

從能帶結構看物性

填滿或不填滿：費米面

電子填滿或不填滿一條完整 ($k=0$ 至 BZ 邊界) 的能帶，對材料的物理性質有極大的影響。金屬類與絕緣體類的物質在外觀上（反射電磁波）、導電、導熱性上有極大的差異。而這個差異主要就是來自它們一條條能帶是否有完整填滿（一條是想像一維的 k 的用語，實際上是 3D 的，因此應該說是整個布里淵區。）

金屬與絕緣體在能帶結構上最主要的差異，就是費米面的存在及其位置（對於絕對零度而言就是化學位勢），對金屬而言，費米面與能帶有相交，即存在某一條能帶有費米面通過，導致那條能帶有些 k 值有電子佔據而有些 k 值則沒有。絕緣體的能帶則是全部填滿或不填，沒有半填滿的能帶。

定義：費米能階與費米面

對金屬而言，電子填到之最高能量的地方 E_F ，即費米能階，可以發生在不同的 k 方向上，費米面是由滿足 $E(\mathbf{k}) = E_F$ 之所有 k 點共同形成之面，通常是相當複雜的（這也就是為什麼計算金屬系統時 k 網格必須取得更密一點，其電荷分佈才會比較正確）。絕緣體通常不講費米面（有的書會說是金屬才有費米面），而以價帶頂部、導帶底部、能隙等來描述單粒子能量本徵值的位置。至於半導體的費米面，則常被定義是在價帶與導帶的中間。

+ k 、- k 對稱性造成導電機制

由於能帶具有 $E(-\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})$ 的本質，因此在一般（無外加電場）狀態下，具有 $-k$ 動量的電子會與具有 $+k$ 動量的電子數目一樣多，因為能量一樣位置有限不可重覆，故低能的先填。

金屬有費米面切過佔據與未佔據之 k 區域，即便在有微弱的外加電場影響下（假設電場是沿 $+k$ 方向），仍能造成填到 $+k$ 之態的比 $-k$ 之態的多，如此系統會有淨電流的流動。金屬與半導體的大致區分，是溫度對其導電度的影響：基於材料之內電荷的傳導機制不

同，高溫所帶來的晶格擾動造成較大的散射，使金屬的導電率降低；但高溫所造成的載子增加則促使內稟型半導體（Intrinsic Semiconductor，即不摻雜的半導體）的導電性變好。

曲率：載子的有效質量

半導體的能隙窄，電子有機會受激從填滿的價帶跑到全空的導帶，形成會讓半導體導電的載子。電子或電洞所處在能帶位置上的曲率，具有群速度的涵意，因為被視為是傳導時的有效質量。能帶越平，則載子越重越不易移動。

間隙：能帶間的間隙與電子躍遷（大、小：直接、間接）

半導體與絕緣體都有能隙，即最高佔據態到最低未佔據態之間的能量差。光學性質涉及從佔據態到未佔據態的躍遷（動量）矩陣，因此能隙大小對材料的光學性質有很大的影響。從能帶之間的躍遷垂直（ k 不變）與不垂直（ k 會改變）來分類所需要的最低能量代價，就有所謂的直接能隙與間接能隙之分。當電子離開所佔據的量子態而躍遷到不同 k 的態，其過程就不只是能量守恆，而是連動量守恆也要滿足（光子動量轉移小，故受光激發垂以直躍遷為主）。材料是間接能隙時，就必須靠其他過程（如聲子熱激發）的同時發生，才能滿足動量守恆，因此間接能隙材料的光電躍遷效率比直接能隙者差很多。

自旋向上與向下的兩重能帶：磁性

當物質具有磁性而我們採取所謂的“自旋極化”計算時，每條 band 不再是同時填有 spin-up 電子及 spin-down 電子，而是會各自分開成為兩條，一條只填 up spin 電子而另一條只填 down spin 電子。所填的 up 電子數與 down 電子數若有不同，則系統有淨磁矩。

如果 spin up 能帶及 spin down 能帶其中只有一條有被費米面通過，另外一條沒有，則這個材料是有趣且有大應用潛力的半金屬 (half-metal)。

邊界與週期性：自發性對稱破壞

費米面巢狀效應：原週期對稱破壞，新的週期產生出來。例如，我們知道實空間週期大小一旦加倍，倒空間大小便會減半。費米面若切在倒空間週期邊界一半或是整數倍分之一的地方，便存在驅動力改變空間週期性，引入能隙，方能允許佔據態脫離空態的束縛，降低能量本徵值，進而使總能降低。

反之，如果能隙沒有打開，佔據能帶總是有接近費米面的一些態會連著未佔據者，總能小不下來（總能只由佔據態電子決定）。因此大自然會願意改變晶胞的對稱性（也就是允許移動破壞原有較高的對稱性），以換取總能的進一步降低。

表面重構現象、一維氫原子鏈的二聚化現象（即線性等距排列起來的氫原子，將會兩兩靠近形成氫分子，以使能量降低。又稱之為 Peierls Distortion ），皆為經典的例子。