

1 ゾーン境界におけるバンドの接続

質問の性質は、全てのバンド構造の周期性によるものです。つまり $\epsilon_n(k) = \epsilon_n(k+K)$

簡単な場合から出発します。

縮退なし、かつスピンなしの場合を考えます。

単一バンドで $n=1$ です。 $\epsilon_1(k) = \epsilon_1(k+K)$ ①

以下 1 を省略。 ②

スピンなしでは $\epsilon(-k) = \epsilon(k)$ となります。

証明は難しくないので、ここでは $\epsilon(k)$ と $\epsilon(-k)$ の両方とも

往還波は同じと見て下します。

つまり、1次元では $\epsilon(k)$ は k の原点に関して ~~対称~~ 対称です。

② より $\epsilon(-\pi/a) = \epsilon(+\pi/a)$

次にゾーン境界の少し内側の点

$$k' = \frac{\pi}{a} - \Delta$$

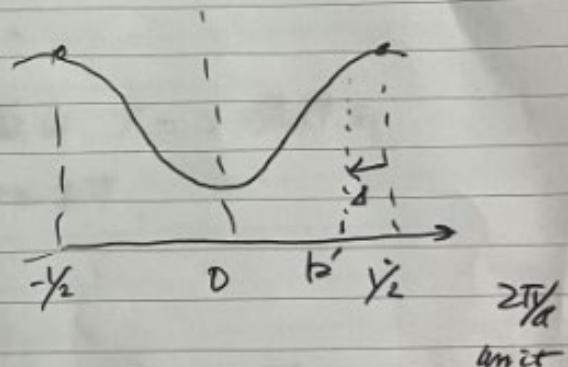
を考える

② より $\epsilon(-k') = \epsilon(k')$

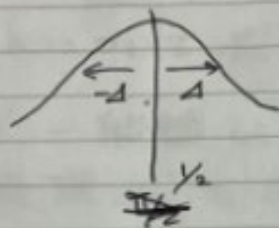
つまり $\epsilon(-\frac{\pi}{a} + \Delta) = \epsilon(\frac{\pi}{a} - \Delta)$... ③

これは①より

$$\epsilon(-\frac{\pi}{a} + \Delta) = \epsilon(\frac{\pi}{a} + \Delta) \dots ④$$



③と④は $k = \pi/a$ を中心に、それぞれ左右に Δ づれた点 A をは同じであること E 述べておいた。
 つぎ $E(k)$ は $k = \pi/a$ を中心に 対称と仮定する



したがって

$$\frac{E(\frac{\pi}{a} + \Delta) - E(\frac{\pi}{a} - \Delta)}{2\Delta} = 0$$

$\Delta \rightarrow 0$ の極限では

$$\left(\frac{dE}{dk}\right)_{k=\frac{\pi}{a}} = 0 \quad \dots \textcircled{5}$$

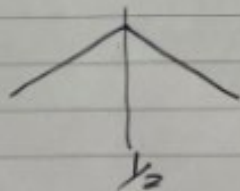
3次元にわたる場合も

ゾーン境界面に垂直方向に関しては、同じ。
 (2軸 ~~は~~ E 平行移動するだけでよい)

$$\left(\frac{\partial E}{\partial k}\right)_n = 0 \quad \dots \textcircled{6}$$

これから 等エネルギー面はゾーン境界面に
 垂直に横切ることが導かれます。

⑤からは



この変化は禁止
 されます。

縮退がある場合、スピンの場合などは、この限りではありません。