

Symetria przestrzeni energetycznej $E_{\underline{k}}$

$1^o \quad \underline{E}_{\underline{k}} = E_{\underline{k} + \underline{K}} \quad , \quad \underline{K} - \text{dowolny wektor sieci odwrotnej}$

Wynika z translacyjnej niezmienniczości układu
- niezmienniczość ze względu na operację translacji,
jest to tzw. symetria translacyjna układu, której
matematycznym wyrazem jest znikanie komutatora
 $[\hat{H}(\vec{r}), \hat{T}_{\vec{R}_L}] = 0$.

Uzasadnienie: Niech $\hat{T}_{\vec{R}_L} \hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r} + \vec{R}_L) = \hat{H}(\vec{r})$
dla dowolnego wektora sieci prostej $\vec{R}_L$.

Pokażemy wcześniej, że $\hat{H}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \sum_i V(\vec{r} - \vec{R}_i)$
spełnia powyższy warunek.

Jeśli $\psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ jest funkcją Blocha to

$$\hat{H}(\vec{r}) \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = E_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) \quad / \quad \hat{T}_{\vec{R}_L}$$

Więc

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{T}_{\vec{R}_L} \hat{H}(\vec{r}) \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \hat{T}_{\vec{R}_L} E_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) \\ \hat{H}(\vec{r}) \hat{T}_{\vec{R}_L} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = E_{\underline{k}} \hat{T}_{\vec{R}_L} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) \end{array} \right.$$

verte
→

zakładamy, że
niezerowe

$$[\hat{H}(\vec{r}), \hat{T}_{\vec{R}_L}] = 0$$

czyli $\hat{T}_{\vec{R}_L} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ jest też f.k. Blocha
której odpowiada ta sama wartość własna
energii $E_{\underline{k}}$, tzn. $\hat{T}_{\vec{R}_L} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \psi_{\underline{k}'}(\vec{r})$

$\underline{k}'$ jest określone przez sposób w jaki
 $\psi_{\underline{k}}$ transformuje się względem translacji

Albo Tzw. (bardziej elegancko) :

Jeśli $\hat{H}(\vec{r})\psi_{\underline{u}}(\vec{r}) = E_{\underline{u}}\psi_{\underline{u}}(\vec{r})$ tzn. $\psi_{\underline{u}}(\vec{r})$ jest f.ą Błaha,

to

$$\hat{H}(\vec{r})\hat{T}_{\vec{R}_L}\psi_{\underline{u}}(\vec{r}) = \hat{T}_{\vec{R}_L}\hat{H}(\vec{r})\psi_{\underline{u}}(\vec{r}) = \hat{T}_{\vec{R}_L}E_{\underline{u}}\psi_{\underline{u}}(\vec{r}) = E_{\underline{u}}\hat{T}_{\vec{R}_L}\psi_{\underline{u}}(\vec{r})$$

gdzie skorzystaliśmy z tego, że dla do-olnej f.ą $\psi_{\underline{u}}(\vec{r})$

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\vec{R}_L}\hat{H}(\vec{r})\psi_{\underline{u}}(\vec{r}) &= \hat{H}(\vec{r}+\vec{R}_L)\psi_{\underline{u}}(\vec{r}+\vec{R}_L) = \hat{H}(\vec{r})\psi_{\underline{u}}(\vec{r}+\vec{R}_L) = \\ &= \hat{H}(\vec{r})\hat{T}_{\vec{R}_L}\psi_{\underline{u}}(\vec{r}) \text{ tzn. } [\hat{T}_{\vec{R}_L}, \hat{H}(\vec{r})] = 0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\bar{R}_n} \underbrace{\hat{T}_{\bar{R}_l} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})}_{\psi_{\underline{k}}(\vec{r})} &= \hat{T}_{\bar{R}_n + \bar{R}_l} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = e^{i\bar{k}(\bar{R}_n + \bar{R}_l)} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \\ &= e^{i(\underline{k} + \underline{K})(\bar{R}_n + \bar{R}_l)} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = e^{i(\bar{k} + \bar{K})\bar{R}_n} e^{i(\bar{k} + \bar{K})\bar{R}_l} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{K} - \text{wektor siły odwrotnej, dowolny} \\ \bar{K} \cdot \bar{R}_i = 2\pi n, \quad \bar{R}_i = (\bar{R}_n + \bar{R}_l) \end{array} \right\}$$

$$= e^{i(\bar{k} + \bar{K})\bar{R}_n} e^{i\bar{k}\bar{R}_l} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = e^{i(\bar{k} + \bar{K})\bar{R}_n} \hat{T}_{\bar{R}_n} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$$

To oznacza, że

$$\hat{T}_{\bar{R}_l} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \psi_{\underline{k} + \underline{K}}(\vec{r})$$

i ponieważ $\hat{T}_{\bar{R}_l} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ jest funkcją własną hamiltonianu więc odpowiada jej wartość własna energii tego stanu ($|\bar{k} + \bar{K}\rangle$)

$$\hat{H} \psi_{\underline{k} + \underline{K}} = E_{\underline{k} + \underline{K}} \psi_{\underline{k} + \underline{K}}$$

Dodatkowo stany $\psi_{\underline{k} + \underline{K}}$ i $\psi_{\underline{k}}$, takie że

$$\hat{H} \psi_{\underline{k}} = E_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}$$

są zdegenerowane, więc

$$E_{\underline{k}} = E_{\underline{k} + \underline{K}}$$

2° $\left(E_k = E_{\alpha k} \right)$, α - przekształcenie izometryczne zachowujące co najmniej jeden punkt np. $C_n, i, \sigma_h, \sigma_v$.
 α jest elementem grupy symetrii punktowej.

Symetria E_k wynika z symetrii układu (hamiltonianu) względem operacji α , czyli z punktowej symetrii układu.

Zdefiniujmy operator $\hat{S}_\alpha f(\vec{r}) \equiv f(\alpha \vec{r})$

i rozważmy periodyczny hamiltonian jednoczeskowy

$$\hat{H}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m} + \sum_i V(\vec{r} - \vec{R}_i)$$

Wtedy

$$\hat{S}_\alpha \hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\alpha \vec{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\alpha \vec{r}}^2}{2m} + V(\alpha \vec{r}) =$$

$$= -\frac{\hbar^2 \nabla_{\alpha \vec{r}}^2}{2m} + \sum_i V(\alpha \vec{r} - \vec{R}_i) = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\alpha \vec{r}}^2}{2m} + \sum_j V(\alpha \vec{r} - \alpha \vec{R}_j) =$$

$$= -\frac{\hbar^2 \nabla_{\alpha \vec{r}}^2}{2m} + \sum_j V(\alpha(\vec{r} - \vec{R}_j))$$

$$(\vec{R}_i = \alpha \vec{R}_j)$$

α - operacja symetrii punktowej sieci Bravais

ponieważ

$$\nabla_{\alpha \vec{r}}^2 = \nabla_{\alpha \vec{r}} \cdot \nabla_{\alpha \vec{r}} = (\alpha \nabla_{\vec{r}}) \cdot (\alpha \nabla_{\vec{r}}) = \nabla_{\vec{r}}^2$$

α - izometria
 (nie zmienia iloczynu skalarnego)

Więc

$$\hat{S}_\alpha \hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r})$$

gdzie $V(\alpha(\vec{r} - \vec{R}_j)) = V(\vec{r} - \vec{R}_j)$ np. jeśli $V(\vec{r} - \vec{R}_i) = V(|\vec{r} - \vec{R}_i|)$.

Uzupełnienie: $\nabla_{\underline{\alpha}} = \alpha \nabla_{\underline{r}}$, α - operator izometrii

$$\alpha \underline{r} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \dots & \alpha_{13} \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_{31} & \dots & \alpha_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Rozważmy $f(r) = f(|\underline{r}|) = f(|\alpha \underline{r}|)$

$$df(r) = (\nabla_{\underline{r}} f(|\underline{r}|)) \cdot d\underline{r} = (\nabla_{\underline{r}} f(r)) \cdot d\underline{r}$$

$$\begin{aligned} df(r) &= (\nabla_{\underline{\alpha}} f(|\alpha \underline{r}|)) \cdot d(\alpha \underline{r}) = \\ &= (\nabla_{\underline{\alpha}} f(r)) \cdot (\alpha d\underline{r}) \end{aligned}$$

czyli

$$(\nabla_{\underline{r}} f(r)) \cdot d\underline{r} = (\nabla_{\underline{\alpha}} f(r)) \cdot (\alpha d\underline{r})$$

ale α jest przekształceniem izometrycznym,
czyli nie zmieniającym iloczynu skalarnego,
więc

$$(\nabla_{\underline{r}} f(r)) \cdot d\underline{r} = (\alpha \nabla_{\underline{r}} f(r)) \cdot (\alpha d\underline{r})$$

czyli

$$(\alpha \nabla_{\underline{r}} f(r)) \cdot (\alpha d\underline{r}) = (\nabla_{\underline{\alpha}} f(r)) \cdot (\alpha d\underline{r})$$

a stąd

$$\nabla_{\underline{\alpha}} f(r) = \alpha \nabla_{\underline{r}} f(r)$$

dla dowolnej f.j. $f(r)$ tzn.

$$\nabla_{\underline{\alpha}} = \alpha \nabla_{\underline{r}}.$$

Uzasadnienie symetrii $E_{\underline{k}}$: Jeśli $\hat{S}_{\underline{\alpha}} \hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r})$

to dla dowolnej fcy $\psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ (nie musi to być fca Blocha)

$$\hat{S}_{\underline{\alpha}} \hat{H}(\vec{r}) \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r}) \psi_{\underline{k}}(\underline{\alpha} \vec{r}) = \hat{H}(\vec{r}) \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$$

$$\text{tzn. } [\hat{S}_{\underline{\alpha}}, \hat{H}(\vec{r})] = 0.$$

Jeśli teraz $\psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ jest fca Blocha to

$$\hat{H}(\vec{r}) \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = E_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$$

a

$$\begin{aligned} \hat{H}(\vec{r}) \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) &= \hat{S}_{\underline{\alpha}} \hat{H}(\vec{r}) \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \hat{S}_{\underline{\alpha}} E_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \\ &= E_{\underline{k}} \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) \end{aligned}$$

tzn.

$\psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ i $\hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ są fcyami własnymi hamiltonianu

odpowiadającymi tej samej wartości własnej $E_{\underline{k}}$,

a więc obie są fcyami Blocha, tzn.

$$\hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \psi_{\underline{k}'}(\vec{r}) \quad \text{gdzie } \underline{k}' \text{ jest określone przez}$$

sposób w jaki ulega $\psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ zmianie (transformuje się) względem operacji translacji, $\hat{T}_{\vec{R}_L} \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$.

Aby policzyć to działanie

musimy sprawdzić jak wygląda składowanie operacji (działań) $\hat{S}_{\underline{\alpha}}$ i $\hat{T}_{\vec{R}_L}$ w działaniu na wektor $\vec{r}$ czyli także dowolną funkcję wektora $\vec{r}$:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\vec{R}_L} \hat{S}_{\underline{\alpha}}(\vec{r}) &= \hat{T}_{\vec{R}_L}(\underline{\alpha}\vec{r}) = \underline{\alpha}\vec{r} + \vec{R}_L = \underline{\alpha}(\vec{r} + \vec{J}'\vec{R}_L) = \\ &= \hat{S}_{\underline{\alpha}} \hat{T}_{\vec{J}'\vec{R}_L}(\vec{r})\end{aligned}\quad \left. \begin{array}{l} \underline{\alpha} \cdot \vec{J}' = 1 \\ \vec{J}' - \text{element} \\ \text{odwrótny} \end{array} \right\}$$

W takim razie działanie translacji $\hat{T}_{\vec{R}_L}$ na stan $\hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ daje

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\vec{R}_L} \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) &= \hat{S}_{\underline{\alpha}} \hat{T}_{\vec{J}'\vec{R}_L} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \hat{S}_{\underline{\alpha}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{J}'\vec{R}_L)} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \\ &= e^{i\vec{k} \cdot (\underline{\alpha}\vec{J}'\vec{R}_L)} \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = e^{i(\underline{\alpha}\vec{k}) \cdot (\underline{\alpha}\vec{J}'\vec{R}_L)} \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = \\ &= e^{i(\underline{\alpha}\vec{k}) \cdot \vec{R}_L} \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})\end{aligned}$$

tzn.

$$\underbrace{\hat{T}_{\vec{R}_L}}_{\psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r})} \left(\underbrace{\hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})}_{\psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r})} \right) = e^{i(\underline{\alpha}\vec{k}) \cdot \vec{R}_L} \underbrace{\left(\hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) \right)}_{\psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r})}$$

$$\hat{T}_{\vec{R}_L} \psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r}) = e^{i(\underline{\alpha}\vec{k}) \cdot \vec{R}_L} \psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r})$$

Tak już pokazaliśmy, $\psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r}) = \hat{S}_{\underline{\alpha}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$ jest f.g's własny hamiltonianu

$$\hat{H} \psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r}) = E_{\underline{\alpha k}} \psi_{\underline{\alpha k}}(\vec{r})$$

która jest zdegenerowana z fga $\psi_{\underline{k}}(\vec{r})$
także, że

$$\hat{H} \psi_{\underline{k}}(\vec{r}) = E_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\vec{r})$$

• to oznacza, że

$$E_{\underline{k}} = E_{\underline{k}}$$

Oznacza to, że fga $E_{\underline{k}}$ w (pierwszej) strefie Brillouina ma pełną symetrię grupy punktowej $\{G\}$.

Zbiór wektorów z RBZ, które otrzymujemy przez działanie wszystkimi elementami grupy punktowej $\{G\}$ tzn. wszystkimi izometriami α z punktowej grupy symetrii $\{G\}$ na wybrany wektor $\vec{k}$ z RBZ nazywamy gwiazdą wektora $\vec{k}$.

$$\{G\vec{k}\} \quad \text{—} \quad \text{gwiazda wektora } \vec{k}.$$

α = wszystkie
elementy punktowej
grupy symetrii

Dwie symetrie $E_{\underline{k}}$ i ich konsekwencje

1° $E_{\underline{k}} = E_{-\underline{k}}$ (symetria inwersji)

$$\frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}=\bar{k}_0} = \frac{\partial E_{-\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}=\bar{k}_0} = - \frac{\partial E_{-\underline{k}}}{\partial (-\bar{k})} \Big|_{\bar{k}=\bar{k}_0} = - \frac{\partial E_{\underline{k}'}}{\partial \bar{k}'} \Big|_{\bar{k}'=\bar{k}_0} = - \frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}=\bar{k}_0}$$

$$\frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}} = - \frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{-\bar{k}}$$

2° $E_{\underline{k}} = E_{\underline{k}+\underline{K}}$ (symetria translacyjna)

$$\frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}=\bar{k}_0} = \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}+\bar{K}=\bar{k}_0+\bar{K}} =$$

$$= \left(\frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial k_x} \mid \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial k_y} \mid \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial k_z} \right) \Big|_{\bar{k}+\bar{K}=\bar{k}_0+\bar{K}} =$$

$$= \left(\frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial (k_x+K_x)} \frac{\partial (k_x+K_x)}{\partial k_x} \mid \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial (k_y+K_y)} \frac{\partial (k_y+K_y)}{\partial k_y} \mid \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial (k_z+K_z)} \frac{\partial (k_z+K_z)}{\partial k_z} \right) \Big|_{\bar{k}+\bar{K}=\bar{k}_0+\bar{K}} =$$

$$= \left(\frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial (k_x+K_x)} \mid \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial (k_y+K_y)} \mid \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial (k_z+K_z)} \right) \Big|_{\bar{k}+\bar{K}=\bar{k}_0+\bar{K}} = \frac{\partial E_{\underline{k}+\underline{K}}}{\partial (\bar{k}+\bar{K})} \Big|_{\bar{k}+\bar{K}=\bar{k}_0+\bar{K}} =$$

$$= \frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}=\bar{k}_0+\bar{K}}$$

$$\frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}} = \frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k} + \bar{K}}$$

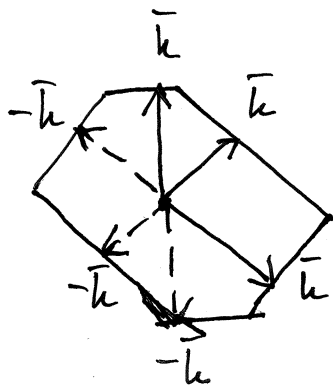
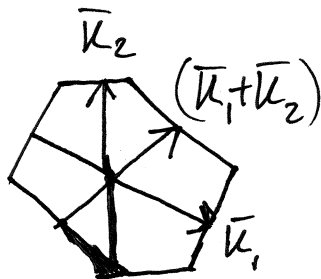
Punkty szerepne : $\bar{k} + \bar{K} = -\bar{k}$ lub $\bar{k} - \bar{K} = -\bar{k}$

czyli

$$-2\bar{k} = \bar{K} \quad \text{lub} \quad 2\bar{k} = \bar{K}$$

wg

$$\bar{k} = -\frac{1}{2}\bar{K} \quad \text{lub} \quad \bar{k} = \frac{1}{2}\bar{K}$$



Dla takich $\bar{k}$ na granicy I strefy
Brillouina (BZ)

$$\frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}} = - \frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{-\bar{k}}$$

i

$$\frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}} = \frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k} + \bar{K} = -\bar{k}}$$

czyli

$$\frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{\bar{k}} = \frac{\partial E_{\underline{k}}}{\partial \bar{k}} \Big|_{-\bar{k}} = 0$$

verte
→

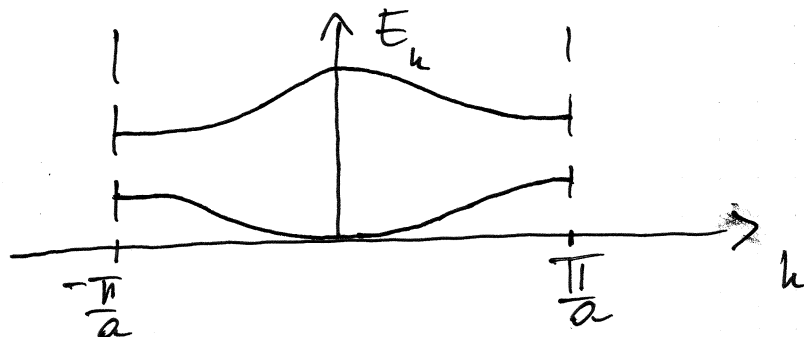
Kolejnym punktem szczególnym jest punkt centralny strefy Brillouina $k=0$ (punkt Γ), dla którego

$$\frac{\partial E_k}{\partial k} \Big|_{\bar{k}=0} = - \frac{\partial E_k}{\partial k} \Big|_{\bar{k}=0} = 0$$

Przypadek jednowymiarowy: $\frac{dE_k}{dk} = 0$ na całej granicy strefy Brillouina.

$$E_k = E_{-k}, \quad E_k = E_{k+K}, \quad K = \frac{2\pi}{a}$$

$$\left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=-\frac{\pi}{a}} = \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=\frac{\pi}{a}} = 0$$



Albo od początku dla jednego wymiaru

$$E_k = E_{-k}; \quad \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{dE_{-k}}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{dE_{-k}}{d(-k)} \right|_{k=k_0} \frac{d(-k)}{dk} = - \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=-k_0}$$

$$E_k = E_{k+K} = E_{k+\frac{2\pi}{a}}; \quad \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{dE_{k+\frac{2\pi}{a}}}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{dE_{k+\frac{2\pi}{a}}}{d(k+\frac{2\pi}{a})} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=k_0+\frac{2\pi}{a}}$$

Jeśli $k_0 + \frac{2\pi}{a} = -k_0 \Rightarrow k_0 = -\frac{\pi}{a}$

lub $k_0 - \frac{2\pi}{a} = -k_0 \Rightarrow k_0 = \frac{\pi}{a}$

to $\left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=\frac{\pi}{a}} = - \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=-\frac{\pi}{a}}$ oraz $\left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=-\frac{\pi}{a}} = \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=-\frac{\pi}{a} + \frac{2\pi}{a}} = \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=\frac{\pi}{a}}$

czyli $\left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=-\frac{\pi}{a}} = \left. \frac{dE_k}{dk} \right|_{k=\frac{\pi}{a}} = 0$.

3° Symetria $E_{\underline{k}} = E_{\underline{\alpha k}}$ nie wnosi nic nowego, tzn.

$$\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} = \nabla_{\underline{\alpha k}} E_{\underline{\alpha k}} = \alpha \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{\alpha k}}$$

czyli w punktach $\underline{\alpha k}$ mamy

$$\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{\alpha k}} = \bar{\alpha}^1 \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} \text{ i jeśli (dokładnie jest to "}\Leftrightarrow\text{")}$$

$$\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} = 0 \text{ to } \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{\alpha k}} = 0 \text{ (tzn. wtedy i tylko wtedy gdy)}$$

w bliższej formie

$$\bar{k} = 0 \rightarrow \alpha(\bar{k} = 0) = 0$$

$$\bar{k} = \frac{\bar{k}_i}{2} \rightarrow \alpha(\bar{k} = \frac{1}{2} \bar{k}_i) = \frac{1}{2} \alpha \bar{k}_i = \frac{1}{2} \bar{k}_i^1 \text{ a to } \bar{k}_i^1 \text{ (}\bar{k}_i\text{)}$$

jest wektor
sieci o długości
bo sieć jest
niezmiennością
przekształcenia α

Czyli nadal otrzymujemy wektory

$$\bar{k} = 0 \text{ i } \bar{k} = \frac{1}{2} \bar{k}_i \text{ są wektorami}$$

$$\text{dla których } \nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} = 0.$$

Wniosek: $E_{\underline{k}}$ ma ekstrema (maxima i minima) w centrum
i na granicy strefy Brillouina, tzn. w
 $\bar{k} = 0, \pm \frac{1}{2} \bar{K}_{\alpha}$.

2° $E_{\underline{k}}$ jest ekstremalna na całej granicy strefy Brillouina
układu jednowymiarowego, czyli miara zbioru punktów
dla których $\nabla_{\underline{k}} E_{\underline{k}} = 0$ jest skończona (większa od zera)
a stąd wynika, że gęstość stanów układu jednowymiaro-
wego ma osobliwość.