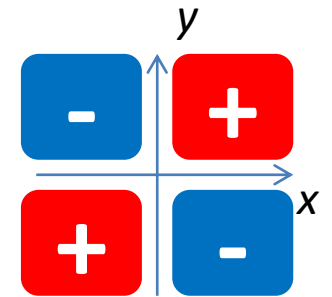
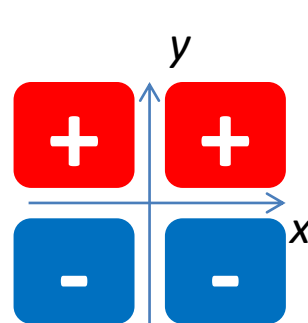
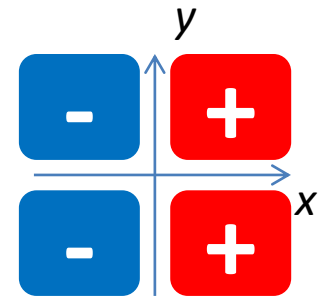
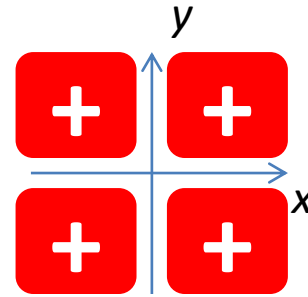
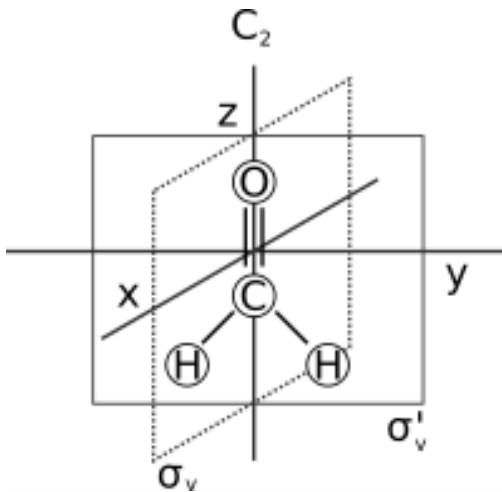
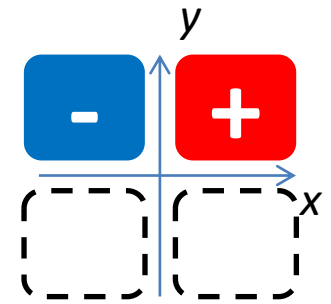
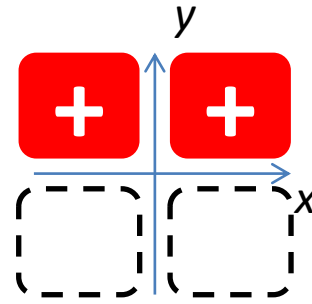
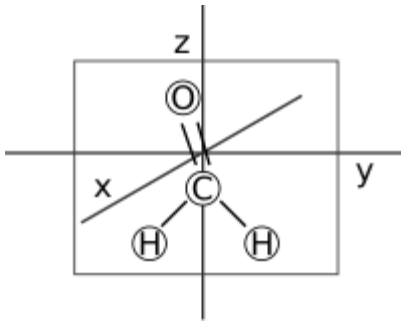


„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych” (1101-4FS22)

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego
Instytut Fizyki Doświadczalnej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski



(w tym wypadku i tak wszystkie reprezentacje są 1-wymiarowe)

Teoria grup a mechanika kwantowa

Równanie Schrödingera opisujące dany układ fizyczny jest niezmiennicze względem operacji symetrii tego układu. Tak więc działanie tych operacji symetrii nie może zmieniać energii układu (nie wyprowadza poza dany poziom energetyczny)

Funkcje falowe związane z danym poziomem energetycznym układu przy operacjach symetrii przechodzą nawzajem na siebie, czyli wyznaczają pewną reprezentację (nieprzywiedlną !) grupy symetrii układu.

Wymiar reprezentacji określa liczbę różnych funkcji falowych o tej samej energii, a więc *degenerację stanu*.

Bardzo często stany nazywa się nazwami nieprzywiedlnych reprezentacji, według których transformują się ich funkcje falowe.

Teoria grup a mechanika kwantowa

Teoria grup pozwala np.:

1. przewidzieć zerowanie się elementów macierzowych operatorów z funkcjami falowymi różnych stanów (a więc znaleźć np. reguły wyboru przejść optycznych)
2. przewidzieć schemat rozszczepień stanów zdegenerowanych pod wpływem zaburzenia obniżającego symetrię hamiltonianu

Ad. 1

- Stan początkowy ma określoną symetrię (repr. Γ_p)
- Hamiltonian zaburzenia ma określoną symetrię (repr. Γ_H)
- Przejście do stanu końcowego o symetrii Γ_k jest dozwolone gdy:

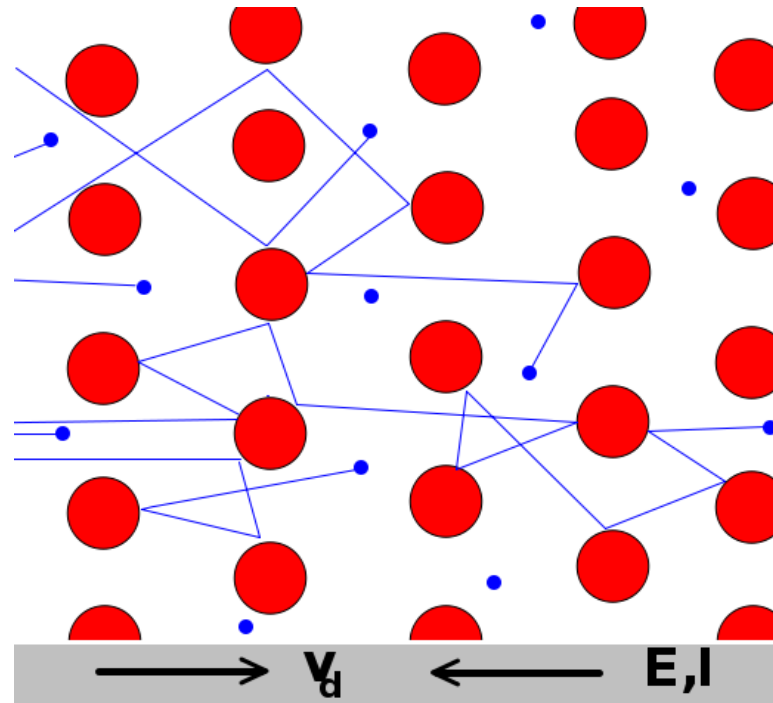
$$\Gamma_k \in \Gamma_H \times \Gamma_p$$

Pojedynczy foton o polaryzacji $\vec{E}||x$
transformuje się jak $f(x) = x$

ELEMENTY MECHANIKI KWANTOWEJ CIAŁA STAŁEGO

Klasyczny model Drudego

Naiwny obrazek: sztywne kulki – elektrony zderzają się ze sztywnymi kulkami – rdzeniami atomowymi; rozproszenie jest izotropowe



http://en.wikipedia.org/wiki/File:Electrona_in_crystallo_fluentia.svg

Klasyczny model Drudego

- średnia droga swobodna $l_{\acute{s}r}$ – rzędu odległości międzyatomowych
- średni czas pomiędzy zderzeniami:

$$\tau_{\acute{s}r} = \frac{l_{\acute{s}r}}{v_{\acute{s}r}}$$

- klasyczne równanie ruchu:
$$\frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = -e\vec{E} - \frac{\langle \vec{p} \rangle}{\tau_{\acute{s}r}}$$

- w stanie ustalonym dostajemy:

$$\vec{j} = -en\vec{v}_u = -en\frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} = \frac{e^2 n \tau_{\acute{s}r}}{m} \vec{E} = \sigma \vec{E}$$

- liczymy $\tau_{\acute{s}r}$ dla miedzi:

- $\sigma (300 \text{ K}) \approx 5,85 \cdot 10^7 \text{ } /\Omega \cdot \text{m}$

- $n \approx 8,5 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$

- $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

$$\Rightarrow \tau_{\acute{s}r} \approx 2,5 \cdot 10^{-14} \text{ s}$$

Klasyczny model Drudego

- jak obliczyć $v_{\dot{s}r}$?
 - tak jak Drude – gaz doskonały (rozkład Boltzmann), $T=300K$:

$$v_{\dot{s}r} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \approx 1,2 \cdot 10^5 \text{ m/s} \quad \Rightarrow \quad l_{\dot{s}r} \approx 3 \text{ nm} = 30 \text{ \AA}$$

- tak jak Sommerfeld – zdegenerowany gaz Fermiego (rozkład Fermiego-Diraca):

$$v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m}} \approx 1,6 \cdot 10^6 \text{ m/s} \quad \Rightarrow \quad l_{\dot{s}r} \approx 40 \text{ nm} = 400 \text{ \AA}$$

- to już jest znacznie więcej niż odległość między atomami, a w niskich temperaturach i czystych metalach $l_{\dot{s}r}$ może być jeszcze znacznie większe (rzędu milimetrów)

klasyczny obraz załamuje się

Dygresja – prawo Wiedemanna-Franza

$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT$$

- k – przewodnictwo cieplne
- σ – przewodnictwo elektryczne
- L – liczba Lorentza

- Drude:
$$L_{Drude} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$$

Sind nur einfache Kerne vorhanden, deren Ladung $\pm e$ ist, so folgt:

$$(20) \quad \frac{\kappa}{\sigma} = \frac{4}{3} \left(\frac{\alpha}{e} \right)^2 T,$$

Dygresja – prawo Wiedemanna-Franza

$$\frac{\kappa}{\sigma} = LT$$

- k – przewodnictwo cieplne
- σ – przewodnictwo elektryczne
- L – liczba Lorentza

- Drude:
$$L_{Drude} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$$
- Sommerfeld:
$$L_{Sommerfeld} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$$
- Model Drudego kompletnie źle opisywał elektronowy wkład do ciepła właściwego

Równanie Schroedingera całego układu

- Zaczniemy od wypisania pełnego hamiltonianu...

Przybliżenie Borna-Oppenheimera

Pełny nierelatywistyczny hamiltonian układu jąder i elektronów:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,N} \frac{Z_N e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_N|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{N<K} \frac{Z_N Z_K e^2}{|\vec{R}_N - \vec{R}_K|} =$$
$$= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + V(\vec{r}, \vec{R}) + G(\vec{R})$$

gdzie: $\vec{r} = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots)$, $\vec{R} = (\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3, \dots)$

- współrzędne obu podukładów – elektronowego i jądrowego (jonowego) są nietrywialnie przemieszane, sugerując, że separacja zmiennych elektronowych i jądrowych jest niemożliwa
- możliwe rozwiązanie: **przybliżenie adiabatyczne Borna-Oppenheimera**

Przybliżenie Borna-Oppenheimera

1. Jony (sieć) drgają powoli w porównaniu z częstościami charakterystycznymi dla elektronów; można wobec tego przyjąć, że dla każdego chwilowego położenia jonów elektrony znajdują się w stanach kwantowych odpowiadających potencjałowi aktualnej konfiguracji jonów.
2. „Zamrażamy” więc jony w ich chwilowych położeniach i rozwiązujemy elektronowe równanie Schrödingera:

$$H_{el}\psi_{el}^k(\vec{r};\vec{R}) = \left(\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + V(\vec{r}, \vec{R}) \right) \psi_{el}^k(\vec{r};\vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R}) \cdot \psi_{el}^k(\vec{r};\vec{R})$$

otrzymujemy wieloelektronowe funkcje falowe $\psi_{el}^k(\vec{r};\vec{R})$ zależne od położenia wszystkich elektronów, ***sparametryzowane chwilowymi położeniami wszystkich jąder*** (jonów) \vec{R} . Wskaźnik k reprezentuje zbiór liczb kwantowych wieloelektronowego stanu kwantowego. Energie $E_{el}^k(\vec{R})$ także zależą od parametrów \vec{R} .

Przybliżenie Borna-Oppenheimera

3. Rozwiązania dla pełnego hamiltonianu układu elektronów i jąder (jonów) poszukujemy teraz w postaci (ewentualnie w postaci kombinacji liniowej takich rozwiązań odpowiadających różnym możliwym funkcjom $\psi_{el}^k(\vec{r}; \vec{R})$):

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \Phi(\vec{R}) \cdot \psi_{el}^k(\vec{r}; \vec{R})$$

4. Pamiętając, że operatory pędu dla jonów będą działały także na $\psi_{el}^k(\vec{r}; \vec{R})$ otrzymujemy:

$$\begin{aligned} H\Psi(\vec{r}, \vec{R}) &= \left(\sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right) \Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \\ &= \psi_{el}^k(\vec{r}; \vec{R}) \left\{ \sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right\} \Phi(\vec{R}) + \\ &\quad - \sum_N \frac{\hbar^2}{2M_N} \left\{ 2\nabla_{\vec{R}_N} \Phi(\vec{R}) \cdot \nabla_{\vec{R}_N} \psi_{el}^k(\vec{r}; \vec{R}) + \Phi(\vec{R}) \Delta_{\vec{R}_N} \psi_{el}^k(\vec{r}; \vec{R}) \right\} \end{aligned}$$

Przybliżenie Borna-Oppenheimera

5. Jeśli można zaniedbać drugą linijkę powyższego wzoru (różniczkowania wieloelektronowej funkcji falowej po współrzędnych jonów) – patrz J.M. Ziman, „Wstęp do teorii ciała stałego”, to otrzymujemy równanie na funkcję $\Phi(\vec{R})$ w formie równania Schrödingera:

$$\left(\sum_N \frac{P_N^2}{2M_N} + E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R}) \right) \Phi(\vec{R}) = E^k \Phi(\vec{R})$$

tzn. $\Phi(\vec{R})$ ma sens funkcji falowej opisującej ruch jąder (jonów) w potencjale wzajemnego ich oddziaływania $G(\vec{R})$ oraz *adiabaticznego wkładu elektronów w energię ruchu jąder/jonów* (energię sieci) $E_{el}^k(\vec{R})$

6. Człony zaniedbane dają sprzężenie pomiędzy podukładami elektronów i jąder (jonów) – *sprężenie elektron-fonon*

Ruch jonów (drgania sieci), przybliżenie harmoniczne

- Równowagowy układ położeń jąder/jonów (równowagowa wartość stałej sieci) odpowiada minimum efektywnego potencjału:

$$U_{eff}^k(\vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R}) + G(\vec{R})$$

w którym poruszają się jądra (jony)

- Rozwijając U_{eff} wokół położenia równowagi \vec{R}_0 (człon liniowy zniknie)

$$U_{eff}(\vec{R}) = U_{eff}(\vec{R}_0) + U'(\delta\vec{R})$$

otrzymujemy energię potencjalną sieci jako funkcję zawierającą człony co najmniej kwadratowe we względnych przesunięciach jonów $\delta\vec{R}$.

Ograniczenie się do członów kwadratowych daje nam obraz drgań sieci jako zbioru sprzężonych oscylatorów harmonicznyc; dołożenie wyższych członów rozwinięcia daje efekty anharmoniczne (np. rozszerzalność termiczną, oddziaływanie fonon-fonon)

Wieloelektronowe równanie Schrödingera

$$H_{el}\psi_{el}^k(\vec{r};\vec{R}) = \left(\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + V(\vec{r},\vec{R}) \right) \psi_{el}^k(\vec{r};\vec{R}) = E_{el}^k(\vec{R}) \cdot \psi_{el}^k(\vec{r};\vec{R})$$

Jak je rozwiązać?

Wieloelektronowe równanie Schrödingera

- Jedna z metod: LCAO-MO z przybliżeniem Hartree-Focka – metoda samouzgodniona (rozwiązania iteracyjne), n-elektronowa funkcja falowa w postaci pojedynczego wyznacznika Slatera, automatycznie zapewniającego antysymetryczność funkcji falowej ze względu na przestawienie dwóch dowolnych elektronów:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_n, s_1, s_2, s_3, \dots, s_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \varphi_1^{sp}(\vec{r}_1, s_1) & \varphi_1^{sp}(\vec{r}_2, s_2) & \dots & \varphi_1^{sp}(\vec{r}_n, s_n) \\ \varphi_2^{sp}(\vec{r}_1, s_1) & \varphi_2^{sp}(\vec{r}_2, s_2) & \dots & \varphi_2^{sp}(\vec{r}_n, s_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_n^{sp}(\vec{r}_1, s_1) & \varphi_n^{sp}(\vec{r}_2, s_2) & \dots & \varphi_n^{sp}(\vec{r}_n, s_n) \end{vmatrix}$$

- każdy z jednoelektronowych spinorbitali $\varphi_i^{sp}(\vec{r}_i, s_i)$ musi być inny – dwa spinorbitale mogą np. mieć tę samą część orbitalną, ale wtedy muszą się różnić spinem:

$$\varphi_i(\vec{r}_i) \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad i \quad \varphi_i(\vec{r}_i) \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Wieloelektronowe równanie Schrödingera

- W metodzie „oddziaływania konfiguracji” poszukuje się rozwiązania zagadnienia wieloelektronowego w postaci kombinacji liniowej różnych możliwych wyznaczników Slatera (jeszcze trudniejsza rachunkowo)
- Dla dużej liczby elektronów metody te są niewykonalne!
- Sposób na efektywne zmniejszenie układów – np. metoda *super-cell*: relatywnie nieduży układ periodycznie powtarzany, co imituje układ duży i np. pozbywamy się w ten sposób wpływu „brzegów” (zerwane wiązania etc.) – rachunki defektów w kryształach, struktur pasmowych kryształów mieszanych etc.

Metoda *super-cell*

Rachunki energii tworzenia defektów w Al_2O_3

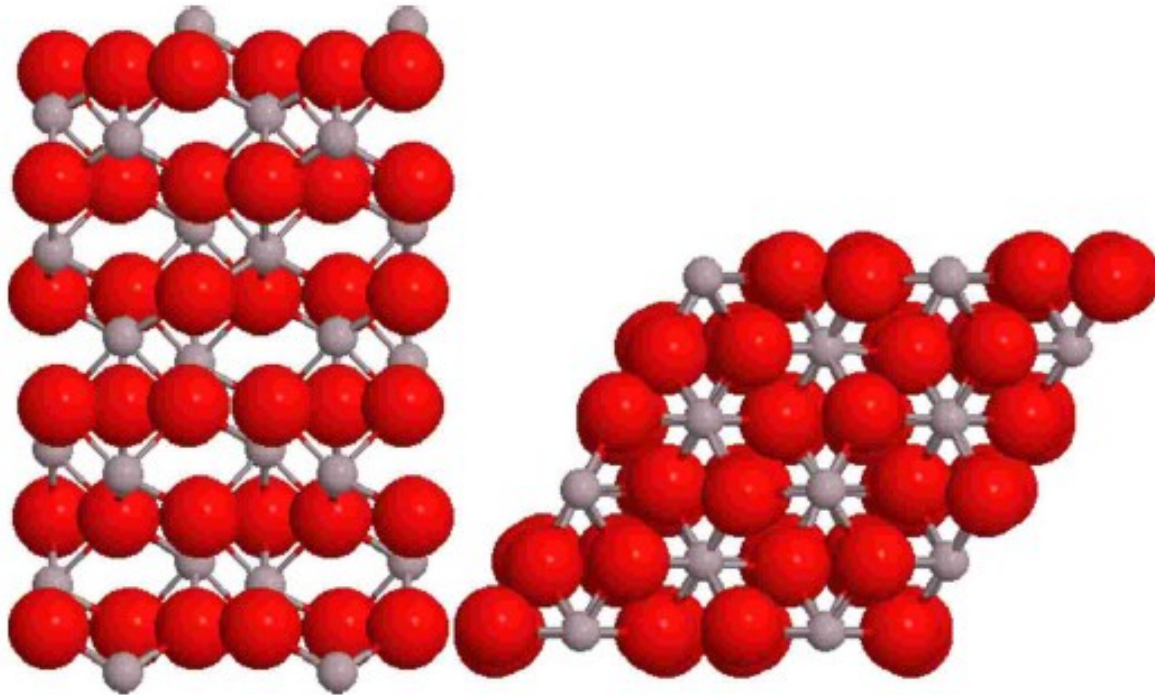


FIG. 1. (Color online) Supercell of Al_2O_3 containing $2 \times 2 \times 1$ copies of the hexagonal unit cell with 120 atoms. Left: side view along the a axis. Right: top view down the c axis.

N. D. M. Hine, K. Frensch, W. M. C. Foulkes, and M. W. Finnis PHYSICAL REVIEW B **79**, 024112 (2009)

Teoria funkcjonału gęstości

ELECTRONIC STRUCTURE OF MATTER – WAVE FUNCTIONS AND DENSITY FUNCTIONALS

Nobel Lecture, January 28, 1999

by

WALTER KOHN

Department of Physics, University of California, Santa Barbara, CA 93106-9530, USA

wave-number-dependent susceptibility of the uniform gas. This suggested the hypothesis that *a knowledge of the groundstate density of $n(r)$ for any electronic system, (with or without interactions) uniquely determines the system.* This hypothesis became the starting point of modern DFT.

Hohenberg-Kohn

A. The Density $n(r)$ as the Basic Variable

The Basic Lemma of HK. The groundstate density $n(r)$ of a bound system of interacting electrons in some external potential $v(r)$ determines this potential uniquely^[1].



the *ground state* properties of a many-electron system are uniquely determined by an *electron density* that depends on only 3 spatial coordinates

Przybliżenie Hartree (podejście jednoelektronowe)

- Poszukujemy rozwiązania w postaci:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_n) = \varphi_1(\vec{r}_1) \cdot \varphi_2(\vec{r}_2) \cdot \varphi_3(\vec{r}_3) \cdot \dots \cdot \varphi_n(\vec{r}_n)$$

- Zakładamy, że na każdy elektron działa średni potencjał pochodzący od jonów i pozostałych elektronów:

$$\left(\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i V_i(\vec{r}_i) \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_n) = E_{tot} \cdot \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_n)$$

- Stąd mamy: $\left(\frac{p_i^2}{2m} + V_i(\vec{r}_i) \right) \varphi_i(\vec{r}_i) = E_i \cdot \varphi_i(\vec{r}_i) \quad \sum_i E_i = E_{tot}$

- Jeśli każdy z potencjałów jest w przybliżeniu taki sam

$$V_1(\vec{r}_1) \approx V_2(\vec{r}_2) \approx \dots \approx V_n(\vec{r}_n) = V(\vec{r})$$

- to ...

Jednoelektronowe równanie Schrödingera

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \varphi_n(\vec{r}) = E_n \cdot \varphi_n(\vec{r})$$

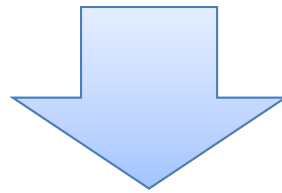
gdzie n – zbiór liczb kwantowych numerujących jednocząstkowe stany kwantowe $\varphi_n(\vec{r})$ o energiach E_n

- stany jednocząstkowe mogą być obsadzone przez kolejne elektrony zgodnie z zasadą Pauliego
- trzeba pamiętać, że jeśli np. zmienimy istotnie liczbę elektronów w danym paśmie, to możemy spodziewać się modyfikacji potencjału $V(\vec{r})$ i zmiany widma jednocząstkowego! (patrz np. renormalizacja przerwy energetycznej)

Potencjał periodyczny (kryształ), twierdzenie Blocha

„Nieskończony problem”: funkcja falowa w całej nieskończonej przestrzeni

$$\Psi(\vec{r}) \quad \vec{r} \in R^3$$



„Ograniczony problem”: funkcja falowa gdzie r i k są **ograniczone do 1 komórki elementarnej** (odpowiednio w sieci prostej i odwrotnej)

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

Zysk: k jest dobrą liczbą kwantową, a postać $u(r)$ nas zwykle nie interesuje

Potencjał periodyczny (kryształ), twierdzenie Blocha

- dla funkcji periodycznych z okresem sieci: $f(\vec{r} + \vec{R}_s) = f(\vec{r})$

gdzie:

$$\vec{R}_s = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$

jest dowolnym wektorem sieci Bravais,

dobrą bazą rozwinięcia na szereg Fouriera są funkcje postaci:

$$g_{\vec{G}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{G}\vec{r})$$

gdzie: $\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^* \quad m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$

– wektor sieci odwrotnej

rzeczywiście:

$$\exp[i\vec{G}(\vec{r} + \vec{R}_s)] = \exp(i\vec{G}\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{G}\vec{R}_s) = \exp(i\vec{G}\vec{r}) \cdot \exp[2\pi i \cdot (n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)] = \exp(i\vec{G}\vec{r})$$

Potencjał periodyczny (kryształ), twierdzenie Blocha

- (jednoelektronowe) równanie Schrödingera:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = E \cdot \varphi(\vec{r})$$

- rozwinięcie potencjału: $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} \exp(i\vec{G}\vec{r})$
- rozwinięcie funkcji falowej: $\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$



$$\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) + \sum_{\vec{k}', \vec{G}} C_{\vec{k}'} V_{\vec{G}} \exp[i(\vec{k}' + \vec{G})\vec{r}] = E \cdot \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

Potencjał periodyczny (kryształ), twierdzenie Blocha

- po przemianowaniu wskaźników sumowania $\vec{k}' + \vec{G} \rightarrow \vec{k}$ otrzymujemy:

$$\sum_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) \cdot \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} \right] = 0$$

- skoro powyższe równanie ma być spełnione dla dowolnego \vec{r} , to:

$$\forall \vec{k} \quad \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$$

- **A więc dla każdego \vec{k} z osobna** będą istniały rozwiązania

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

zawierające współczynniki $C_{\vec{k}}$ rozwinięcia różniące się od \vec{k} o dowolny wektor sieci odwrotnej. Oznacza to, że wektor \vec{k} jest **dobrą liczbą kwantową**, numerującą zarówno stany, jak ich energie.

Potencjał periodyczny (kryształ), twierdzenie Blocha

- rozwiązanie numerowane „liczba kwantowa” \vec{k} :

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} \exp[i(\vec{k} - \vec{G}) \cdot \vec{r}]$$

odpowiadające energii własnej $E_{\vec{k}} = E(\vec{k})$

- każde $\vec{k} - \vec{G}$ jest równie dobre do numerowania stanów; wygodnie jest wybrać wektor najkrótszy (należący do **pierwszej strefy Brillouina**)

- inaczej:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left[\sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}) \right] \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

Funkcja Blocha

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

*funkcja
Blocha*

Własności funkcji Blocha

1. wektor falowy \vec{k} należy do pierwszej strefy Brillouina i jest dobrą liczbą kwantową; n numeruje różne rozwiązania odpowiadające temu samemu \vec{k} (indeks pasm)
2. funkcja $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ (amplituda blochowska) jest funkcją periodyczną z okresem sieci:

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_s)$$

Funkcja Blocha

3. $\varphi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = \varphi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$:

$$\begin{aligned}\varphi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) &= \left[\sum_{\vec{G}'} C_{\vec{k} + \vec{G} - \vec{G}'} \exp(-i\vec{G}' \cdot \vec{r}) \right] \cdot \exp[i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}] = \\ &= \left[\sum_{\vec{G}''} C_{\vec{k} - \vec{G}''} \exp(-i\vec{G}'' \cdot \vec{r}) \right] \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \varphi_{n, \vec{k}}(\vec{r})\end{aligned}$$

4. $E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$ – wynika z punktu poprzedniego