

5.8 晶体能带的对称性

平移对称性

点群对称

时间反演对称

能带的图示

对称性分析

晶体具有对称性，因而晶体中电子的运动状态也会具有对称性，所以表述运动状态的本征能量和本征态也具有对称性，了解了这种对称性，对于我们理解能带性质、简化要处理的问题会很有帮助。比如在计算和绘制 k 空间的能带图时，就可以充分利用其对称性质。

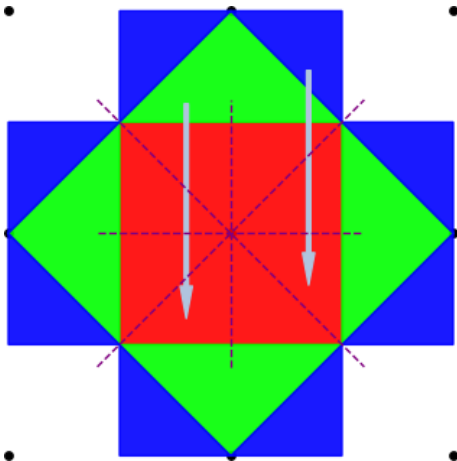
晶体的对称性包括点对称操作和平移对称性，它们都会反映到本征能量的对称性上。

平移对称性: $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})$

Bloch 定理一节中曾指出简约波矢 \mathbf{k} 表示原胞之间电子波函数位相的变化, 如果 \mathbf{k} 改变一个倒格矢量, 它们所标志的原胞之间波函数位相的变化是相同的, 也就是说 \mathbf{k} 和 $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ 是等价的, 从这点出发我们也可认为是 k 空间的周期函数, 其周期等于倒格矢。

简约波矢的取值范围就是倒易空间的 Wigner-Seitz 原胞, 即第一布里渊区内。我们利用这种平移对称性可以将第二 Brillouin 区的每一块各自平移一个倒格矢而与第一 Brillouin 区重合。同理, 更高的 Brillouin 区也可通过适当的平移与第一区重合, 因此我们可以把注意力仅限制在第一区内, 它包含了晶体能带的所有必要信息。

应特别注意, 这个表达式只是对同一能带才正确。



点群对称

如果 α 为晶体所属点群 G 的任一点对称操作，那么对于非简并能带有 $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\alpha\mathbf{k})$ 。证明如下。

点群操作满足如下性质：

$\alpha \in G \Rightarrow \alpha^{-1} \in G$; \mathbf{R} 是格点 $\Rightarrow \alpha\mathbf{R}, \alpha^{-1}\mathbf{R}$ 也是格点;

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (\alpha\mathbf{A}) \cdot (\alpha\mathbf{B})$ 点群变化不改变矢量内积

$$\mathcal{H}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \qquad \phi(\mathbf{r}) = \alpha\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\alpha^{-1}\mathbf{r})$$

$$\alpha\mathcal{H}\alpha^{-1}\alpha\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \alpha\varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{H}\phi(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\phi(\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \alpha\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\alpha^{-1}\mathbf{r} + \alpha^{-1}\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \alpha^{-1}\mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\alpha^{-1}\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \alpha^{-1}\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r}) = e^{i(\alpha\mathbf{k}) \cdot (\alpha\alpha^{-1}\mathbf{R})} \phi(\mathbf{r}) = e^{i(\alpha\mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}} \phi(\mathbf{r}) = \psi_{n\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}\phi = \mathcal{H}\psi_{n\alpha\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\alpha\mathbf{k})\psi_{n\alpha\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\alpha\mathbf{k})\phi$$

$$\Leftrightarrow \quad \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\alpha\mathbf{k})$$

点群对称

如果 α 为晶体所属点群 G 的任一点对称操作，那么对于非简并能带有 $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\alpha\mathbf{k})$ 。

这表明，在 \mathbf{k} 空间中 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 具有与晶体点群完全相同的对称性。这样就可以在晶体能带计算和表述中把第一布里渊区分成若干个等价的小区域，只取其中一个就足够了。区域大小为第一布里渊区的 $1/f$ ， f 为晶体点群对称操作元素数。如三维立方晶体 $f = 48$ 。

原胞是晶体点阵的最小重复单位，因此点阵具有的点群对称性全部反映在原胞中是能够理解的。

点对称操作：简并情况

如果能带存在简并，对称关系比较复杂。例如简立方晶格里 p -轨道扩展成的能带

$$\varepsilon_{p_x}(\mathbf{k}) = \varepsilon_p - J_0 - 2J_1 \cos(k_x a) - 2J_2 [\cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$$

$$\varepsilon_{p_y}(\mathbf{k}) = \varepsilon_p - J_0 - 2J_1 \cos(k_y a) - 2J_2 [\cos(k_z a) + \cos(k_x a)]$$

$$\varepsilon_{p_z}(\mathbf{k}) = \varepsilon_p - J_0 - 2J_1 \cos(k_z a) - 2J_2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

绕 z -轴旋转 90° 的操作使得 $p_x, k_x \rightarrow -p_y, -k_y$, $p_y, k_y \rightarrow p_x, k_x$, 因此这个操作意味着：

$$\varepsilon_{p_x}(k_x, k_y, k_z) = \varepsilon_{p_y}(-k_y, k_x, k_z)。$$

时间反演对称: $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(-\mathbf{k})$

在具有时间反演对称时, 如果不考虑自旋, 晶体中电子运动的 Hamiltonian 是实的, $\mathcal{H} = -\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2 / (2m) + U(\mathbf{r}) = \mathcal{H}^*$ 。

$$\mathcal{H}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \Leftrightarrow \quad [\mathcal{H}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})]^* = [\varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})]^*$$

$$\mathcal{H}\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$$

$\psi_{n\mathbf{k}}^*$ 也是方程的解, 且二者具有相同的本征值

$$\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = [\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})]^* = [e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})]^*$$

$$= e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \quad \Leftrightarrow \quad \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \psi_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\Leftrightarrow \quad \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(-\mathbf{k})$$

在有空间反演的时候, 从晶体的点群对称性里也可以得到 $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(-\mathbf{k})$ 。这里我们发现, 这个结论不依赖于晶体的点群对称性。如果系统性质与自旋无关, 那么不管晶体中是否有对称中心, 在 \mathbf{k} 空间中 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 总是有反演对称的。这实际上是时间反演对称性的结果。

时间反演对称：包含自旋

上面的讨论里不涉及到电子自旋。如果考虑电子自旋自由度的话，那么时间反演和空间反演之间就会有区别。

在有自旋的时候，空间反演表现得和没有自旋时相同，

$$\varepsilon_{n,\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{n,\sigma}(-\mathbf{k})。$$

有自旋的时候，时间反演意味着 $\varepsilon_{n,\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{n,-\sigma}(-\mathbf{k})$ ，这就是量子力学里的 Kramers 简并。

如果一个系统里同时具有空间和时间反演，那么：

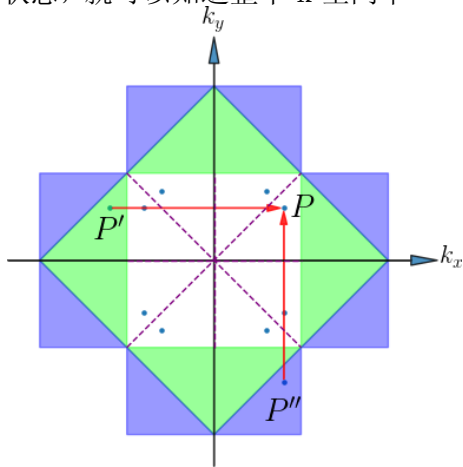
$$\varepsilon_{n,\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{n,-\sigma}(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{n,-\sigma}(\mathbf{k})，$$
 也就是说电子自旋简并。

$\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 图示

以二维正方晶格为例，二维正方晶格的点群是 C_{4v} ($4mm$)，所以，对于一般位置 P ，在简约区中共有 8 个点与 P 点对称相关。在这些点，电子都有相同的能量 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 。因此，我们只需研究清楚简约区中 $1/8$ 空间中电子的能量状态，就可以知道整个 k 空间中的能量状态了。我们将这部分体积称为简约区的不可约体积。

依此类推，对于立方晶系的 O_h ($m3m$) 点群，只需研究 $\Omega_b/48$ 即可。

减少在确定、计算能带时所做的工作是对称性研究的意义之一。



$\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 图示

对于一般位置 \mathbf{k} ，简约区中对称相关的波矢量数就等于点群的阶数。但若 \mathbf{k} 在简约区中的某些特殊位置（对称点、对称轴或对称面）上，即在晶体点群中，存在某些对称操作 α ，使得

$$\alpha \mathbf{k} = \mathbf{k} \quad \text{或者} \quad \alpha \mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{G}_l$$

这时，简约区中等价波矢量数就少于点群的阶数。

在二维正方晶格的简约区中， \mathbf{k} 有以下特殊位置：

Γ 点： $\mathbf{k} = (0, 0)$

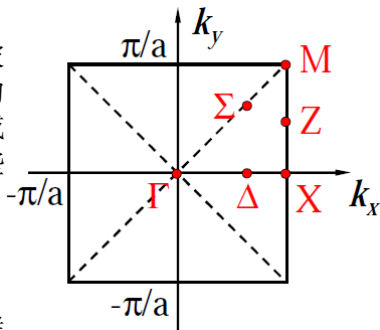
X 点： $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, 0)$

M 点： $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$

Δ 线： $\mathbf{k} = (k, 0)$

Z 线： $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, k)$

Σ 线： $\mathbf{k} = (k, k)$

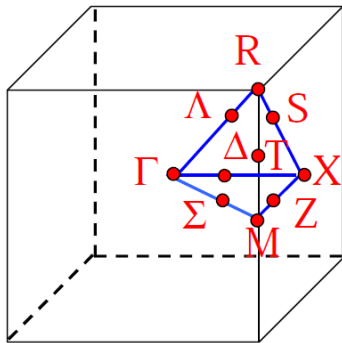


$\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 图示

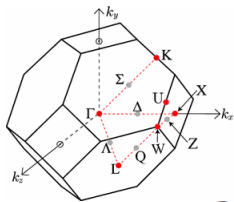
简立方晶格的简约区中 \mathbf{k} 的特殊位置：(001) 平面内的特殊点/线和二维正方晶格里的一样，不过把 $k_z = 0$ 明显地写出来。

Γ 点:	$\mathbf{k} = (0, 0, 0)$	X 点:	$\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, 0, 0)$
M 点:	$\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0)$	R 点:	$\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$
$\langle 100 \rangle$ Δ 线:	$\mathbf{k} = (k, 0, 0)$	Z 线:	$\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, k, 0)$
$\langle 110 \rangle$ Σ 线:	$\mathbf{k} = (k, k, 0)$		
S 线:	$\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, k, k)$		
T 线:	$\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, k)$		
$\langle 111 \rangle$ Λ 线:	$\mathbf{k} = (k, k, k)$		

我们无法在平面上完整地画出三维体系中的能谱关系，所以一般是选择展示沿着这些特殊的点和线的能谱关系。通常情况下能带的顶部或者底部都在这些高对称点/线上，这种图包含了有关材料的最重要的信息。

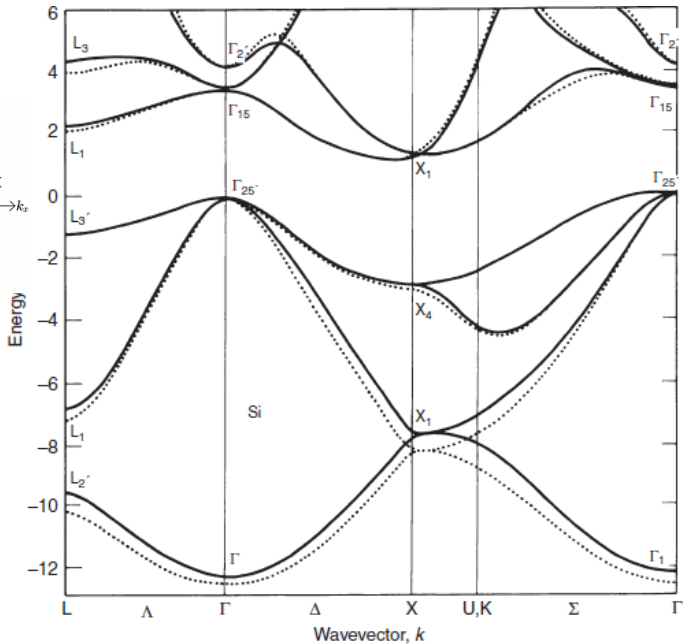


Si 的能带图



用两种不同赝势法计算得到的 Si 的能带。

Chelikowsky,
Fig. 7



高对称点中的对称性分析

对称性分析除了可以减少计算量之外，还可以在 k 空间中高对称点附近的波函数以及能带简并情况提供重要的线索。

在高对称点上，某些对称操作不改变 \mathbf{k} ，这样这些对称操作和 Hamiltonian 具有共同本征态。这样我们可以按照对称性把这些本征态分类，把具有相同对称性的本征态归为一类。从这些分类，我们就可以获得不少材料的物理性质，例如光学性质、自旋轨道耦合的形式等等。

此外，由于晶格周期场的影响，对称性不同的波函数能量通常并不相等，只有相同对称性的波函数才可能简并。由此我们可以得到能带的简并信息。

数学上，用群论的方法（尤其是群表示理论）系统地处理这些问题。这里我们用近自由电子近似来简单地介绍一下。

空晶格电子能带

空晶格中电子是自由电子，其能量 $\varepsilon_0(\mathbf{k}') = \hbar^2 \mathbf{k}'^2 / (2m)$ 。这里 \mathbf{k}' 是广延波矢，不一定在简约区里。但我们一定可以找到一个唯一倒格矢 \mathbf{G}_{l_n} ，使得 $\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{G}_{l_n}$ 是简约波矢。由此，我们可以构造出零阶的本征能量和波函数。

$$\varepsilon_n^{(0)}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}_{l_n}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}_{l_n}|^2$$
$$\psi_{n\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_{l_n}) \cdot \mathbf{r}}$$

除了在简约区的中心和边界之外，不同能带的能量一般不同，可以用非简并微扰来处理晶格周期场。在弱周期场时，本征能量基本就是自由电子能量 $\varepsilon_n^{(0)}(\mathbf{k})$ 。

在简约区的中心和边界处，有多个不同的能带具有相同的能量。此时需要用简并微扰的办法来处理。借助对称性可以大大简化问题。

一维空晶格能带

我们先看最简单的一维的情况。

$$G_{l_n} = \frac{2\pi l_n}{a} \quad \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} [k + G_{l_n}]^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k + \frac{2\pi l_n}{a} \right]^2$$

为了计算和表示简单，我们以 $\frac{\pi}{a}$ 为 k 的单位，以 $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ 为能量的单位。这样

$$\varepsilon_n^{(0)}(k) = (k + 2l_n)^2 \quad \psi_{nk}^{(0)}(x) = e^{i(k+2l_n)x} \quad -1 \leq k \leq 1$$

$$n = 1, l_1 = 0,$$

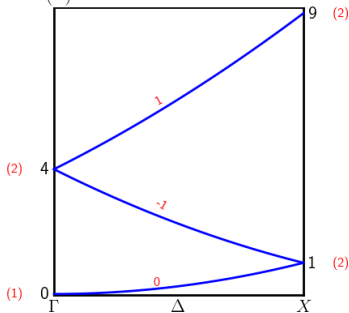
$$\varepsilon_1^{(0)}(k) = k^2, \quad \psi_{1k}^{(0)} = e^{ikx}$$

$$n = 2, l_2 = -1,$$

$$\varepsilon_2^{(0)}(k) = (k - 2)^2, \quad \psi_{1k}^{(0)} = e^{i(k-2)x}$$

$$n = 3, l_3 = 1,$$

$$\varepsilon_3^{(0)}(k) = (k + 2)^2, \quad \psi_{3k}^{(0)} = e^{i(k+2)x}$$



一维空晶格能带

在一般的 k ，电子态 $|k\rangle$ 和其空间反演态（或者镜面反映，在一维下，这两者没有区别） $| -k\rangle$ 并不耦合，它们之间没有关系，体系的本征态不是反演算符 σ 的本征态，体系本征态和平面波差别不大，对应于前面讲的非简并微扰的情况。

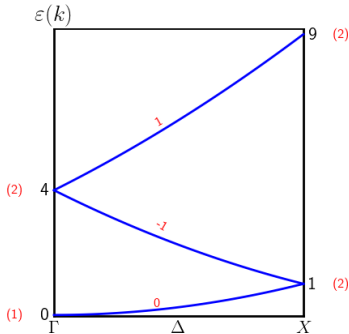
但是 $|n\pi/a\rangle$ 和 $| -n\pi/a\rangle$ 这两个反演态有耦合，因此体系本征态同时是 σ 的本征态，因此体系的本征态和平面波相差很远。对应于前面的简并微扰的情况。以 $\varepsilon = 4$ 为例子。

在 Γ 点 ($k = 0$) 上，有两个能带的能量 $\varepsilon = 4$ 。分别是

$$n = 2, l_2 = -1, \psi_{2\Gamma}^{(0)}(x) = e^{-2ix}$$

$$n = 3, l_2 = +1, \psi_{3\Gamma}^{(0)}(x) = e^{2ix}$$

右图是空晶格能带，括号里是能级简并度。



路人版的对称分析

在有晶格周期场时，需要用简并微扰。本征波函数是 $\psi_{2/3\Gamma}^{(0)}$ 这两个波函数的组合。我们假设系统是一个具有宇称（空间反演）对称的一维晶格，

$$x \Rightarrow \sigma x = -x$$

σ 是空间反演对称操作

$$U(x) = \sigma U(x) \sigma^{-1} = U(-x)$$

\Leftrightarrow

$$\sigma \mathcal{H} \sigma^{-1} = \mathcal{H}$$

σ 和 \mathcal{H} 具有共同本征态。但是 $\psi_{2\Gamma}^{(0)}$ 和 $\psi_{3\Gamma}^{(0)}$ 都不是 σ 的本征态，

$$\sigma \psi_{2\Gamma}^{(0)} = \sigma [e^{-2ix}] = e^{-2i(-x)} = e^{2ix} = \psi_{3\Gamma}^{(0)}$$

$$\sigma \psi_{3\Gamma}^{(0)} = \sigma [e^{2ix}] = e^{2i(-x)} = e^{-2ix} = \psi_{2\Gamma}^{(0)}$$

但可以很容易得到 σ 的本征函数

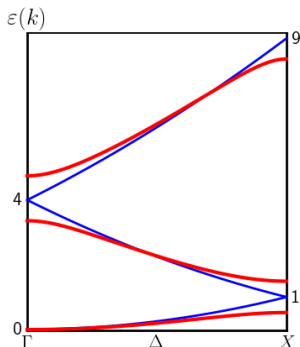
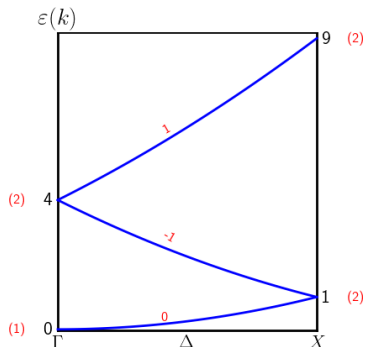
$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{2\Gamma}^{(0)} \pm \psi_{3\Gamma}^{(0)}] = \begin{cases} \cos 2x \\ \sin 2x \end{cases} \quad \sigma \psi_{\pm} = \pm \psi_{\pm}$$

路人版的对称分析

因为 \mathcal{H} 和 σ 具有共同本征态，而每个 σ 的本征态只对应一个波函数，因此 ψ_{\pm} 也是 \mathcal{H} 的本征态。

$$\mathcal{H}\psi_{\pm} = \varepsilon_{\pm}\psi_{\pm} \quad = [\varepsilon_0(2) \pm U_1]\psi_{\pm}$$

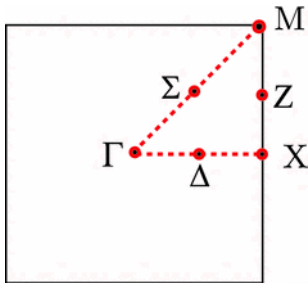
这就是我们前面讲的由于晶格场导致的能隙。不过在这里利用对称性，我们不用求解方程就可以直接构造出 Γ 点的本征态。



二维方格子

考虑一个晶格常数为 a 的简单二维方格子。同样以 π/a 为动量单位, $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ 为能量单位。

倒格矢可以表示为 $\mathbf{G}_l = (2l_1, 2l_2)$, l_1 和 l_2 为整数。



从晶格的对称性可以得到不可约“体积”是图中的红色虚线标志的区域。 Γ 、 X 和 M 点是高对称点, Δ 和 Σ 线是高对称的线。

空晶格能级结构为

$$\varepsilon_n^{(0)}(\mathbf{k}) = (k_x + 2l_{1n})^2 + (k_y + 2l_{2n})^2$$

相应的波函数为

$$\psi_{n\mathbf{k}}^{(0)} = e^{i(k_x + 2l_{1n})x + i(k_y + 2l_{2n})y}$$

二维方格子

右图是在 Δ 线上的空晶格能级结构。蓝色括号里的是 \mathbf{G}_{l_n} 对应的 (l_1, l_2) 。可以发现，高对称的 Γ 和 X 点上具有非常高的简并度（红色括号中的数字）。

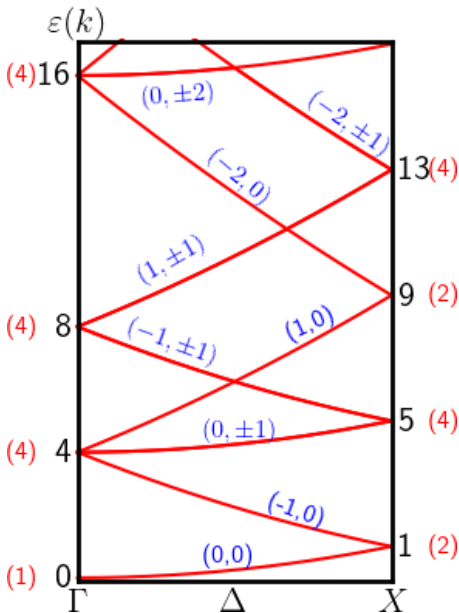
例如， Γ 点上能量为 4 的态有四个。分别对应于 $\mathbf{G}_{l_n} = (\pm 1, 0)$ 和 $\mathbf{G}_{l_n} = (0, \pm 1)$ ，相应的波函数分别为

$$\psi_{\pm 1, 0} = e^{\pm 2ix}$$

$$\psi_{0, \pm 1} = e^{\pm 2iy}$$

在 Δ 线上， $\psi_{0, +1}$ 和 $\psi_{0, -1}$ 两个态是简并的。波函数分别是

$$\psi_{0, \pm 1} = e^{ik_x x \pm 2iy}$$



二维方格子中的对称分析

简单方格子里的对称算符包括

$$\{E, R_{90}, R_{180}, R_{270}, m_x, m_y, m_+, m_-\}$$

E 是单位算符； R_θ 是绕中心旋转 θ 角度 ($\theta = 90, 180, 270$)； $m_{x,y}$ 是沿 x, y 轴的镜面反演； m_\pm 则是沿着对角线的镜面反演。

比一维复杂的是，这八个算符并不互相对易。一般情况下我们不能同时把这八个算符对角化。很多时候，我们只能找到波函数的某种组合，使得这些算符在这些组合下具有相同的块对角化结构。Hamiltonian 在这种波函数下也具有相同的块对角化结构。同一个块里，本征能量简并；不同块里，能量不同。找出这种块对角化结构以及相应的波函数（基的组合）就是群表示理论的主要用途。

二维方格子中的对称分析

对于前面提到的在 $\varepsilon_0 = 4$ 的 Γ 点处，我们可以把四个简并的空晶格波函数

$$\psi_{\pm 1,0} = e^{\pm 2ix} \quad \psi_{0,\pm 1} = e^{\pm 2iy}$$

通过如下组合，

$$\psi_{\Gamma_1} = \cos 2x + \cos 2y$$

$$\psi_{\Gamma_3} = \cos 2x - \cos 2y$$

$$\psi_{\Gamma_5} = \begin{pmatrix} \sin 2x \\ \sin 2y \end{pmatrix}$$

可以把所有对称算符块对角化。 $\Gamma_{1,3,5}$ 是群表示指标。原来四重简并的能级劈裂成两个不简并和一个两重简并的态。

二维方格子

方格子中 Γ 点处 $\varepsilon_0 = 4$ 时的本征解

$$\mathcal{H}_\Gamma = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & U_2 & U_1 & U_1 \\ U_2 & \varepsilon_0 & U_1 & U_1 \\ U_1 & U_1 & \varepsilon_0 & U_2 \\ U_1 & U_1 & U_2 & \varepsilon_0 \end{pmatrix}$$
$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \cos 2x & \sin 2x & \cos 2y & \sin 2y \\ \varepsilon_0 + U_2 & 0 & 2U_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_0 - U_2 & 0 & 0 \\ 2U_1 & 0 & \varepsilon_0 + U_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_0 - U_2 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{\Gamma_1} = \cos 2x + \cos 2y$$

$$\varepsilon_{\Gamma_1} = \varepsilon_0 + U_2 + 2U_1$$

一重简并

$$\psi_{\Gamma_3} = \cos 2x - \cos 2y$$

$$\varepsilon_{\Gamma_3} = \varepsilon_0 + U_2 - 2U_1$$

一重简并

$$\psi_{\Gamma_5} = \begin{pmatrix} \sin 2x \\ \sin 2y \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon_{\Gamma_5} = \varepsilon_0 - U_2$$

两重简并

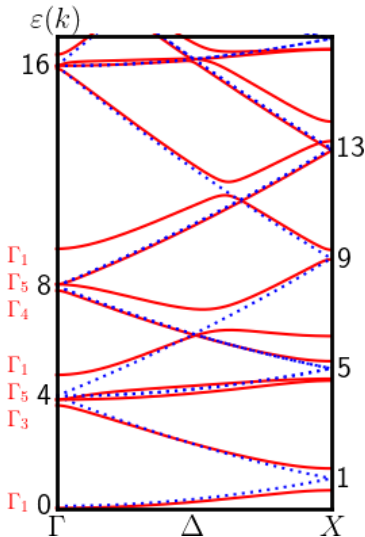
二维方格子

右图是周期场中的能带图，可以看出 Γ 点上的能级简并改变情况。

在 Δ 线上，非平凡的对称操作只有沿着 x 轴的镜像对称。因此和一维分析一样，存在奇偶宇称的两类波函数。除了一些偶然简并之外，一般情况下的这两类波函数简并性被解除，例如在 Γ 点处简并的 Γ_5 就劈裂成两个带

$$\psi_{(0,\pm 1)k_x} \Rightarrow e^{ik_x x} \cos 2y, e^{ik_x x} \sin 2y。$$

在 Δ 线中间，不同宇称的波函数能级可以相交，形成偶然简并。相同宇称的能级则不会。

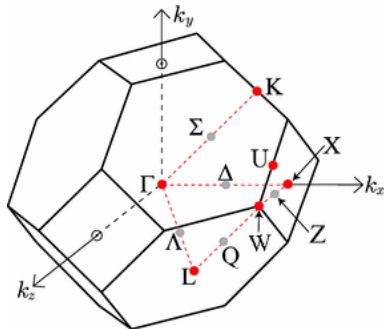


三维情况：FCC

三维情况更加复杂。

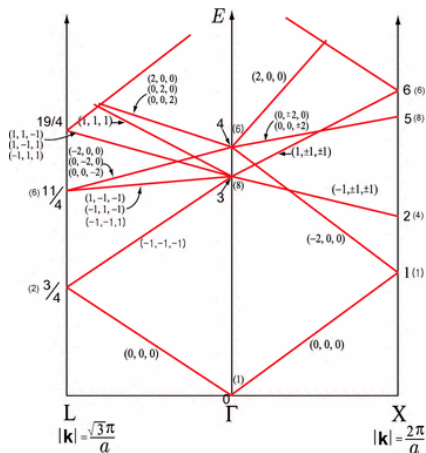
右图是 FCC 结构的简约布里渊区。图上标出了各种各样的高对称点和高对称线。

按照赝势法，晶体里的能谱可以用空晶格模型的基础上加上弱的周期场得到。因此通常在计算中，都是从空晶格出发，经过对称性分析得到在高对称点 / 线上的大体的能级结构，再进一步的计算。

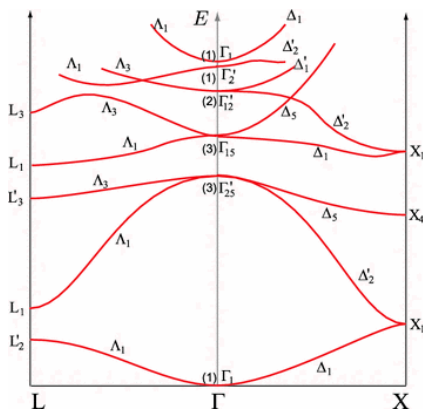


Quinn, Fig 5.8

三维情况：FCC



FCC 空晶格模型的能带结构
Quinn, Fig 5.9



简化的 Si 的能带图
Quinn, Fig 5.11