از دماست.

(3) تابع $f(E)$ نسبت به E_f متقارن است. احتمال اینکه تراز انرژی $E_f + dE$ اشغال شده باشد

برابر است با احتمال اینکه تراز انرژی $E_f - dE$ اشغال نشده باشد.

برای تمام ترازهای انرژی که $E_f > 3kT$ باشد، تابع $f(E)$ به طور تقریبی چنین نوشت

$$f(E) = e^{-(E-E_f)/kT} \quad 1-9$$