

Άσκηση 3

Οι ενεργειακές ζώνες των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας του αλουμινίου (κρύσταλλος fcc πλεγματοτικής σταθεράς a) εντός του μη αναγωγίσιμου πολυέδρου της πρώτης ζώνης Brillouin, το οποίο ορίζεται από τα σημεία $\Gamma:(0,0,0)$, $X:(1,0,0)$, $W:(1,1/2,0)$, $L:(1/2,1/2,1/2)$, $U:(1,1/4,1/4)$, $K:(3/4,3/4,0)$ σε μονάδες $2\pi/a$, υπολογίζονται από τις ιδιοτιμές του πίνακα

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2(\mathbf{k}-\mathbf{K}_1)^2}{2m} & b & b & c \\ b & \frac{\hbar^2(\mathbf{k}-\mathbf{K}_2)^2}{2m} & c & b \\ b & c & \frac{\hbar^2(\mathbf{k}-\mathbf{K}_3)^2}{2m} & b \\ c & b & b & \frac{\hbar^2(\mathbf{k}-\mathbf{K}_4)^2}{2m} \end{pmatrix}.$$

Τα διανύσματα αντιστρόφου πλέγματος που υπεισέρχονται είναι (σε μονάδες $2\pi/a$): $\mathbf{K}_1 = (0,0,0)$, $\mathbf{K}_2 = (1,1,1)$, $\mathbf{K}_3 = (1,1,-1)$, $\mathbf{K}_4 = (2,0,0)$ και $2ma^2b/h^2 = 0.0179$, $2ma^2c/h^2 = 0.0562$. Να σχεδιασθούν οι ενεργειακές ζώνες μέχρι ενέργεια $E: 2ma^2E/h^2 = 1.5$ κατά μήκος των διευθύνσεων υψηλής συμμετρίας WL, LG, GX, XW, WK, διαδοχικά, μαζί με τις αντίστοιχες ενεργειακές ζώνες των ελευθέρων ηλεκτρονίων.