

**ΦΥΣΙΚΗ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ  
ΑΣΚΗΣΕΙΣ**

1) Δίνεται το επίπεδο (110) στο εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc). (α) Ποιοι είναι οι δείκτες Miller αυτού του επιπέδου ως προς ένα απλό κυβικό πλέγμα (sc) και ως προς ένα χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (bcc); (β) Να βρείτε τις αποστάσεις μεταξύ διαδοχικών επιπέδων και να σχεδιάσετε τα διαδοχικά επίπεδα για τις περιπτώσεις που το πλέγμα είναι (i) απλό κυβικό, (sc), (ii) εδροκεντρωμένο κυβικό (fcc) (iii) χωροκεντρωμένο κυβικό (bcc)

bcc:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y}) \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{z} + \hat{x})$$

$$\vec{G}_{bcc} = n_1 \vec{a}^* + n_2 \vec{b}^* + n_3 \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [(n_1 + n_3)\hat{x} + (n_1 + n_2)\hat{y} + (n_2 + n_3)\hat{z}]$$

fcc:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{G}_{fcc} = n_1 \vec{a}^* + n_2 \vec{b}^* + n_3 \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [(n_1 - n_2 + n_3)\hat{x} + (n_1 + n_2 - n_3)\hat{y} + (-n_1 + n_2 + n_3)\hat{z}]$$

$$\vec{G}_{(110)fcc} = \vec{a}^* + \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} [\hat{x} + \hat{y} - \hat{z} - \hat{x} + \hat{y} + \hat{z}] = \frac{4\pi}{a} \hat{y}$$

Άρα,  $(110)_{fcc} \leftrightarrow (010)_{sc}$

$$\vec{G}_{bcc} = \frac{2\pi}{a} [(n_1 + n_3)\hat{x} + (n_1 + n_2)\hat{y} + (n_2 + n_3)\hat{z}] = \frac{2\pi}{a} (\beta \hat{y}), \text{ όπου } \beta \text{ είναι ακέραιος αριθμός.}$$

$$(n_1 + n_3) = 0$$

$$n_1 = n_2$$

$$(n_1 + n_2) = \beta \quad 2n_1 = \beta \quad \text{άρα, } n_3 = n_2 = \frac{\beta}{2} \text{ και } n_3 = -n_1 = \frac{\beta}{2} \text{ Θέτουμε } \beta = 2$$

$$(n_2 + n_3) = 0$$

Άρα το επίπεδο  $(110)_{fcc}$  είναι το επίπεδο  $(11\bar{1})_{bcc}$

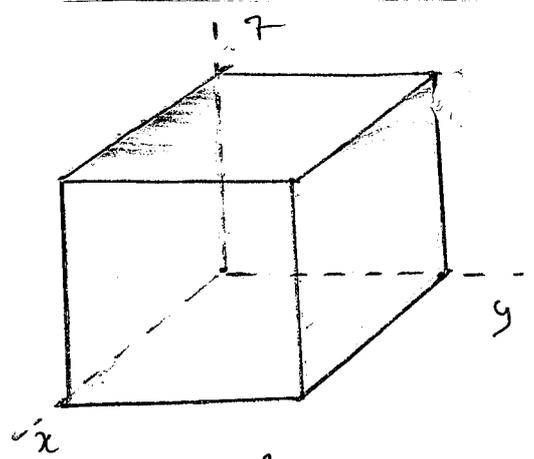
$$(110)_{fcc} \leftrightarrow (010)_{sc} \leftrightarrow (11\bar{1})_{bcc}$$

**Απλό κυβικό πλέγμα (sc):**

$$\vec{G}_{(010)sc} = \frac{2\pi}{a} (\hat{y})$$

$$|\vec{G}_{(010)sc}| = \frac{2\pi}{a}$$

$$d_{sc} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{(010)sc}|} \quad \text{Άρα} \quad d_{sc} = a$$



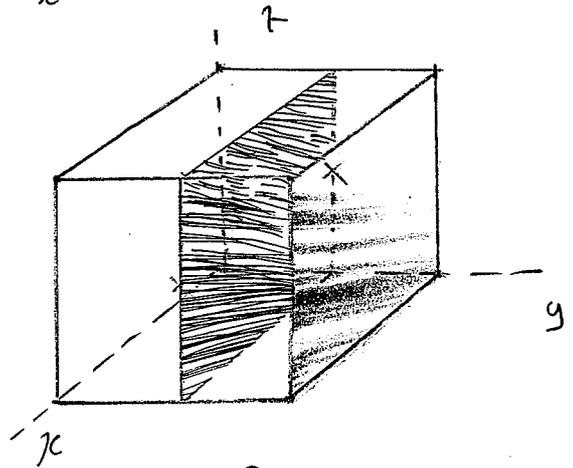
**Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc):**

$$|\vec{G}_{(110)fcc}| = \vec{a}^* + \vec{b}^* =$$

$$= \frac{2\pi}{a} [(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) + (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})] = \frac{4\pi}{a} \hat{y}$$

$$|\vec{G}_{(110)fcc}| = \frac{4\pi}{a}$$

$$d_{sc} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{(211)fcc}|} \quad \text{Άρα} \quad d_{fcc} = \frac{\sqrt{2}a}{4}$$

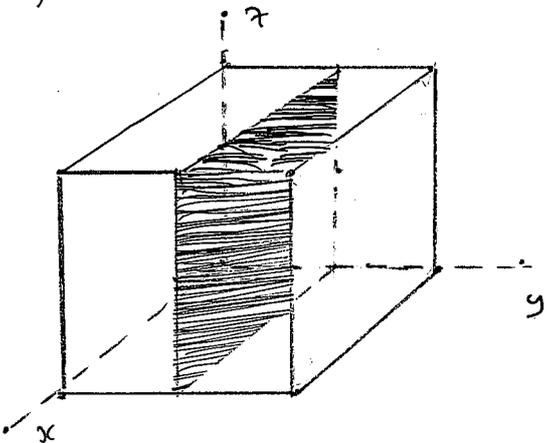


**Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (bcc):**

$$\vec{G}_{(11\bar{1})bcc} = \vec{a}^* + \vec{b}^* - \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} (2\hat{y})$$

$$|\vec{G}_{(11\bar{1})bcc}| = \frac{4\pi}{a}$$

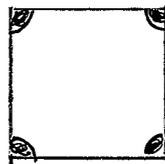
$$d_{sc} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{(11\bar{1})bcc}|} \quad \text{Άρα} \quad d_{bcc} = \frac{a}{2}$$



**Πυκνότητα (ρ) πλεγματικών σημείων**

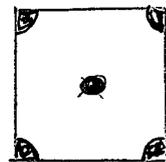
**Απλό κυβικό πλέγμα (sc):**

$$\rho = \frac{4^{(1/4)}}{a^2} = \frac{1}{a^2}$$



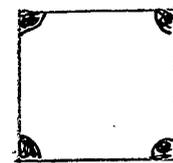
**Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc):**

$$\rho = \frac{4^{(1/4)+1}}{a^2} = \frac{2}{a^2}$$



**Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (bcc):**

$$\rho = \frac{4^{(1/4)}}{a^2} = \frac{1}{a^2}$$

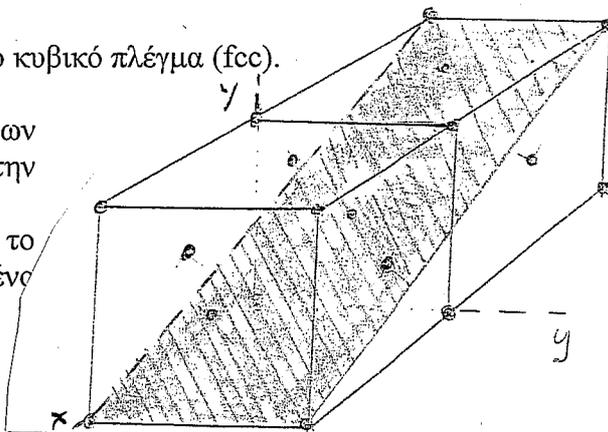


2) Το σχήμα δείχνει ένα επίπεδο σε ένα εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc).

(α) Να βρείτε τους δείκτες Miller αυτού του επιπέδου

(β) Να βρείτε τις αποστάσεις μεταξύ διαδοχικών επιπέδων και να σχεδιάσετε τα διαδοχικά επίπεδα. (γ) Να βρείτε την πυκνότητα των πλεγματικών σημείων στο επίπεδο αυτό.

(δ) Ποια θα ήταν η απάντηση στο ερώτημα (β) εάν το πλέγμα ήταν (i) απλό κυβικό και (ii) χωροκεντρωμένο κυβικό;



Οι δείκτες Miller αυτού του επιπέδου είναι (102) στο απλό κυβικό πλέγμα. Το επίπεδο αυτό είναι κάθετο

στο διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος  $\vec{G}_{(102)sc} = \frac{2\pi}{a} [\hat{x} + 2\hat{z}]$ .

(α) Στο εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc):

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{G}_{fcc} = n_1 \vec{a}^* + n_2 \vec{b}^* + n_3 \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [(n_1 - n_2 + n_3)\hat{x} + (n_1 + n_2 - n_3)\hat{y} + (-n_1 + n_2 + n_3)\hat{z}]$$

Το επίπεδο αυτό είναι κάθετο στο  $\vec{G}_{fcc} = \frac{2\pi}{a} [\beta \hat{x} + 2\beta \hat{z}]$

Άρα

$$(n_1 - n_2 + n_3) = \beta \quad (1)$$

$$(n_1 + n_2 - n_3) = 0 \quad (2)$$

$$(-n_1 + n_2 + n_3) = 2\beta \quad (3)$$

Προκύπτει από τις (1) και (3) ότι  $n_3 = \frac{3\beta}{2}$ . τότε οι (1) και (2) δίνουν  $n_1 = \frac{\beta}{2}$  και  $n_2 = \beta$ .

Θέτοντας  $\beta=2$  έχουμε  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$ ,  $n_3 = 3$ . Άρα, το επίπεδο αυτό είναι το (123) στο χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Το επίπεδο αυτό είναι κάθετο στο διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος  $\vec{G}_{(123)fcc} = \vec{a}^* + 2\vec{b}^* + 3\vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [(2)\hat{x} + (4)\hat{z}] = \frac{4\pi}{a} [\hat{x} + 2\hat{z}]$ .

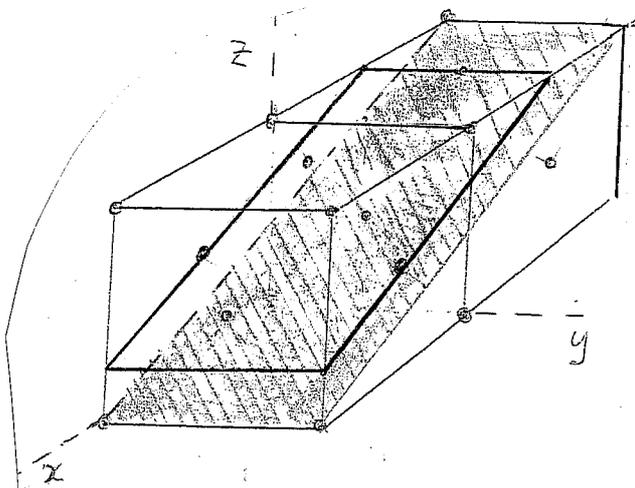
$$(β) |\vec{G}_{(123)fcc}| = |\vec{a}^* + 2\vec{b}^* + 3\vec{c}^*| = \frac{4\pi}{a} \sqrt{5}$$

Άρα η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών επιπέδων

$$\text{(στο fcc) είναι } d_{(123)fcc} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{(123)fcc}|} = \frac{2\pi}{\frac{4\pi}{a}\sqrt{5}} = \frac{a}{2\sqrt{5}}$$

(γ) Εμβαδόν:  $a\sqrt{5}a = \sqrt{5}a^2$ .

$$\text{Πυκνότητα: } \frac{1+4(\frac{1}{4})}{\sqrt{5}a^2} = \frac{2}{\sqrt{5}a^2}$$

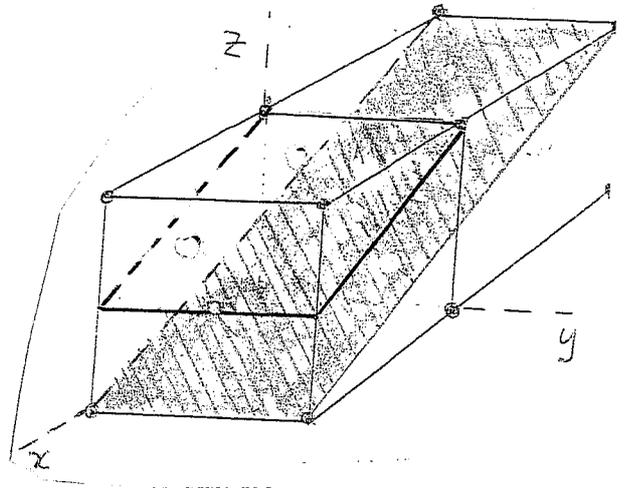


(δ) (i) Απλό κυβικό:

$$\vec{G}_{(102)sc} = \frac{2\pi}{a} [\hat{x} + 2\hat{z}].$$

Άρα η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών επιπέδων

$$(\text{στο } sc) \text{ είναι } d_{(102)sc} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{(102)sc}|} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a}\sqrt{5}} = \frac{a}{\sqrt{5}}.$$



(ii) Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (bcc):

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y}) \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{z} + \hat{x})$$

$$\vec{G}_{bcc} = n_1 \vec{a}^* + n_2 \vec{b}^* + n_3 \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [(n_1 + n_3)\hat{x} + (n_1 + n_2)\hat{y} + (n_2 + n_3)\hat{z}]$$

$$\text{Το επίπεδο } (102)_{sc} \text{ είναι κάθετο στο διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος } \vec{G}_{(102)sc} = \frac{2\pi}{a} [\hat{x} + 2\hat{z}].$$

Στο χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (bcc) το επίπεδο αυτό είναι κάθετο στο

$$\vec{G}_{fcc} = \frac{2\pi}{a} [\beta \hat{x} + 2\beta \hat{z}]:$$

Άρα

$$(n_1 + n_3) = \beta \quad (1)$$

$$(n_1 + n_2) = 0 \quad (2)$$

$$(n_2 + n_3) = 2\beta \quad (3)$$

Από την εξ. (2):  $n_2 = -n_1$ . Τότε από τις (1) και (3) προκύπτει ότι  $n_1 = -\frac{\beta}{2}$ ,  $n_3 = \frac{3\beta}{2}$ .

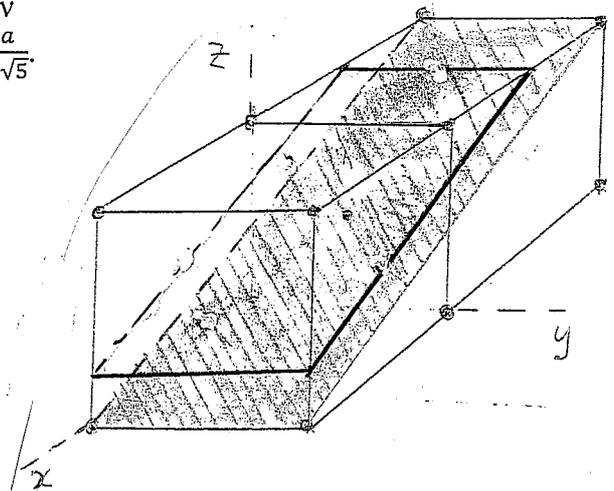
Θέτοντας  $\beta=2$  έχουμε  $n_1 = -1$ ,  $n_2 = 1$ ,  $n_3 = 3$ . Άρα, το επίπεδο αυτό είναι το  $(\bar{1} 1 3)$  στο χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Το επίπεδο αυτό είναι κάθετο στο διάνυσμα του αντιστρόφου

$$\text{πλέγματος } \vec{G}_{(\bar{1} 1 3)bcc} = -\vec{a}^* + 2\vec{b}^* + 3\vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [(2)\hat{x} + (4)\hat{z}] = \frac{4\pi}{a} [\hat{x} + 2\hat{z}].$$

$$|\vec{G}_{(\bar{1} 1 3)bcc}| = |-\vec{a}^* + 2\vec{b}^* + 3\vec{c}^*| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{5}$$

Άρα η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών επιπέδων

$$(\text{στο } bcc) \text{ είναι } d_{(\bar{1} 1 3)bcc} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{(\bar{1} 1 3)bcc}|} = \frac{2\pi}{\frac{4\pi}{a}\sqrt{5}} = \frac{a}{2\sqrt{5}}.$$



$$(123)_{fcc} \leftrightarrow (102)_{sc} \leftrightarrow (\bar{1} 1 3)_{bcc}$$

3) Τα θεμελιώδη διανύσματα ενός εξαγωνικού πλέγματος είναι τα  $\vec{a} = a \hat{x}$ ,  $\vec{b} = -\frac{a}{2} \hat{x} + \frac{a\sqrt{3}}{2} \hat{y}$  και  $\vec{c} = c \hat{z}$ .

(α) Να βρείτε τον όγκο της θεμελιώδους κυψελίδας αυτού του εξαγωνικού πλέγματος.

(β) Να βρείτε τα θεμελιώδη διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος.

(γ) Να σχεδιάσετε την πρώτη ζώνη Brillouin αυτού του εξαγωνικού πλέγματος

$$(α) V_c = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = \left[ a\hat{x} \times \left( -\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \right] \cdot c\hat{z} = \frac{a^2 c \sqrt{3}}{2} (\hat{x} \times \hat{y}) \cdot \hat{z} = \frac{a^2 c \sqrt{3}}{2} (\hat{z} \cdot \hat{z}) = \frac{a^2 c \sqrt{3}}{2}$$

$$(β) \vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{2\pi}{\frac{a^2 c \sqrt{3}}{2}} \left( -\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \times c\hat{z}$$

$$= \frac{4\pi}{a^2 c \sqrt{3}} \left[ -\frac{ac}{2} (\hat{x} \times \hat{z}) + \frac{ac\sqrt{3}}{2} (\hat{y} \times \hat{z}) \right] = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \left[ \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right] = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} [\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}]$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{c} \times \vec{a}) = \frac{4\pi}{a^2 c \sqrt{3}} [c\hat{z} \times a\hat{x}] = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \hat{y}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a} \times \vec{b}) = \frac{4\pi a^2}{a^2 c \sqrt{3}} \left[ \hat{x} \times \left( -\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \right] = \frac{2\pi}{c} \hat{z}$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} [\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}], \quad \vec{b}^* = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \hat{y}, \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{c} \hat{z}$$

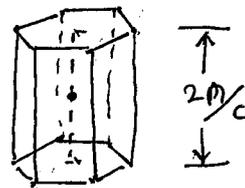
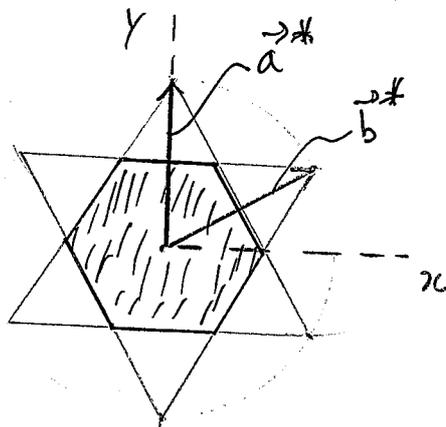
(γ) Πρώτη ζώνη Brillouin:

$$|\vec{a}^*| = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} [\sqrt{(3+1)}] = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

$$|\vec{b}^*| = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* = \left( \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \right)^2 \cos \theta, \quad \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} [\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}] \cdot \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \hat{y} = \frac{8\pi^2}{3a^2}$$

Από τις δύο παραπάνω εξισώσεις προκύπτει ότι  $\cos \theta = \frac{1}{2}$  και άρα  $\theta = 60^\circ$



Πρόβολη ΠΑΕ  
B.Z. στο  
ΕΠΙΠΕΔΟ (x, y) .

ΦΥΣΙΚΗ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ

4) Ακτίνες x με μήκος κύματος  $\lambda$  προσπίπτουν σε κρύσταλλο με εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc) με κατεύθυνση  $[ \bar{1} \bar{1} 0 ]$  και υφίστανται έντονη σκέδαση Bragg (συμβολή πρώτης τάξης) στην κατεύθυνση  $[ 1 1 0 ]$ . Οι δείκτες Miller δίνονται ως προς το απλό κυβικό πλέγμα (sc) (α) Από ποια οικογένεια επιπέδων γίνεται η σκέδαση; Να βρείτε τους δείκτες Miller αυτών των επιπέδων ως προς το απλό κυβικό πλέγμα (sc) και ως προς το εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc). Να σχεδιάσετε ένα τέτοιο επίπεδο. (β) Ποια είναι η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών επιπέδων που βρήκατε στο (α); (γ) Ποια είναι η απόσταση μεταξύ δύο πλησιέστερων γειτόνων στον κρύσταλλο αυτόν (συναρτήσει του  $\lambda$ );

$$\vec{k} = \gamma(-\hat{x} - \hat{y}), \quad \vec{k}' = \gamma(-\hat{x} + \hat{y})$$

Η σκέδαση είναι ελαστική. Άρα,  $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$  και  $\gamma = \gamma'$ . Τότε,  $|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \gamma$

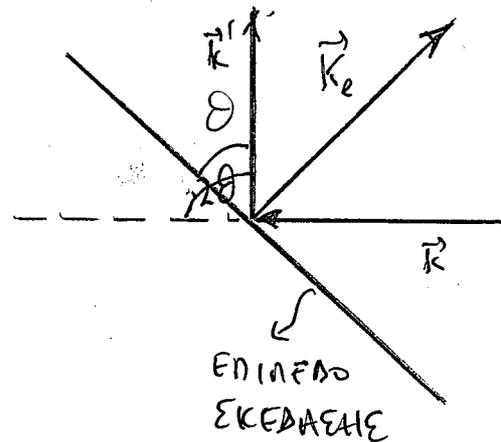
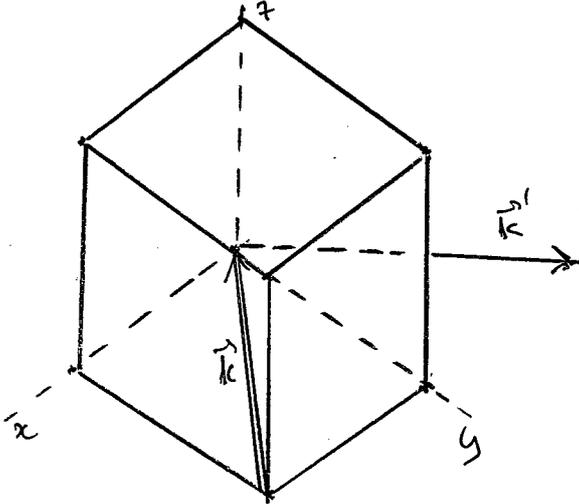
$$\vec{k} \cdot \vec{k}' = |\vec{k}| |\vec{k}'| \cos(2\theta) = \gamma^2 \cos(2\theta)$$

$$\text{Όμως, } \vec{k} \cdot \vec{k}' = \gamma(-\hat{x} - \hat{y}) \cdot \gamma(-\hat{x} + \hat{y}) = \gamma^2(-1 + 1) = 0.$$

Τότε  $\cos(2\theta) = 0$  και συνεπώς  $2\theta = 90^\circ$ ,  $\theta = 45^\circ$

$$\text{Συνθήκη Bragg: } n\lambda = 2d \sin\theta = 2d \frac{\sqrt{2}}{2} = \sqrt{2} d. \text{ Για } n=1, \quad \lambda = \sqrt{2} d$$

Άρα, η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών πλεγματικών επιπέδων είναι  $d = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}$  (1)



Η σκέδαση γίνεται από το επίπεδο που είναι κάθετο στο

$$\vec{G} = \vec{k}' - \vec{k} = \gamma(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{x} + \hat{y}) = 2\gamma \hat{y}$$

Στο απλό κυβικό πλέγμα, sc, αυτό αντιστοιχεί στο επίπεδο  $(0 1 0)_{sc}$

Ποιο είναι το  $\vec{G}$  στο χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα;

$$\vec{G}_{bcc} = n_1 \vec{a}^* + n_2 \vec{b}^* + n_3 \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [(n_1 + n_3)\hat{x} + (n_1 + n_2)\hat{y} + (n_2 + n_3)\hat{z}]$$

Αναζητούμε  $\vec{G}_{bcc} = \frac{2\pi}{a} (\beta \hat{y})$  όπου  $a$  είναι ακέραιος αριθμός.

$$(n_1 + n_3) = 0$$

$$(n_1 + n_2) = \beta$$

$$(n_2 + n_3) = 0$$

Από τις εξισώσεις αυτές προκύπτει ότι:  $n_1 = n_2$ ,  $2n_1 = \beta$ , Τότε,  $n_1 = n_2 = \frac{\beta}{2}$  και  $n_3 = -\frac{\beta}{2}$

Θέτουμε  $\beta = 2$  και έχουμε τότε το επίπεδο  $(1\ 1\ \bar{1})_{fcc}$

$$\text{Άρα, } \vec{G}_{fcc} = \vec{a}^* + \vec{b}^* - \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} [2\hat{y}] = \frac{2\pi}{a} [2\hat{y}]$$

Επειδή όμως  $\vec{G} = \vec{k}' - \vec{k} = 2\gamma \hat{y}$ , ισχύει η σχέση  $\gamma = \frac{2\pi}{a}$

$$|\vec{G}_{(1\ 1\ \bar{1})fcc}| = |\vec{a}^* + \vec{b}^* - \vec{c}^*| = \left| \frac{\pi}{a} \hat{y} \right| = \frac{\pi}{a}$$

Η απόσταση,  $d$ , μεταξύ δύο πλεγματικών επιπέδων είναι  $d_{bcc} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{(1\ 1\ \bar{1})fcc}|} = \frac{a}{2}$

$$d_{fcc} = \frac{a}{2} \quad (2)$$

Από τις εξισώσεις (1) και (2) προκύπτει ότι  $d_{fcc} = \frac{a}{2} = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}$  και άρα  $a = \sqrt{2} \lambda$

Στο εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα η πλησιέστερη απόσταση μεταξύ πλεγματικών σημείων είναι

$$S_{min} = \frac{\sqrt{2}}{2} a$$

$$\text{Άρα, επειδή } a = \sqrt{2} \lambda, \quad S_{min} = \frac{\sqrt{2}}{2} a = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{2} \lambda = \lambda$$

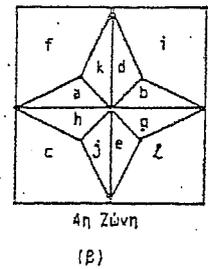
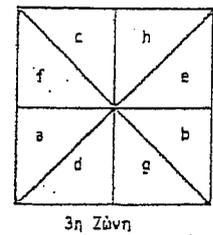
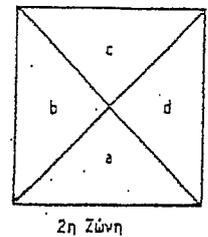
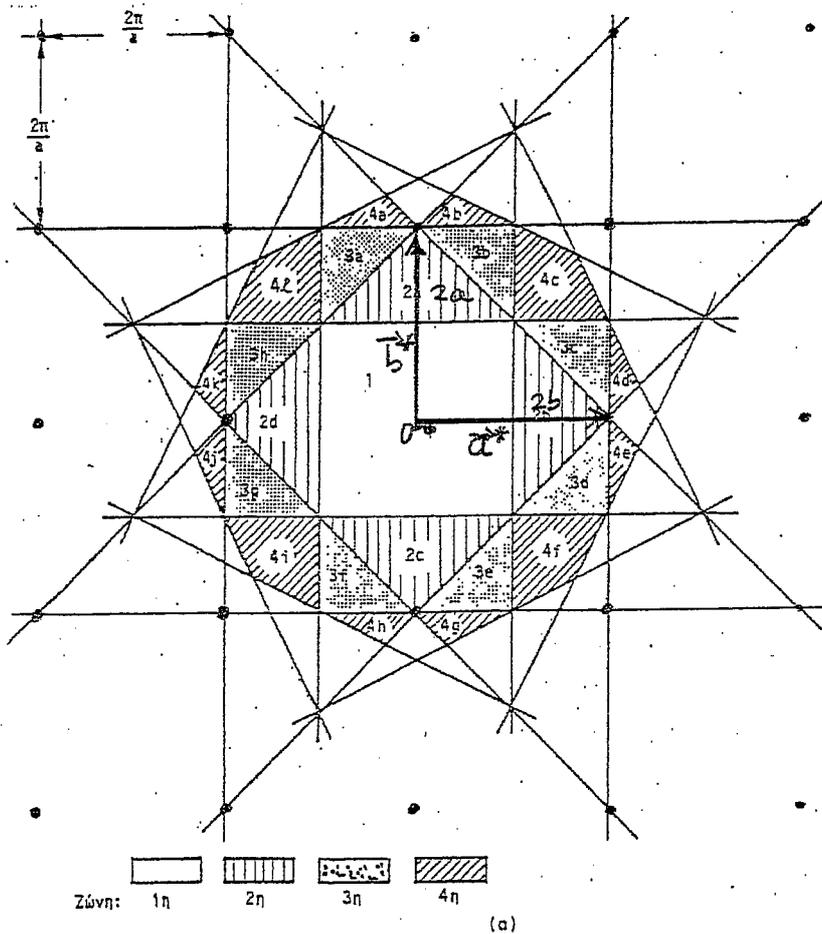
$$\boxed{S_{min} = \lambda}$$

ΦΥΣΙΚΗ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ

ΑΣΚΗΣΕΙΣ (2)

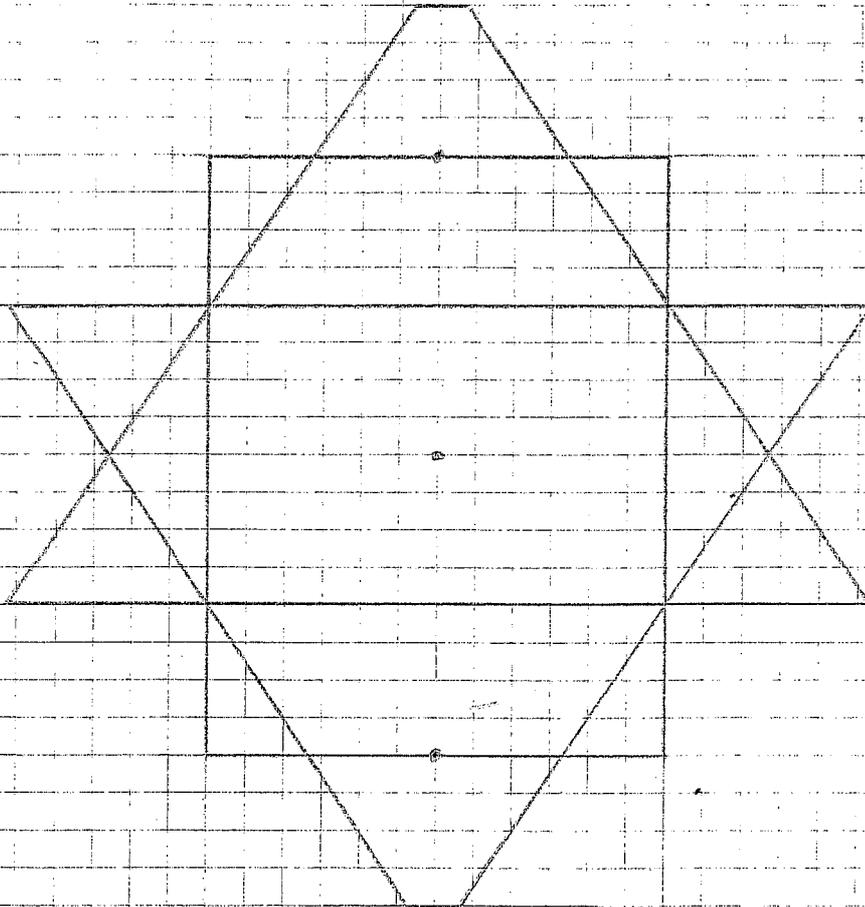
30/4/2012

5) Το σχήμα (α) δείχνει τις τέσσερις πρώτες ζώνες Brillouin για ένα τετράγωνο πλέγμα,  $\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$ ,  $\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$ . Να βρείτε με ποια διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος,  $\vec{G} = m_1 \vec{a}^* + m_2 \vec{b}^*$ , μετατοπίζεται το κάθε τμήμα της 2<sup>ης</sup>, 3<sup>ης</sup>, και 4<sup>ης</sup> ζώνης Brillouin στο ανηγμένο σχήμα (σχήμα (β)).



2 <sup>η</sup> ζώνη Brillouin	Μετατόπιση κατά:	3 <sup>η</sup> ζώνη Brillouin	Μετατόπιση κατά:	4 <sup>η</sup> ζώνη Brillouin	Μετατόπιση κατά:
2a	$-\vec{b}^*$	3a	$-\vec{b}^*$	4a	$-\vec{b}^*$
2b	$-\vec{a}^*$	3b	$-\vec{b}^*$	4b	$-\vec{b}^*$
2c	$+\vec{b}^*$	3c	$-\vec{a}^*$	4c	$-(\vec{a}^* + \vec{b}^*)$
2d	$+\vec{a}^*$	3d	$-\vec{a}^*$	4d	$-\vec{a}^*$
		3e	$+\vec{b}^*$	4e	$-\vec{a}^*$
		3f	$+\vec{b}^*$	4f	$-\vec{a}^* + \vec{b}^*$
		3g	$+\vec{a}^*$	4g	$+\vec{b}^*$
		3h	$+\vec{a}^*$	4h	$+\vec{b}^*$
				4i	$(\vec{a}^* + \vec{b}^*)$
				4j	$+\vec{a}^*$
				4k	$+\vec{a}^*$
				4l	$\vec{a}^* - \vec{b}^*$

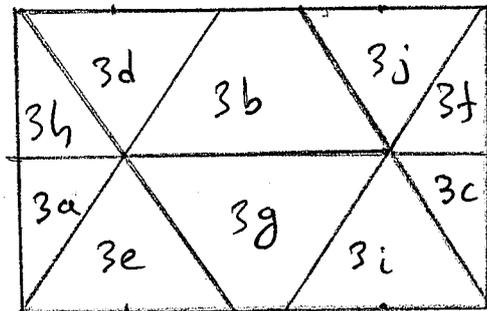
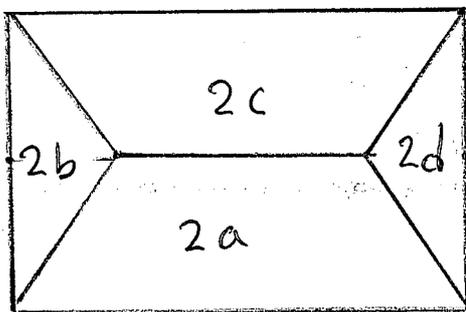
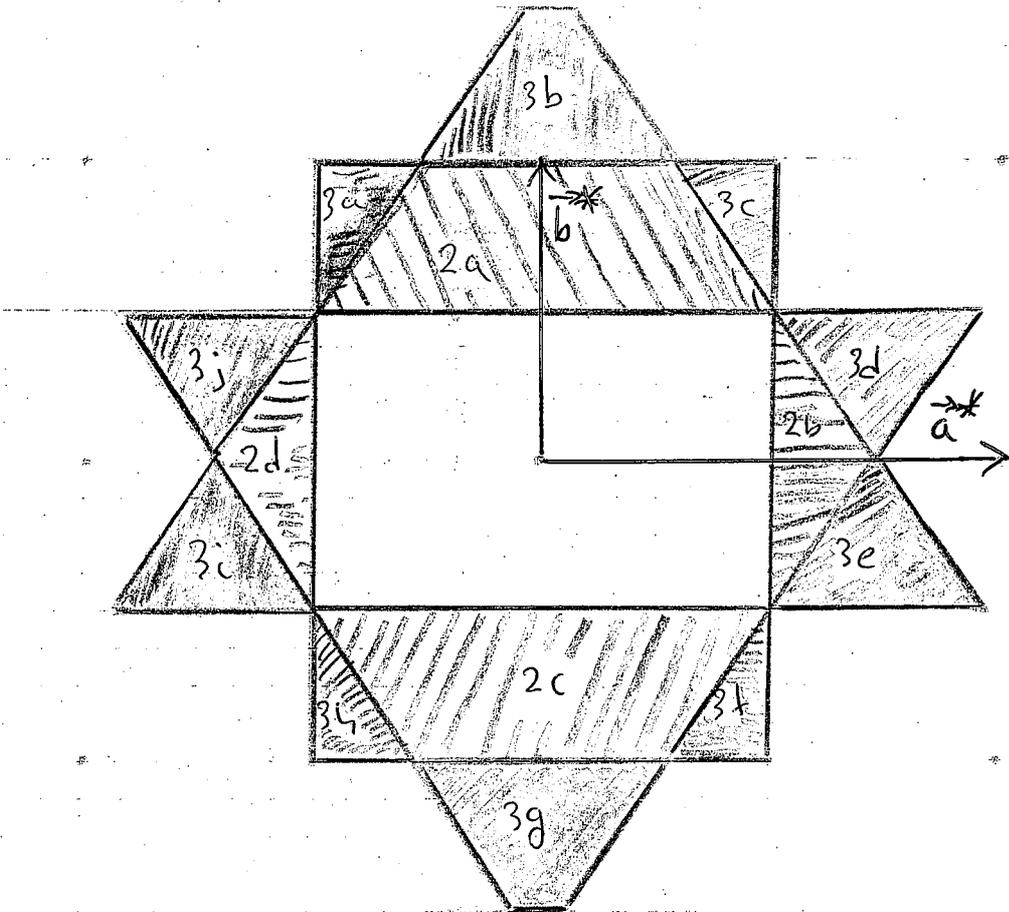
6) Το σχήμα δείχνει τις τρεις πρώτες ζώνες Brillouin ενός διδιάστατου ορθογώνιου πλέγματος στο επίπεδο  $(x,y)$  με μήκη ακμών  $\vec{a} = 2a\hat{x}$  και  $\vec{b} = 3a\hat{y}$ . (α) Να βρείτε τα θεμελιώδη διανύσματά του αντιστρόφου πλέγματος  $\mathbf{a}^*$  και  $\mathbf{b}^*$ . (β) Να κάνετε την αναγωγή της δεύτερης και της τρίτης ζώνης Brillouin στην περιοχή της πρώτης ζώνης. Με ποια μετατόπιση κατά μοναδιαία διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος  $\vec{G} = m_1\vec{a}^* + m_2\vec{b}^*$  γίνεται η κάθε μετατόπιση; (γ) (i) Ηλεκτρόνια κινούνται σε αυτό το διδιάστατο «κενό πλέγμα» [ $U(\mathbf{r})=0$ ]. Σχεδιάστε την καμπύλη σταθερής ενέργειας για την περίπτωση  $E = (3\hbar^2/20m)(\pi/a)^2$  στο επεκταμένο σχήμα. Σχεδιάστε τα τμήματα αυτών των καμπυλών σε σχήματα ανηγμένης ζώνης. (ii) Πώς τροποποιούνται οι καμπύλες αν υπάρχει ένα ασθενές δυναμικό  $U(\mathbf{r}) \neq 0$ ; Να γραμμοσκιάσετε τις περιοχές των ηλεκτρονίων που προκύπτουν στα ερωτήματα (γi) και (γii).



$$\vec{a} = 2a\hat{x}, \vec{b} = 3a\hat{y}, \perp: \vec{c} = a\hat{z} \quad V_c = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = 6a^3(\hat{x} \times \hat{y}) \cdot \hat{z} = 6a^3$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{6a^3} (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{2\pi}{6a^3} 3a^2(\hat{y} \times \hat{z}) = \frac{\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{6a^3} (\vec{c} \times \vec{a}) = \frac{2\pi}{6a^3} 2a^2(\hat{z} \times \hat{x}) = \frac{2\pi}{3a} \hat{y}$$



2a: Alkarsinan keri  $-\vec{b}^*$

2b: " "  $-\vec{a}^*$

2c: " "  $\vec{b}^*$

2d: " "  $\vec{a}^*$

3a, 3b, 3c Alkarsinan keri  $-\vec{b}^*$

3d, 3e " "  $-\vec{a}^*$

3f, 3g, 3h " "  $\vec{b}^*$

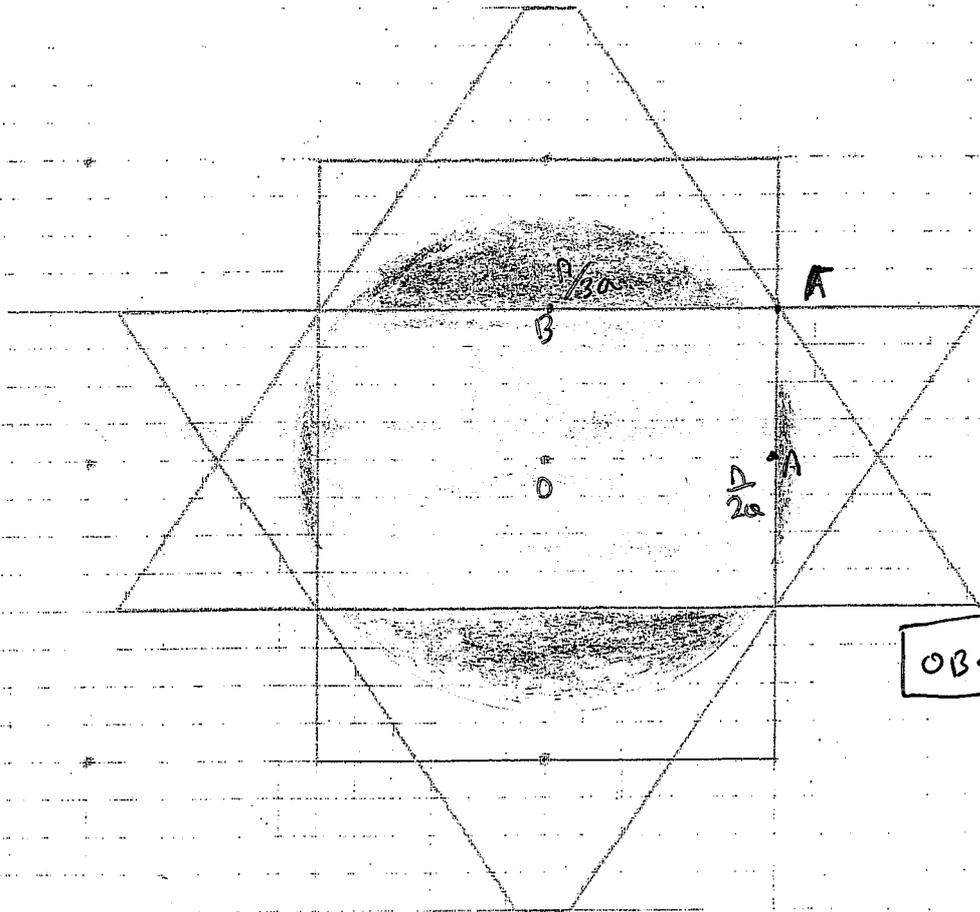
3i, 3j " "  $\vec{a}^*$

(6-2)

$$U(r) = 0$$

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{10} \frac{n^2}{a^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$k = \sqrt{\frac{3}{10}} \frac{n}{a} = \dots$$



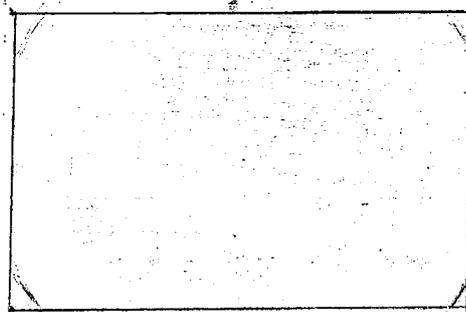
$$OA = \frac{n}{2a}$$

$$OB = \frac{n}{3a}$$

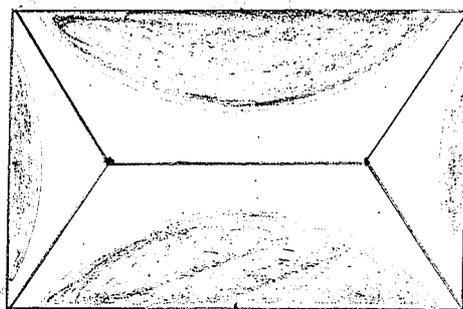
$$OF = \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{n}{a}$$

=

$$OB < OA < k < OF$$

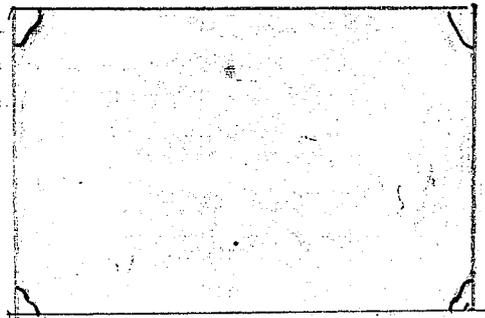
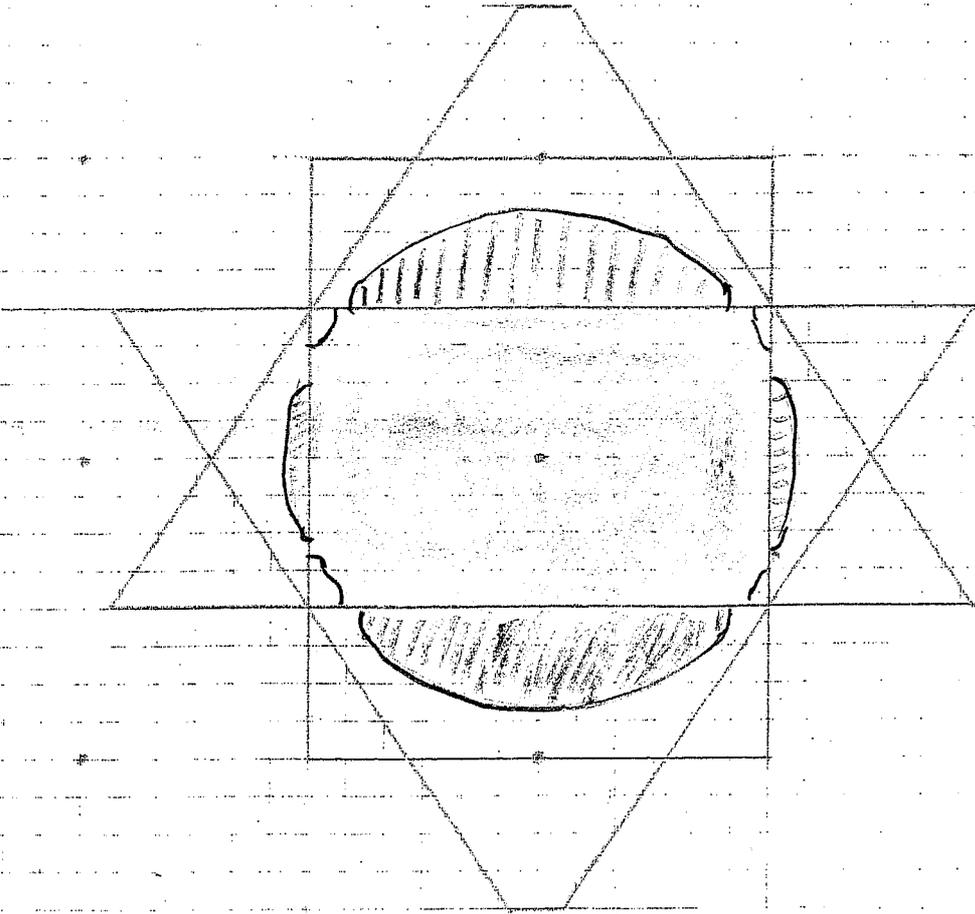


Мікропіна  
сум 1<sup>й</sup> фін  
Бріллоуін

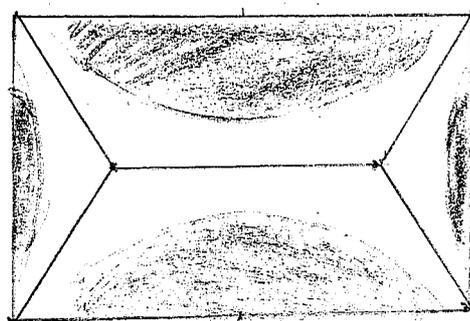


Мікропіна  
сум 2<sup>й</sup> фін  
фін Бріллоуін.

$$U(r) \neq 0$$



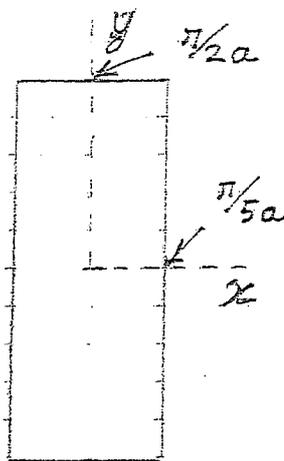
η κυρτότατα ούρα  
1<sup>η</sup> του Brillouin



η κυρτότατα ούρα  
δεύτερη του Brillouin.

$$G=4$$

7) Το σχήμα δείχνει την πρώτη ζώνη Brillouin ενός διδιάστατου ορθογώνιου πλέγματος στο επίπεδο  $xy$ . (α) Να βρείτε τα θεμελιώδη διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος  $\mathbf{a}^*$  και  $\mathbf{b}^*$ . Να βρείτε τα θεμελιώδη διανύσματα  $\mathbf{a}$  και  $\mathbf{b}$ . (γ) Να σχεδιάσετε τη δεύτερη ζώνη Brillouin.



(γ) Ηλεκτρόνια κινούνται σε αυτό το διδιάστατο «κενό πλέγμα» [ $U(\vec{r})=0$ ]. Σχεδιάστε τις καμπύλες σταθερής ενέργειας για την περίπτωση  $E = (9 \hbar^2/200m)(\pi/a)^2$  σε σχήματα ανηγμένης ζώνης.

(δ) Πώς τροποποιούνται οι καμπύλες αν υπάρχει ένα ασθενές δυναμικό  $U(\vec{r}) \neq 0$ ;

$$\vec{a}^* = 2\left(\frac{\pi}{5a}\hat{x}\right) = \frac{2\pi}{5a}\hat{x} \quad \vec{b}^* = 2\left(\frac{\pi}{2a}\hat{y}\right) = \frac{\pi}{a}\hat{y}$$

$$\perp: \vec{a} = \alpha\hat{x} + \beta\hat{y}, \quad \vec{b} = \gamma\hat{x} + \delta\hat{y}$$

$$\text{Γνωρίζουμε ότι } \vec{a} \cdot \vec{a}^* = 2\pi, \quad \vec{a} \cdot \vec{b}^* = 0, \quad \vec{b} \cdot \vec{a}^* = 0, \quad \vec{b} \cdot \vec{b}^* = 2\pi$$

$$\vec{a} \cdot \vec{a}^* = (\alpha\hat{x} + \beta\hat{y}) \cdot \frac{2\pi}{5a}\hat{x} = \frac{2\pi\alpha}{5a} = 2\pi \Rightarrow \boxed{\alpha = 5a}$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b}^* = (\alpha\hat{x} + \beta\hat{y}) \cdot \frac{\pi}{a}\hat{y} = \frac{\beta\pi}{a} = 0 \Rightarrow \boxed{\beta = 0}$$

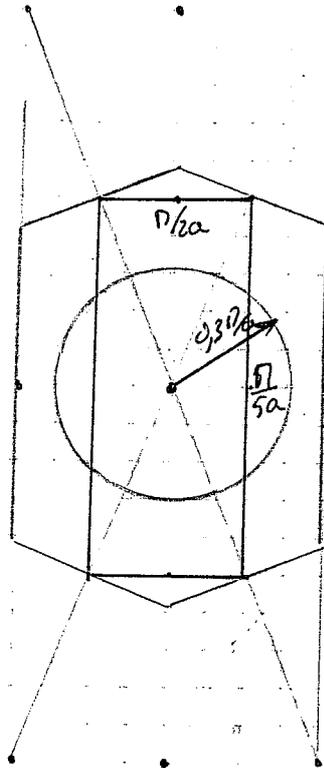
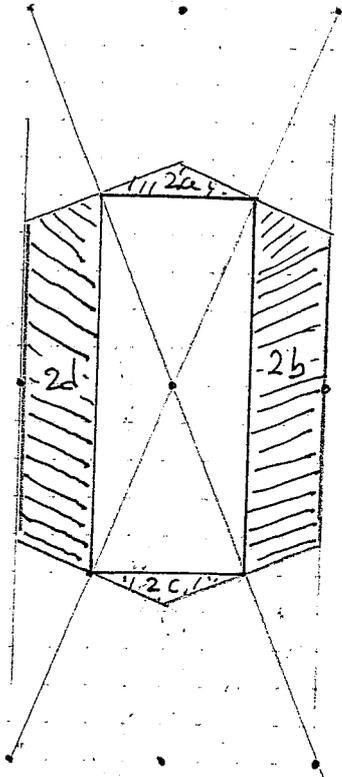
$$\vec{b} \cdot \vec{a}^* = (\gamma\hat{x} + \delta\hat{y}) \cdot \frac{2\pi}{5a}\hat{x} = \frac{2\pi\gamma}{5a} = 0 \Rightarrow \boxed{\gamma = 0}$$

$$\vec{b} \cdot \vec{b}^* = (\gamma\hat{x} + \delta\hat{y}) \cdot \frac{\pi}{a}\hat{y} = \frac{\pi\delta}{a} = 2\pi \Rightarrow \boxed{\delta = 2a}$$

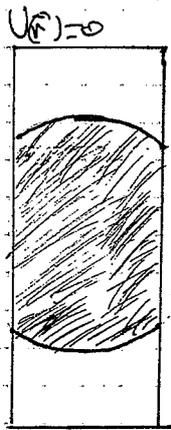
$$\text{Άρα: } \vec{a} = 5a\hat{x}, \quad \vec{b} = 2a\hat{y}$$

$$E = \frac{9\hbar^2}{200m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{9}{100} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \Rightarrow k^2 = \frac{9}{100} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

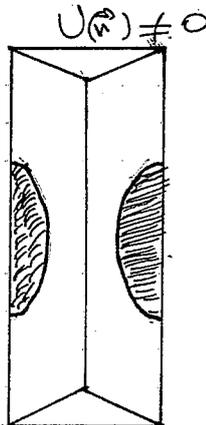
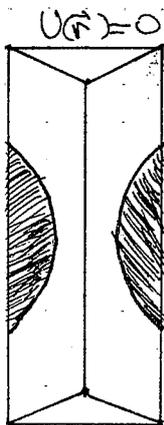
$$\therefore k = 0, \pm \frac{3\pi}{a}$$



1<sup>st</sup> zone  
Brillouin



2<sup>nd</sup> zone  
Brillouin



8) Ένα ηλεκτρόνιο κινείται σε μονοδιάστατο

Η ενέργειά του είναι  $E(\vec{k}) = E_1 + (E_2 - E_1) \sin^2\left(\frac{ak_x}{2}\right)$

Θεωρούμε ότι ένα σταθερό, χρονικά ανεξάρτητο, ηλεκτρικό πεδίο  $\vec{E} = E_x \hat{x}$ , ( $E_x > 0$ ) εφαρμόζεται κατά μήκος του κρυστάλλου. Να υπολογίσετε την ταχύτητα ομάδας  $v_g$  και την ενεργό μάζα  $m^*$  του ηλεκτρονίου. Να δείξετε ότι το ηλεκτρόνιο, που θεωρούμε ότι δεν σκεδάζεται, εκτελεί περιοδική κίνηση στον πραγματικό χώρο και να υπολογίσετε την περίοδο  $T$ . Να συμπληρώσετε τον παρακάτω πίνακα, θεωρώντας ότι το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στον

$t$	$k$	$E(k)$	$v_g$	$m^*$
0				
$(1/4)T$				
$(1/2)T$				
$(3/4)T$				
$T$				

«πυθμένα» της ενεργειακής ζώνης όταν  $t = 0$ . Πότε αποκτά το ηλεκτρόνιο για πρώτη φορά κυματόνισμα  $k_x = -\frac{\pi}{2a}$ ; Να σχεδιάσετε τις καμπύλες της ενέργειας  $E(k)$ , της ταχύτητας ομάδας  $v_g$  και της ενεργού μάζας  $m^*$  συναρτήσει του  $k_x$ .

$$v_g(k_x) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_x} = \frac{a}{\hbar} (E_2 - E_1) \sin \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_x}{2}$$

$$\frac{d^2E}{dk_x^2} = a(E_2 - E_1) \frac{a}{2} \left[ \cos^2 \left( \frac{ak_x}{2} \right) - \sin^2 \left( \frac{ak_x}{2} \right) \right]$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk_x^2} = \frac{a^2}{2\hbar^2} (E_2 - E_1) \left[ \cos^2 \left( \frac{ak_x}{2} \right) - \sin^2 \left( \frac{ak_x}{2} \right) \right]$$

$$F = -eE = \frac{dP}{dt} = \hbar \frac{dk_x}{dt}$$

Άρα,  $k_x(t) = k_{x_0} - \frac{eE}{\hbar} t$  Θέτουμε  $k_x(t=0) = k_{x_0} = 0$ .

Συνεπώς,  $v_g(t) = \frac{a}{\hbar} (E_2 - E_1) \sin\left(-\frac{aeE}{2\hbar} t\right) \cos\left(-\frac{aeE}{2\hbar} t\right) = \frac{a}{2\hbar} (E_2 - E_1) \sin\left(-\frac{aeE}{\hbar} t\right)$

Άρα,  $T = \frac{2\pi\hbar}{aeE}$

$t$	$k$	$E(k)$	$v_g$	$m^*$
0	0	$E_1$	0	$2\hbar^2/[a^2(E_2-E_1)]$
$(1/4)T$	$-\pi/(2a)$	$(E_1+E_2)/2$	$a(E_2-E_1)/(2\hbar)$	$\rightarrow \pm \infty$
$(1/2)T$	$-\pi/a$	$E_2$	0	$-2\hbar^2/[a^2(E_2-E_1)]$
$(3/4)T$	$-3\pi/(2a)$	$(E_1+E_2)/2$	$-a(E_2-E_1)/(2\hbar)$	$\rightarrow \mp \infty$
$T$	$-2\pi/a$	$E_1$	0	$2\hbar^2/[a^2(E_2-E_1)]$

