

上次讲到：

为了得到清晰确切的结果，我们就必须对一个感兴趣的、特定固体的实际势能 $V(\mathbf{r})$ 去求解单电子的Schrödinger方程，然而即使是比较简单的势，其Schrödinger方程的求解过程也是一项数学推导极其繁琐的工作，为了得到能与实验对照的结果，这样做当然是非常必要的。但如果只是为了更好地进一步理解周期性势场对电子运动的影响，我们最好是选择使用经过简化的势，用最少量的数学过程来求解Schrödinger方程，以便专心地理解相关的物理问题。

能带计算方法的理解（部分）

Born–Oppenheimer 绝热近似：

Hatree–Fock 平均场近似（单电子近似）

周期场近似(Periodic potential approximation)：

复杂多体问题变为周期势场下的单电子问题，单电子薛定谔方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r)$$

其中： $V(\vec{r} + \vec{R}_n) = V(\vec{r})$

全电子势（Muffin-tin）

赝势

凝胶模型（自由电子气的背景）

非周期性

周期性

对称性

平面波

缀加平面波

线性组合缀加平面波

散射函数

原子轨道线性组合

数值

严格的平面波方法

- 根据布洛赫定理，周期势场中单电子波函数是一个调幅平面

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \vec{k} \in 1BZ$$

波函数按倒格矢展开，可写为

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \sum_{\vec{h}} a(\vec{k} + \vec{K}_h) e^{i(\vec{k} + \vec{K}_h)\cdot\vec{r}}$$

这是平面波的线性组合-自由电子的本征解的线性组合

- 为了求解待定系数 $a(\vec{k} + \vec{K}_h)$ ，将波函数带入波动方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

- 可得： $\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + \sum_{h' \neq h} V(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) a(\vec{k} + \vec{K}_{h'}) = 0$
- 由方程组系数行列式为零的条件，可得到确定能量本征值 $E(\vec{k})$ 的方程

$$\det \left| \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] \delta_{h,h'} + \sum_{h' \neq h} V(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) \right| = 0$$

- 原则上这是个 $\infty \times \infty$ 阶行列式，实际计算时只能取有限阶行列式

4.3 近自由电子近似

近自由电子近似 (Nearly Free Electron)

在周期场中，若电子的势能随位置的变化（起伏）比较小，而电子的平均动能要比其势能的绝对值大得多时，电子的运动就几乎是自由的。因此，我们可以把自由电子看成是它的零级近似，而将周期场的影响看成小的微扰来求解。（也称为弱周期场近似）。这个模型虽然简单，但却给出周期场中运动电子本征态的一些最基本特点。

- 波动方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = E(\vec{\mathbf{k}}) \psi_{\mathbf{k}}(\vec{r})$$

$V(\vec{r}) = \bar{V} + \Delta V$, \bar{V} 为平均势，通常取为0； ΔV 为相对于平均势的起伏

零级近似

- 取 $\Delta V = 0$ ，即均匀势场的情况，电子是完全自由的，波函数和能量本征值是

$$\begin{cases} \psi_k^0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ E^0(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \end{cases}$$

应用玻恩-冯卡门边界条件 $\psi_k^0(\vec{r}) = \psi_k^0(\vec{r} + N_i\vec{a}_i)$ ，得到

$$N_i\vec{k} \cdot \vec{a}_i = 2\pi h_i, i = 1, 2, 3$$

可取波矢

$$\vec{k} = \frac{h_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{h_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{h_3}{N_3}\vec{b}_3$$

$\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 为倒格矢

零级近似

- 于是 \vec{k} 只能取分立值，每一个 \vec{k} 在动量空间中所占的体积


$$\frac{\vec{b}_1}{N_1} \cdot \left(\frac{\vec{b}_2}{N_2} \times \frac{\vec{b}_3}{N_3} \right) = \frac{\Omega^*}{N_1 N_2 N_3} = \frac{(2\pi)^3}{N\Omega}$$

由于 $N\Omega$ 是一个大数， \vec{k} 在动量空间准连续，均匀分布，其密度为 $\frac{N\Omega}{(2\pi)^3}$

- 证明波函数满足正交归一条件

$$\int \psi_{k'}^0{}^*(\vec{r}) \psi_k^0(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{k',k}$$
$$\sum_k \psi_{k'}^0{}^*(\vec{r}) \psi_k^0(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

非简并微扰 (试)

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \sum_h a(\vec{k} + \vec{K}_h) e^{i(\vec{k} + \vec{K}_h) \cdot \vec{r}}$$


- 将波函数改写为

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} a(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \sum_{h \neq 0} a(\vec{k} + \vec{K}_h) e^{i(\vec{k} + \vec{K}_h) \cdot \vec{r}}$$

(4.2.13)

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + \sum_{h' \neq h} V(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) a(\vec{k} + \vec{K}_{h'}) = 0$$

设 ΔV 是小量, 则除了 $a(\vec{k}) \approx 1$, 其他 $a(\vec{k} + \vec{K}_h)$ 都是小量

因为所有 $V(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'})$ 都是小量, 在确定待定系数的方程中, 仅保留一级小量, 并用 $E_0(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ 代替 $E(\vec{k})$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + V(\vec{K}_h) = 0$$

由此求得

$$a(\vec{k} + \vec{K}_h) = \frac{V(\vec{K}_h)}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2)}$$

非简并微扰

- 一级近似波函数

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \sum_{h \neq 0} \frac{V(\vec{K}_h)}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2)} e^{i(\vec{k} + \vec{K}_h)\cdot\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_k(\vec{r})$$

其中

$$u_k(\vec{r}) = 1 + \sum_{h \neq 0} \frac{V(\vec{K}_h)}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2)} e^{i\vec{K}_h\cdot\vec{r}}$$

它满足 $u_k(\vec{r} + \vec{R}_l) = u_k(\vec{r})$

- 能量本征值的二级近似解（可试）

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \sum_{h \neq 0} \frac{|V(\vec{K}_h)|^2}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2)}$$

(4.2.13)

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + \sum_{h' \neq h} V(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) a(\vec{k} + \vec{K}_{h'}) = 0$$

$K_h = 0$; h' 换为 h

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k}) + \sum_{h \neq 0} V(-\vec{K}_h) a(\vec{k} + \vec{K}_h) = 0$$

$$a(\vec{k}) \cong 1, \quad V(-\vec{K}_h) = V^*(\vec{K}_h)$$

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \sum_{h \neq 0} \frac{|V(\vec{K}_h)|^2}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2)}$$

非简并微扰

- 考虑周期势场的扰动，电子的波函数是波矢为 \vec{k} 的零级平面波与所有可能的散射波的线性叠加。散射波加入的份额取决于它与零级状态的能量差和 $V(\vec{K}_h)$
- 散射结果受选择定则的支配， \vec{k} 态电子只能被散射到与它相差一个倒格矢的 $\vec{k} + \vec{K}_h$ 态
- 以上波函数和能谱结果只适用于 $\frac{\hbar^2}{2m} |k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2| \gg |V(\vec{K}_h)|$ 的情况，因此电子的波函数十分接近自由电子的情况

简并微扰

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \sum_{h \neq 0} \frac{|V(\vec{K}_h)|^2}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2)}$$

- 当满足 $\vec{k}^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 = 0$ 时，分母趋于零将导致发散
- 原因是两个状态的电子具有相等的能量，无论怎样小的扰动都会引起两个态之间很强的耦合
- 将波函数

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} a(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \sum_{h \neq 0} a(\vec{k} + \vec{K}_h) e^{i(\vec{k} + \vec{K}_h)\cdot\vec{r}}$$

写为

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = a(\vec{k}) |\vec{k}\rangle + a(\vec{k} + \vec{K}_h) |\vec{k} + \vec{K}_h\rangle$$

确定待定系数的方程

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar^2}{2\pi} k^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k}) + V(-\vec{K}_h) a(\vec{k} + \vec{K}_h) &= 0 \\ \left[\frac{\hbar^2}{2\pi} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + V(\vec{K}_h) a(\vec{k}) &= 0 \end{aligned}$$

(4.2.13)

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + \sum_{h' \neq h} V(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) a(\vec{k} + \vec{K}_{h'}) = 0$$

$K_h = 0$; h' 换为 h ; 只取 $k + K_h$ 项

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k}) + V(-\vec{K}_h) a(\vec{k} + \vec{K}_h) = 0$$

$K_{h'} = 0$; 只取 $k + K_h$ 项

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + V(\vec{K}_h) a(\vec{k}) = 0$$

简并微扰

- 确定能量本征值

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - E(\vec{k}) & V(-\vec{K}_h) \\ V(\vec{K}_h) & \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \end{vmatrix} = 0$$

得到

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} [k^2 + (\vec{k} + \vec{K}_h)^2] \pm \sqrt{\frac{\hbar^4}{4m^2} [k^2 - (\vec{k} + \vec{K}_h)^2]^2 + 4|V(\vec{K}_h)|^2} \right\}$$

由于 $V(-\vec{K}_h) = V^*(\vec{K}_h)$, $\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2$

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \pm |V(\vec{K}_h)|$$

四、布里渊区、能带、能隙、 禁带

- 非简并微扰的计算是发散的，条件是：

$$k^2 = (k + K_h)^2$$
- 也就是 $K_h \cdot (k + \frac{1}{2}K_h) = 0$
- 满足这个方程的 k 矢量的端点，在 k 空间确定了一系列的平面，这些平面是倒格矢 K_h 的垂直平分面，也就是布里渊区边界。

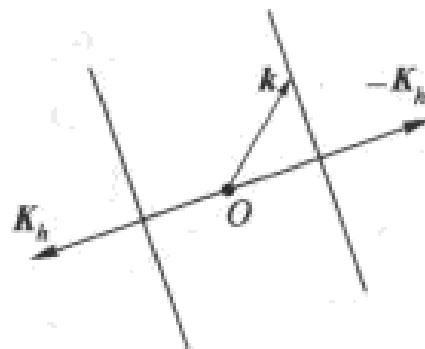
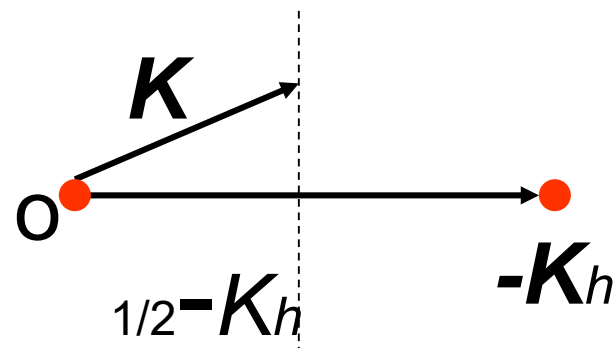
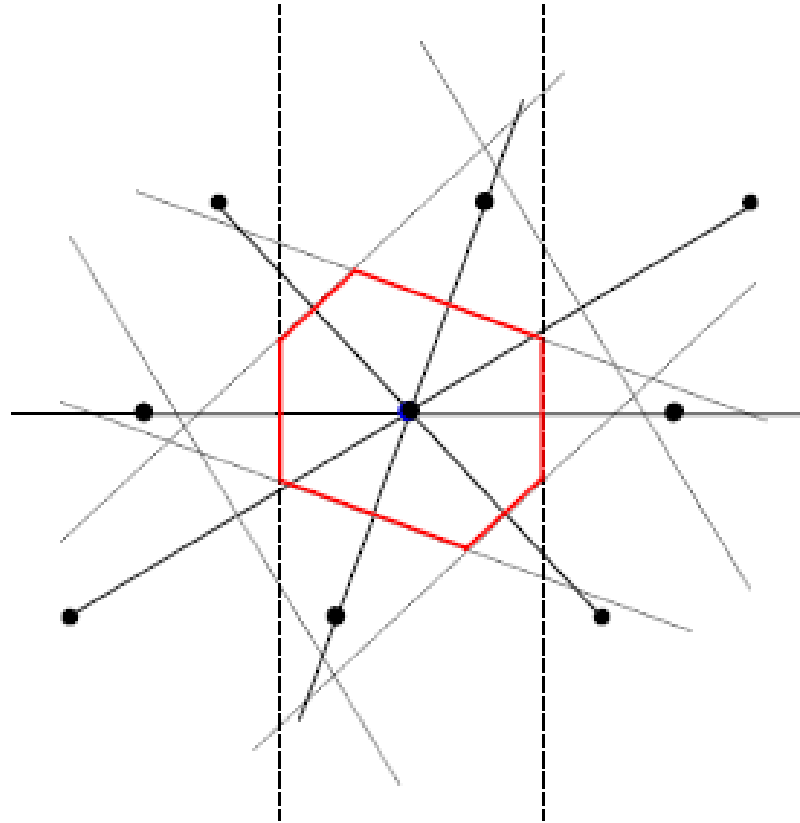


图 4.3.1 方程 $K_h \cdot (k + \frac{1}{2}K_h) = 0$ 确定了倒格矢 $-K_h$ 的垂直平分面

布里渊区：

第一布里渊区的确定：取法和正点阵中Wigner-Seitz原胞取法相同。它是倒点阵的原胞。



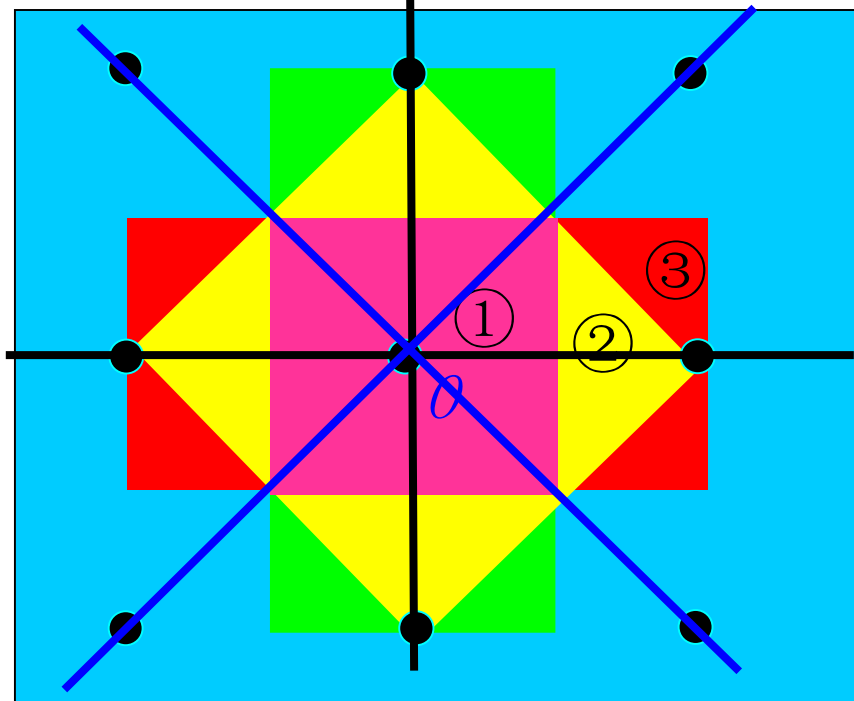
二维晶格点阵的布里渊区

取正格子基矢为 $\vec{a}_1 = a\vec{i}$ 和 $\vec{a}_2 = a\vec{j}$

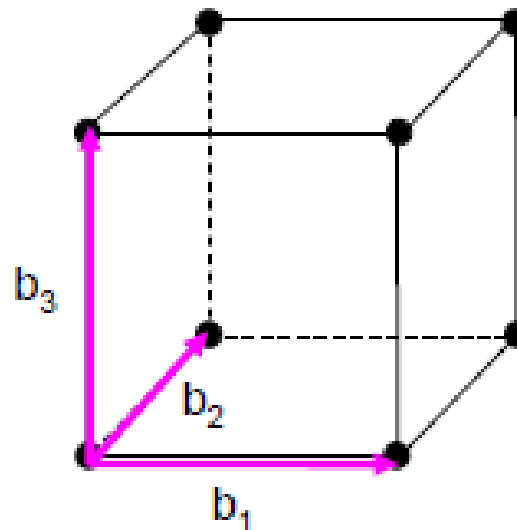
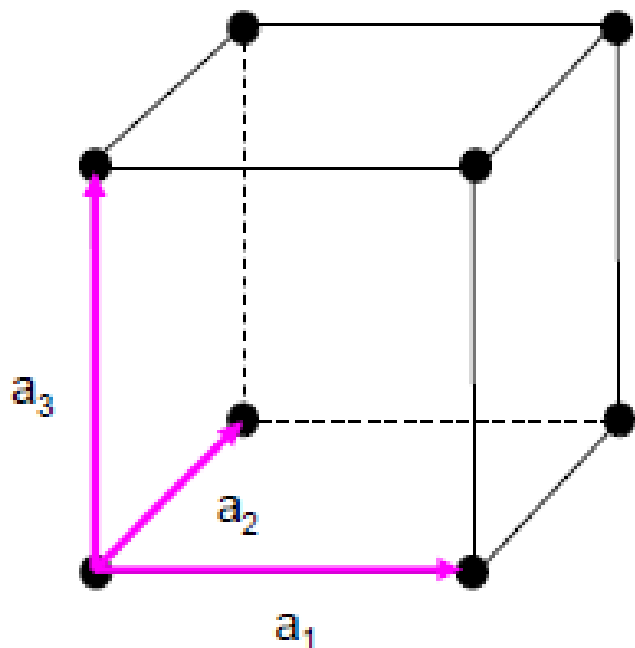
可求出倒格子基矢为 $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$ 和 $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j}$

作原点0至其它倒格点连线的中垂线，它们将二维倒格子平面分割成许多区域

二维正方格子的第一、二、三布里渊区



简单立方 (sc)



第一布里渊区边界是下面六个倒格矢的中点，并与之正交的平面：

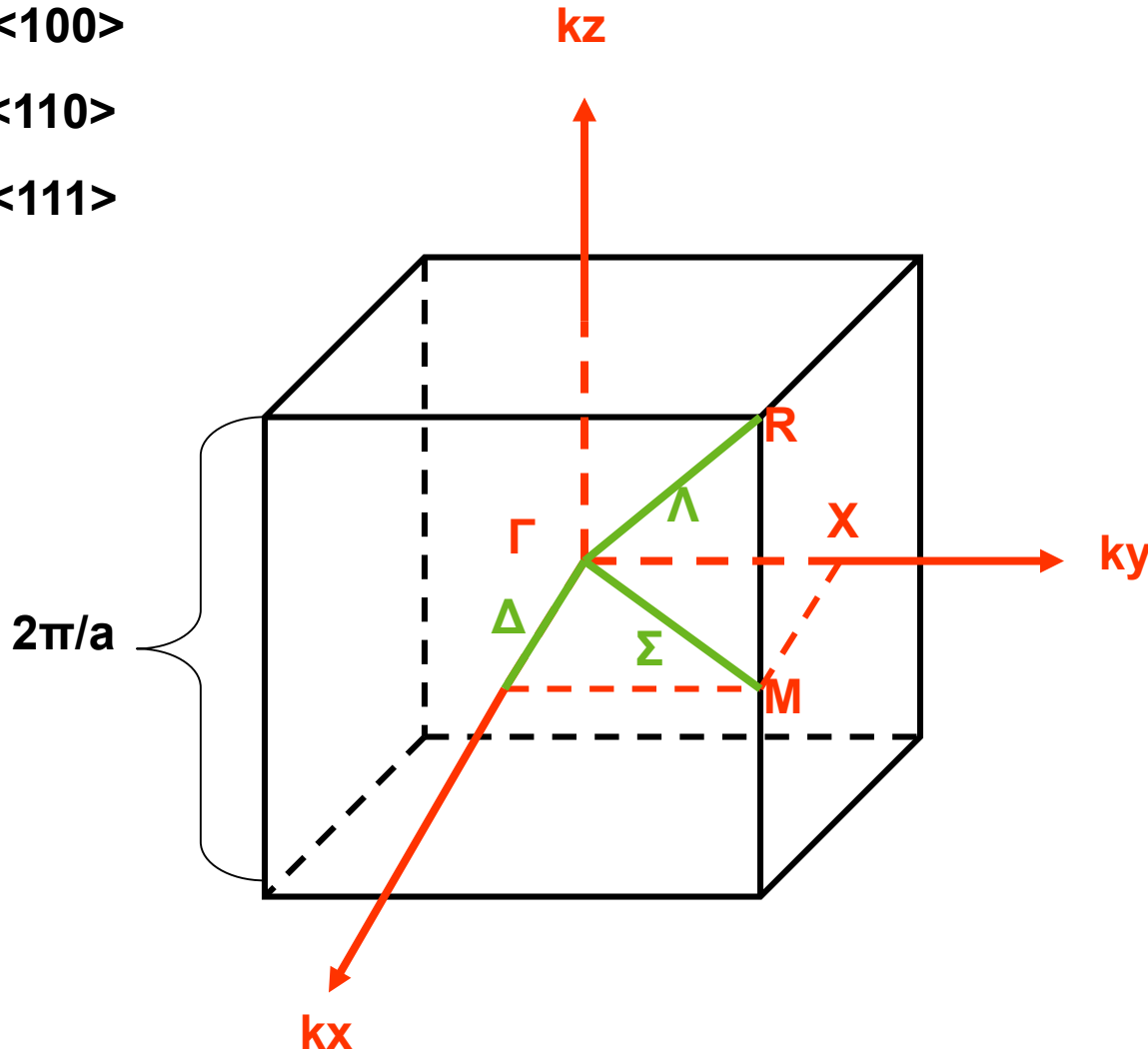
$$\pm \frac{1}{2}b_1 = \pm \left(\frac{\pi}{a}\right)\vec{x}; \quad \pm \frac{1}{2}b_2 = \pm \left(\frac{\pi}{a}\right)\vec{y}; \quad \pm \frac{1}{2}b_3 = \pm \left(\frac{\pi}{a}\right)\vec{z}$$

布里渊区的高对称点-简单立方

$\Delta <100>$

$\Sigma <110>$

$\Lambda <111>$



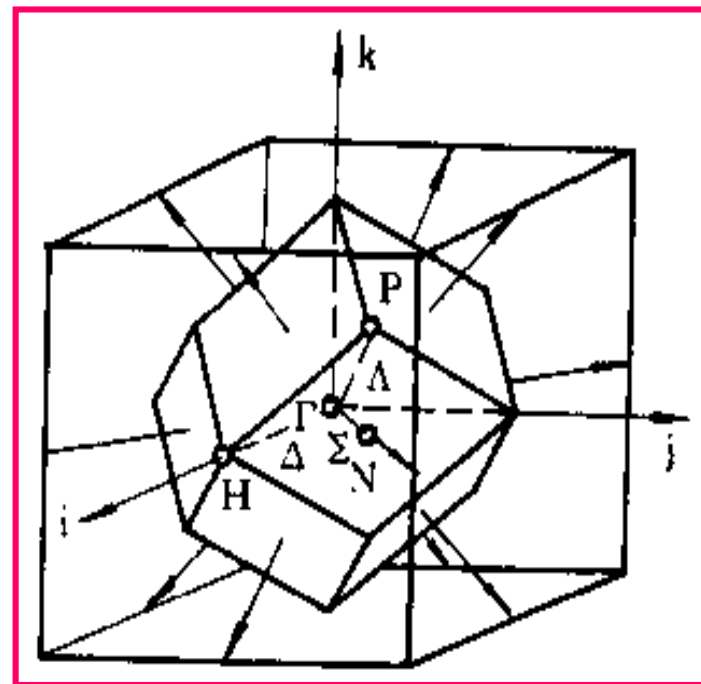
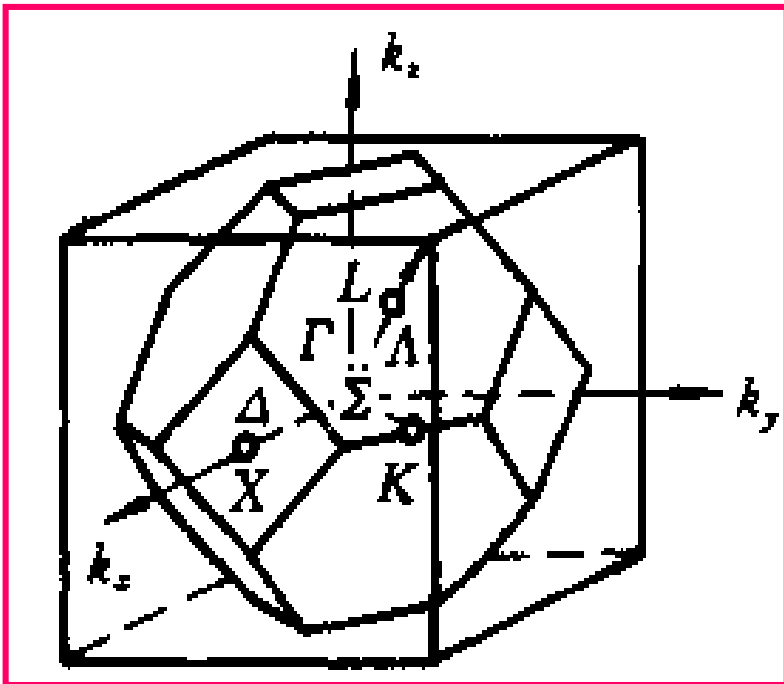
$$\Gamma : (0,0,0)$$

$$X : \frac{\pi}{a}(1,0,0)$$

$$R : \frac{\pi}{a}(1,1,1)$$

三维晶格点阵的布里渊区

简单立方格子的第一布里渊区是简单立方格子
面心立方格子的第一布里渊区是截角八面体(十四面体)
体心立方格子的第一布里渊区是棱形十二面体



能带、禁带、能隙

- 简并微扰

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \pm |V(\vec{K}_h)|$$

- K矢量落在布里渊区界面上时，电子能量发生突变，形成带宽 E_g 的能隙

$$E_g = 2|V(K_h)|$$

- 属于每个布里渊区的能量准连续分布，构成一个能带
- 每个能带所容纳的状态数为 $2N$ 。
- 能带之间存在相当大的能量间隔，这些能量区间，不存在薛定谔方程的本征解，称为禁带。

一维近自由电子近似能谱

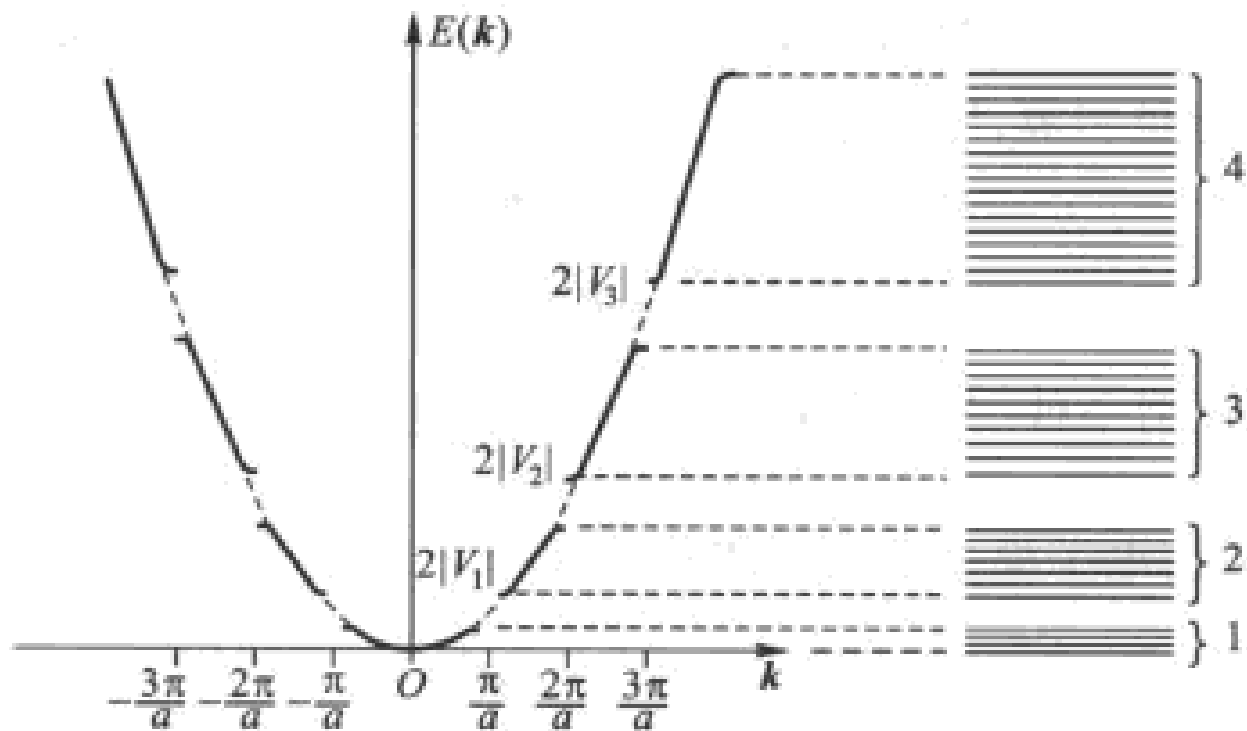


图 4.3.4 一维近自由电子近似的能谱 $E(k)$ 、能隙、能带和禁带

能隙与能带

一维情况下，能隙和禁带一一对应

二维、三维下，布里渊区界面存在能隙，但不同k方向的能带有交叠。

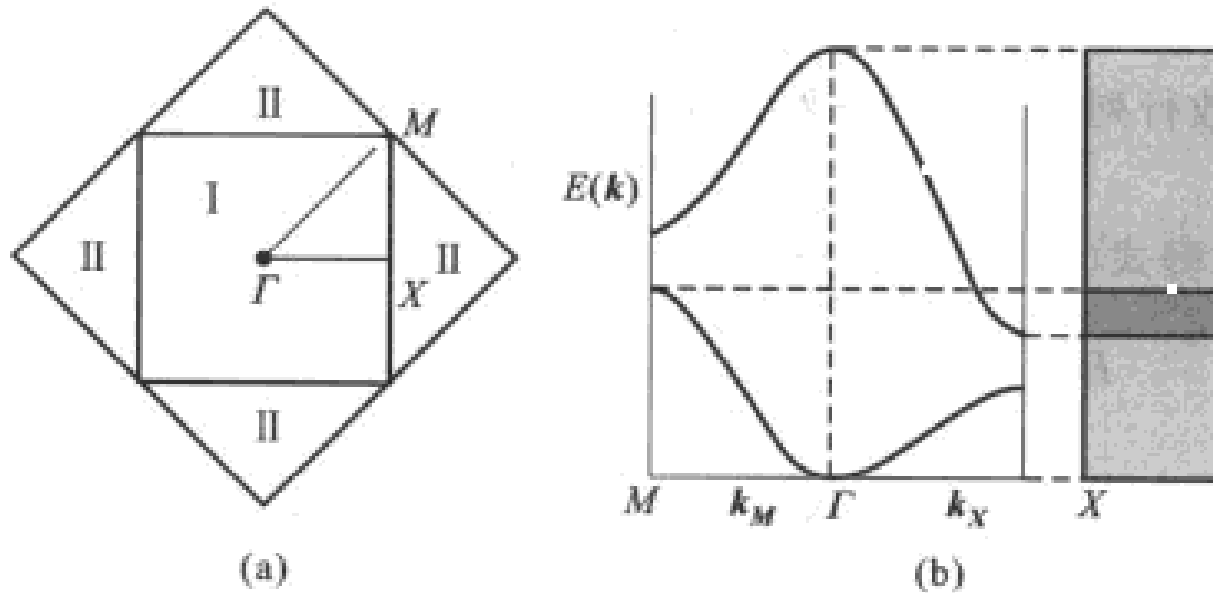
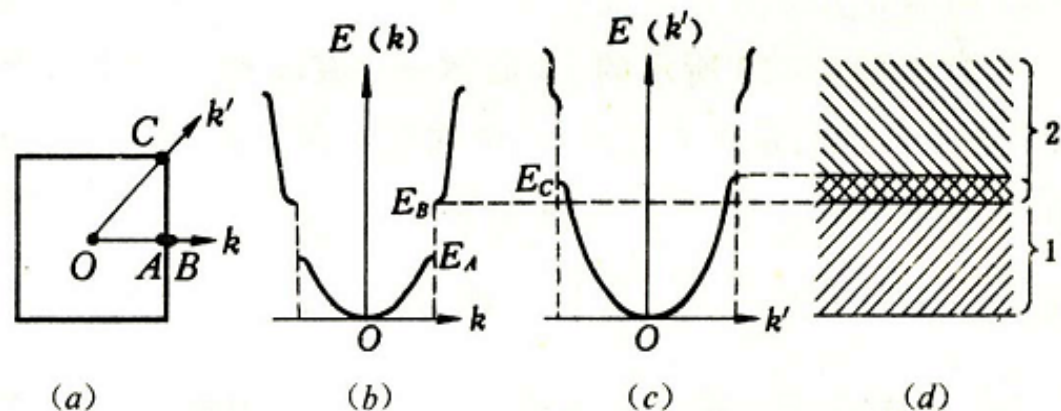


图 4.3.5 能带的交叠

如，三维情况下，在布里渊区边界上电子能量的突变并不意味着能带间一定有禁带的存在，而且还可能发生能带与能带的交叠。这是由于在三维情况下，在布里渊区边界上沿不同的 k 方向上，电子能量的不连续可能出现的不同的能量范围。因此，在某些 k 方向上不允许有某些能量值，而在其他 k 方向上仍有可能允许有这种能量，所以，在布里渊区边界面上能量的不连续并不一定意味着有禁带。这是三维情况与一维情况的一个重要区别。



能带交迭的示意图

能隙的物理成因（一维）

- 能隙在布里渊区界面产生, $k' = \frac{n\pi}{a}$
- 当满足Bragg条件时, $k = k' - \frac{2n\pi}{a} = -\frac{n\pi}{a}$
- 能量, $k^2 = k'^2$
- $\psi^{(0)} = A\psi_k^{(0)} + B\psi_{k'}^{(0)}$

$$\begin{aligned} &= A \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + B \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik'x} \\ &= A \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{in\pi}{a}x} + B \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{in\pi}{a}x} \\ &= A \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{i\pi}{a}x} + B \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i\pi}{a}x} \end{aligned}$$

第一布里渊区 $n=1$

4.3.14

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k}) + V(-\vec{K}_h) a(\vec{k} + \vec{K}_h) &= 0 \\ \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{K}_h)^2 - E(\vec{k}) \right] a(\vec{k} + \vec{K}_h) + V(\vec{K}_h) a(\vec{k}) &= 0 \end{aligned}$$

由上式，得到

$$\begin{aligned} (E_k^0 - E)A + V_{-1}B &= 0 \\ V_1A + (E_{k'}^0 - E)B &= 0 \end{aligned}$$

行列式为0，可解出：

$$E_{\pm} = E_k^0 \pm |V_1|$$

$$\left(\frac{A}{B} \right)_{\pm} = \mp 1$$

- 波函数: $\psi^{(0)} = A \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{i\pi}{a}x} + B \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i\pi}{a}x}$

- 代入可得

- $\psi_+(x) = \frac{A}{\sqrt{L}} \left(e^{-\frac{i\pi}{a}x} - e^{\frac{i\pi}{a}x} \right) = \sqrt{\frac{2}{L}} i \sin \frac{\pi x}{a}$

电子聚集在离子实之间, 势能较高

- $\psi_-(x) = \frac{A}{\sqrt{L}} \left(e^{\frac{i\pi}{a}x} + e^{-\frac{i\pi}{a}x} \right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{\pi x}{a}$

电子聚集在离子实附近, 势能较低

- 波函数的系数是归一化条件确定, L 是晶链长度

晶体中电子波的布拉格反射是能隙的起因

• 那么驻波的概率密度是：

• $\rho_+(x) = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{a}$

• $\rho_-(x) = \frac{2}{L} \cos^2 \frac{\pi x}{a}$

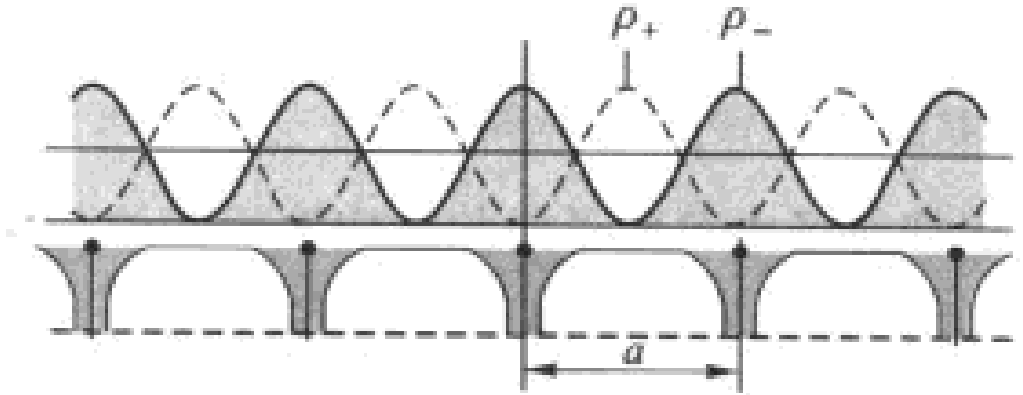


图 4.3.6 能隙的成因

如势能函数取为：

$$V(x) = 2V_1 \cos \frac{2\pi x}{a} = V_1 \left(e^{-\frac{i2\pi x}{a}} + e^{\frac{i2\pi x}{a}} \right), V_1 < 0$$

两种驻波态的平均势能差：

$$E_g = \int_0^L 2V_1 \cos \frac{2\pi x}{a} \left[\frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{a} - \frac{2}{L} \cos^2 \frac{\pi x}{a} \right] dx = -2V_1 = 2|V_1|$$

六、简约波矢

- 近自由电子近似下，波函数和能谱不是倒空间的周期函数，是属于不同能带的状态，分布在不同的布里渊区内。
- 之前讲过，波矢量 \mathbf{k} 是对应于平移算符本征值的量子数，其物理意义表示不同原胞之间电子波函数的位相变化。
- 所以严格来说，周期势场中单电子的状态应该用简约波矢 $\bar{\mathbf{k}}$ 来标志，限制在第一布里渊区内
- 任意一个波矢可以表示为： $\mathbf{k} = \bar{\mathbf{k}} + \mathbf{K}_h$ 。

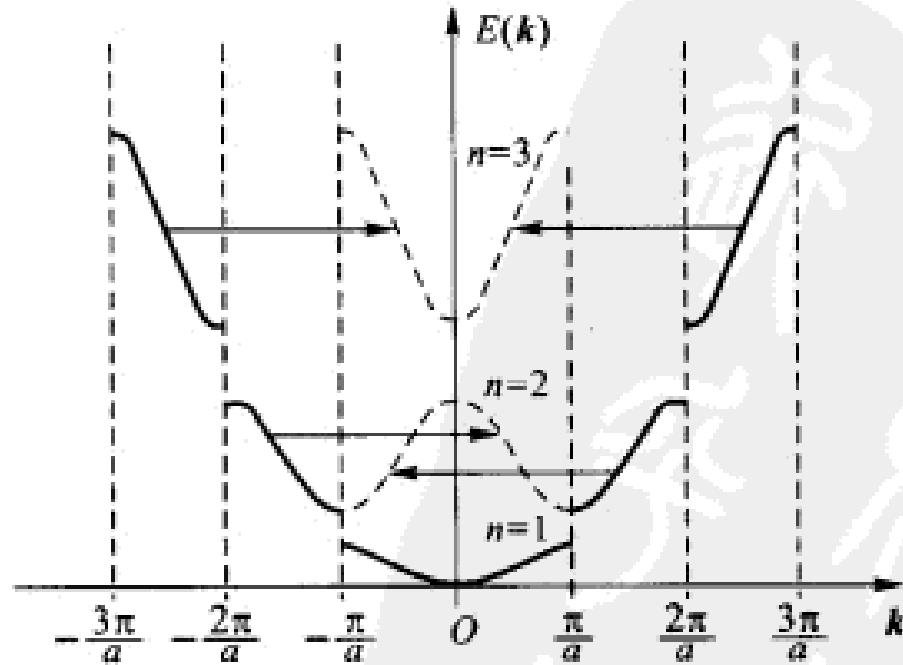


图 4.3.7 利用布洛赫定理,用简约波矢表示近自由电子近似的能带

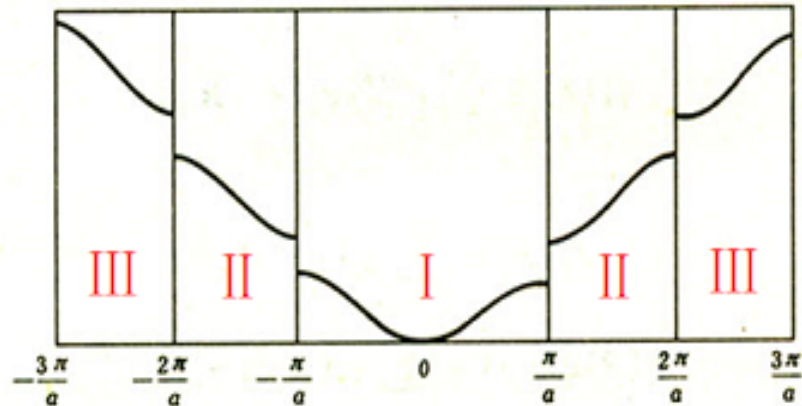
- 为了用简约波矢来标志近自由电子的状态, 须标明, 是属于哪个能带, $n=?$, 以及它的简约波矢 $\bar{\mathbf{k}}=?$ 。(P149)

七、能带的能区图式

$E_n(k)$ 函数的三种图象

在 k 空间中，电子能量 $E_n(k)$ 函数有三种不同的表示方式，称为三种布里渊区图象。这三种表示方法是等价的，可根据所考虑问题的方便选择不同的表示方法。

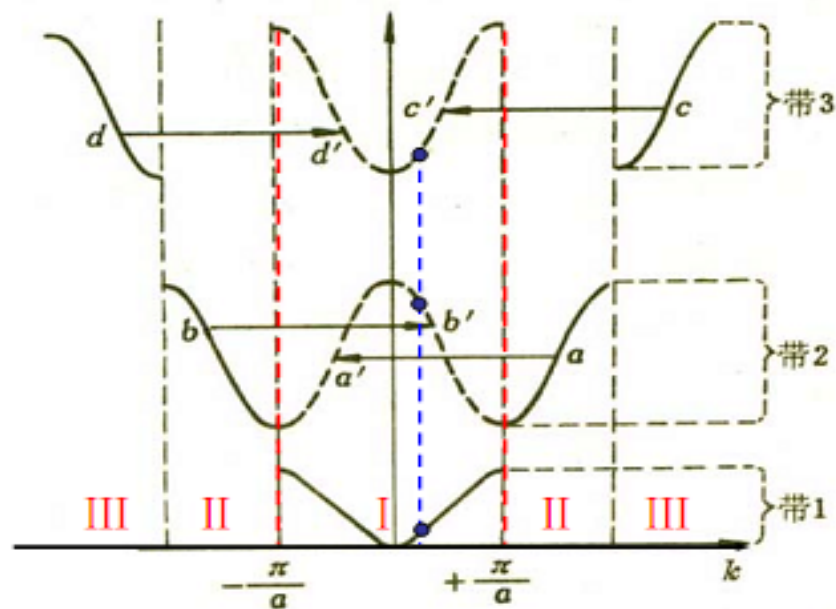
若波矢量 k 在整个 k 空间中取值，这时每一个布里渊区中有一个能带，第 n 个能带在第 n 个布里渊区中，这种表示法称为**扩展的布里渊能区图象**。



若将波矢量 k 限制在简约区中，由于 k 和 $k+K_h$ 所对应的平移算符本征值相同，也就是说， k 和 $k+K_h$ 标志的原胞间电子波函数的位相变化相同。在这个意义上，可以认为 k 和 $k+K_h$ 是等价的。因此，可以将 k 限制在简约区中。

但是由于电子的能量分为若干个能带，如将所有能带都表示在简约区中，那么，对于一个简约波矢 k ，就有若干个分立的能量值与之对应。我们用 n 来区分不同的能带 $E_n(k)$ 。对于给定的能带 n ， $E_n(k)$ 是 k 的连续函数。

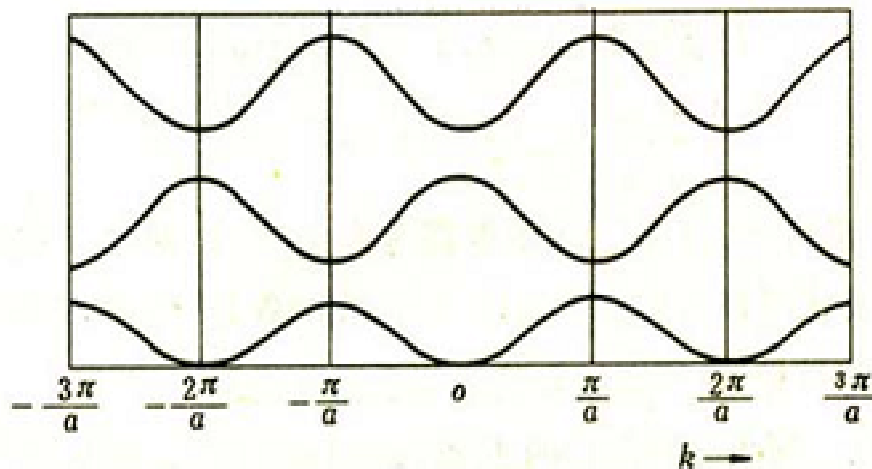
$E_n(k)$ 的这种表示法称为简约的布里渊能区图象。



实际上，由于我们认为 k 和 $k+K_h$ 等价，因而， $E_n(k)$ 的简约布里渊区图象中的第 n 个能带，实际上是由扩展布里渊区图象中从第 n 个布里渊区中平移一个倒格矢 K_h 而得来的。

由于认为 k 和 $k+K_h$ 等价，因而可以认为 $E_n(k)$ 是 k 空间中以倒格矢 K_h 为周期的周期函数，即 $E_n(k) = E_n(k+K_h)$ 。而简约布里渊区是倒易空间的原胞，以此原胞为重复单元进行平移操作可以得到整个 k 空间，这些单元都是等价的。因此，对于同一能带有： $E_n(k) = E_n(k+K_h)$

$E_n(k)$ 的这种表示法称为**周期的布里渊能区图象**。



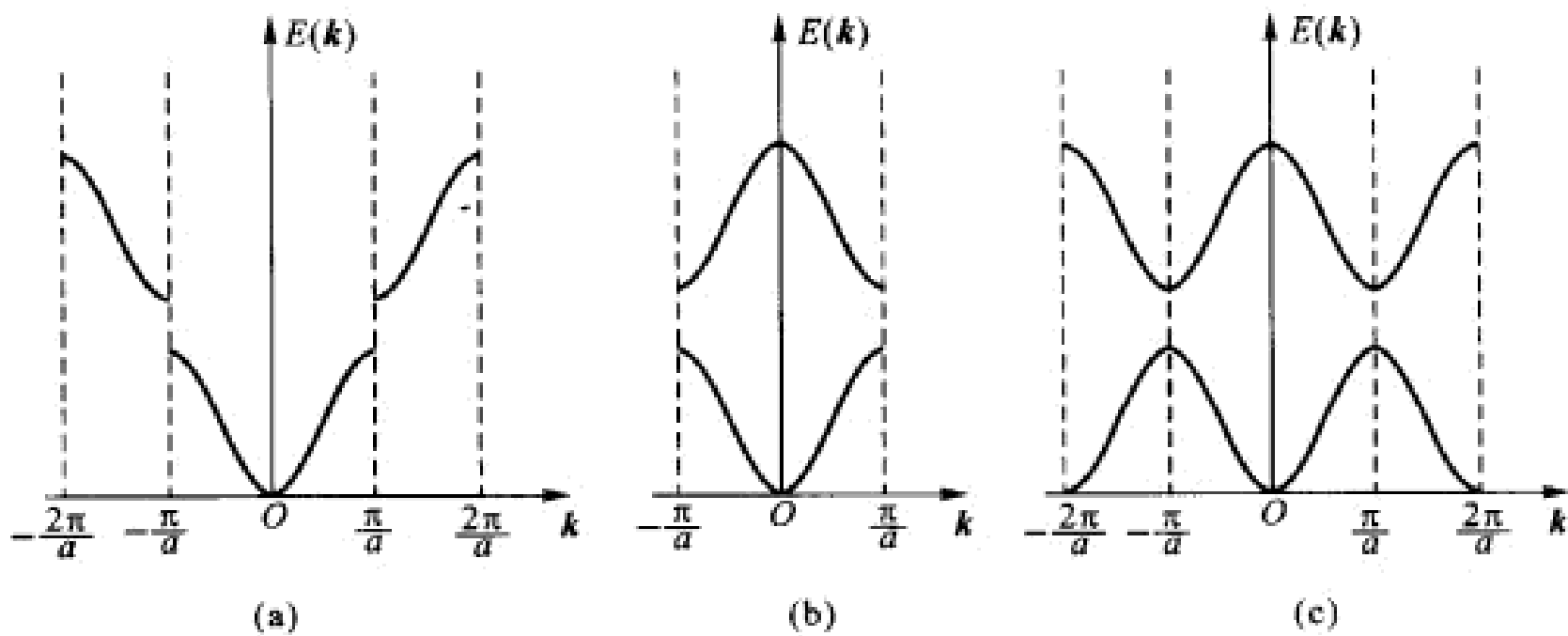


图 4.3.8 一维点阵的能区图式

(a) 扩展能区图式 (b) 简约能区图式 (c) 周期的能区图式

扩展布里渊区图象：不同的能带在 k 空间中不同的布里渊区中给出；
 简约布里渊区图象：所有能带都在简约区中给出；
 周期布里渊区图象：在每一个布里渊区中给出所有能带。

