



# ΗΜΙΑΓΩΓΑ ΥΛΙΚΑ: ΘΕΩΡΙΑ-ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ

Μέρος 1<sup>ο</sup>: Στοιχεία Θεωρίας Ημιαγωγών  
Ενότητα 2<sup>η</sup>: Ύλη και ακτινοβολία – Αρχές κβαντικής θεωρίας.

Γεώργιος Λιτσαρδάκης  
Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών  
& Μηχανικών Υπολογιστών



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



# Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης





## 2. Ύλη και ακτινοβολία – Αρχές κβαντικής θεωρίας.



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ  
2007-2013  
πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Περιεχόμενα ενότητας

1. Δυϊσμός ύλης-ακτινοβολίας.
2. Αρχή απροσδιοριστίας.
3. Στοιχεία κβαντικής μηχανικής.
4. Εξίσωση Schrodinger.
5. Το ελεύθερο σωματίο.



# Στοιχεία Θεωρίας Ημιαγωγών

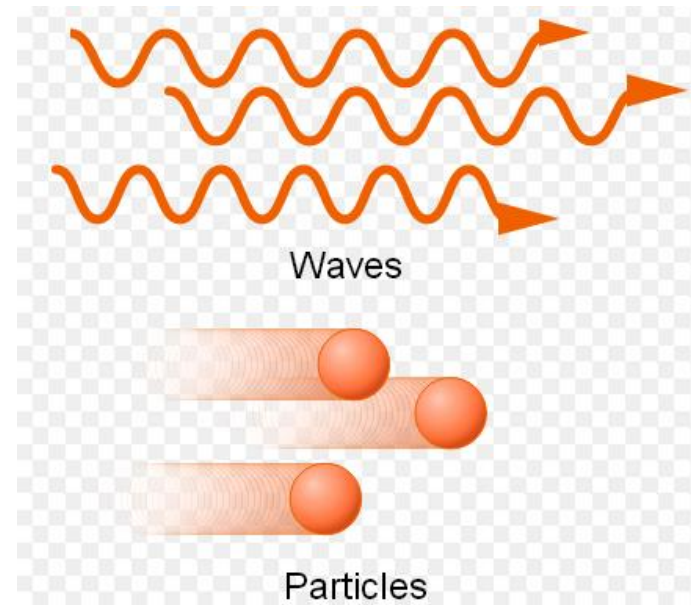
## Βασικές αρχές

- ύλη και ακτινοβολία
- αρχή απροσδιοριστίας
- κβαντική μηχανική
  - κυματοσυνάρτηση
  - τελεστές
  - ενέργεια - εξίσωση Schrodinger
- ενέργεια ηλεκτρονίων
  - ελεύθερο σωματίο
  - περιορισμένο σωματίο
    - άπειρο πηγάδι δυναμικού
    - πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού
    - φράγμα δυναμικού
- ηλεκτρόνια σε περιοδικό δυναμικό



# δυϊσμός ύλης-ακτινοβολίας

*“η υλη και η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία έχουν και σωματιδιακές και κυματικές ιδιότητες”*




Διττή φύση των σωματιδίων

Πηγή:  
, <http://www.sciencecalculators.org/optics/light/>



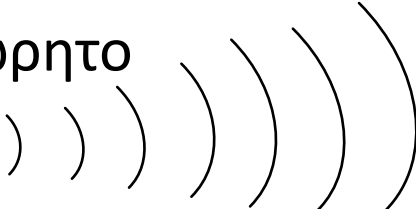
# δυϊσμός ύλης-ακτινοβολίας (2)

- “η υλη και η ηλεκτρομαγνητικη ακτινοβολια εχουν και σωματιδιακες και κυματικες ιδιοτητες

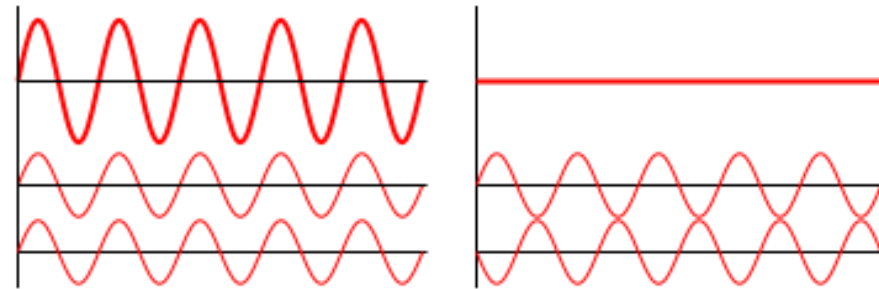
- σωματίο: 

- οντότητα εντοπισμένη στο χώρο
- διακριτές ποσότητες

- αδιαχώρητο

- κύμα: 

- οντότητα μη εντοπισμένη
- περιοδικότητα
- συμβολή
- (αλληλεπιδρά προσθετικά ή καταστροφικά με άλλα κύματα)



Περίθλαση και Συμβολή

Πηγή: Vecorized from [File:Interference of two waves.png](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Interference_of_two_waves.png), [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Interference\\_of\\_two\\_waves.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Interference_of_two_waves.svg)





# το φωτόνιο

η ακτινοβολία εκπέμπεται & απορροφάται κατά διακριτές ποσότητες

- το φωτόνιο είναι στοιχειώδης ποσότητα (κβάντο) ακτινοβολίας

- ενέργεια  $E=hn$

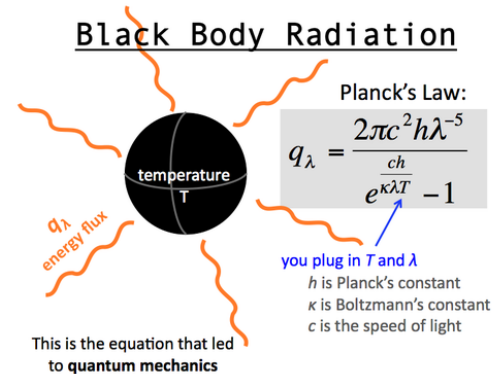
$$h=6.625 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{sec} \quad (=6.625 \times 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{sec})$$

$$\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{sec}$$

- μάζα  $m=0$

- ορμή  $p=E/c$

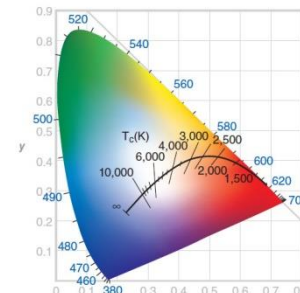
$$p=E/c=h/\lambda = \hbar k \quad (k=2\pi/\lambda)$$



Ακτινοβολία Μέλανος σώματος

Πηγή: Clearscience,

<https://www.tumblr.com/search/black%20body%20radiation>  
<http://clearscience.tumblr.com/post/43003055435/we-said-a-couple-times-while-talking-about-flames>



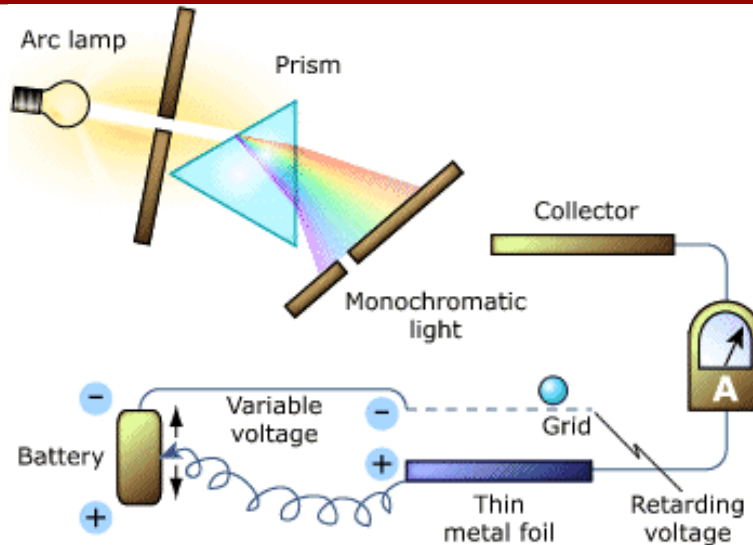
Το μέγιστο της έντασης μετατοπίζεται με τη θερμοκρασία

Διάγραμμα μήκων κύματος σε σχέση με τη θερμοκρασία ενός μέλανος σώματος.

Πηγή: ledsmagazine,

[http://www.ledsmagazine.com/content/dam/leds/migrated/objects/features/10/10/14/1310leds\\_web\\_dimming1.jpg](http://www.ledsmagazine.com/content/dam/leds/migrated/objects/features/10/10/14/1310leds_web_dimming1.jpg)  
<http://www.ledsmagazine.com/articles/print/volume-10/issue-10/features/careful-design-delivers-halogen-like-led-dimming-magazine.html>

# φωτοηλεκτρικό φαινόμενο



Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο.

Πηγή: Nobel Media AB 2015,

[http://www.nobelprize.org/educational/physics/quantised\\_world/waves-particles-1.html](http://www.nobelprize.org/educational/physics/quantised_world/waves-particles-1.html)

- Όταν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία κατάλληλου μήκους κύματος (υπεριώδεις) πέσει σε ένα μέταλλο, τότε από το μέταλλο εκπέμπονται ηλεκτρόνια (λειτουργία φωτοκυττάρων).



# φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (2)

- Η ακτινοβολία (φωτόνια) έχει ενέργεια  $E=hn$  .
- Τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια έχουν ενέργεια  $E_k=hn-\phi$ , (όπου  $\phi$  το έργο εξόδου του μετάλλου)
- η εκπομπή αρχίζει αμέσως όταν η συχνότητα ξεπεράσει μια ορισμένη τιμή  $hn>\phi$
- η κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων αυξάνεται με την αύξηση της συχνότητας, όχι με την αύξηση της έντασης της ακτινοβολίας
- η ένταση του ρεύματος (ο αριθμός των ηλεκτρονίων) είναι ανάλογη της έντασης της ακτινοβολίας (του αριθμού φωτονίων)
- => η ενέργεια δεν απορροφάται ομοιόμορφα - η ακτινοβολία επιδρά σαν να αποτελείται από διακριτά σύνολα



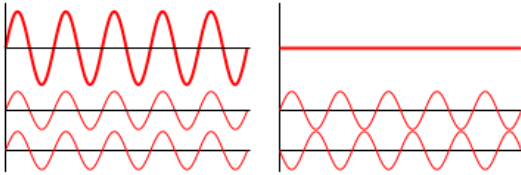
# το ηλεκτρόνιο - αρχή De Broglie

όπως ένα φωτόνιο με μήκος κύματος  $\lambda$  έχει ορμή  $p=h/\lambda$ ,  
ένα σωματίδιο με ορμή  $p=mv$  έχει μήκος κύματος  $\lambda$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

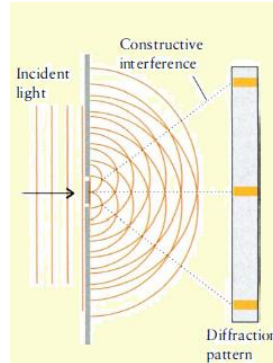


# συμβολή - περίθλαση

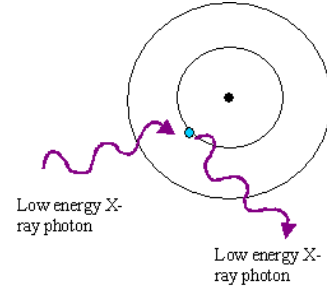


Περίθλαση και Συμβολή

Πηγή: Vecorized from [File:Interference of two waves.png](http://www.wikimedia.org/wiki/File:Interference_of_two_waves.png), [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Interference of two waves.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Interference_of_two_waves.svg)

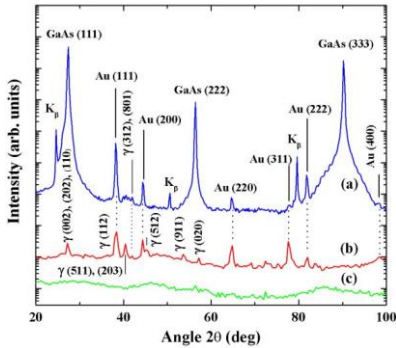


Περίθλαση και Συμβολή



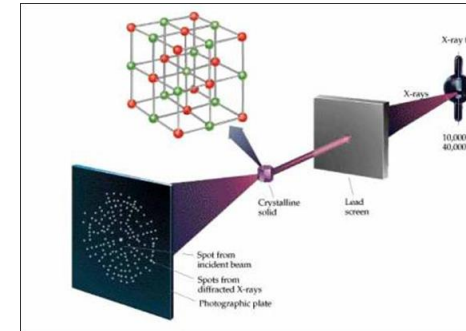
Συμβολή-Περίθλαση

Πηγή: [http://www.antonine-education.com/Pages/Physics\\_5\\_Options/Medical\\_Physics/MED\\_07/med\\_phys\\_7.htm](http://www.antonine-education.com/Pages/Physics_5_Options/Medical_Physics/MED_07/med_phys_7.htm)



Διάγραμμα XRD

Πηγή: Peter Atkins & Loretta Jones, Chemical Principles, Third Edition 2005, Freeman and Company, <http://jacqkrol.x10.mx/content/chem/chem-intro.shtml>



Συμβολή-Περίθλαση

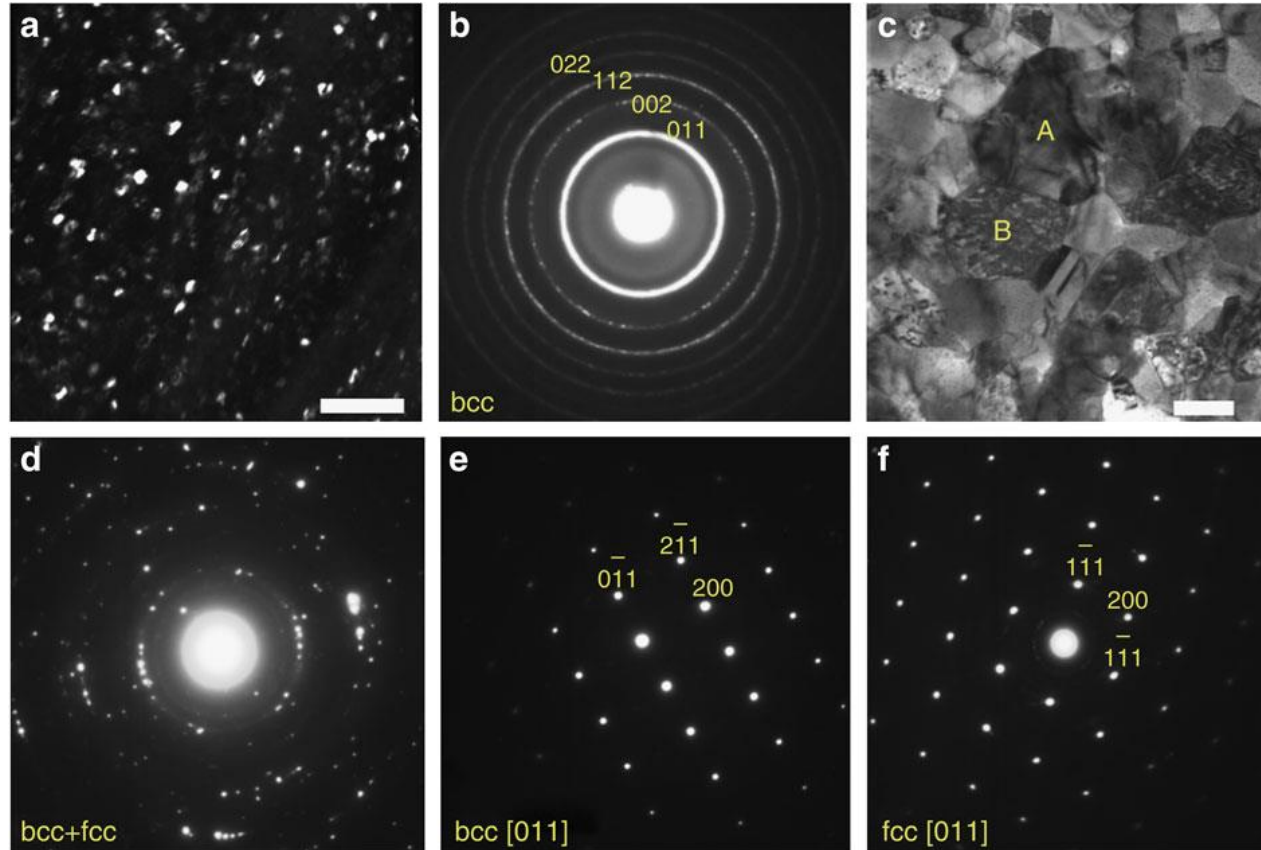
Πηγή: <http://www.memrise.com/mem/2206739/x-ray-crystallography/>

Πηγή: Nanotechnology and Nanomaterials » "Nanowires", book edited by Paola Prete, ISBN 978-953-7619-79-4, Published: February 1, 2010 under CC BY-NC-SA 3.0 license. © The Author(s), <http://www.intechopen.com/books/nanowires/movpe-self-assembly-and-physical-properties-of-free-standing-iii-v-nanowires>

- Σωματίδια, όπως τα ηλεκτρόνια και τα νετρόνια περιθλώνται από ένα κρυσταλλικό πλέγμα, όπως ακριβώς και οι ακτίνες Χ.



# Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο



Εικόνες TEM και αντίστροφο πλέγμα

EM images of  $\text{Co}_{0.73}\text{Fe}_{0.27}$  of (a) (110) dark field image of as-deposited sample, the scale bar is 50 nm. (b) corresponding SAED pattern of the as-deposited, (c) bright field image of annealed sample, the scale bar is 200 nm. (d) SAED pattern of the same sample as (c) using  $\sim 1.5\text{-}\mu\text{m}$ -diameter aperture showing the mixture structure of bcc and fcc phases, (e) [011] bcc diffraction pattern from grain marked 'A' in (c), and (f) [011] fcc diffraction pattern from grain marked 'B' in (c).

Πηγή: Giant magnetostriction in annealed  $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x$  thin-films, Nature Communications 2, Article number: 518 doi:10.1038/ncomms1529

Received 25 May 2011 Accepted 04 October 2011 Published 01 November 2011, [http://www.nature.com/ncomms/journal/v2/n10/fig\\_tab/ncomms1529\\_F4.html](http://www.nature.com/ncomms/journal/v2/n10/fig_tab/ncomms1529_F4.html)



# αρχή απροσδιοριστίας

- Είναι αδύνατο να γίνει ταυτόχρονα ακριβής μέτρηση της θέσης και της ορμής ενός σωματίου.
- Η αβεβαιότητα  $\delta x$  στον προσδιορισμό της θέσης  $x$ , και  $\delta p$  στον προσδιορισμό της ορμής  $p$ , είναι:

$$\delta p \delta x > h > h/2\pi$$



# στοιχεία κβαντικής μηχανικής

- Η Μηχανική είναι θεωρία που εξετάζει την κίνηση και ισορροπία σωμάτων σε κάποιο σύστημα αναφοράς.
- Η Κβαντική Μηχανική είναι γενική θεωρία μηχανικής που εφαρμόζεται σε ατομικά-υποατομικά συστήματα, όπου η κλασική μηχανική παρουσιάζει προβλήματα.
- Ισχύει και σε μεγάλα συστήματα (μεγάλη μάζα, ενέργεια, ταχύτητα), όπου όμως προτιμάται η απλούστερη κλασική μηχανική.
- Για μεγάλα συστήματα ανάγεται στην κλασική μηχανική ( αρχή της αντιστοιχίας: *για μεγάλους κβαντικούς αριθμούς  $n$  οι λύσεις τείνουν σε αυτές της κλασικής μηχανικής*)





# ΚΥΜΑΤΟΣΥΝΑΡΤΗΣΗ

- μιγαδική συνάρτηση  $\Psi(x,y,z,t)$ .  
Η  $\Psi$  και η παράγωγός της είναι ορισμένες, συνεχείς και μονότιμες για κάθε τιμή  $x,y,z,t$ .
- $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$  *πυκνότητα πιθανότητας* :  
Η πιθανότητα να βρεθεί ένα σωματίο σε χώρο  $x+dx$  είναι  $\Psi^*\Psi dx$ .
- συνθήκη κανονικοποίησης  
$$\int \Psi^*\Psi dx = 1$$



# τελεστές

Εφαρμόζουμε στην  $\Psi$  **διαφορικούς τελεστές**, που συνδέονται με **φυσικά μεγέθη** μετρήσιμα-παρατηρήσιμα (θέση, ορμή, ενέργεια κ.α)

μεγέθη

$x, y, z, f(x, y, z)$

Ορμή  $p$

Ενέργεια  $E$

τελεστες

$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, f(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

$$\hat{p} = \frac{h}{2\pi i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{E} = -\frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{d}{dt}$$



# τελεστές - μέση τιμή

- τελεστής επί συνάρτηση = σταθερά επί συνάρτηση  
π.χ  $E\Psi = \epsilon\Psi$
- Οι συναρτήσεις λέγονται *ιδιοσυναρτήσεις*.
- Οι σταθερές λέγονται *ιδιοτιμές* (είναι οι τιμές που μπορεί να πάρει το φυσικό μέγεθος που αντιστοιχεί στον τελεστή)
- ο τελεστής επενεργώντας στην συνάρτηση παράγει την τιμή του φυσικού μεγέθους που μετράμε
- Η αναμενόμενη ή μέση τιμή ενός μεγέθους  $M$  είναι

$$\langle M \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{M} \Psi dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx}$$



# ενέργεια

Η ενέργεια του συστήματος κλασικά είναι  $E=p^2/2m+V(x,y,z)$ .

Χρησιμοποιώντας τους τελεστές γράφουμε

(εξίσωση του *Schrodinger*) :

$$\hat{E}\Psi = \left( \hat{p}^2 \Psi / 2m \right) + V(x, y, z)\Psi$$

$$-\frac{\hbar}{2\pi i} \cdot \frac{d\Psi}{dt} = \left( -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \right) \cdot \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \cdot \Psi$$

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + V(x, y, z, t)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$



# χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrodinger

- με τη μέθοδο χωρισμού των μεταβλητών αναζητούμε λύσεις της μορφής  $\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z) \cdot \phi(t)$
- Στην εξίσωση του Schrodinger αντικαθιστούμε και διαιρούμε με  $\Psi = \psi \cdot \phi$
- τότε  $\Psi = \psi(x,y,z) \exp(-2\pi i E t / h)$  και η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση του Schrodinger είναι:

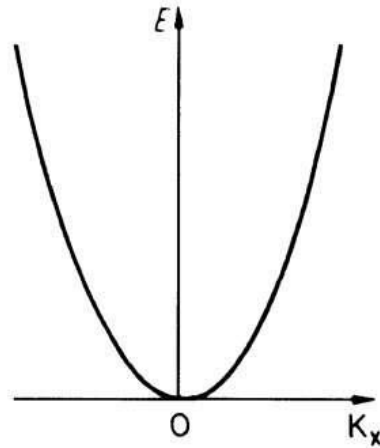
$$\hat{H}\psi = E\psi \Leftrightarrow \left( -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \right) \nabla^2 \cdot \psi + U(x, y, z) \cdot \psi = E \cdot \psi$$
$$\nabla^2 \psi + \left( \frac{8\pi^2 m}{h^2} \right) [E - U(x, y, z)] \cdot \psi = 0$$

**Σε μία διάσταση:**

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \left( \frac{8\pi^2 m}{h^2} \right) [E - U(x)] \cdot \psi = 0$$



# το ελεύθερο σωματίο - ενέργεια



Πηγή:

[http://what-when-how.com/wp-content/uploads/2011/07/tmp6C166\\_thumb.jpg](http://what-when-how.com/wp-content/uploads/2011/07/tmp6C166_thumb.jpg)

<http://what-when-how.com/electronic-properties-of-materials/energy-bands-in-crystals-fundamentals-of-electron-theory-part-1/>

- *ελεύθερο*: δεν ασκούνται δυνάμεις  
(σταθερό δυναμικό,  $dU/dr=-F=0$ )
- κινητική ενέργεια (μόνο):  
$$E=p^2/2m=h^2/2m\lambda^2=(\hbar^2/2m)k^2 \quad (p=h/\lambda = \hbar k, \quad \lambda=2\pi/k)$$
- *η ενέργεια του ελεύθερου σωματίου είναι συνεχής παραβολική συνάρτηση του  $k$*



# το ελεύθερο σωματίο - κυματοσυνάρτηση

- $E = p^2/2m = h^2/2m\lambda^2 = (\hbar^2/2m)k^2$

$$\frac{d^2\omega}{dx^2} = -\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right) \cdot \omega = -k^2\omega$$

- λύση:  $\psi = A \exp(ikx) = A \exp[(2\pi i/h)px]$

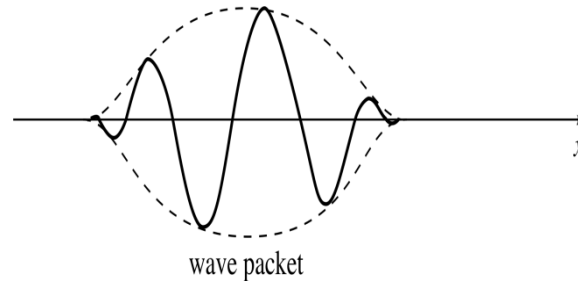
- $\Psi = A \exp[(2\pi i/h)(px - Et)] = A \exp[i(kx - \omega t)]$

*Η κυματοσυνάρτηση του ελεύθερου σωματίου είναι μια εξίσωση τρέχοντος κύματος.*

Η πυκνότητα πιθανότητας  $\Psi^* \Psi = |A|^2$  είναι ανεξάρτητη της θέσης (μή εντοπισμένο)



# το ελεύθερο σωματίο - εντοπισμός



Κυματόδεμα

Πηγή: PPLATO / FLAP (Flexible Learning Approach To Physics), PHYS 10.3: Wavefunctions, [http://www.met.reading.ac.uk/pplato2/flap/phys10\\_3.html](http://www.met.reading.ac.uk/pplato2/flap/phys10_3.html)

- εντοπισμένο ελεύθερο σωματίο: "**κυματόδεμα**" (άθροισμα κυματοσυναρτήσεων με διαφορετικές τιμές ορμής, μεταβαλλόμενο πλάτος και συχνότητα)  
$$\Psi(x,t) = \int A(k) \exp[i(kx - \omega t)] dk$$
- μεγαλύτερη αβεβαιότητα στην ορμή- μικρότερη αβεβαιότητα στη θέση





# Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Λιτσαρδάκης Γεώργιος.  
«Ημιαγωγά Υλικά: Θεωρία – Διατάξεις» Έκδοση: 1.0. Θεσσαλονίκη 2015.  
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:  
<http://eclass.auth.gr/courses/OCRS463>.



# Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά - Παρόμοια Διανομή [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>





# Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: Καρανάσιος Νικόλαος  
Θεσσαλονίκη, 2015



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ