空格子近似

平成 13 年度卒論生

2001 年 5 月

1　空格子近似とは

空格子近似は、自由電子に結晶の周期的条件のみを与えてポテンシャルを 0 とする近似である。ポテンシャルを 0 とするとシュレデンガー方程式 $(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r))\psi(r) = E\psi(r)$ は

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) = E\psi(r)$$

となる。これより波動関数 $\psi(r)$ は $\psi(r) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ となる。ここで周期的境界条件を考える。まず満たすべき式は $\psi(r) = \psi(r+R)$ である。$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot\,(\vec{r}+\vec{R})}$ これが常に成り立つには $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$ が成り立たなければいけない。つまり

$$\psi(R) = \cos(\vec{k}\cdot\vec{R}) + i\sin(\vec{k}\cdot\vec{R}) = 1$$

ゆえに $\vec{k}\cdot\vec{R} = 2\pi n$ （ただしｎは整数とする）この条件を見たすベクトル $\vec{k}$ は基本逆格子ベクトル $(\vec{b_1}, \vec{b_2}, \vec{b_3})$ をもちいて

$$\vec{k} = \xi_1\vec{b_1} + \eta_2\vec{b_2} + \zeta_3\vec{b_3}$$

となる。ここで基本逆格子ベクトルは以下のようなものである。基本格子ベクトルを $\vec{A} = (\vec{a_1}, \vec{a_2}, \vec{a_3})$ とすれば、基本逆格子ベクトルは

$$\vec{b_1} = \frac{2\pi(\vec{a_2}\times\vec{a_3})}{\vec{a_1}\cdot(\vec{a_2}\times\vec{a_3})}, \vec{b_2} = \frac{2\pi(\vec{a_3}\times\vec{a_1})}{\vec{a_2}\cdot(\vec{a_3}\times\vec{a_1})}, \vec{b_3} = \frac{2\pi(\vec{a_1}\times\vec{a_2})}{\vec{a_3}\cdot(\vec{a_1}\times\vec{a_2})}$$

となる。

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) \tag{1}$$

エネルギー固有値は

$$H\psi = E\psi \qquad -\frac{\hbar^2k^2}{2m}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = Ee^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

より、$E(k)=\frac{\hbar^2|k^2|}{2m}$ となる。ここで波数ベクトル $\vec{k}$ を第一ブリルアンゾーン領域に限定する。

$$E(k)=\frac{\hbar^2}{2m}|\vec{k}-l\vec{B}|^2$$

ただし l は逆格子の点の座標である。波数ベクトル及び逆格子ベクトルを代入すると

$$\begin{aligned}
E_l(\vec{k}) &= \frac{\hbar^2}{2m}\left|\xi_1\vec{b}_1+\eta_2\vec{b}_2+\zeta_3\vec{b}_3-l_1\vec{b}_1-l_2\vec{b}_2-l_3\vec{b}_3\right|^2 \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left|\begin{pmatrix}(\xi_1 b_{1x}+\eta_2 b_{2x}+\zeta_3 b_{3x})\frac{2\pi}{a}\\(\xi_1 b_{1y}+\eta_2 b_{2y}+\zeta_3 b_{3y})\frac{2\pi}{b}\\(\xi_1 b_{1z}+\eta_2 b_{2z}+\zeta_3 b_{3z})\frac{2\pi}{c}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}(l_1 b_{1x}+l_2 b_{2x}+l_3 b_{3x})\frac{2\pi}{a}\\(l_1 b_{1y}+l_2 b_{2y}+l_3 b_{3y})\frac{2\pi}{b}\\(l_1 b_{1z}+l_2 b_{2z}+l_3 b_{3z})\frac{2\pi}{c}\end{pmatrix}\right|^2 \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left|\begin{pmatrix}\xi_x\frac{2\pi}{a}\\\eta_y\frac{2\pi}{b}\\\zeta_z\frac{2\pi}{c}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}n_x\frac{2\pi}{a}\\n_y\frac{2\pi}{b}\\n_z\frac{2\pi}{c}\end{pmatrix}\right|^2
\end{aligned}$$

となる。ここで $\xi_x,\eta_y,\zeta_z,n_x,n_y,n_z$ は

$$\begin{aligned}
\xi_x &= \xi_1 b_{1x}+\eta_2 b_{2x}+\zeta_3 b_{3x} \\
\eta_y &= \xi_1 b_{1y}+\eta_2 b_{2y}+\zeta_3 b_{3y} \\
\zeta_z &= \xi_1 b_{1z}+\eta_2 b_{2z}+\zeta_3 b_{3z} \\
n_x &= l_1 b_{1x}+l_2 b_{2x}+l_3 b_{3x} \\
n_y &= l_1 b_{1y}+l_2 b_{2y}+l_3 b_{3y} \\
n_z &= l_1 b_{1z}+l_2 b_{2z}+l_3 b_{3z}
\end{aligned}$$

である。

2　立方単純格子

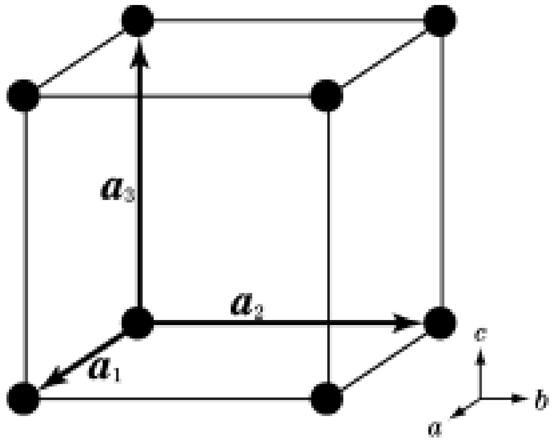

図 1: 立方単純格子の実格子

立方単純格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix} \tag{2}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\pi}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{a} \end{pmatrix} \tag{3}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \xi_1 \\ \eta_y &= \eta_2 \\ \zeta_z &= \zeta_3 \\ n_x &= l_1 \\ n_y &= l_2 \\ n_z &= l_3 \end{aligned} \tag{4}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（5）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（1）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（2）の通りである。対

n^2	$(n_x n_y n_z)$	$(l_1 l_2 l_3)$	l^2
0	(000)	(000)	0
1	(100)	(100)	1
1	$(\bar{1}00)$	$(\bar{1}00)$	1
1	(010)	(010)	1
1	$(0\bar{1}0)$	$(0\bar{1}0)$	1
1	(001)	(001)	1
1	$(00\bar{1})$	$(00\bar{1})$	1
2	(110)	(110)	2
2	$(0\bar{1}0)$	$(0\bar{1}0)$	2
2	$(\bar{1}10)$	$(\bar{1}10)$	2
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(\bar{1}\bar{1}0)$	2
2	(101)	(101)	2
2	$(10\bar{1})$	$(10\bar{1})$	2
2	$(\bar{1}01)$	$(\bar{1}01)$	2
2	$(\bar{1}0\bar{1})$	$(\bar{1}0\bar{1})$	2
2	(011)	(011)	2
2	$(01\bar{1})$	$(01\bar{1})$	2
2	$(0\bar{1}1)$	$(0\bar{1}1)$	2
2	$(0\bar{1}\bar{1})$	$(0\bar{1}\bar{1})$	2
⋮	⋮	⋮	⋮

$n^2 = 2$ までを書き記す。

表 1: 立方単純格子の逆格子点の座標

称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（3）の通りである。手計算による立方単純格子の特殊点のエネルギーを図（20）、計算機によるエネルギーバンド図を図（3）で示す。

	(ξ_1,η_2,ζ_3)	(ξ_x,η_y,ζ_z)
Γ	(000)	(000)
X	$(0\frac{1}{2}0)$	$(0\frac{1}{2}0)$
M	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
R	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

表 2: 立方単純格子の対称点の座標

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$			
		$\Gamma(000)$	$X(0\frac{1}{2}0)$	$M(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$R(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
(000)	0	0	$\frac{1}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{3}{4}A$
(100)	1	$1A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{3}{4}A$
$(\bar{1}00)$	1	$1A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
(010)	1	$1A$	$\frac{1}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{3}{4}A$
$(0\bar{1}0)$	1	$1A$	$\frac{9}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
(001)	1	$1A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{3}{2}A$	$\frac{3}{4}A$
$(00\bar{1})$	1	$1A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{3}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
(110)	2	$2A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{3}{4}A$
$(1\bar{1}0)$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
$(\bar{1}10)$	2	$2A$	$\frac{9}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
$(\bar{1}\bar{1}0)$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A$	$\frac{9}{2}A$	$\frac{19}{4}A$
(101)	2	$2A$	$\frac{9}{4}A$	$\frac{3}{2}A$	$\frac{3}{4}A$
$(10\bar{1})$	2	$2A$	$\frac{9}{4}A$	$\frac{3}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
$(\bar{1}01)$	2	$2A$	$\frac{9}{4}A$	$\frac{7}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	$2A$	$\frac{9}{4}A$	$\frac{7}{2}A$	$\frac{19}{4}A$
(011)	2	$2A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{3}{2}A$	$\frac{3}{4}A$
$(01\bar{1})$	2	$2A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{3}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
$(0\bar{1}1)$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A$	$\frac{7}{2}A$	$\frac{11}{4}A$
$(0\bar{1}\bar{1})$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A$	$\frac{7}{2}A$	$\frac{19}{4}A$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$A=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=2$ まで書き記す。

表 3: 立方単純格子の E-(k,n) 関係

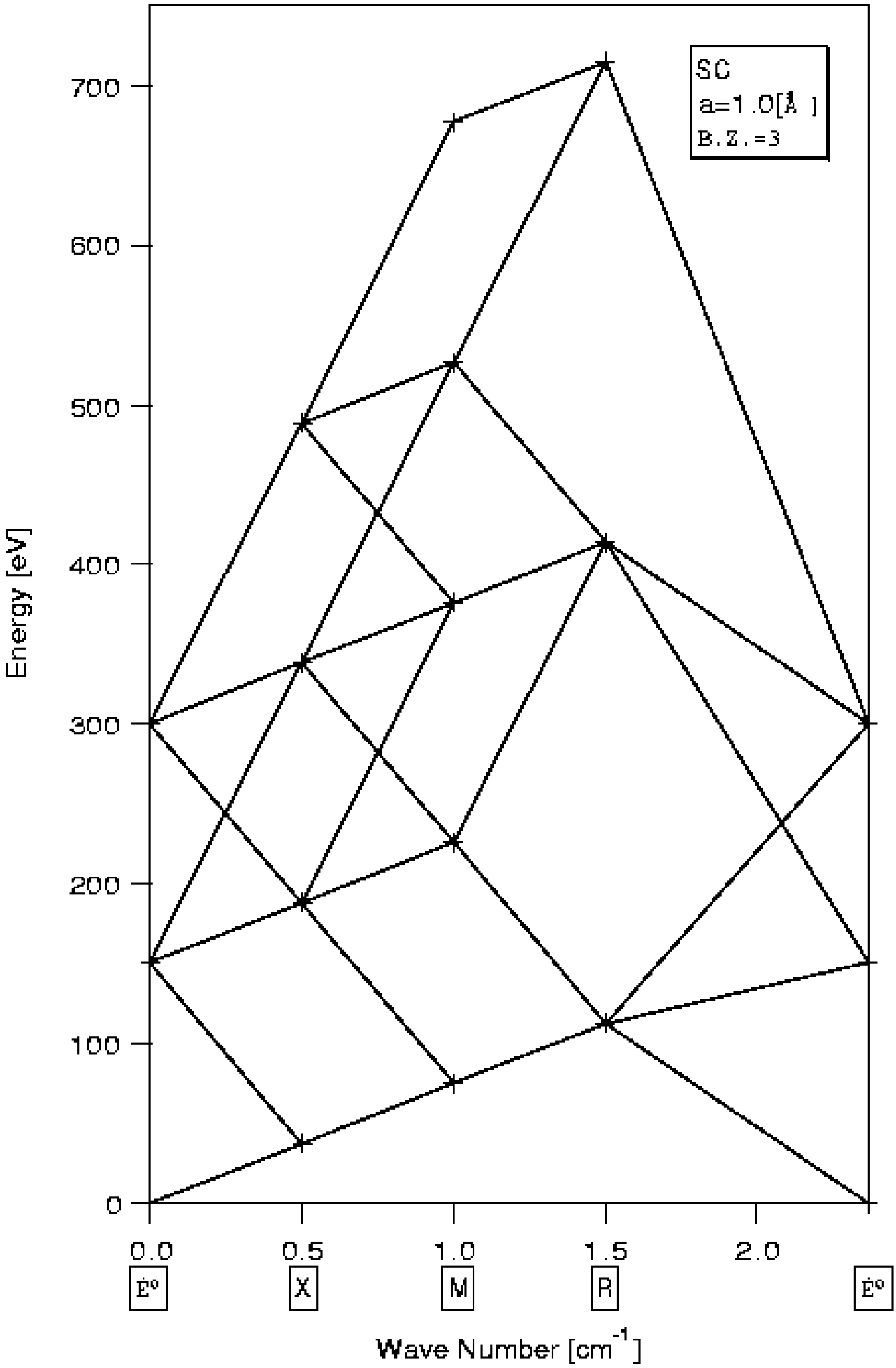

図 2: 立方単純格子の特殊点のエネルギー

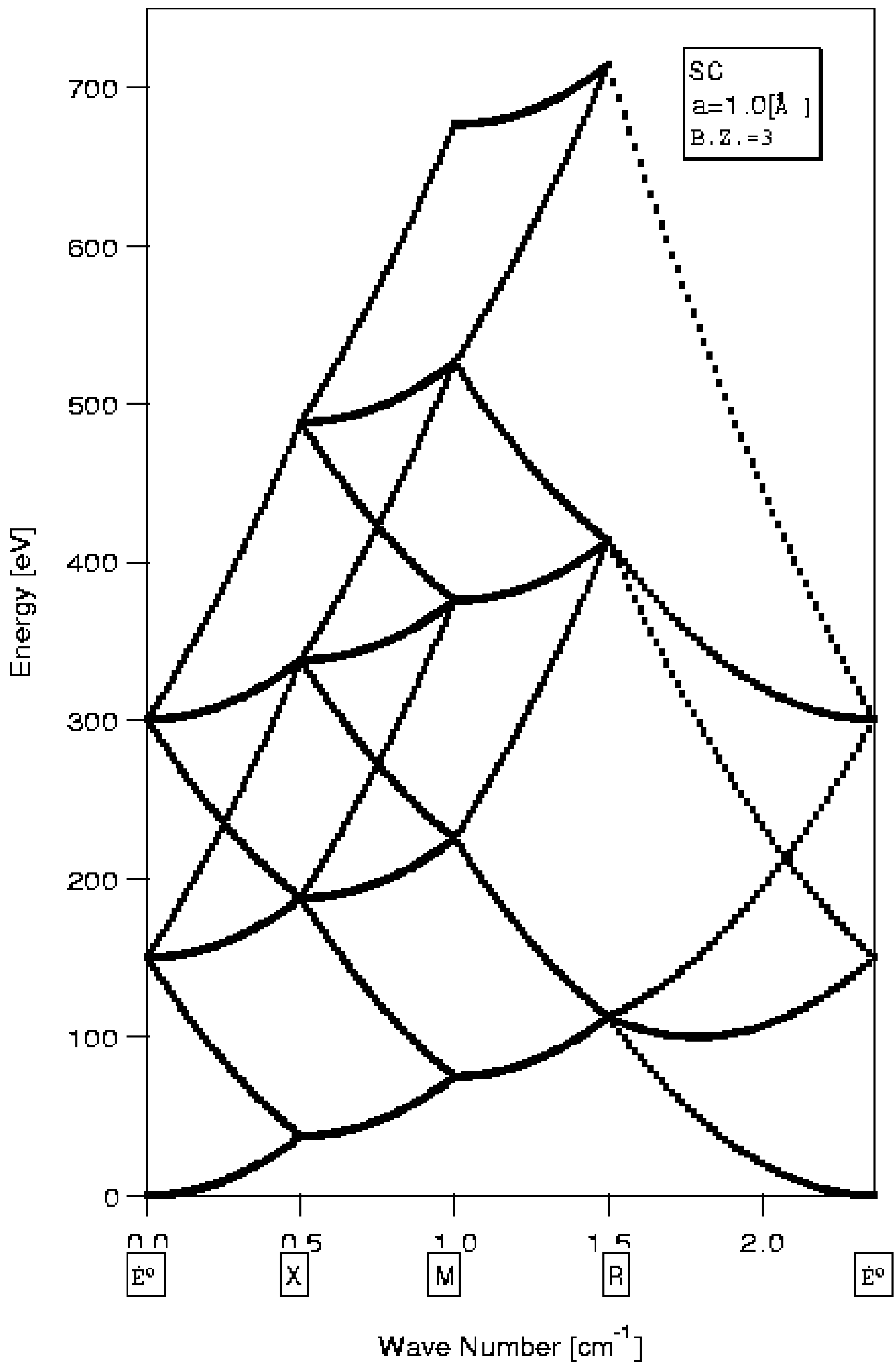

図 3: 立方単純格子のバンド図

3　立方面心格子

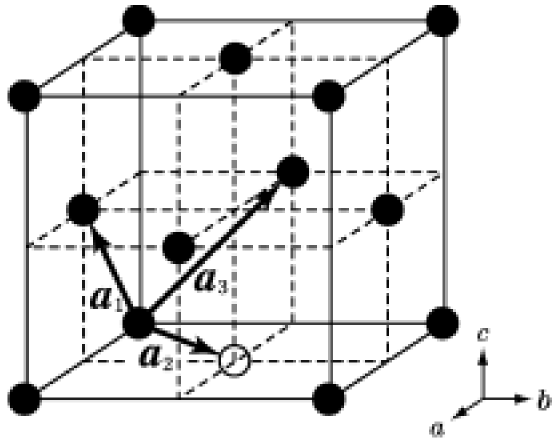

図 4: 立方面心格子の実格子

立方面心格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} -\frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & -\frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & -\frac{2\pi}{a} \end{pmatrix} \tag{7}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= -\xi_1 + \eta_2 + \zeta_3 \\ \eta_y &= \xi_1 - \eta_2 + \zeta_3 \\ \zeta_z &= \xi_1 + \eta_2 - \zeta_3 \\ n_x &= -l_1 + l_2 + l_3 \\ n_y &= l_1 - l_2 + l_3 \\ n_z &= l_1 + l_2 - l_3 \end{aligned} \tag{8}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（9）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{9}$$

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（4）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（5）の通りである。対

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
3	$(\bar{1}11)$	(100)	1
3	$(1\bar{1}\bar{1})$	$(\bar{1}00)$	1
3	$(1\bar{1}1)$	(010)	1
3	$(\bar{1}1\bar{1})$	$(0\bar{1}0)$	1
3	$(11\bar{1})$	(001)	1
3	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(00\bar{1})$	1
3	(111)	(111)	3
3	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	3
4	(002)	(110)	2
4	$(00\bar{2})$	$(\bar{1}\bar{1}0)$	2
4	(020)	(101)	2
4	$(0\bar{2}0)$	$(\bar{1}0\bar{1})$	2
4	(200)	(011)	2
4	$(\bar{2}00)$	$(0\bar{1}\bar{1})$	2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 4: 立方面心格子の逆格子点の座標

称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（6）の通りである。手計算による立方面心格子の特殊点のエネルギーを図（5)、計算機によるエネルギーバンド図を図（6）で示す。

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
X	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	(010)
L	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
W	$(\frac{1}{2}\frac{1}{4}\frac{3}{4})$	$(\frac{1}{2}10)$

表 5: 立方面心格子の対称点の座標

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$			
		$\Gamma(000)$	$X(010)$	$L(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$W(\frac{1}{2}10)$
(000)	0	$0A$	$1A$	$\frac{3}{4}A$	$\frac{5}{4}A$
$(\bar{1}11)$	3	$3A$	$2A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{13}{4}A$
$(1\bar{1}\bar{1})$	3	$3A$	$6A$	$\frac{19}{4}A$	$\frac{21}{4}A$
$(1\bar{1}1)$	3	$3A$	$6A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{21}{4}A$
$(\bar{1}1\bar{1})$	3	$3A$	$2A$	$\frac{19}{4}A$	$\frac{13}{4}A$
$(11\bar{1})$	3	$3A$	$2A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{5}{4}A$
$(\bar{1}\bar{1}1)$	3	$3A$	$6A$	$\frac{19}{4}A$	$\frac{29}{4}A$
(111)	3	$3A$	$2A$	$\frac{3}{4}A$	$\frac{5}{4}A$
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	3	$3A$	$6A$	$\frac{27}{4}A$	$\frac{29}{4}A$
(002)	4	$4A$	$5A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{21}{4}A$
$(00\bar{2})$	4	$4A$	$5A$	$\frac{27}{4}A$	$\frac{21}{4}A$
(020)	4	$4A$	$1A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{5}{4}A$
$(0\bar{2}0)$	4	$4A$	$9A$	$\frac{27}{4}A$	$\frac{37}{4}A$
(200)	4	$4A$	$5A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{13}{4}A$
$(\bar{2}00)$	4	$4A$	$5A$	$\frac{27}{4}A$	$\frac{29}{4}A$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$$A = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2 = 4$ まで書き記す。

表 6: 立方面心格子の E-(k,n) 関係

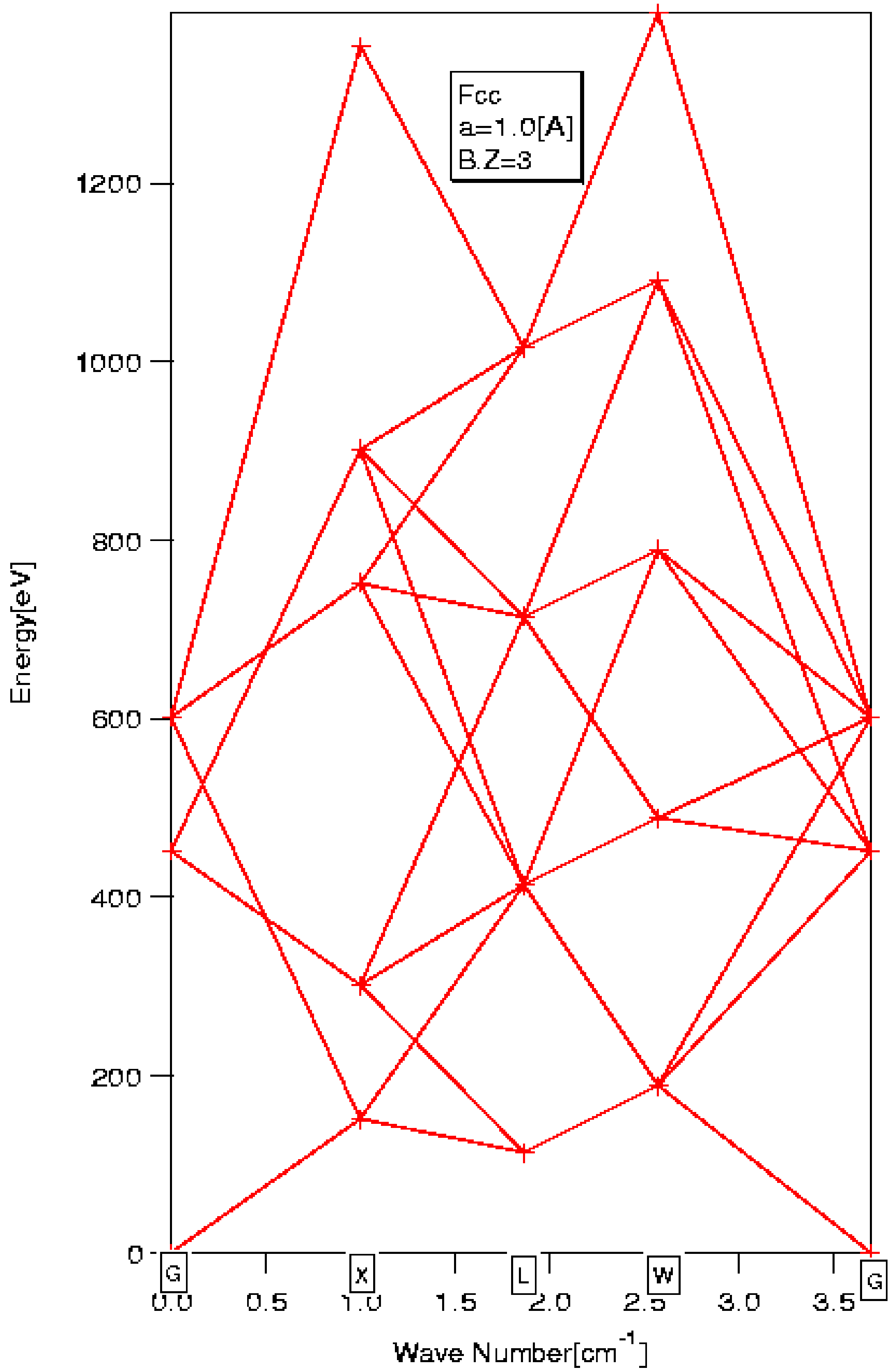

図 5: 立方面心格子の特殊点のエネルギー

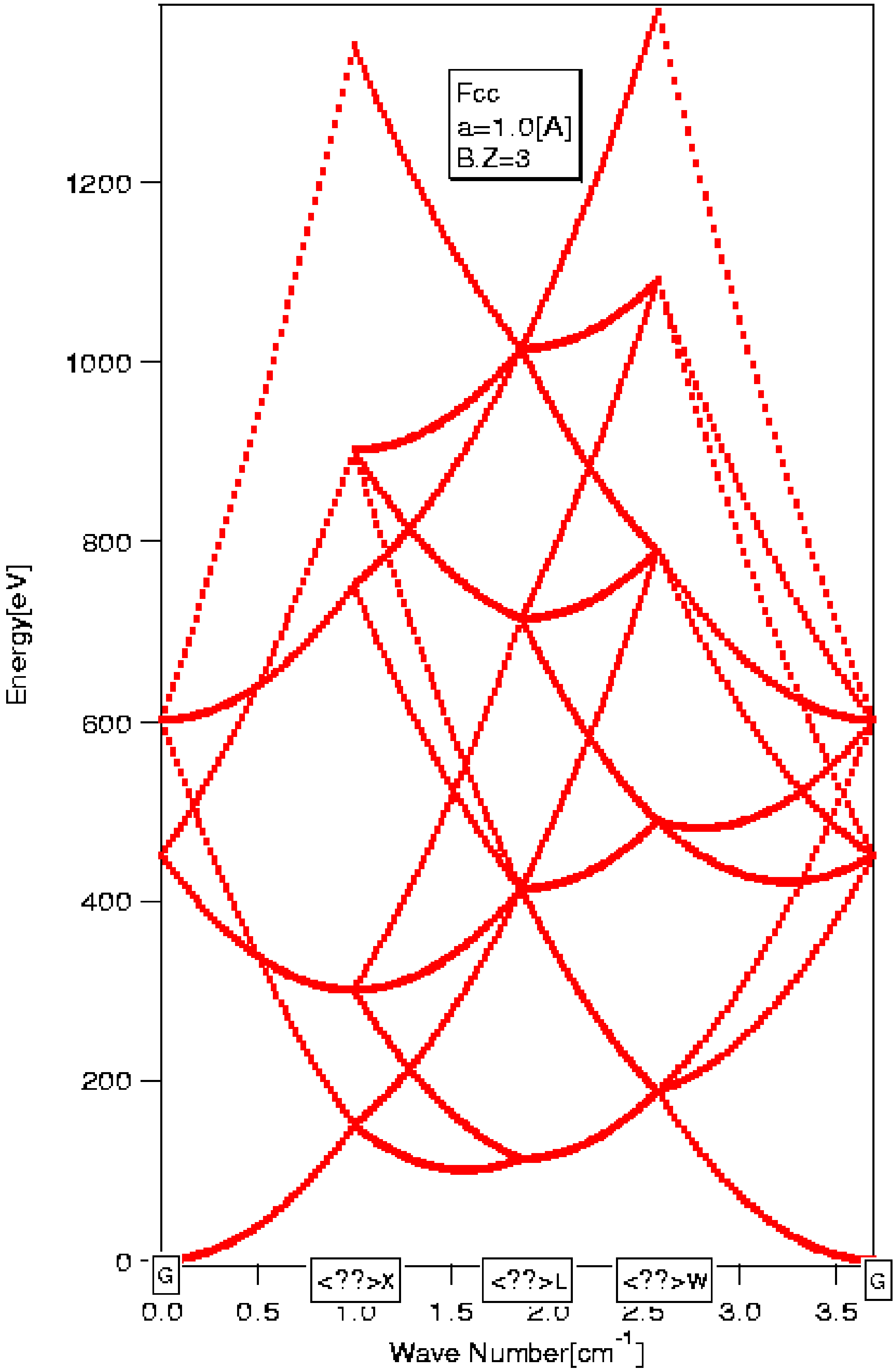

図 6: 立方面心格子のバンド図

4　立方体心格子

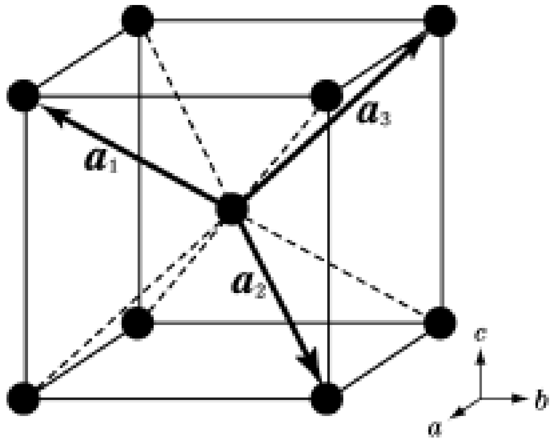

図 7: 立方体心格子の実格子

立方体心格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{pmatrix} \tag{10}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \eta_2 + \zeta_3 \\ \eta_y &= \xi_1 + \zeta_3 \\ \zeta_z &= \xi_1 + \eta_2 \\ n_x &= l_2 + l_3 \\ n_y &= l_1 + l_3 \\ n_z &= l_1 + l_2 \end{aligned} \tag{12}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（13）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{13}$$

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（7）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（8）の通りである。対

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
2	$(0\bar{1}\bar{1})$	$(\bar{1}00)$	1
2	$(\bar{1}0\bar{1})$	$(0\bar{1}0)$	1
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(00\bar{1})$	1
2	(110)	(001)	1
2	(101)	(010)	1
2	(011)	(100)	1
2	$(10\bar{1})$	$(\bar{1}01)$	2
2	$(1\bar{1}0)$	$(\bar{1}10)$	2
2	$(01\bar{1})$	$(0\bar{1}1)$	2
2	$(0\bar{1}1)$	$(01\bar{1})$	2
2	$(\bar{1}10)$	$(1\bar{1}0)$	2
2	$(\bar{1}01)$	$(10\bar{1})$	2
4	$(00\bar{2})$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	3
4	$(0\bar{2}0)$	$(\bar{1}1\bar{1})$	3
4	(200)	$(\bar{1}11)$	3
4	$(\bar{2}00)$	$(1\bar{1}\bar{1})$	3
4	(020)	$(1\bar{1}1)$	3
4	(002)	$(11\bar{1})$	3
⋮	⋮	⋮	⋮

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 7: 立方体心格子の逆格子点の座標

称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（9）の通りである。手計算による体心立方格子の特殊点のエネルギーを図 (8)、計算機によるエネルギーバンド図を図（9）で示す。

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
H	$(\frac{1}{2}\frac{\bar{1}}{2}\frac{1}{2})$	(010)
P	$(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
N	$(00\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$

表 8: 立方体心格子の対称点の座標

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$			
		$\Gamma(000)$	$H(010)$	$P(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$N(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
(000)	0	0	$1A$	$\frac{3}{4}A$	$\frac{1}{2}A$
$(0\bar{1}\bar{1})$	2	$2A$	$5A$	$\frac{19}{4}A$	$\frac{7}{2}A$
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	$2A$	$3A$	$\frac{19}{4}A$	$\frac{7}{2}A$
$(\bar{1}\bar{1}0)$	2	$2A$	$5A$	$\frac{19}{4}A$	$\frac{9}{2}A$
(110)	2	$2A$	$1A$	$\frac{3}{4}A$	$\frac{1}{2}A$
(101)	2	$2A$	$3A$	$\frac{3}{4}A$	$\frac{3}{2}A$
(011)	2	$2A$	$1A$	$\frac{3}{4}A$	$\frac{3}{2}A$
$(10\bar{1})$	2	$2A$	$3A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{3}{2}A$
$(1\bar{1}0)$	2	$2A$	$5A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{5}{2}A$
$(01\bar{1})$	2	$2A$	$1A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{3}{2}A$
$(0\bar{1}1)$	2	$2A$	$5A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{7}{2}A$
$(\bar{1}01)$	2	$2A$	$3A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{7}{2}A$
$(\bar{1}10)$	2	$2A$	$1A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{5}{2}A$
$(00\bar{2})$	4	$4A$	$5A$	$\frac{27}{4}A$	$\frac{9}{2}A$
$(0\bar{2}0)$	4	$4A$	$9A$	$\frac{27}{4}A$	$\frac{13}{2}A$
$(\bar{2}00)$	4	$4A$	$5A$	$\frac{27}{4}A$	$\frac{13}{2}A$
(200)	4	$4A$	$5A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{5}{2}A$
(020)	4	$4A$	$1A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{5}{2}A$
(002)	4	$4A$	$5A$	$\frac{11}{4}A$	$\frac{9}{2}A$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$$A = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 9: 立方体心格子の E-(k,n) 関係

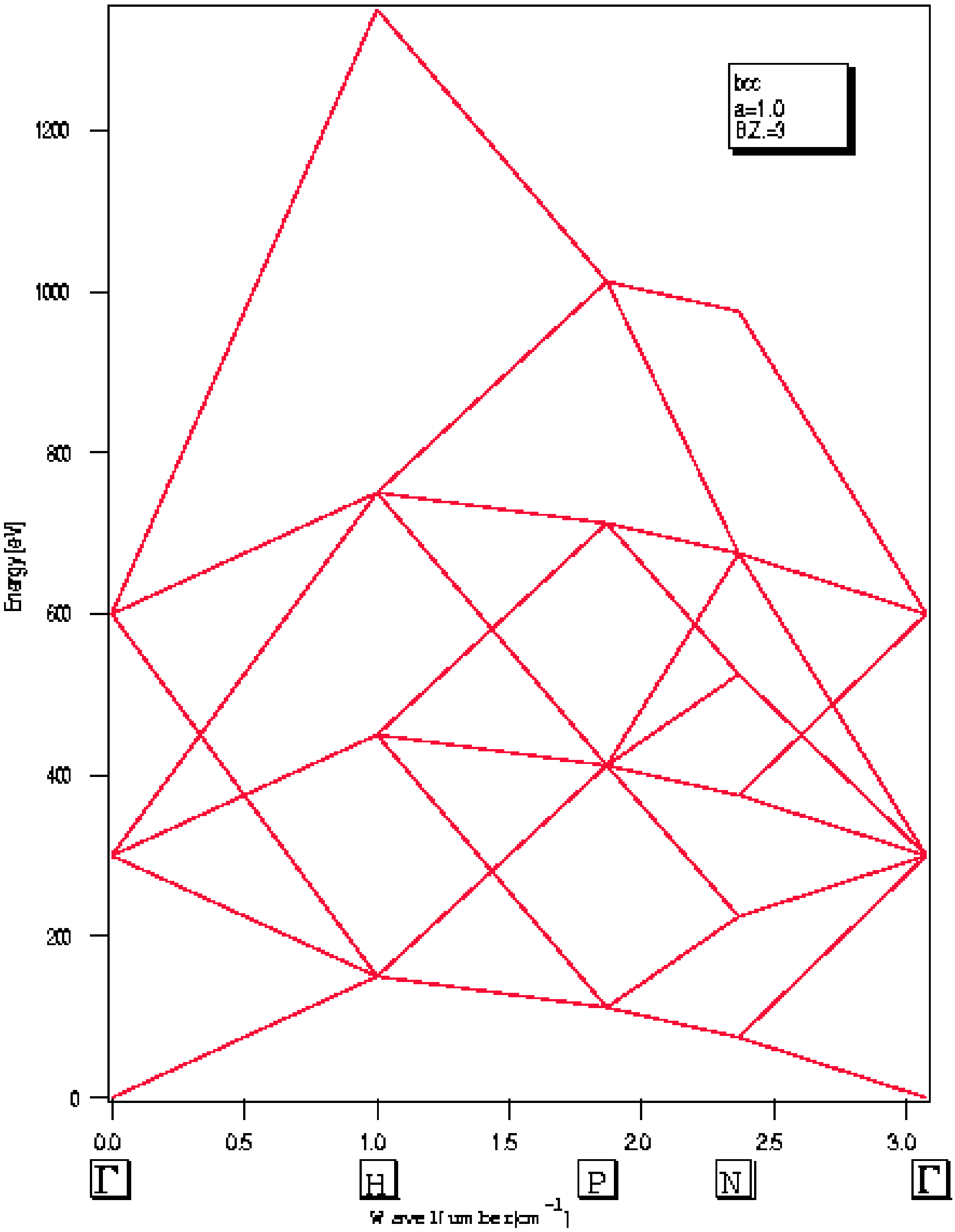

図 8: 立方体心格子の特殊点のエネルギー

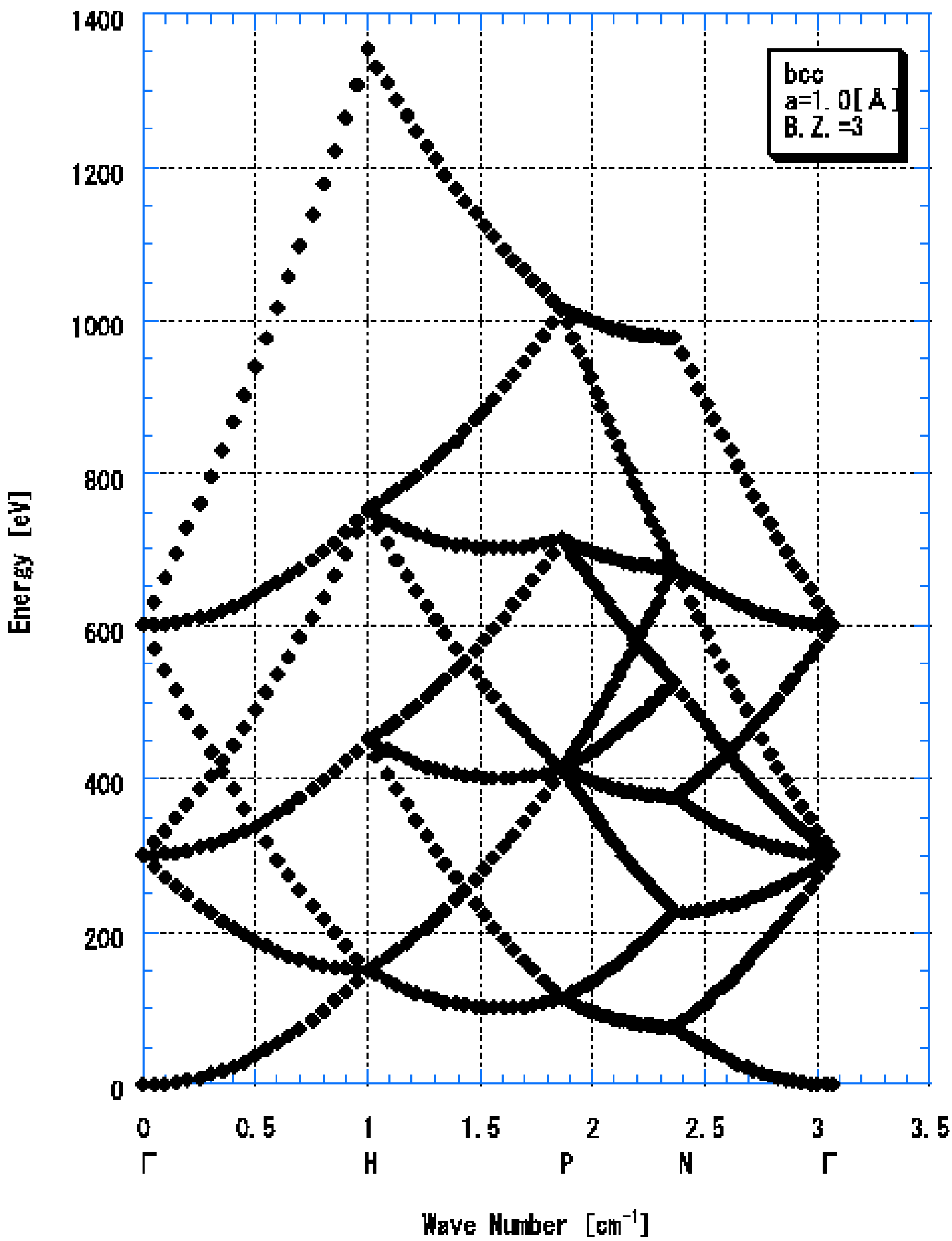

図 9: 立方体心格子のバンド図

5　正方単純格子

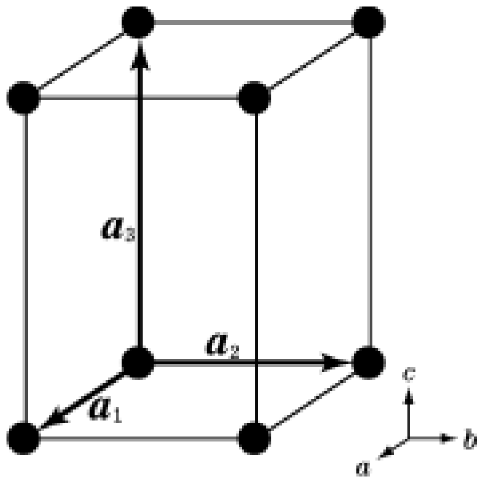

図 10: 立方単純格子の実格子

正方単純格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{14}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\pi}{a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{15}$$

である。

$$\begin{array}{rcl} \xi_x &=& \xi_1 \\ \eta_y &=& \eta_2 \\ \zeta_z &=& \zeta_3 \\ n_x &=& l_1 \\ n_y &=& l_2 \\ n_z &=& l_3 \end{array} \tag{16}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（17）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{17}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
1	$(\bar{1}00)$	$(\bar{1}00)$	1
1	$(0\bar{1}0)$	$(0\bar{1}0)$	1
1	$(00\bar{1})$	$(00\bar{1})$	1
1	(001)	(001)	1
1	(010)	(010)	1
1	(100)	(100)	1
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(\bar{1}\bar{1}0)$	2
2	$(\bar{1}0\bar{1})$	$(\bar{1}0\bar{1})$	2
2	$(\bar{1}01)$	$(\bar{1}01)$	2
2	$(\bar{1}10)$	$(\bar{1}10)$	2
2	$(0\bar{1}\bar{1})$	$(0\bar{1}\bar{1})$	2
2	$(0\bar{1}1)$	$(0\bar{1}1)$	2
2	$(01\bar{1})$	$(01\bar{1})$	2
2	(011)	(011)	2
2	$(1\bar{1}0)$	$(1\bar{1}0)$	2
2	$(10\bar{1})$	$(10\bar{1})$	2
2	(101)	(101)	2
2	(110)	(110)	2
⋮	⋮	⋮	⋮

$n^2 = 2$ までを書き記す。

表 10: 正方単純格子の逆格子点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（10）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（11）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（12）の通りである。手計算による正方単純格子の特殊点のエネルギーを図（11)、計算機によるエネルギーバンド図を図（12）で示す。

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
M	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
Z	$(00\frac{1}{2})$	$(00\frac{1}{2})$
A	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
R	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
X	$(0\frac{1}{2}0)$	$(0\frac{1}{2}0)$

表 11: 正方単純格子の対称点の座標

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$					
		$\Gamma(000)$	$X(0\frac{1}{2}0)$	$M(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$A(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$R(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$Z(00\frac{1}{2})$
(000)	0	0	$\frac{1}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}00)$	1	$1A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
$(0\bar{1}0)$	1	$1A$	$\frac{9}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
$(00\bar{1})$	1	$1C$	$\frac{1}{4}A+1C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}C$
(001)	1	$1C$	$\frac{1}{4}A+1C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}C$
(010)	1	$1A$	$\frac{1}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
(100)	1	$1A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}\bar{1}0)$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A$	$\frac{9}{2}A$	$\frac{9}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{13}{4}A+\frac{1}{4}C$	$2A+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+1C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{9}{4}C$	$1A+\frac{9}{4}C$
$(\bar{1}01)$	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+1C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}10)$	2	$2A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$2A+\frac{1}{4}C$
$(0\bar{1}\bar{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{9}{4}A+1C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}C$	$1A+\frac{9}{4}C$
$(0\bar{1}1)$	2	$1A+1C$	$\frac{9}{4}A+1C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
$(01\bar{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{1}{4}A+1C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$1A+\frac{9}{4}C$
(011)	2	$1A+1C$	$\frac{1}{4}A+1C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
$(1\bar{1}0)$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A$	$\frac{5}{2}A$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{13}{4}A+\frac{1}{4}C$	$2A+\frac{1}{4}C$
$(10\bar{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+1C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{9}{4}C$	$1A+\frac{9}{4}C$
(101)	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+1C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$
(110)	2	$2A$	$\frac{5}{4}A$	$\frac{1}{2}A$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$2A+\frac{1}{4}C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$A=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=2$ までを書き記す。

表 12: 正方単純格子の E-(k,n) 関係

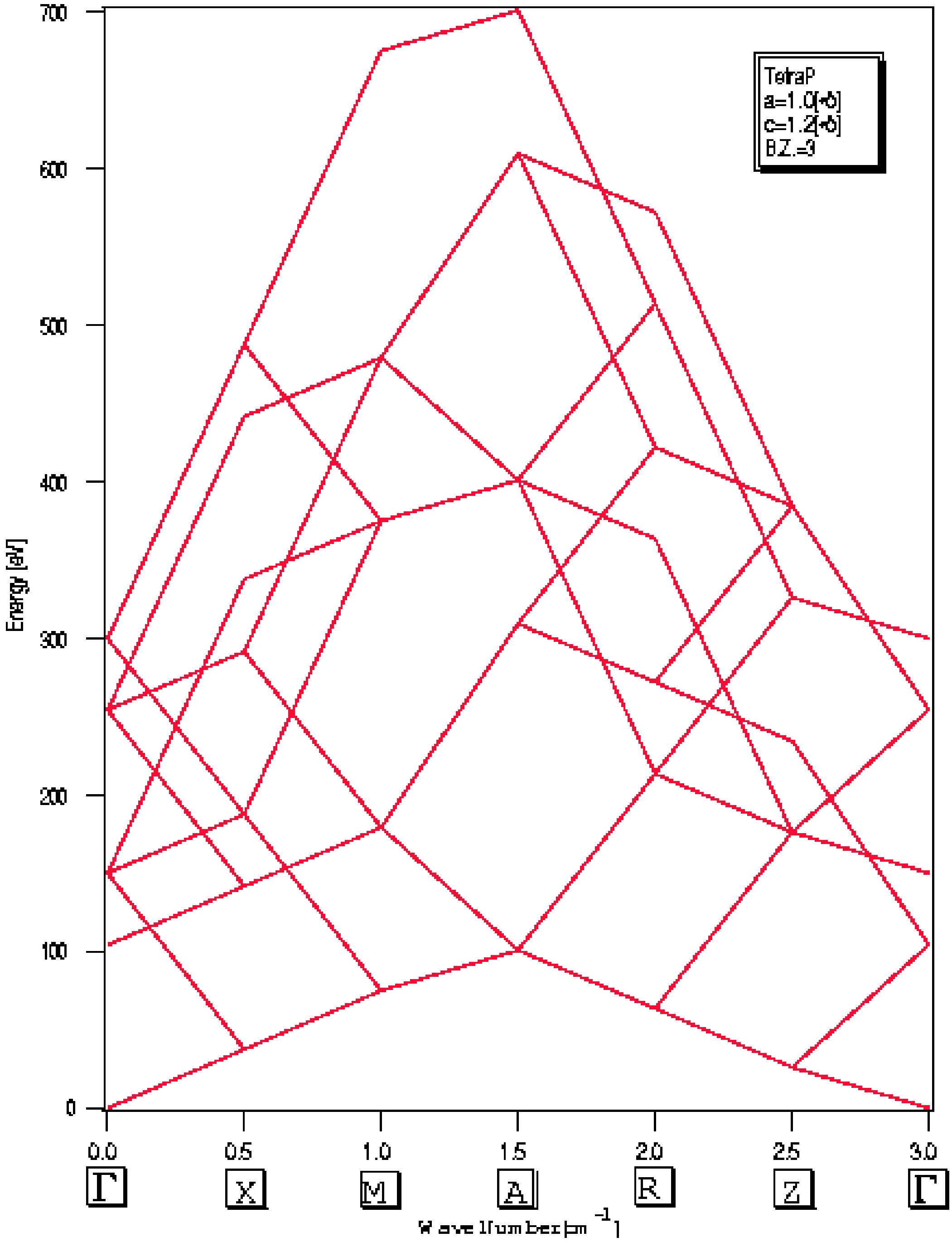

図 11: 正方単純格子の特殊点のエネルギー

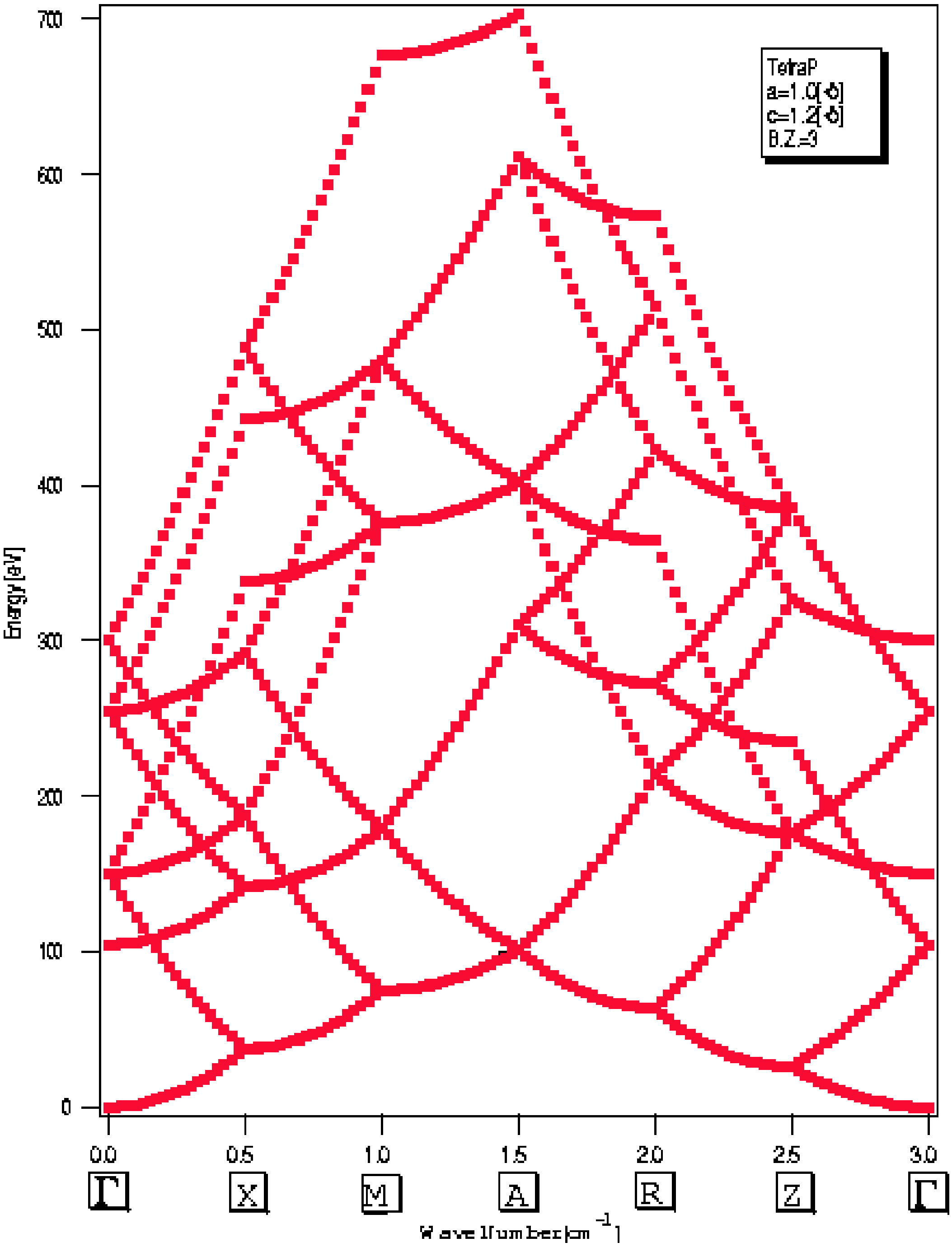

図 12: 正方単純格子のバンド図

6　正方体心格子

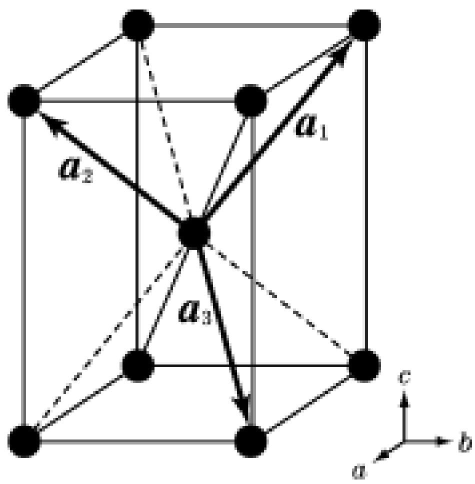

図 13: 正方体心格子の実格子

正方体心格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a & -\frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}c & \frac{1}{2}c & -\frac{1}{2}c \end{pmatrix} \tag{18}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{c} & \frac{2\pi}{c} & 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \eta_2 + \zeta_3 \\ \eta_y &= \xi_1 + \zeta_3 \\ \zeta_z &= \xi_1 + \eta_2 \\ n_x &= l_2 + l_3 \\ n_y &= l_1 + l_3 \\ n_z &= l_1 + l_2 \end{aligned} \tag{20}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（21）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{21}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
2	$(0\bar{1}\bar{1})$	$(\bar{1}00)$	1
2	$(\bar{1}0\bar{1})$	$(0\bar{1}0)$	1
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(00\bar{1})$	1
2	(110)	(001)	1
2	(101)	(010)	1
2	(011)	(100)	1
2	$(10\bar{1})$	$(\bar{1}01)$	2
2	$(1\bar{1}0)$	$(\bar{1}10)$	2
2	$(01\bar{1})$	$(0\bar{1}1)$	2
2	$(0\bar{1}1)$	$(01\bar{1})$	2
2	$(\bar{1}10)$	$(1\bar{1}0)$	2
2	$(\bar{1}01)$	$(10\bar{1})$	2
4	$(00\bar{2})$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	3
4	$(0\bar{2}0)$	$(\bar{1}1\bar{1})$	3
4	(200)	$(\bar{1}11)$	3
4	$(\bar{2}00)$	$(1\bar{1}\bar{1})$	3
4	(020)	$(1\bar{1}1)$	3
4	(002)	$(11\bar{1})$	3
⋮	⋮	⋮	⋮

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 13: 正方体心格子の逆格子点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（13）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（14）, 表（15）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（16）の通りである。手計算による正方体心格子の特殊点のエネルギーを図（14）、計算機によるエネルギーバンド図を図（15）で示す

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
N	$(0\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
X	$(00\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
Z	$(\bar{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	(100)
P	$(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$a > c$ の場合

表 14: 正方体心格子の対称点の座標 (case1)

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
N	$(0\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
X	$(00\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
Z	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\bar{\frac{1}{2}})$	(001)
P	$(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$c > a$ の場合

表 15: 正方体心格子の対称点の座標 (case2)

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}^{(n_x,n_y,n_z)}$					
		$\Gamma(000)$	$N(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$X(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$Z(100)$	$Z(001)$	$P(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
(000)	0	0	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{2}A$	$1A$	$1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$
$(0\overline{1}\overline{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$2A+1C$	$1A+4C$	$\frac{5}{2}A+\frac{9}{4}C$
$(\overline{1}0\overline{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$4A+1C$	$1A+4C$	$\frac{5}{2}A+\frac{9}{4}C$
$(\overline{1}\overline{1}0)$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{2}A$	$5A$	$2A+1C$	$\frac{9}{2}A+\frac{1}{4}C$
(110)	2	$2A$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{2}A$	$1A$	$2A+1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$
(101)	2	$1A+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$1C$	$1A$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$
(011)	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$2A+1C$	$1A$	$\frac{1}{2}A+\frac{1}{4}C$
$(10\overline{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$1C$	$1A+4C$	$\frac{1}{2}A+\frac{9}{4}C$
$(1\overline{1}0)$	2	$2A$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{2}A$	$1A$	$2A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$
$(01\overline{1})$	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{2}A+1C$	$2A+1C$	$1A+4C$	$\frac{1}{2}A+\frac{9}{4}C$
$(0\overline{1}1)$	2	$1A+1C$	$\frac{5}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$2A+1C$	$1A$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$
$(\overline{1}10)$	2	$2A$	$\frac{13}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{2}A$	$5A$	$2A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$
$(\overline{1}01)$	2	$1A+1C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{2}A+1C$	$4A+1C$	$1A$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$
$(00\overline{2})$	4	$4C$	$\frac{1}{4}A+\frac{25}{4}C$	$\frac{1}{2}A+4C$	$1A+4C$	$9C$	$\frac{1}{2}A+\frac{25}{4}C$
$(0\overline{2}0)$	4	$4A$	$\frac{17}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{13}{2}A$	$5A$	$4A+1C$	$\frac{13}{2}A+\frac{1}{4}C$
(200)	4	$4A$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{2}A$	$1A$	$4A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$
$(\overline{2}00)$	4	$4A$	$\frac{25}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{13}{2}A$	$9A$	$4A+1C$	$\frac{13}{2}A+\frac{1}{4}C$
(020)	4	$4A$	$\frac{17}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{5}{2}A$	$5A$	$4A+1C$	$\frac{5}{2}A+\frac{1}{4}C$
(002)	4	$4C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{2}A+4C$	$1A+4C$	$1C$	$\frac{1}{2}A+\frac{9}{4}C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$A=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=4$ までを書き記す。

表 16: 正方体心格子の E-(k,n) 関係

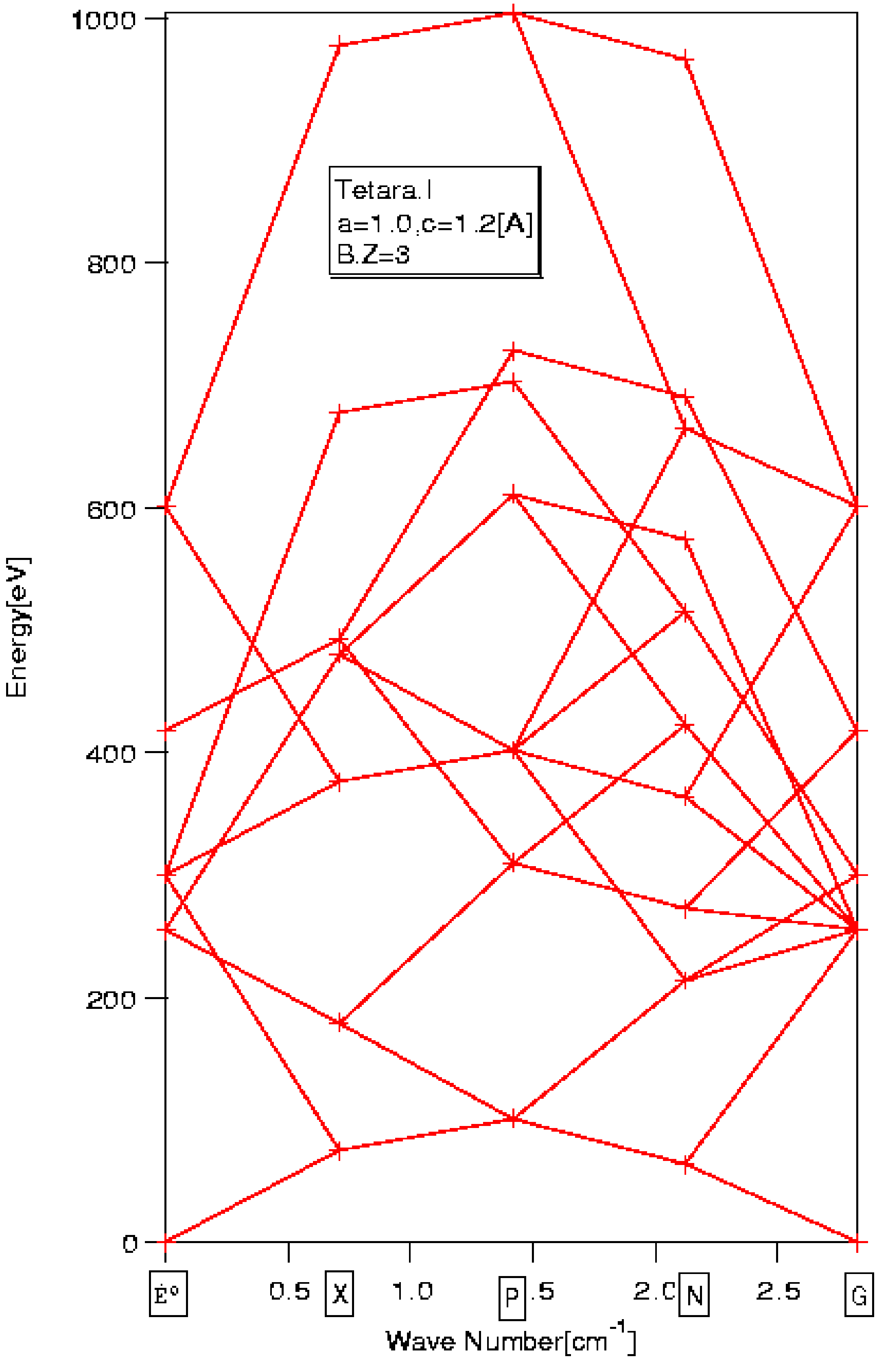

図 14: 正方体心格子の特殊点のエネルギー

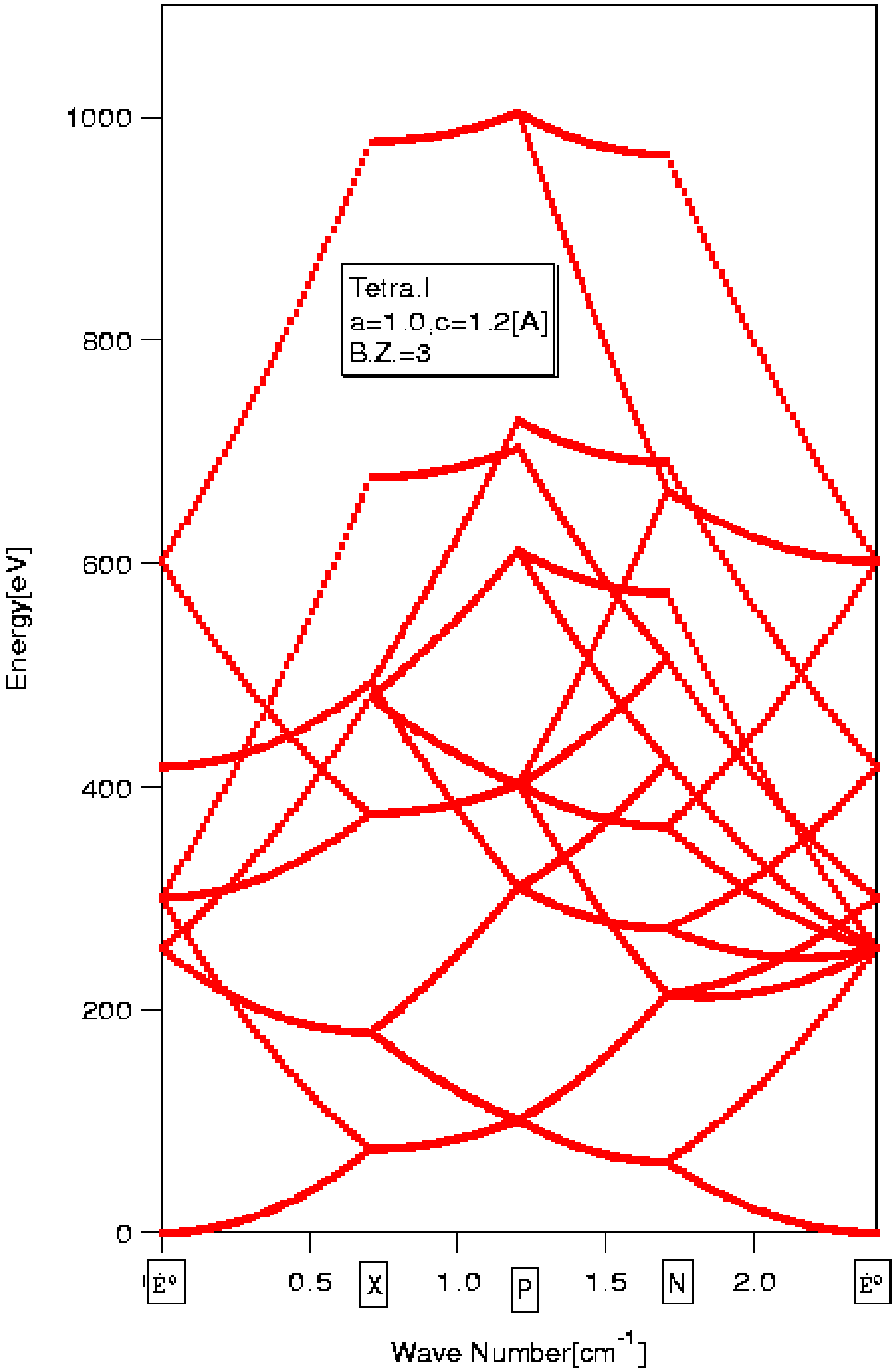

図 15: 正方体心格子のバンド図

7　斜方単純格子

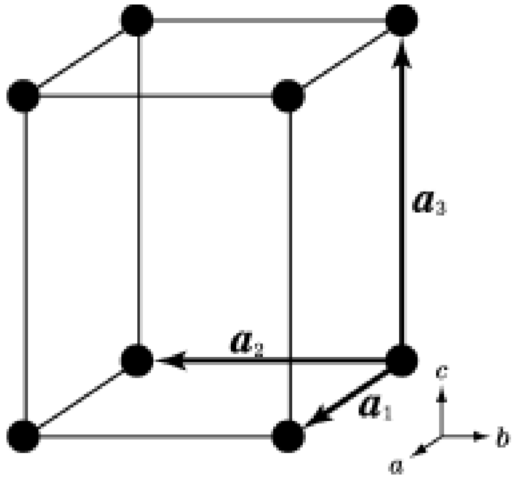

図 16: 斜方単純格子の実格子

斜方単純格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ -b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{22}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2\pi}{a} & 0 \\ -\frac{2\pi}{b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{23}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \eta_2 \\ \eta_y &= -\xi_1 \\ \zeta_z &= \zeta_3 \\ n_x &= l_2 \\ n_y &= -l_1 \\ n_z &= l_3 \end{aligned} \tag{24}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（25）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{b}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{25}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
1	$(\bar{1}00)$	$(\bar{1}00)$	1
1	(010)	$(0\bar{1}0)$	1
1	$(00\bar{1})$	$(00\bar{1})$	1
1	(001)	(001)	1
1	$(0\bar{1}0)$	(010)	1
1	(100)	(100)	1
2	$(\bar{1}10)$	$(\bar{1}\bar{1}0)$	2
2	$(\bar{1}0\bar{1})$	$(\bar{1}0\bar{1})$	2
2	$(\bar{1}01)$	$(\bar{1}01)$	2
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(\bar{1}10)$	2
2	(011)	$(1\bar{1}\bar{1})$	2
2	$(0\bar{1}\bar{1})$	$(0\bar{1}1)$	2
2	$(0\bar{1}1)$	$(01\bar{1})$	2
2	(110)	(011)	2
2	$(10\bar{1})$	$(1\bar{1}0)$	2
2	(101)	$(10\bar{1})$	2
2	$(1\bar{1}0)$	(101)	2
2	$(\bar{1}10)$	(110)	2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$n^2 = 2$ までを書き記す。

表 17: 斜方単純格子の逆格子点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（17）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（18）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（19）の通りである。手計算によるの斜方単純格子の特殊点のエネルギーを図（17）、計算機によるエネルギーバンド図を図（18）で示す。

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Y	$(\overline{\frac{1}{2}}00)$	$(0\frac{1}{2}0)$
X	$(0\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}00)$
Z	$(00\frac{1}{2})$	$(00\frac{1}{2})$
U	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
T	$(\overline{\frac{1}{2}}0\frac{1}{2})$	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
S	$(\overline{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
R	$(\overline{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

表 18: 斜方単純格子の対称点の座標

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$							
		$\Gamma(000)$	$Y\,(0\frac{1}{2}0)$	$S(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$R(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$T\,(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$U\,(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$Z\,(00\frac{1}{2})$	$X\,(\frac{1}{2}00)$
(000)	0	0	$\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A$
(100)	1	A	$A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A$
$(\bar{1}00)$	1	A	$A+\frac{1}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A$
(010)	1	B	$\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B$
$(0\bar{1}0)$	1	B	$\frac{9}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B$
(001)	1	C	$\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+C$
$(00\bar{1})$	1	C	$\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+C$
(110)	2	$A+B$	$A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$A+B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B$
$(1\bar{1}0)$	2	$A+B$	$A+\frac{9}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$A+B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B$
$(\bar{1}10)$	2	$A+B$	$A+\frac{1}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$A+B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+B$
$(\bar{1}\bar{1}0)$	2	$A+B$	$A+\frac{9}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$A+B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+B$
(101)	2	$A+C$	$A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+C$
$(10\bar{1})$	2	$A+C$	$A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+C$
$(\bar{1}01)$	2	$A+C$	$A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$A+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+C$
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	$A+C$	$A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}C$	$A+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}A+C$
(011)	2	$B+C$	$\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+C$
$(01\bar{1})$	2	$B+C$	$\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{9}{4}C$	$B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+C$
$(0\bar{1}1)$	2	$B+C$	$\frac{9}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{1}{4}C$	$B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+C$
$(0\bar{1}\bar{1})$	2	$B+C$	$\frac{9}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+\frac{9}{4}C$	$B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+B+C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$$A=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, B=\left(\frac{2\pi}{b}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=2$ までを書き記す。

表 19: 斜方単純格子の E-(k,n) 関係

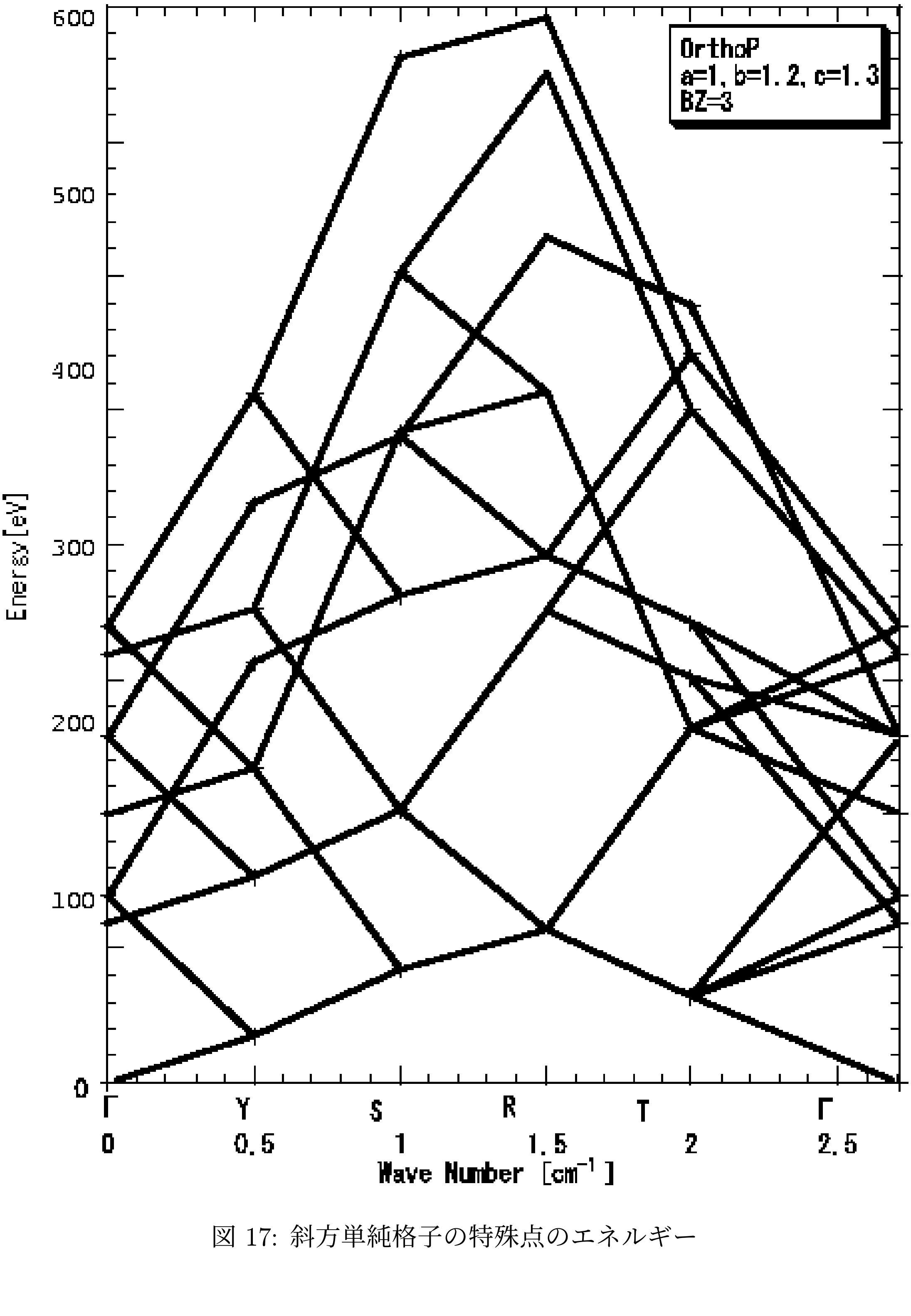

図 17: 斜方単純格子の特殊点のエネルギー

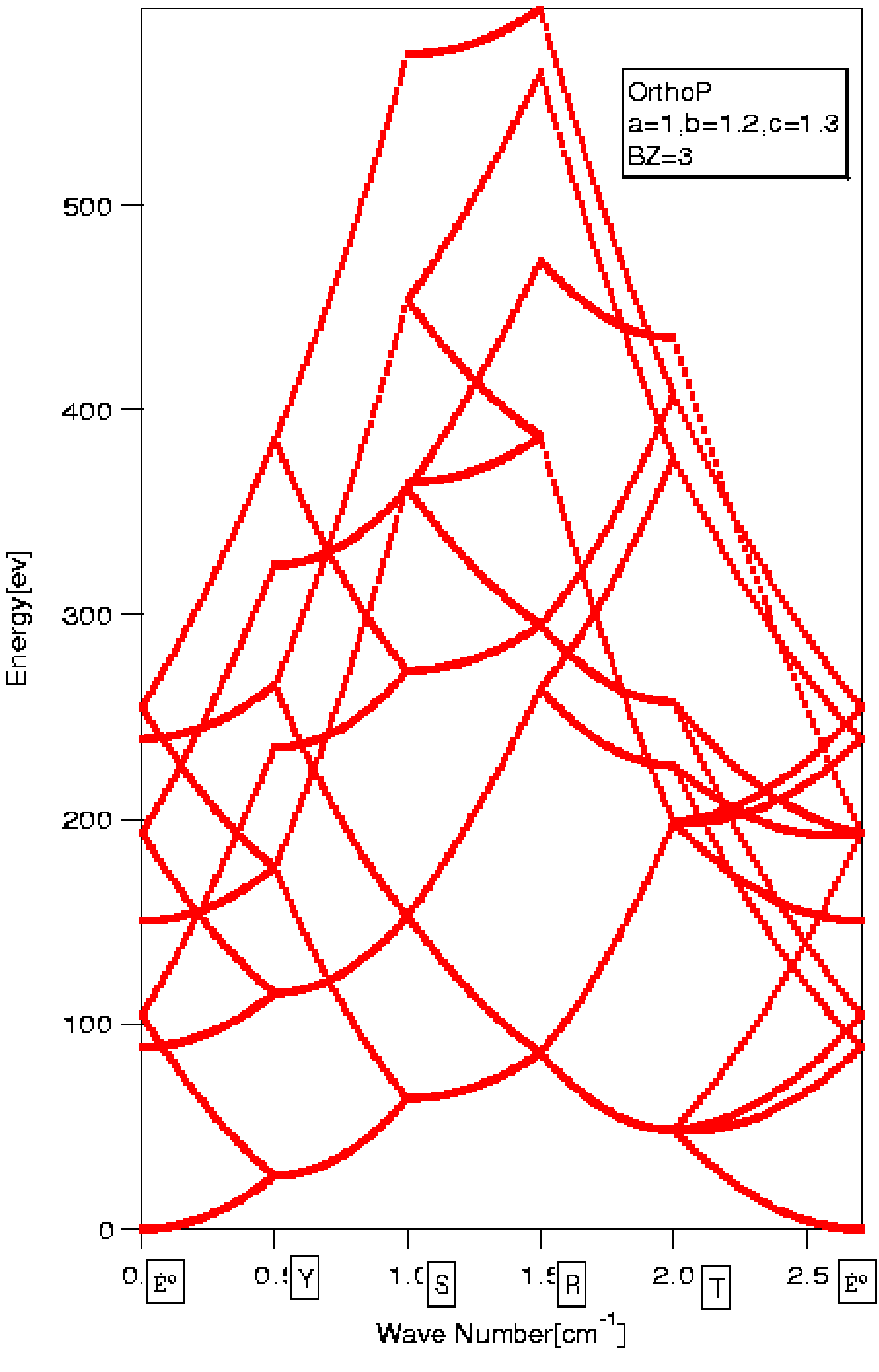

図 18: 斜方単純格子のバンド図

8　斜方底面心格子

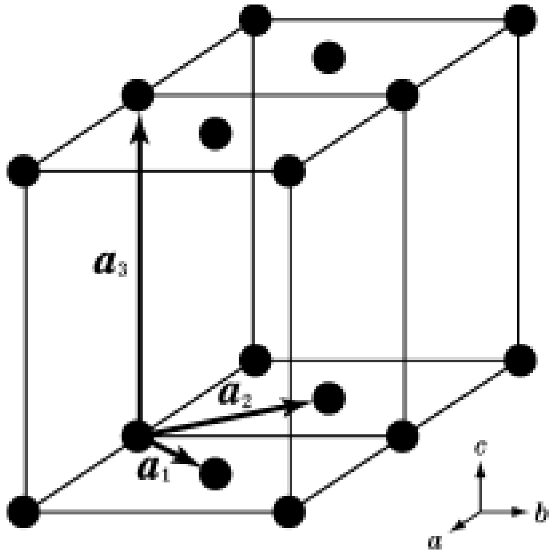

図 19: 斜方底面心格子の実格子

斜方底面心格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a & 0 \\ -\frac{1}{2}b & \frac{1}{2}b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{26}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 \\ \frac{2\pi}{b} & -\frac{2\pi}{b} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{27}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \xi_1 + \eta_2 \\ \eta_y &= -\xi_1 + \eta_2 \\ \zeta_z &= \zeta_3 \\ n_x &= l_1 + l_2 \\ n_y &= -l_1 + l_2 \\ n_z &= l_3 \end{aligned} \tag{28}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（29）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{b}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{29}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
1	$(00\bar{1})$	$(00\bar{1})$	1
1	(001)	(001)	1
2	$(\bar{1}10)$	$(\bar{1}00)$	1
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(0\bar{1}0)$	1
2	(110)	(010)	1
2	$(1\bar{1}0)$	(100)	1
⋮	⋮	⋮	⋮

$n^2 = 2$ までを書き記す。

表 20: 斜方底面心格子の逆格子点の座標

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Y	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	(100)
Z	$(00\frac{1}{2})$	$(00\frac{1}{2})$
T	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	(101)
S	$(0\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
R	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

表 21: 斜方低面心格子の対称点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（20）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（21）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（22）の通りである。手計算による斜方底面心格子の特殊点のエネルギーを図（??）、計算機によるエネルギーバンド図を図（21）で示す。

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$					
		$\Gamma(000)$	$Y(100)$	$Z(00\frac{1}{2})$	$T(101)$	$S(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$R(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
(000)	0	0	A	$\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(00\bar{1})$	1	C	$A+C$	$\frac{9}{4}C$	$1A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$
(001)	1	C	$A+C$	$\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}10)$	2	$A+B$	$4A+B$	$1A+1B+\frac{1}{4}C$	$4A+1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}\bar{1}0)$	2	$A+B$	$4A+B$	$1A+1B+\frac{1}{4}C$	$4A+1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$
(110)	2	$A+B$	B	$1A+1B+\frac{1}{4}C$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(1\bar{1}0)$	2	$A+B$	B	$1A+1B+\frac{1}{4}C$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$A=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, B=\left(\frac{2\pi}{b}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=2$ までを書き記す。

表 22: 斜方底面心格子の E-(k,n) 関係

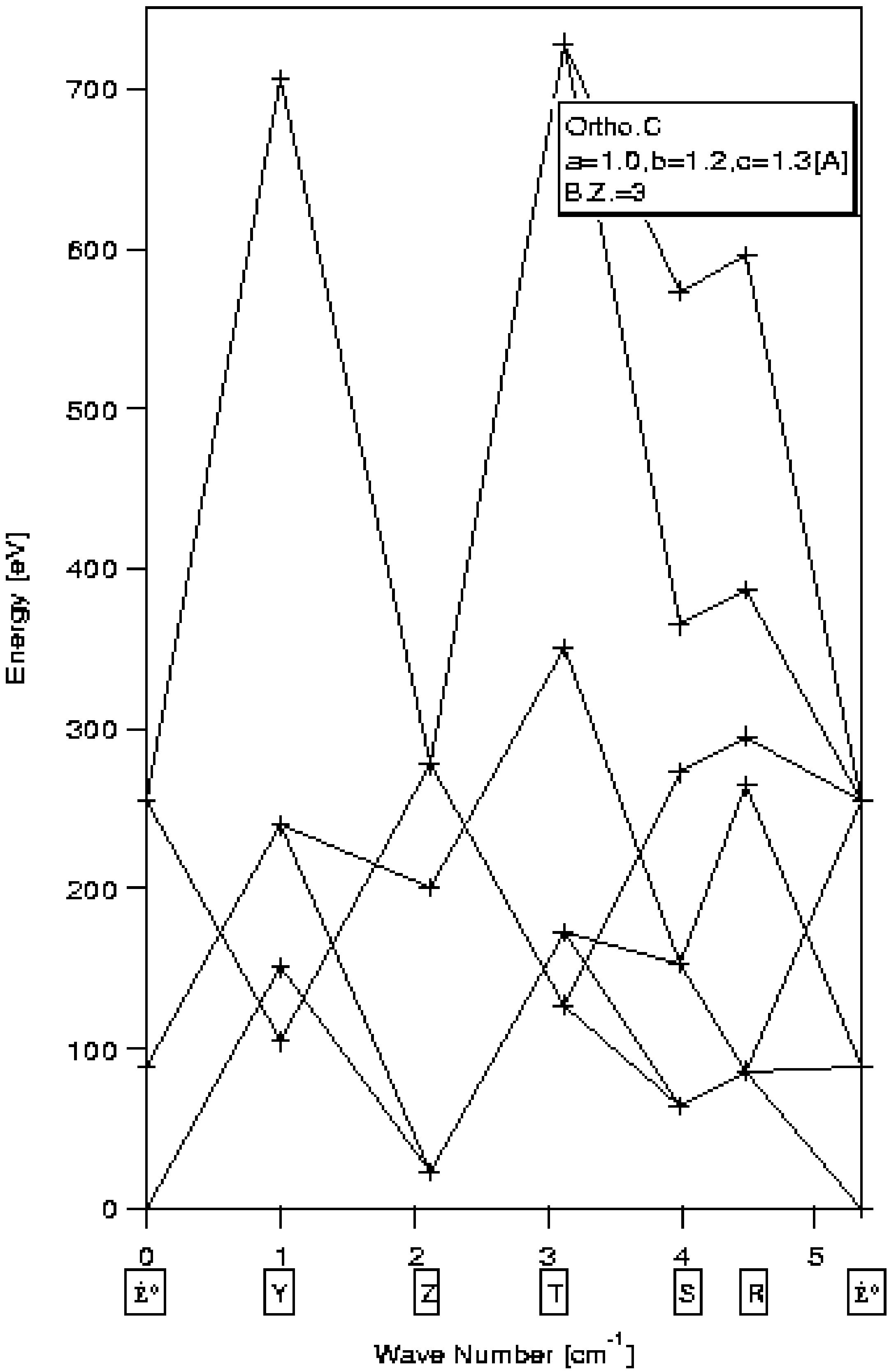

図 20: 立方単純格子の特殊点のエネルギー

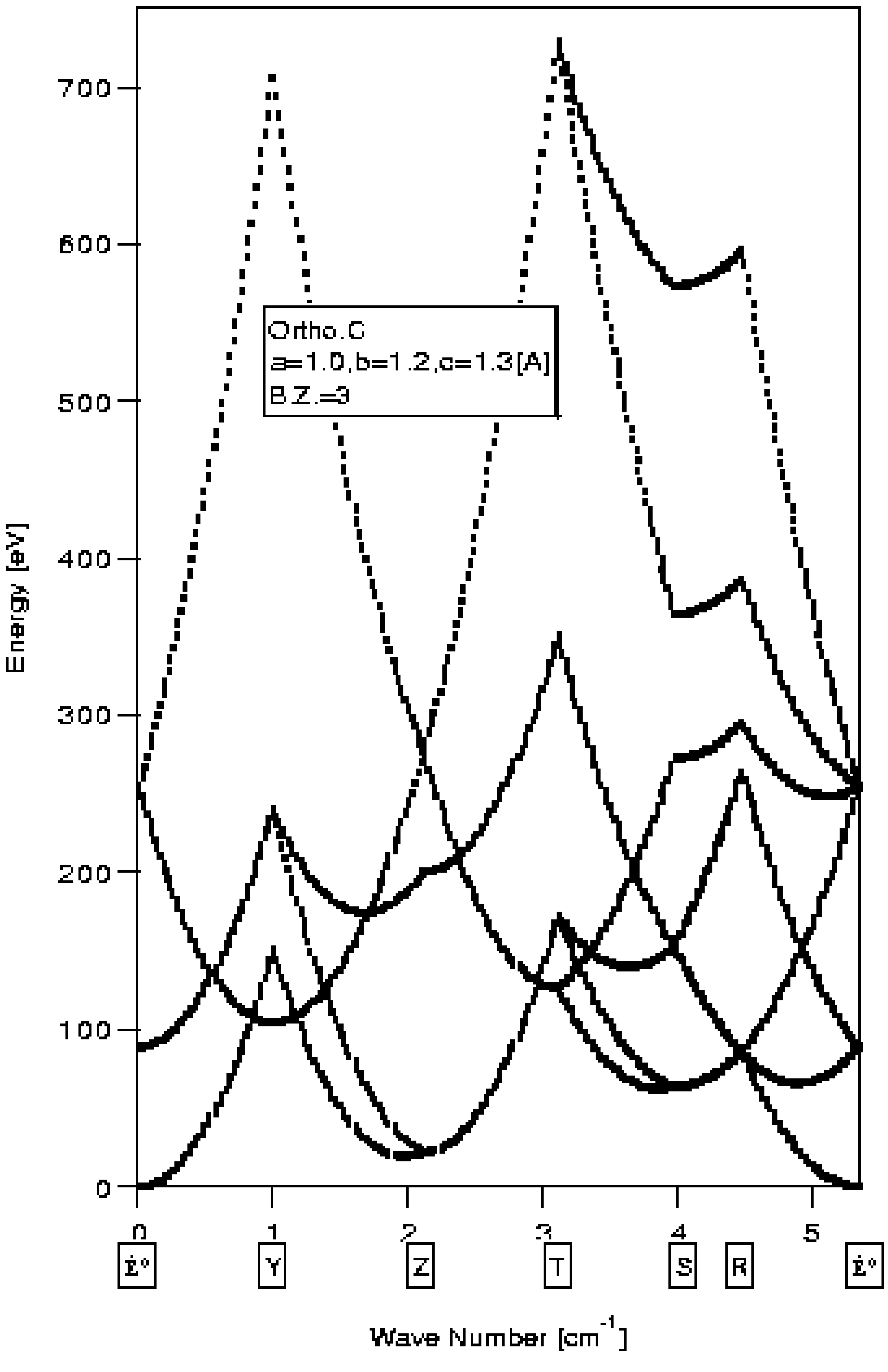

図 21: 斜方底面心格子のバンド図

9　斜方体心格子

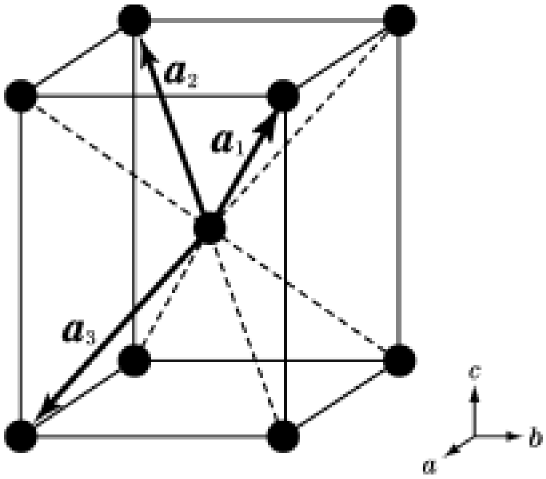

図 22: 斜方体心格子の実格子

斜方体心格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a & -\frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}b & -\frac{1}{2}b & -\frac{1}{2}b \\ \frac{1}{2}c & \frac{1}{2}c & -\frac{1}{2}c \end{pmatrix} \tag{30}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ 0 & -\frac{2\pi}{b} & -\frac{2\pi}{b} \\ \frac{2\pi}{c} & \frac{2\pi}{c} & 0 \end{pmatrix} \tag{31}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \xi_1 + \zeta_3 \\ \eta_y &= -\eta_2 - \zeta_3 \\ \zeta_z &= \xi_1 + \eta_2 \\ n_x &= l_1 + l_3 \\ n_y &= -l_2 - l_3 \\ n_z &= l_1 + l_2 \end{aligned} \tag{32}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（33）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{b}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{33}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
2	$(\bar{1}0\bar{1})$	$(\bar{1}00)$	1
2	$(01\bar{1})$	$(0\bar{1}0)$	1
2	$(\bar{1}10)$	$(00\bar{1})$	1
2	$(1\bar{1}0)$	(001)	1
2	$(0\bar{1}1)$	(010)	1
2	(101)	(100)	1
2	$(0\bar{1}\bar{1})$	$(\bar{1}01)$	2
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(\bar{1}10)$	2
2	$(10\bar{1})$	$(0\bar{1}1)$	2
2	$(\bar{1}01)$	$(01\bar{1})$	2
2	(110)	$(1\bar{1}0)$	2
2	(011)	$(10\bar{1})$	2
4	$(00\bar{2})$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	3
4	$(\bar{2}00)$	$(\bar{1}1\bar{1})$	3
4	$(0\bar{2}0)$	$(\bar{1}11)$	3
4	(020)	$(1\bar{1}\bar{1})$	3
4	(200)	$(1\bar{1}1)$	3
4	(002)	$(11\bar{1})$	3
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 23: 斜方体心格子の逆格子点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（23）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（24）, 表（25）, 表（26）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（27）の通りである。手計算による斜方体心格子の特殊点のエネルギーを図（23）、計算機によるエネルギーバンド図を図（24）で示す

	(ξ_1,η_2,ζ_3)	(ξ_x,η_y,ζ_z)
Γ	(000)	(000)
X	$(\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}}\frac{1}{2})$	(100)
R	$(\frac{1}{2}00)$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
S	$(\frac{1}{2}0\overline{\frac{1}{2}})$	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
T	$(\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
W	$(\frac{3}{4}\overline{\frac{1}{4}\frac{1}{4}})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$a > b > c, a > c > b$ の場合

表 24: 斜方体心格子の対称点の座標 (case1)

	(ξ_1,η_2,ζ_3)	(ξ_x,η_y,ζ_z)
Γ	(000)	(000)
X	$(\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}\frac{1}{2}})$	(010)
R	$(\frac{1}{2}00)$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
S	$(\frac{1}{2}0\overline{\frac{1}{2}})$	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
T	$(\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
W	$(\frac{3}{4}\overline{\frac{1}{4}\frac{1}{4}})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$b > a > c, b > c > a$ の場合

表 25: 斜方体心格子の対称点の座標 (case2)

	(ξ_1,η_2,ζ_3)	(ξ_x,η_y,ζ_z)
Γ	(000)	(000)
X	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}})$	(001)
R	$(\frac{1}{2}00)$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
S	$(\frac{1}{2}0\overline{\frac{1}{2}})$	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
T	$(\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$
W	$(\frac{3}{4}\overline{\frac{1}{4}\frac{1}{4}})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$c > b > a, c > a > b$ の場合

表 26: 斜方体心格子の対称点の座標 (case3)

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$					
		$\Gamma(000)$	$X(100)$	$R(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$S(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$T(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$W(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
(000)	0	0	$1A$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(01\bar{1})$	2	$1B+1C$	$1A+1B+1C$	$\frac{1}{4}A+1B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	$1A+1C$	$4A+1C$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$
$(\bar{1}10)$	2	$1A+1B$	$4A+1B$	$\frac{9}{4}A+1B+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(1\bar{1}0)$	2	$1A+1B$	$1B$	$\frac{1}{4}A+1B+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$
(101)	2	$1A+1C$	$1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(0\bar{1}1)$	2	$1B+1C$	$1A+1B+1C$	$\frac{1}{4}A+1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(10\bar{1})$	2	$1A+1C$	$1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$
(110)	2	$1A+1B$	$1B$	$\frac{1}{4}A+1B+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(0\bar{1}\bar{1})$	2	$1B+1C$	$1A+1B+1C$	$\frac{1}{4}A+1B+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{9}{4}C$
(011)	2	$1B+1C$	$1A+1B+1C$	$\frac{1}{4}A+1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}\bar{1}0)$	2	$1A+1B$	$4A+1B$	$\frac{9}{4}A+1B+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}01)$	2	$1A+1C$	$4A+1C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$1A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+1C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(00\bar{2})$	4	$4C$	$1A+4C$	$\frac{1}{4}A+\frac{25}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{25}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+4C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{25}{4}C$
(020)	4	$4B$	$1A+4B$	$\frac{1}{4}A+4B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}B+\frac{1}{4}C$
(200)	4	$4A$	$1A$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$	$4A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(\bar{2}00)$	4	$4A$	$9A$	$\frac{25}{4}A+\frac{1}{4}C$	$4A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{25}{4}A+\frac{1}{4}B$	$\frac{25}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{1}{4}C$
$(0\bar{2}0)$	4	$4B$	$1A+4B$	$\frac{1}{4}A+4B+\frac{1}{4}C$	$\frac{25}{4}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{25}{4}B$	$\frac{1}{4}A+\frac{25}{4}B+\frac{1}{4}C$
(002)	4	$4C$	$1A+4C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+4C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}B+\frac{9}{4}C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$$A=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, B=\left(\frac{2\pi}{b}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=4$ までを書き記す。

表 27: 斜方体心格子の E-(k,n) 関係

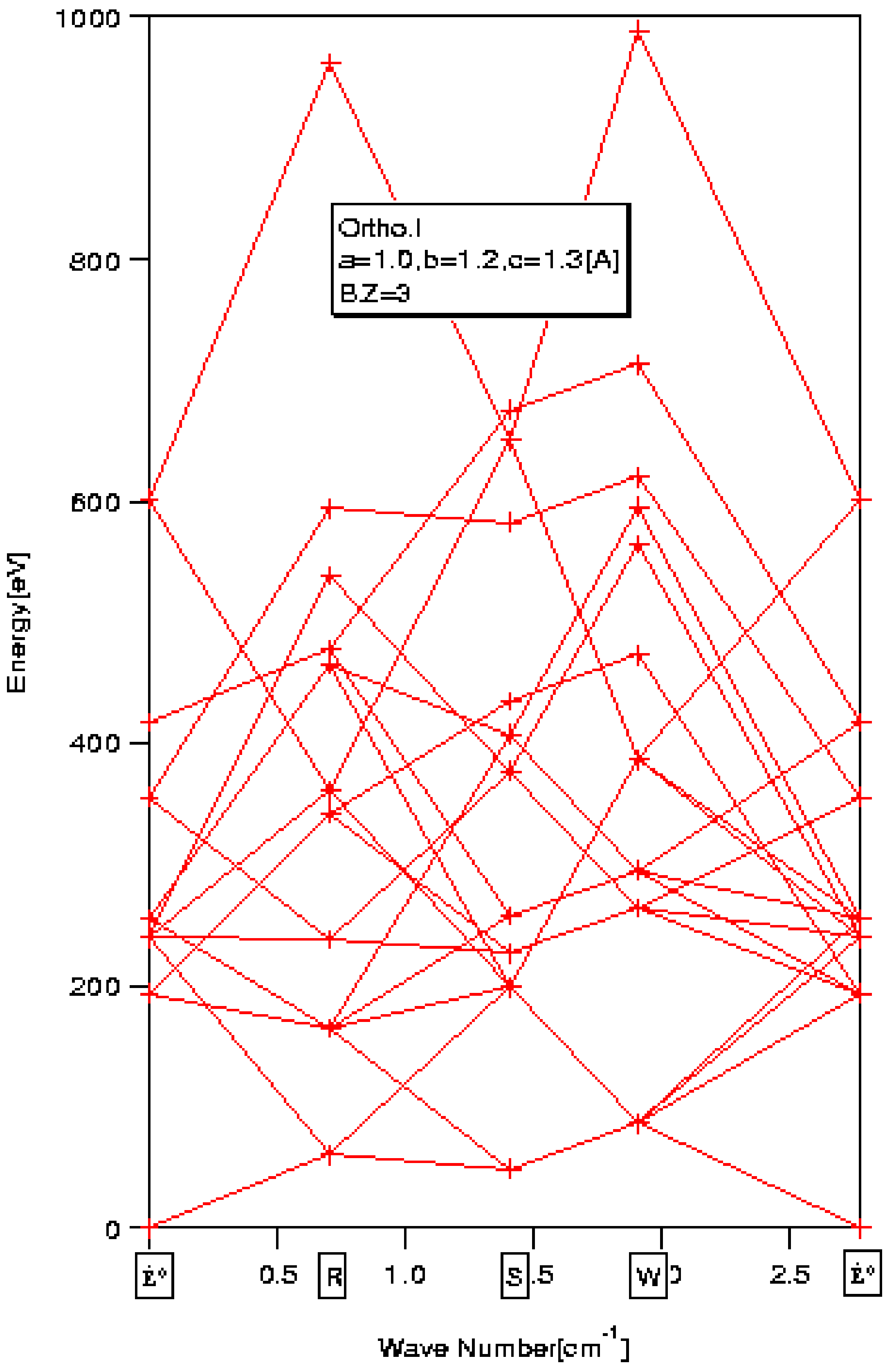

図 23: 斜方体心格子の特殊点のエネルギー

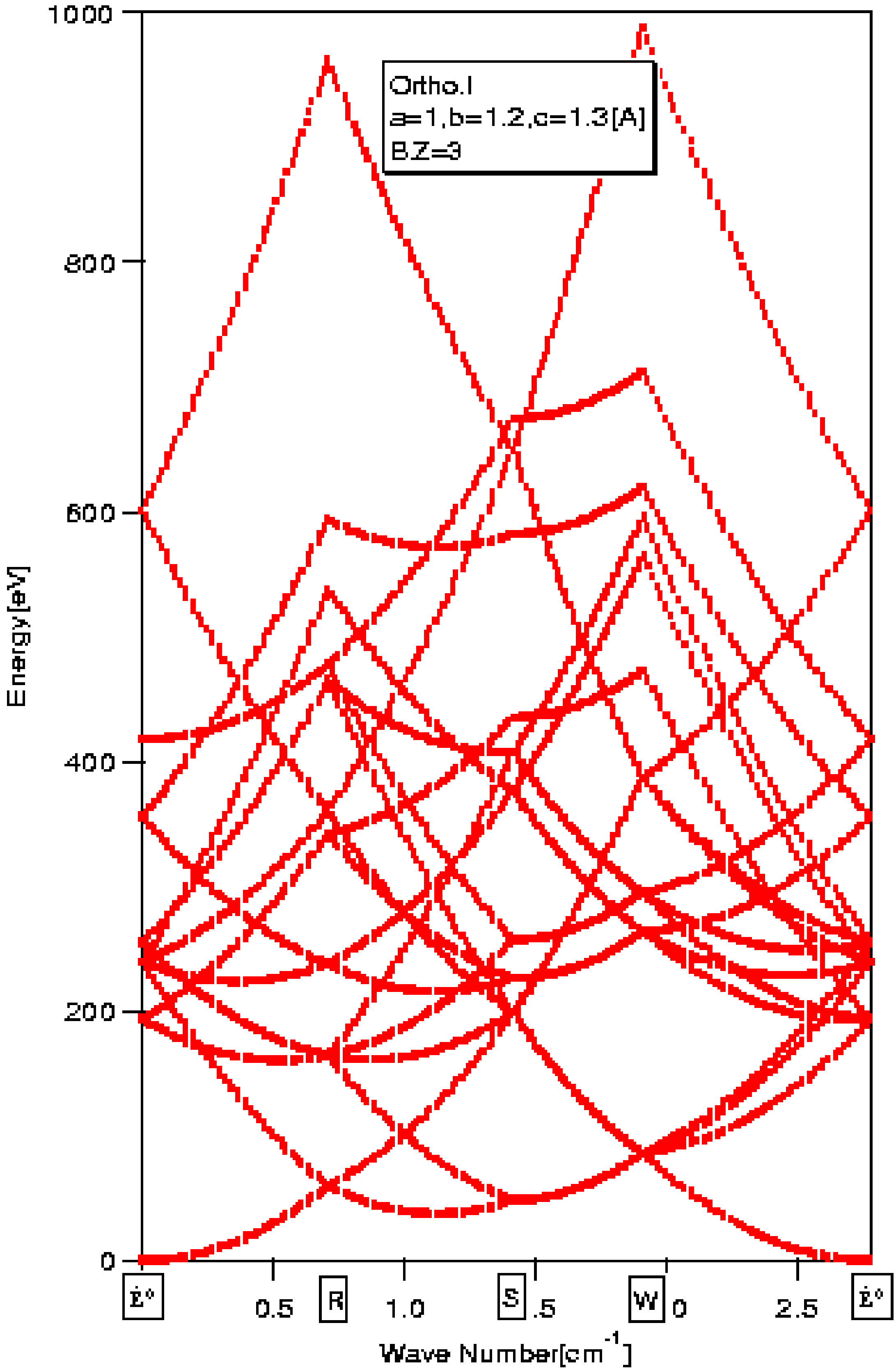

図 24: 斜方体心格子のバンド図

10 斜方面心格子

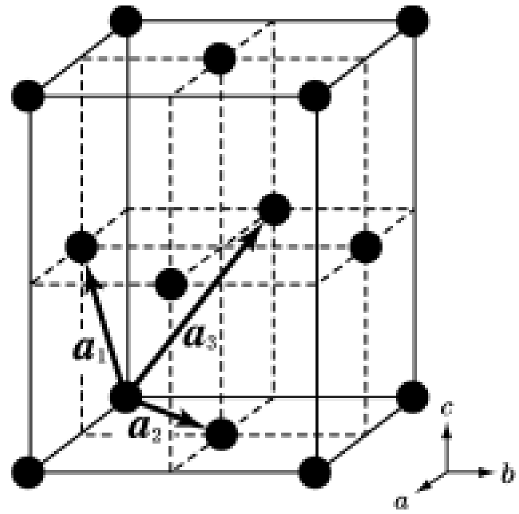

図 25: 斜方面心格子の実格子

斜方面心格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a & 0 & \frac{1}{2}a \\ 0 & -\frac{1}{2}b & -\frac{1}{2}b \\ \frac{1}{2}c & \frac{1}{2}c & 0 \end{pmatrix} \tag{34}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{a} & -\frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{b} & -\frac{2\pi}{b} & -\frac{2\pi}{b} \\ \frac{2\pi}{c} & \frac{2\pi}{c} & -\frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{35}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \xi_1 - \eta_2 + \zeta_3 \\ \eta_y &= \xi_1 - \eta_2 - \zeta_3 \\ \zeta_z &= \xi_1 + \eta_2 - \zeta_3 \\ n_x &= l_1 - l_2 + l_3 \\ n_y &= l_1 - l_2 - l_3 \\ n_z &= l_1 + l_2 - l_3 \end{aligned} \tag{36}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（37）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{b}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{37}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
3	$(\bar{1}1\bar{1})$	$(\overline{111})$	3
3	$(\overline{111})$	$(\bar{1}00)$	1
3	$(11\bar{1})$	$(0\bar{1}0)$	1
3	$(\bar{1}11)$	$(00\bar{1})$	1
3	$(1\overline{11})$	(001)	1
3	$(\overline{11}1)$	(010)	1
3	(111)	(100)	1
3	$(1\bar{1}1)$	(111)	3
4	$(00\bar{2})$	$(\overline{11}0)$	2
4	$(\bar{2}00)$	$(\bar{1}0\bar{1})$	2
4	(020)	$(0\overline{11})$	2
4	$(0\bar{2}0)$	(011)	2
4	(200)	(101)	2
4	(002)	(110)	2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 28: 斜方面心格子の逆格子点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（28）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（29）, 表（30）表（31）表（32）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（33）の通りである。手計算による斜方面心格子の特殊点のエネルギーバンド図を図 (26)、計算機によるエネルギーバンド図を図（27）で示す。

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Y	$(0\overline{\frac{1}{2}\frac{1}{2}})$	(010)
X	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	(100)
Z	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	(001)
L	$(\frac{1}{2}00)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$\frac{1}{a^2} < \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}$,
$\frac{1}{b^2} < \frac{1}{c^2} + \frac{1}{a^2}$,
$\frac{1}{c^2} < \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}$ の場合

表 29: 斜方面心格子の対称点の座標 (case1)

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Y	$(0\overline{\frac{1}{2}\frac{1}{2}})$	(010)
X	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	(100)
Z	$(\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}}0)$	(110)
L	$(\frac{1}{2}00)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$\frac{1}{c^2} > \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}$ の場合

表 30: 斜方面心格子の対称点の座標 (case2)

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Y	$(1\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	(101)
X	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	(100)
Z	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	(001)
L	$(\frac{1}{2}00)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$\frac{1}{b^2} > \frac{1}{c^2} + \frac{1}{a^2}$

表 31: 斜方面心格子の対称点の座標 (case3)

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Y	$(0\overline{\tfrac{1}{2}}\,\overline{\tfrac{1}{2}})$	(010)
X	$(\tfrac{1}{2}0\overline{\tfrac{1}{2}})$	(011)
Z	$(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0)$	(001)
L	$(\tfrac{1}{2}00)$	$(\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2})$

$$\frac{1}{a^2} > \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}$$

表 32: 斜方面心格子の対称点の座標 (case4)

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$							
		$\Gamma(000)$	$Y(010)$	$Y(101)$	$X(100)$	$X(011)$	$Z(001)$	$Z(110)$	$L(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
(000)	0	0	B	A + C	A	B + C	C	A + B	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
$(\bar{1}1\bar{1})$	3	A + B + C	A + C	4A + B + 4C	4A + B + C	A + 4C	A + B + 4C	4A + C	$\frac{9}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{9}{4}$C
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	3	A + B + C	A + 4B + C	4A + B + 4C	4A + B + C	A + 4B + 4C	A + B + 4C	4A + 4B + C	$\frac{9}{4}$A + $\frac{9}{4}$B + $\frac{9}{4}$C
$(11\bar{1})$	3	A + B + C	A + C	B + 4C	B + C	A + 4C	A + B + 4C	C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{9}{4}$C
$(\bar{1}11)$	3	A + B + C	A + C	4A + B	4A + B + C	A	A + B	4A + C	$\frac{9}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
$(1\bar{1}\bar{1})$	3	A + B + C	A + 4B + C	B + 4C	B + C	A + 4B + 4C	A + B + 4C	4B + C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{9}{4}$B + $\frac{9}{4}$C
$(\bar{1}\bar{1}1)$	3	A + B + C	A + 4B + C	4A + B	4A + B + C	A + 4B	A + B	4A + 4B + C	$\frac{9}{4}$A + $\frac{9}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
(111)	3	A + B + C	A + C	B	B + C	A	A + B	C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
$(1\bar{1}1)$	3	A + B + C	A + 4B + C	B	B + C	A + 4B	A + B	4B + C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{9}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
$(00\bar{2})$	4	4C	B + 4C	A + 9C	A + 4C	B + 9C	9A	A + B + 4C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{25}{4}$C
$(\bar{2}00)$	4	4A	4A + B	9A + C	A + 4B	4A + B + C	4A + C	9A + B	$\frac{25}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
(020)	4	4B	B	A + 4B + C	A + 4B	B + C	4B + C	A + B	$\frac{1}{4}$A + $\frac{9}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
$(0\bar{2}0)$	4	4B	9B	A + 4B + C	A + 4B	9B + C	4B + C	A + 9B	$\frac{1}{4}$A + $\frac{25}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
(200)	4	4A	4A + B	A + C	A	4A + B + C	4A + C	A + B	$\frac{9}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{1}{4}$C
(002)	4	4C	B + 4C	A + C	A + 4C	B + C	C	A + B + 4C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$B + $\frac{9}{4}$C
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$$A = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, B = \left(\frac{2\pi}{b}\right)^2, C = \left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 33: 斜方面心格子の E-(k,n) 関係

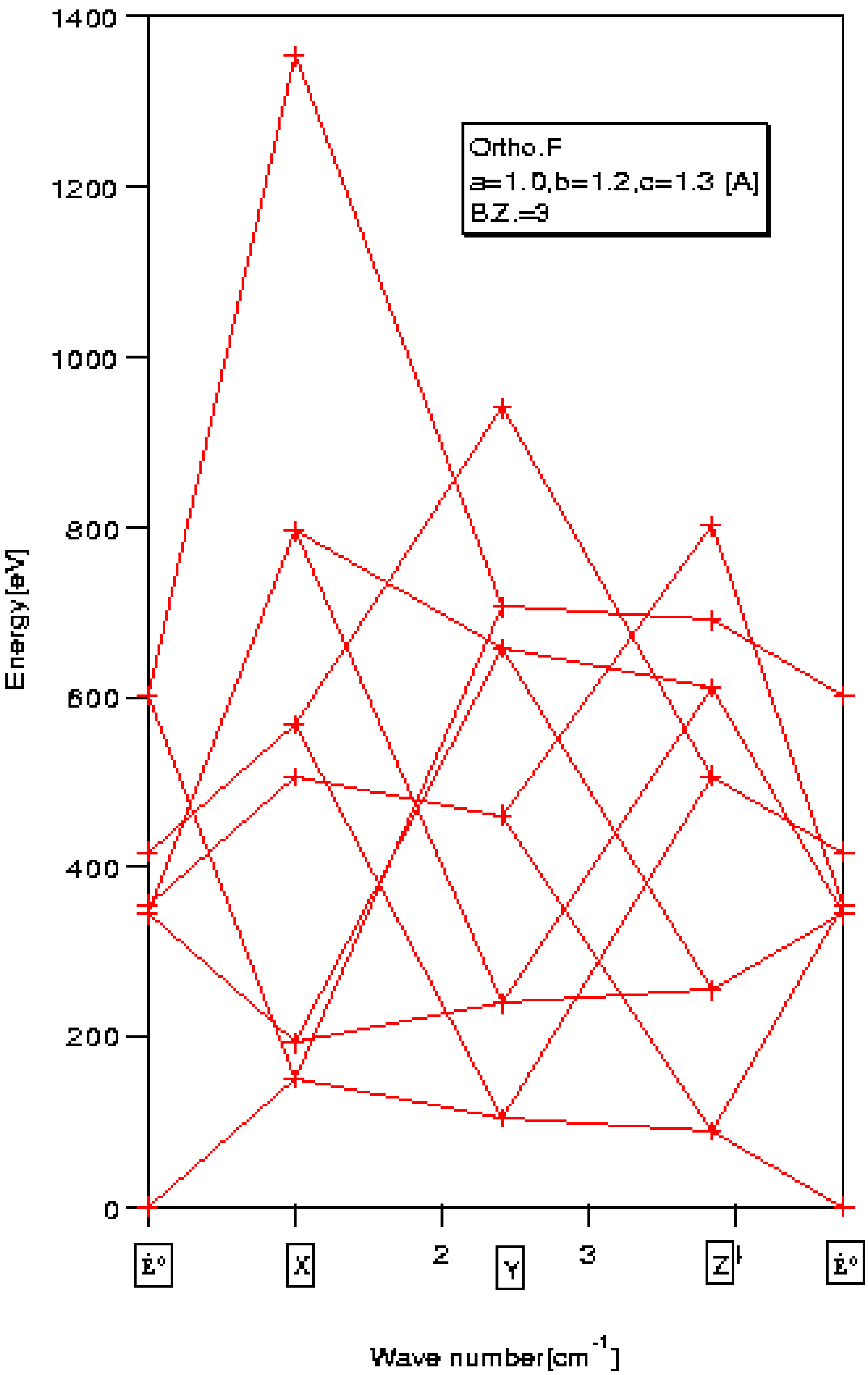

図 26: 斜方面心格子の特殊点のエネルギー

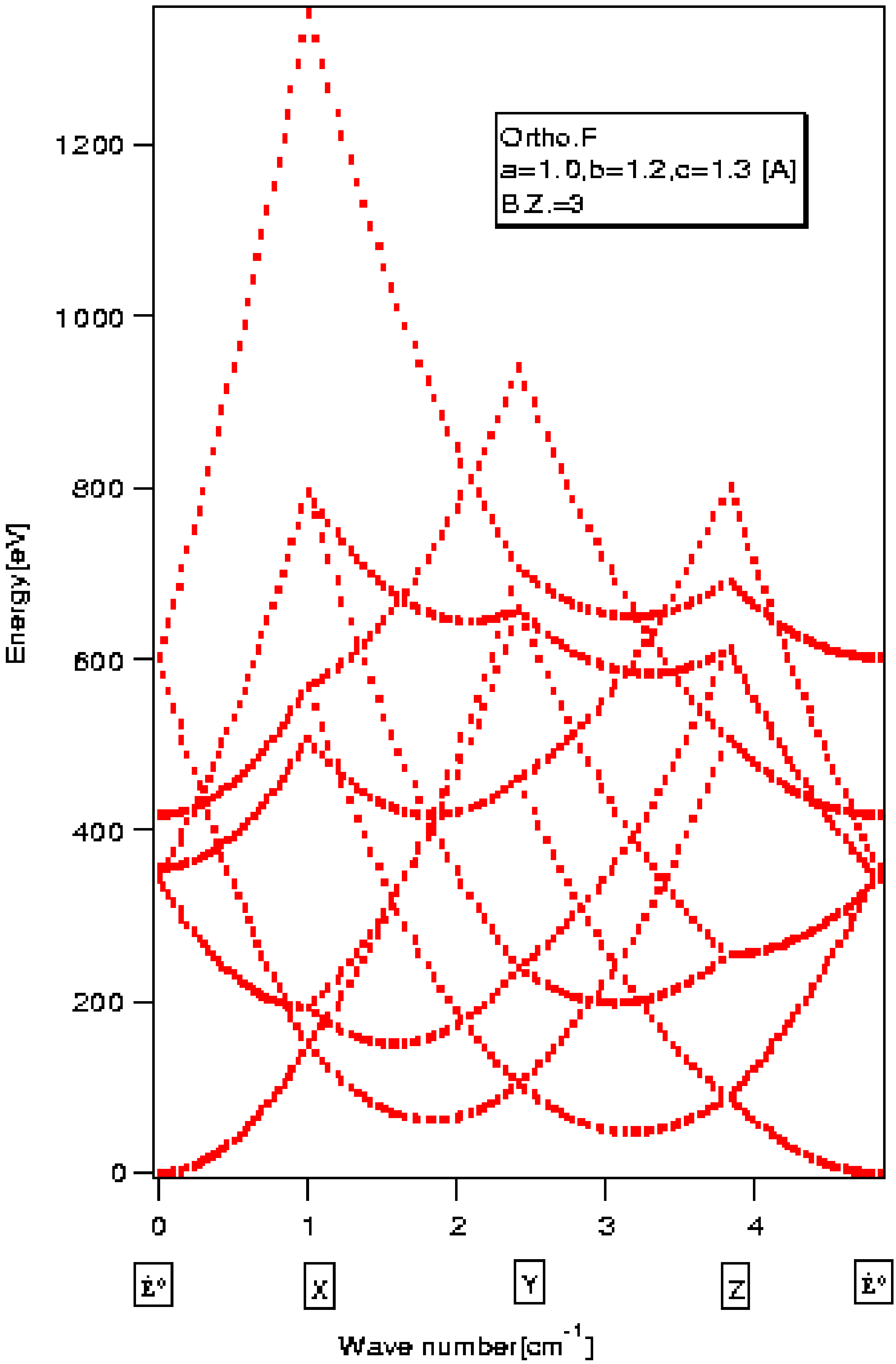

図 27: 斜方面心格子のバンド図

11　6方単純格子

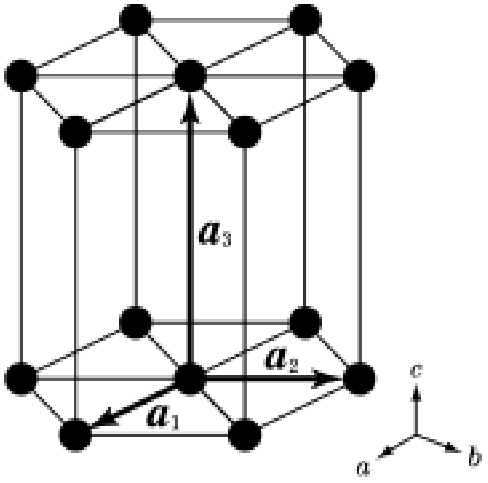

図 28: 六方単純格子の実格子

6方単純格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}a & 0 \\ -a & \frac{1}{2}a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{38}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{2\pi}{a} & \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{2\pi}{a} & 0 \\ -\frac{2\pi}{a} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{39}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \xi_1 + 2\eta_2 \\ \eta_y &= -\xi_1 \\ \zeta_z &= \zeta_3 \\ n_x &= l_1 + 2l_2 \\ n_y &= -l_1 \\ n_z &= l_3 \end{aligned} \tag{40}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（41）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{41}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
1	$(\bar{1}00)$	$(\bar{1}00)$	1
1	(010)	$(0\bar{1}0)$	1
1	$(00\bar{1})$	$(00\bar{1})$	1
1	(001)	(001)	1
1	$(0\bar{1}0)$	(010)	1
1	(100)	(100)	1
2	$(\bar{1}10)$	$(\bar{1}\bar{1}0)$	2
2	$(\bar{1}0\bar{1})$	$(\bar{1}0\bar{1})$	2
2	$(\bar{1}01)$	$(\bar{1}01)$	2
2	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(\bar{1}10)$	2
2	$(01\bar{1})$	$(0\bar{1}\bar{1})$	2
2	(011)	$(0\bar{1}1)$	2
2	$(0\bar{1}\bar{1})$	$(01\bar{1})$	2
2	$(0\bar{1}1)$	(011)	2
2	(110)	$(1\bar{1}0)$	2
2	$(10\bar{1})$	$(10\bar{1})$	2
2	(101)	(101)	2
2	$(1\bar{1}0)$	(110)	2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$n^2 = 2$ までを書き記す。

表 34: 6 方単純格子の逆格子点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（34）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（35）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（36）の通りである。手計算による 6 方単純格子の特殊点のエネルギーを図（??）、計算機によるエネルギーバンド図を図（??）で示す。

	(ξ_1,η_2,ζ_3)	(ξ_x,η_y,ζ_z)
Γ	(000)	(000)
M	$(0\frac{1}{2}0)$	(100)
A	$(00\frac{1}{2})$	$(00\frac{1}{2})$
L	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(10\frac{1}{2})$
K	$(\overline{\frac{1}{3}}\frac{2}{3}0)$	$(1\frac{1}{3}0)$
H	$(\overline{\frac{1}{3}}\frac{2}{3}\frac{1}{3})$	$(1\frac{1}{3}\frac{1}{3})$

表 35: 6 方単純格子の対称点の座標

$(n_xn_yn_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$					
		$\Gamma(000)$	$M(100)$	$A(00\frac{1}{2})$	$L(10\frac{1}{2})$	$K(1\frac{1}{3}0)$	$H(1\frac{1}{3}\frac{1}{3})$
(000)	0	0	$\frac{1}{3}B$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{9}B$	$\frac{4}{9}B+\frac{1}{9}C$
$(\bar{1}00)$	1	$\frac{1}{3}B$	$\frac{4}{3}B$	$\frac{1}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{13}{9}B$	$\frac{13}{9}B+\frac{1}{9}C$
(010)	1	$1B$	$\frac{4}{3}B$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{7}{9}B$	$\frac{7}{9}B+\frac{1}{9}C$
$(00\bar{1})$	1	$1C$	$\frac{1}{3}B+1C$	$\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{3}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{4}{9}B+1C$	$\frac{4}{9}B+\frac{16}{9}C$
(001)	1	$1C$	$\frac{1}{3}B+1C$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{9}B+1C$	$\frac{4}{9}B+\frac{4}{9}C$
$(0\bar{1}0)$	1	$1B$	$\frac{4}{3}B$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{19}{9}B$	$\frac{19}{9}B+\frac{1}{9}C$
(100)	1	$\frac{1}{3}B$	0	$\frac{1}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{9}B$	$\frac{1}{9}B+\frac{1}{9}C$
$(\bar{1}10)$	2	$\frac{4}{3}B$	$\frac{7}{3}B$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{7}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{16}{9}B$	$\frac{16}{9}B+\frac{1}{9}C$
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	$\frac{1}{3}B+1C$	$\frac{4}{3}B+1C$	$\frac{1}{3}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{13}{9}B+1C$	$\frac{13}{9}B+\frac{16}{9}C$
$(\bar{1}01)$	2	$\frac{1}{3}B+1C$	$\frac{4}{3}B+1C$	$\frac{1}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{13}{9}B+1C$	$\frac{13}{9}B+\frac{4}{9}C$
$(\bar{1}\bar{1}0)$	2	$\frac{4}{3}B$	$\frac{7}{3}B$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{7}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{28}{9}B$	$\frac{28}{9}B+\frac{1}{9}C$
$(01\bar{1})$	2	$1B+1C$	$\frac{4}{3}B+1C$	$1B+\frac{9}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{7}{9}B+1C$	$\frac{7}{9}B+\frac{16}{9}C$
(011)	2	$1B+1C$	$\frac{4}{3}B+1C$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{7}{9}B+1C$	$\frac{7}{9}B+\frac{4}{9}C$
$(0\bar{1}\bar{1})$	2	$1B+1C$	$\frac{4}{3}B+1C$	$1B+\frac{9}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{19}{9}B+1C$	$\frac{19}{9}B+\frac{16}{9}C$
$(0\bar{1}1)$	2	$1B+1C$	$\frac{4}{3}B+1C$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{19}{9}B+1C$	$\frac{19}{9}B+\frac{4}{9}C$
(110)	2	$\frac{4}{3}B$	$1B$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{4}{9}B$	$\frac{4}{9}B+\frac{1}{9}C$
$(10\bar{1})$	2	$\frac{1}{3}B+1C$	$1C$	$\frac{1}{3}B+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{9}B+1C$	$\frac{1}{9}B+\frac{16}{9}C$
(101)	2	$\frac{1}{3}B+1C$	$1C$	$\frac{1}{3}B+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{9}B+1C$	$\frac{1}{9}B+\frac{4}{9}C$
$(1\bar{1}0)$	2	$\frac{4}{3}B$	$1B$	$\frac{4}{3}B+\frac{1}{4}C$	$1B+\frac{1}{4}C$	$\frac{16}{9}B$	$\frac{16}{9}B+\frac{1}{9}C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$B=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=2$ までを書き記す。

表 36: 6 方単純格子の E-(k,n) 関係

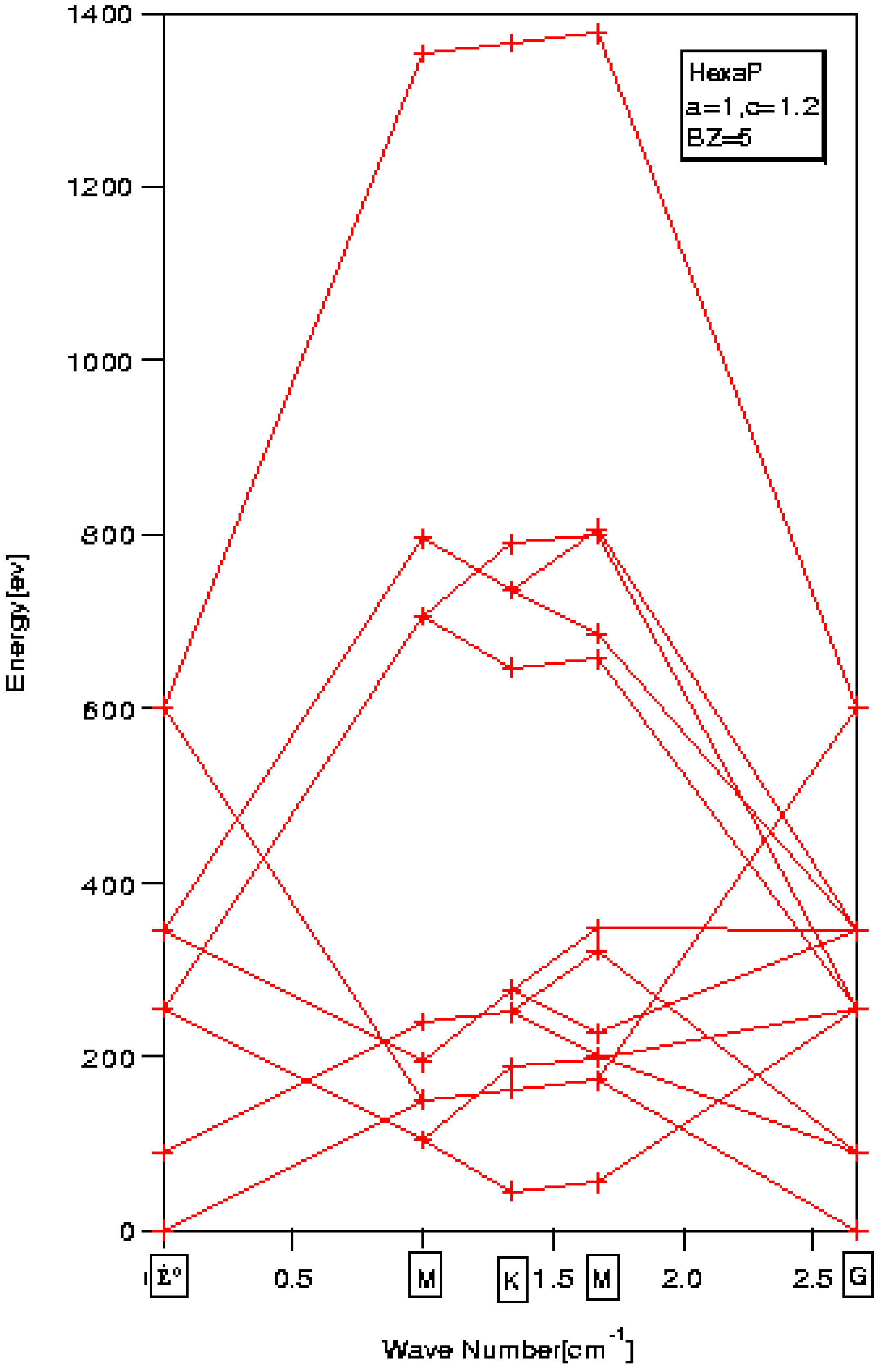

図 29: 六方単純格子の特殊点のエネルギー

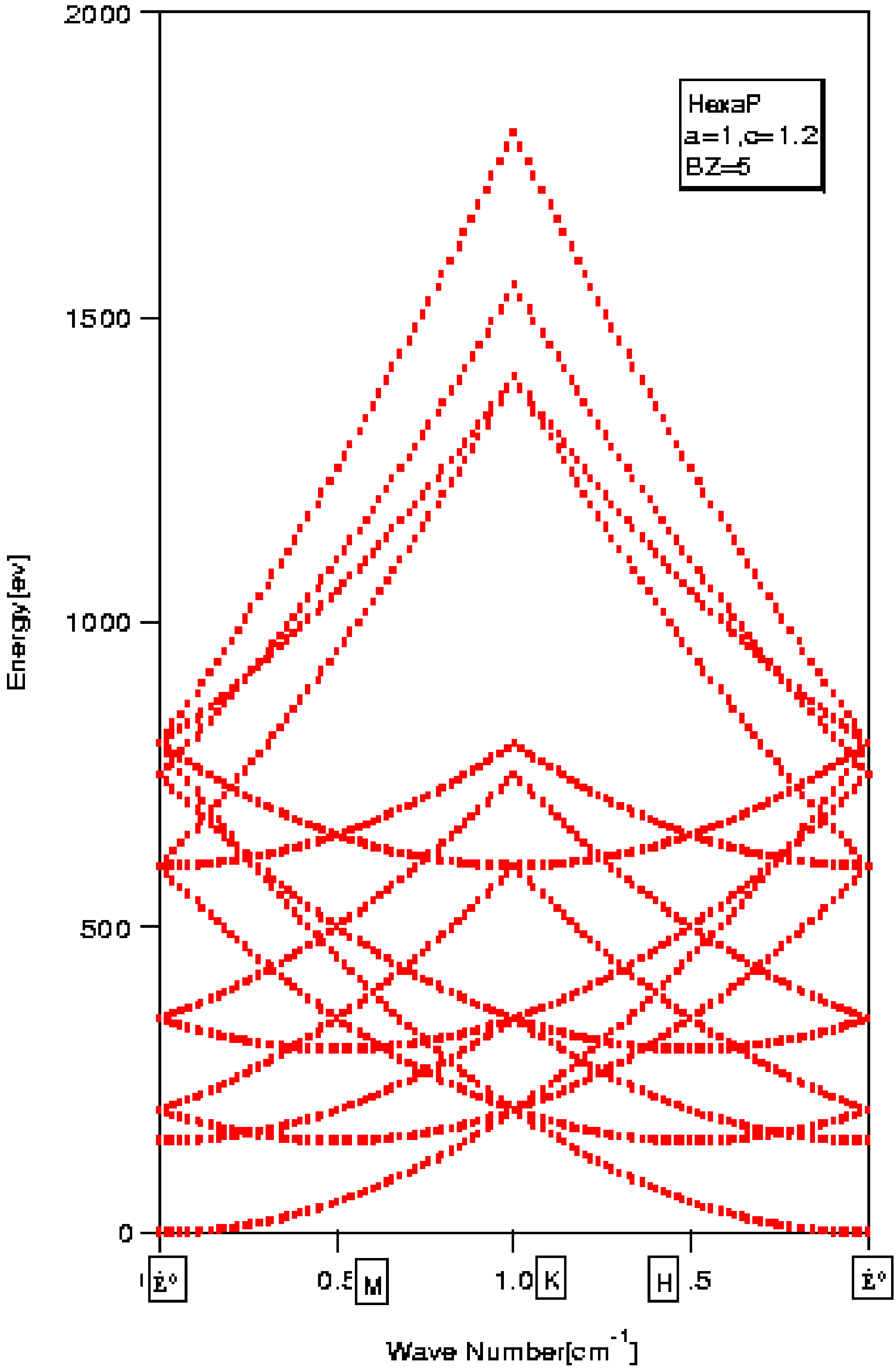

図 30: 六方単純格子のバンド図

12 3方単純格子

EPS File RealTrigP.epsf not found

図 31: 三方単純格子の実格子

3方単純格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}a & -\frac{\sqrt{3}}{2}a \\ -a & a & a \\ c & 2c & 2c \end{pmatrix} \tag{42}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{2\pi}{a} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{2\pi}{a} \\ -\frac{2}{3}\frac{2\pi}{a} & \frac{1}{3}\frac{2\pi}{a} & \frac{1}{3}\frac{2\pi}{a} \\ \frac{1}{3}\frac{2\pi}{c} & \frac{1}{3}\frac{2\pi}{c} & \frac{1}{3}\frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{43}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \eta_2 - \zeta_3 \\ \eta_y &= -2\xi_1 + \eta_2 + \zeta_3 \\ \zeta_z &= \xi_1 + \eta_2 + \zeta_3 \\ n_x &= l_2 - l_3 \\ n_y &= -2l_1 + l_2 + l_3 \\ n_z &= l_1 + l_2 + l_3 \end{aligned} \tag{44}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（45）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{3a}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{3c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{45}$$

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（37）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（38）, 表（39）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、これについては表（40）の通りである。手計算による3方単純格子の特殊点のエネルギーを図 (??)、エネルギーバンド図を図（??）で示す。

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
0	(000)	(000)	0
3	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	$(0\bar{1}0)$	1
3	$(1\bar{1}\bar{1})$	$(00\bar{1})$	1
3	$(\bar{1}11)$	(001)	1
3	(111)	(010)	1
4	$(\bar{2}00)$	$(0\bar{1}1)$	2
4	(200)	$(01\bar{1})$	2
⋮	⋮	⋮	⋮

$n^2 = 4$ までを書き記す。

表 37: 3 方単純格子の逆格子点の座標

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Z	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(00\frac{3}{2})$
L	$(0\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
F	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	(011)

$a > \sqrt{2}c$ の場合

表 38: 3 方単純格子の対称点の座標 (case1)

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
Z	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(00\frac{3}{2})$
L	$(0\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
F	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$(\frac{1}{2}\frac{\bar{1}}{2}1)$

$\sqrt{2}c > a$ の場合

表 39: 3 方単純格子の対称点の座標 (case2)

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_\mathrm{x},n_\mathrm{y},n_\mathrm{z})}_{(\xi_\mathrm{x},\eta_\mathrm{y},\zeta_\mathrm{z})}$				
		$\Gamma(000)$	$Z(00\frac{3}{2})$	$L(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$F(011)$	$F(\frac{1}{2}\overline{\frac{1}{2}}1)$
(000)	0	0	$\frac{9}{4}C$	$1B+\frac{1}{4}C$	$1B+1C$	$1B+1C$
$(\overline{1}\overline{1}\overline{1})$	3	$4B+1C$	$4B+\frac{25}{4}C$	$9B+\frac{9}{4}C$	$7B+4C$	$7B+4C$
$(1\overline{1}\overline{1})$	3	$4B+1C$	$4B+\frac{25}{4}C$	$3B+\frac{9}{4}C$	$7B+4C$	$1B+4C$
$(\overline{1}11)$	3	$4B+1C$	$4B+\frac{1}{4}C$	$7B+\frac{1}{4}C$	$3B$	$9B$
(111)	3	$4B+1C$	$4B+\frac{1}{4}C$	$B+\frac{1}{4}C$	$3B$	$3B$
$(\overline{2}00)$	4	$12B$	$12B+\frac{9}{4}C$	$19B+\frac{1}{4}C$	$13B+1C$	$19B+1C$
(200)	4	$12B$	$12B+\frac{9}{4}C$	$7B+\frac{1}{4}C$	$13B+1C$	$7BA+1C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$B=\left(\frac{2\pi}{3a}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{3c}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=4$ までを書き記す。

表 40: 3方単純格子の E-(k,n) 関係

図 32: 三方単純格子の特殊点のエネルギー

図 33: 三方単純格子のバンド図

13　単斜単純格子

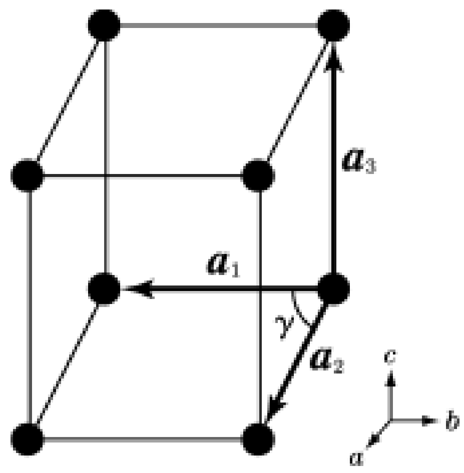

図 34: 単斜単純格子の実格子

単斜単純格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} 0 & a\sin\gamma & 0 \\ -b & -a\cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \tag{46}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} -\frac{2\pi}{b}\cot\gamma & \frac{2\pi}{a}\csc\gamma & 0 \\ -\frac{2\pi}{b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{47}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \left(-\tfrac{a}{b}\cos\gamma\right)\xi_1 + \eta_2 \\ \eta_y &= -\xi_1 \\ \zeta_z &= \zeta_3 \\ n_x &= \left(-\tfrac{a}{b}\cos\gamma\right)l_1 + l_2 \\ n_y &= -l_1 \\ n_z &= l_3 \end{aligned} \tag{48}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（49）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a\sin\gamma}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{b}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{49}$$

n^2	(n_x, n_y, n_z)	(l_1, l_2, l_3)	l^2
	$(n_x 00)$	(000)	0
	$(n_x 10)$	$(\bar{1}00)$	1
	$(n_x 00)$	$(0\bar{1}0)$	1
	$(n_x 0\bar{1})$	$(00\bar{1})$	1
	$(n_x 01)$	(001)	1
	$(n_x 00)$	(010)	1
	$(n_x \bar{1}0)$	(100)	1
	$(n_x 10)$	$(\bar{1}\bar{1}0)$	2
	$(n_x 1\bar{1})$	$(\bar{1}0\bar{1})$	2
	$(n_x 11)$	$(\bar{1}01)$	2
	$(n_x 10)$	$(\bar{1}10)$	2
	$(n_x 0\bar{1})$	$(0\bar{1}\bar{1})$	2
	$(n_x 01)$	$(0\bar{1}1)$	2
	$(n_x 0\bar{1})$	$(01\bar{1})$	2
	$(n_x 01)$	(011)	2
	$(n_x \bar{1}0)$	$(1\bar{1}0)$	2
	$(n_x \bar{1}\bar{1})$	$(10\bar{1})$	2
	$(n_x \bar{1}1)$	(101)	2
	$(n_x \bar{1}0)$	(110)	2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$l^2 = 2$ まで書き記してある。
n_x は整数にならないため n_x のままになっている。
n^2 も整数が作れないため空白のままになっている。

表 41: 単斜単純格子の逆格子点の座標

l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（41）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（42）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、角度 γ が残り、表現が長くなるため、これについては省略することにする。手計算による単斜単純格子の特殊点のエネルギーを図（35）、計算機によるエネルギーバンド図を図（36）で示す。

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	$(\xi_x \frac{1}{2} 0)$
B	$(\overline{\frac{1}{2}} 00)$	$(\xi_x \overline{\frac{1}{2}} 0)$
Y	$(0 \frac{1}{2} 0)$	$(\xi_x 00)$
Z	$(00 \frac{1}{2})$	$(\xi_x 0 \frac{1}{2})$
C	$(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$(\xi_x 0 \frac{1}{2})$
D	$(\overline{\frac{1}{2}} 0 \frac{1}{2})$	$(\xi_x \frac{1}{2} \frac{1}{2})$
A	$(\overline{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} 0)$	$(\xi_x \frac{1}{2} 0)$
	$(\overline{\frac{1}{2}} \overline{\frac{1}{2}} 0)$	$(\xi_x \frac{1}{2} 0)$
	$(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$	$(\xi_x \overline{\frac{1}{2}} 0)$
E	$(\overline{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$(\xi_x \frac{1}{2} \frac{1}{2})$
	$(\overline{\frac{1}{2}} \overline{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} 0)$	$(\xi_x \overline{\frac{1}{2}} \frac{1}{2})$
	$(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$	$(\xi_x \overline{\frac{1}{2}} \frac{1}{2})$

表 42: 単斜単純格子の対称点の座標

$(\mathsf{n_x n_y n_z})$	n^2	$E^{(n_\mathsf{x}, n_\mathsf{y}, n_\mathsf{z})}_{(\xi_\mathsf{x}, \eta_\mathsf{y}, \zeta_\mathsf{z})}$			
		$\Gamma(000)$	Y $(\frac{1}{2}00)$	Z $(00\frac{1}{2})$	C $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
(000)	0	0	$\frac{1}{4}$A	$\frac{1}{4}$C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$C
$(\bar{1}00)$	1	A	$\frac{9}{4}$A	A + $\frac{1}{4}$C	$\frac{9}{4}$A + $\frac{1}{4}$C
$(00\bar{1})$	1	C	$\frac{1}{4}$A + C	$\frac{9}{4}$C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{9}{4}$C
(001)	1	C	$\frac{1}{4}$A + C	$\frac{1}{4}$C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$C
(100)	1	A	$\frac{1}{4}$A	A + $\frac{1}{4}$C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$C
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	A + C	$\frac{9}{4}$A + C	A + $\frac{9}{4}$C	$\frac{9}{4}$A + $\frac{9}{4}$C
$(\bar{1}01)$	2	A + C	$\frac{9}{4}$A + C	A + $\frac{9}{4}$C	$\frac{9}{4}$A + $\frac{1}{4}$C
$(10\bar{1})$	2	A + C	$\frac{1}{4}$A + C	A + $\frac{9}{4}$C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{9}{4}$C
(101)	2	A + C	$\frac{1}{4}$A + C	$\frac{1}{4}$A + C	$\frac{1}{4}$A + $\frac{1}{4}$C
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

$A = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, B = \left(\frac{2\pi}{b}\right)^2, C = \left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2 = 2$ までを書き記す。

表 43: 単斜単純格子の E-(k,n) 関係

図 35: 単斜単純格子の特殊点のエネルギー

図 36: 単斜単純格子のバンド図

14　単斜底面心格子

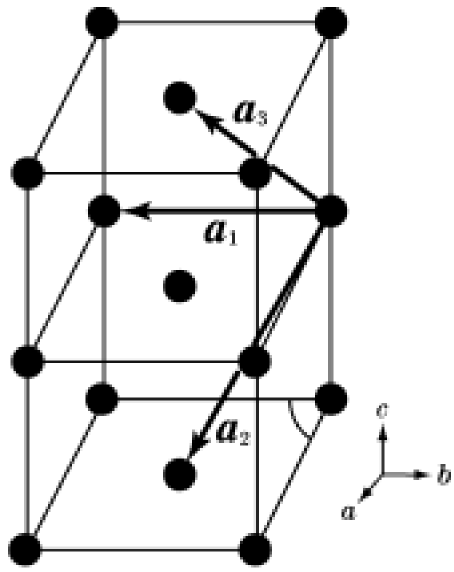

図 37: 単斜底面心格子の実格子

単斜底面心格子の基本格子ベクトル（$\vec{A}$）は

$$\vec{A} = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}a\sin\gamma & \frac{1}{2}a\sin\gamma \\ -b & -\frac{1}{2}a\cos\gamma & -\frac{1}{2}a\cos\gamma \\ 0 & \frac{1}{2}c & \frac{1}{2}c \end{pmatrix} \tag{50}$$

である。逆格子ベクトル（$\vec{B}$）は

$$\vec{B} = (\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3) = \begin{pmatrix} -\frac{2\pi}{b}\cot\gamma & \frac{2\pi}{a}\csc\gamma & \frac{2\pi}{a}\csc\gamma \\ -\frac{2\pi}{b} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2\pi}{c} & \frac{2\pi}{c} \end{pmatrix} \tag{51}$$

である。

$$\begin{aligned} \xi_x &= \left(-\tfrac{a}{b}\cos\gamma\right)\xi_1 + \eta_2 + \zeta_3 \\ \eta_y &= -\xi_1 \\ \zeta_z &= -\eta_2 + \zeta_3 \\ n_x &= \left(-\tfrac{a}{b}\cos\gamma\right)l_1 + l_2 + l_3 \\ n_y &= -l_1 \\ n_z &= -l_2 + l_3 \end{aligned} \tag{52}$$

である。ただし、$\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z$ を式（53）としている。

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a\sin\gamma}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_y = \frac{2\pi}{b}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b}_z = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{53}$$

	(ξ_1, η_2, ζ_3)	(ξ_x, η_y, ζ_z)
Γ	(000)	(000)
A	$(\overline{\frac{1}{2}}00)$	$(\xi_x\frac{1}{2}0)$
Z	$(0\overline{\frac{1}{2}}\frac{1}{2})$	$(\xi_x 01)$
M	$(\overline{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\frac{1}{2})$	$(\xi_x\frac{1}{2}1)$
L	$(\overline{\frac{1}{2}}0\frac{1}{2})$	$(\xi_x\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
V	$(00\frac{1}{2})$	$(\xi_x 0\frac{1}{2})$

表 44: 単斜底面心格子の対称点の座標

n_x は一般的に整数にならない。l_1, l_2, l_3 の組み合わせにより、n_x, n_y, n_z が決定されるが、これについては表（??）の通りである。第一ブリルアンゾーンにおける主な対称点の座標について表（44）の通りである。対称点と逆格子点が決まればエネルギーが決まるが、角度 γ が残り、表現が長くなるため、これについては省略することにする。手計算による単斜底面心格子の特殊点のエネルギーを図（38)、計算機によるエネルギーバンド図を図（39）で示す。

$(n_x n_y n_z)$	n^2	$E^{(n_x,n_y,n_z)}_{(\xi_x,\eta_y,\zeta_z)}$			
		$\Gamma(000)$	$Y(\frac{1}{2}00)$	$Z(00\frac{1}{2})$	$C(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
(000)	0	0	$\frac{1}{4}A$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}00)$	1	A	$\frac{9}{4}A$	$A+\frac{1}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$
$(00\bar{1})$	1	C	$\frac{1}{4}A+C$	$\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$
(001)	1	C	$\frac{1}{4}A+C$	$\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$
(100)	1	A	$\frac{1}{4}A$	$A+\frac{1}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$
$(\bar{1}0\bar{1})$	2	$A+C$	$\frac{9}{4}A+C$	$A+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{9}{4}C$
$(\bar{1}01)$	2	$A+C$	$\frac{9}{4}A+C$	$A+\frac{9}{4}C$	$\frac{9}{4}A+\frac{1}{4}C$
$(10\bar{1})$	2	$A+C$	$\frac{1}{4}A+C$	$A+\frac{9}{4}C$	$\frac{1}{4}A+\frac{9}{4}C$
(101)	2	$A+C$	$\frac{1}{4}A+C$	$\frac{1}{4}A+C$	$\frac{1}{4}A+\frac{1}{4}C$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$A=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2, B=\left(\frac{2\pi}{b}\right)^2, C=\left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$

係数 $\frac{\hbar^2}{2m}$ については省略してある。

$n^2=2$ までを書き記す。

表 45: 単斜単純格子の E-(k,n) 関係

図 38: 単斜底面心格子の特殊点のエネルギー

図 39: 単斜底面心格子のバンド図

15　結論

　１．空格子近似は自由電子に周期的境界条件のみを与え、ポテンシャルは０としている。そのため連続したエネルギー値をとる。ゆえに、バンドギャップは存在しない。
２．グラフから、特殊点の上や特殊線に沿った所をみることによって、縮退があることが分かる。
３．結晶の対称性が低くなると（たとえば、立方単純晶から正方単純晶へ)、縮退が解け、バンド図は複雑になる。