

14. Elektronen in einem periodischen Potential

- bisher:
- Wellen-Natur von Phononen
 - nur Kristall-Impuls erhalten
 - alle Anregungen können in der 1. BZ beschrieben werden
 - Streuung mit Kristall-Impuls-Erhaltung

- hier:
- Elektronen-Wellen-Natur im FK
 - auch hier Kristall-Impuls-Erhaltung
 - Elektronen-anregungsspektrum auch in 1. BZ

freie e^-
Modell
Sommerfeld
4. Kap.

keine WW mit FK



Kap. 14: schwache WW

tight-binding
Modell
10. Kap.

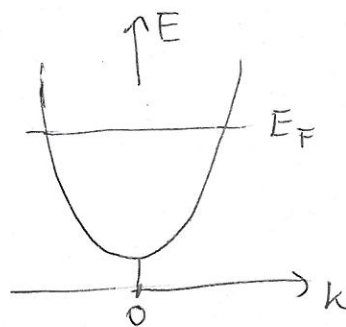
starke WW mit
Kernen $\Rightarrow$ hopping

- Wiederholung: freie e^- (4. Kap)

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Ansatz: ebene Welle $|\vec{k}\rangle \sim e^{i\vec{k}\vec{x}}$

$$\Rightarrow \text{Eigenenergien} \quad E_0(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m}$$

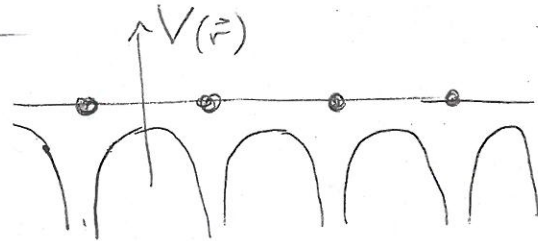


14.1 Fast freies Elektronen Modell

- schwache periodische Störung

$$H = H_0 + V(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$$

$\vec{R}$: Gittervektor



- Matrixelemente sind die Fourier-Komponenten

$$\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \int d\vec{r} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} V(\vec{r}) =: V_{\vec{k}' - \vec{k}} \quad (14.1)$$

- Null, außer wenn $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$: reziproker Vektor
das heißt, ein Ebene-Wellen-Zustand $\vec{k}$ kann nur in einen anderen Zustand $\vec{k}'$ streuen, wenn die Differenz ein

reziproker Vektor ist $\Rightarrow$ Kristall-Impuls-Erhaltung

- probieren Störungsrechnung 1. Ordnung

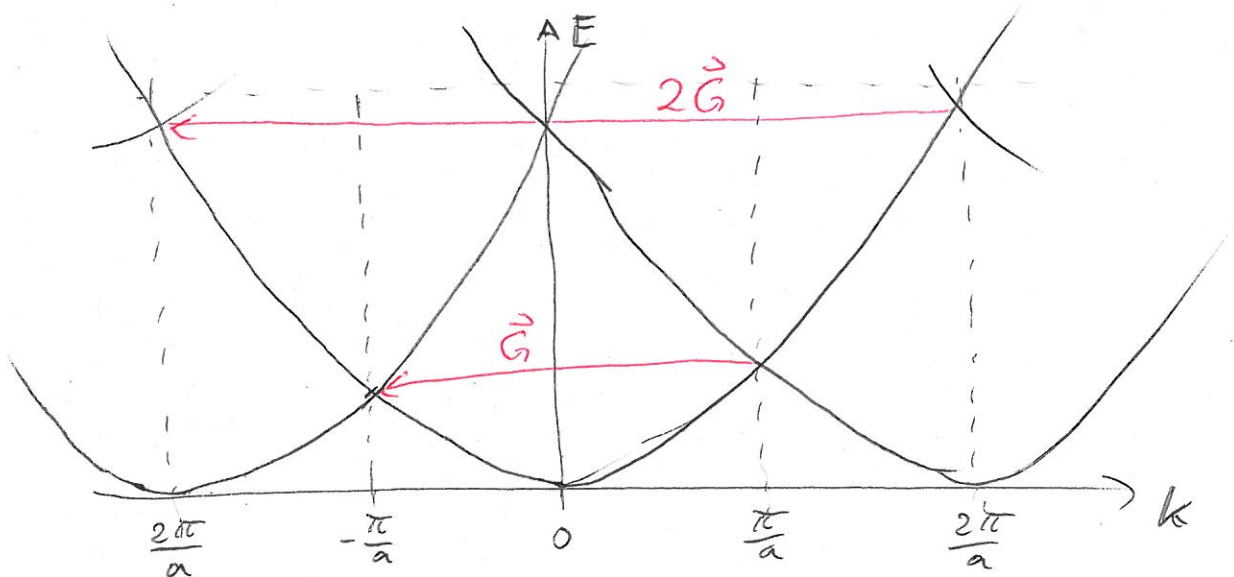
$$E(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + \langle \vec{k} | V | \vec{k} \rangle = E_0(\vec{k}) + V_0$$

V_0 : uninteressante Energieverschiebung aller Eigenenergien

- Störungsrechnung 2. Ordnung

$$E(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + V_0 + \sum_{\substack{\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G} \\ \vec{G} \neq 0}} \frac{|\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2}{E_0(\vec{k}) - E_0(\vec{k}')} \quad (14.2)$$

Problem: $E_0(\vec{k})$ kann gleich $E_0(\vec{k}')$ sein
 $\Rightarrow$ Divergenz der Störungsrechnung!

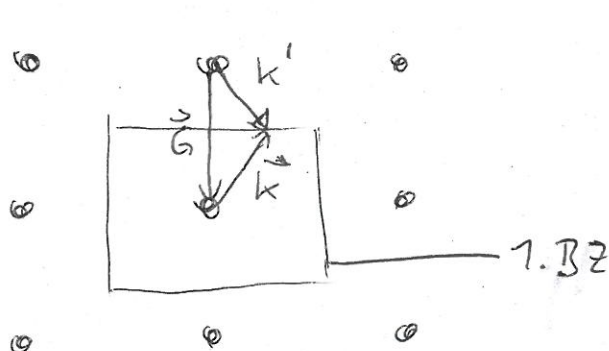


Divergenz bei $E_0(\vec{k}) = E_0(\vec{k}')$ (14.3)
 $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$ (14.4)

in 1D: 14.3 gibt $k' = \pm k$
14.4 gibt $k' = -k = \frac{n\pi}{a}$

in 3D: 14.3 und 14.4 sind erfüllt auf den BZ-Rändern

Beispiel für 1. BZ



$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$$

Problem = Divergenz der Störungsrechnung selbst für kleine $V(\vec{r})$

Lösung:

14.1.1 Entartete Störungsrechnung

- exakte Diagonalisierung in der "Nähe" der Entartung mit den zwei entarteten Zuständen und Störung $V(\vec{r})$
- sei $|\vec{k}\rangle$ und $|\vec{k}'\rangle = |\vec{k} + \vec{G}\rangle$ mit der selben Energie
- Matrix - Elemente

$$\langle \vec{k} | H | \vec{k} \rangle = \epsilon_0(\vec{k})$$

$$\langle \vec{k}' | H | \vec{k}' \rangle = \epsilon_0(\vec{k}') = \epsilon_0(\vec{k} + \vec{G}) \quad (14.5)$$

$$\langle \vec{k} | H | \vec{k}' \rangle = V_{\vec{k}-\vec{k}'} = V_{\vec{G}}^*$$

$$\langle \vec{k}' | H | \vec{k} \rangle = V_{\vec{k}'-\vec{k}} = V_{\vec{G}}$$

} siehe (14.1)

- $V_{-\vec{G}} = V_{\vec{G}}^*$ da $V(\vec{r}) \in \mathbb{R}$

- Wellenfkt ist Linear kombination

$$|\psi\rangle = \alpha |\vec{k}\rangle + \beta |\vec{k}'\rangle = \alpha |\vec{k}\rangle + \beta |\vec{k} + \vec{G}\rangle \quad (14.6)$$

- Effektive Schrödingergl.

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0(\vec{k}) & V_{\vec{G}}^* \\ V_{\vec{G}} & \epsilon_0(\vec{k} + \vec{G}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (14.7)$$

- Determinante Null setzen

$$(\epsilon_0(\vec{k}) - E)(\epsilon_0(\vec{k} + \vec{G}) - E) - |V_{\vec{G}}|^2 = 0 \quad (14.8)$$

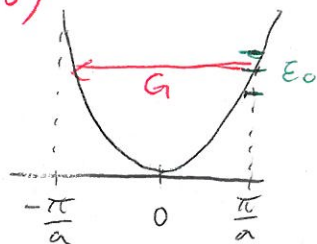
14.1.2 Einfacher Fall: $\vec{k}$ genau auf BZ-Rand

$$\Rightarrow \epsilon_0(\vec{k}) = \epsilon_0(\vec{k} + \vec{G})$$

$$(14.8) \Rightarrow (\epsilon_0(\vec{k}) - E)^2 = |V_{\vec{G}}|^2$$

$$\Rightarrow E_{\pm} = \epsilon_0(\vec{k}) \pm |V_{\vec{G}}| \quad (14.9)$$

$\Rightarrow$ Energie lücke am BZ-Rand



• 1D, einfacher Potential

$$V(x) = \tilde{V} \cos(2\pi x/a) \quad \text{mit } \tilde{V} > 0$$

$$\text{BZ-Rand: } k = \frac{\pi}{a} \quad \text{und} \quad k' = -k = -\frac{\pi}{a}$$

$$k' - k = G = -\frac{2\pi}{a}, \quad \text{und} \quad \epsilon_0(k) = \epsilon_0(k')$$

von (14.7) bekommen wir $\alpha = \pm \beta$

$$\Rightarrow \text{Eigenzustände} \quad |\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k\rangle \pm |k'\rangle) \quad (14.10)$$

$$\text{im realen Raum: } \langle x | k \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$$

$$\Rightarrow |k\rangle \rightarrow e^{ikx} = e^{ix \frac{\pi}{a}}$$

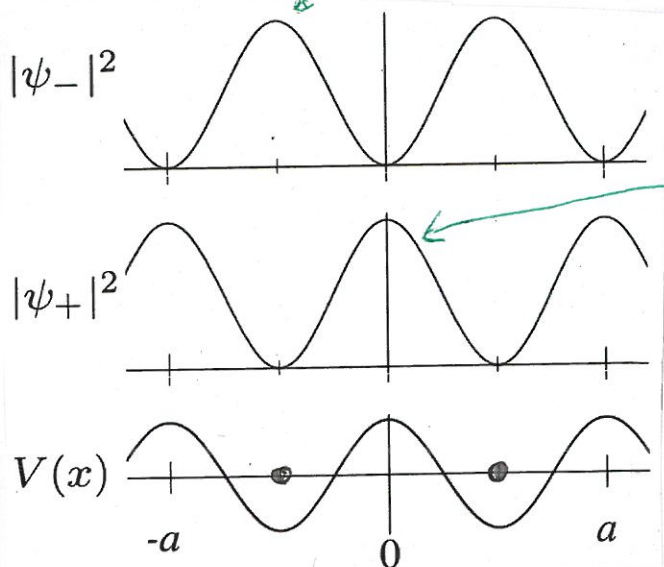
$$|k'\rangle \rightarrow e^{ik'x} = e^{-ix \frac{\pi}{a}}$$

$$\Rightarrow \psi_+ \sim e^{ix \frac{\pi}{a}} + e^{-ix \frac{\pi}{a}} \sim \cos\left(x \frac{\pi}{a}\right)$$

$$\psi_- \sim e^{ix \frac{\pi}{a}} - e^{-ix \frac{\pi}{a}} \sim \sin\left(x \frac{\pi}{a}\right)$$

← lokalisiert bei den Kernen

Stehende Wellen



Wellen fkt lokalisiert zwischen den Kernen

Prinzip: Ein periodisches Potential streut zwei Ebene Wellen $|\vec{k}\rangle$ und $|\vec{k} + \vec{G}\rangle$

Bei gleicher Energie $\Rightarrow$ starke Mischung
 $\Rightarrow$ Lokalisierung

- Zustand mit tieferer Energie bei Minima von $V(\vec{r})$
- Zustand mit höherer Energie bei Maxima von $V(\vec{r})$

14.1.3 k nicht ganz auf BZ-Rand (1D)

- Lösung von (14.8) für k in der Nähe des BZ-Rands

$$E_0\left(n\frac{\pi}{a} + \delta\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + 2\frac{n\pi}{a}\delta + \delta^2 \right)$$

$$E_0\left(-n\frac{\pi}{a} + \delta\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 - 2\frac{n\pi}{a}\delta + \delta^2 \right)$$

- mit Eq. 14.8

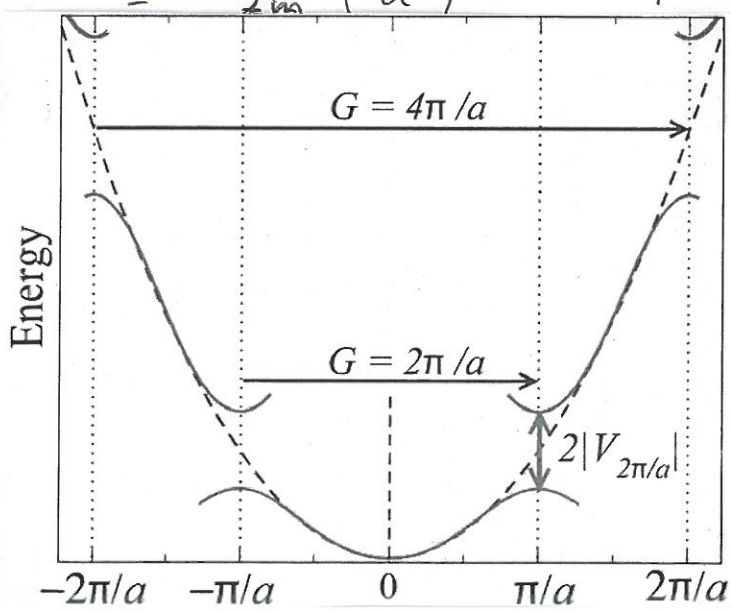
$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \delta^2 \right] - E + \frac{\hbar^2}{2m} 2n\frac{\pi\delta}{a} \right) \times$$

$$\times \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \delta^2 \right] - E - \frac{\hbar^2}{2m} 2n\frac{\pi\delta}{a} \right) - |V_G|^2 = 0$$

$$\Rightarrow E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \delta^2 \right] \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m} 2n\frac{\pi\delta}{a} \right)^2 + |V_G|^2} \quad (14.11)$$

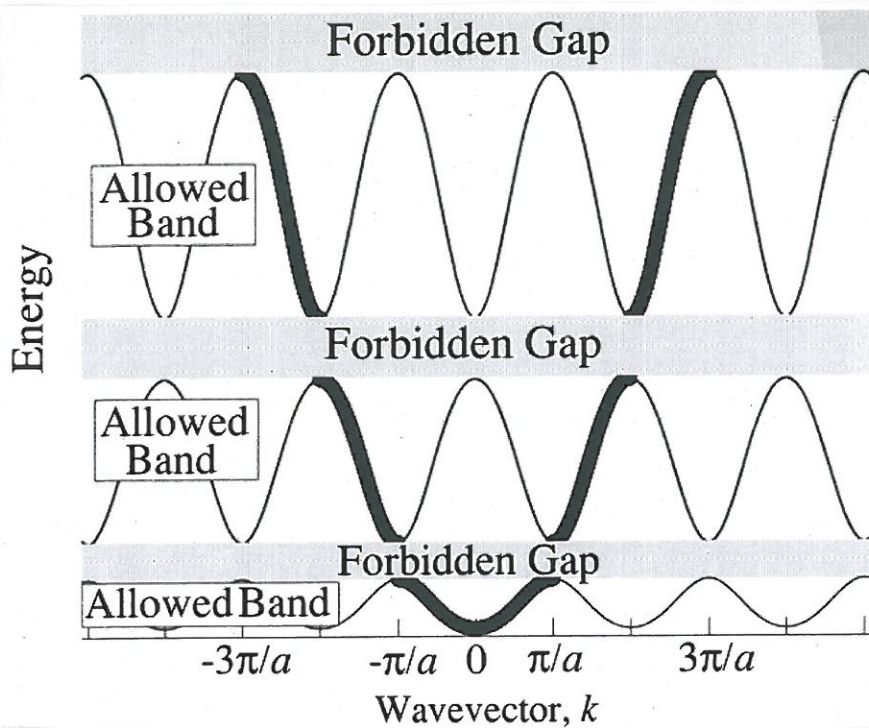
- für kleine δ

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \pm |V_G| + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left[1 \pm \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}{|V_G|} \right] \quad (14.12)$$



$\Rightarrow$ Energie lücke mit Band-Formierung

- wie beim tight-binding Modell haben wir Bänder
- periodisch in der BZ



$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

○ - Effektive Masse:

Von Eq. 14.12 $\Rightarrow$

$$E_+ = C_+ + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2 m_+^*} \quad (\text{elektronartig})$$

$$E_- = C_- + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2 m_-^*} \quad (\text{Lochartig})$$

$$m_{\pm}^* = \frac{m}{1 \pm \frac{\hbar^2 (\hbar \pi / a)^2}{m} \frac{1}{|V_G|}}$$

> 1

= starke Bandkrümmung resultiert in kleine effekt. Masse

○ 14.1.4 Fast freie e^- in 2D und 3D

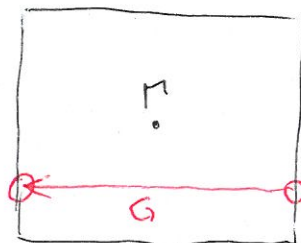
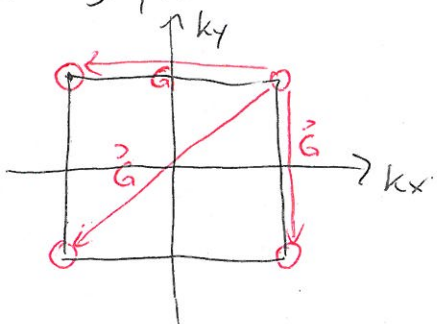
- sehr analog: an BZ-Rändern öffnen sich Bandlücken

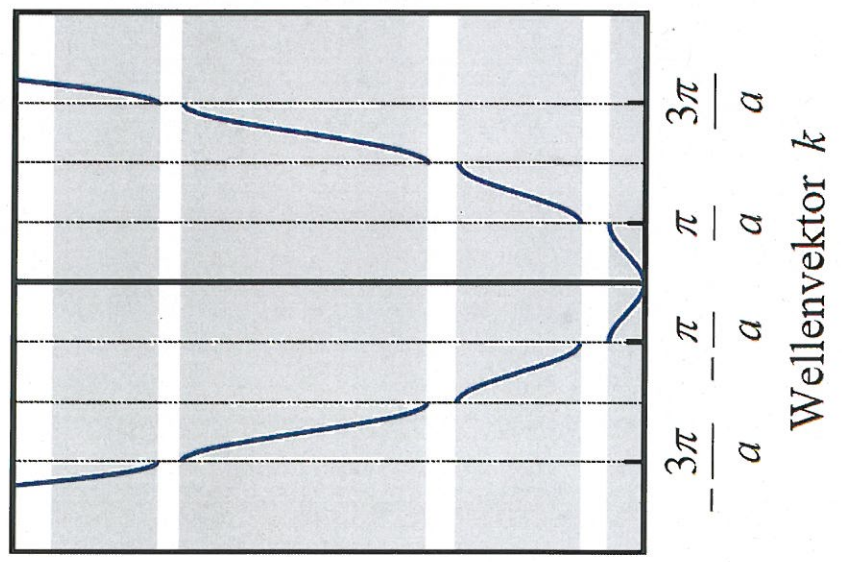
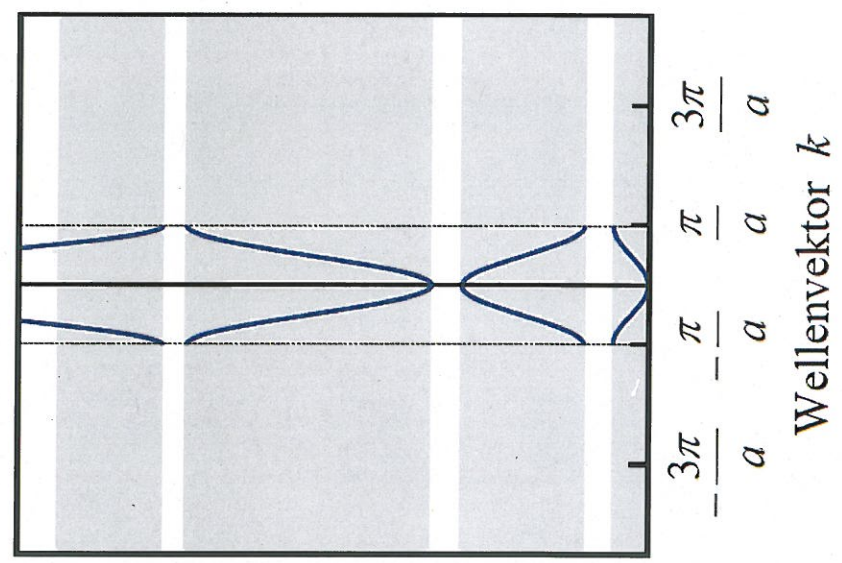
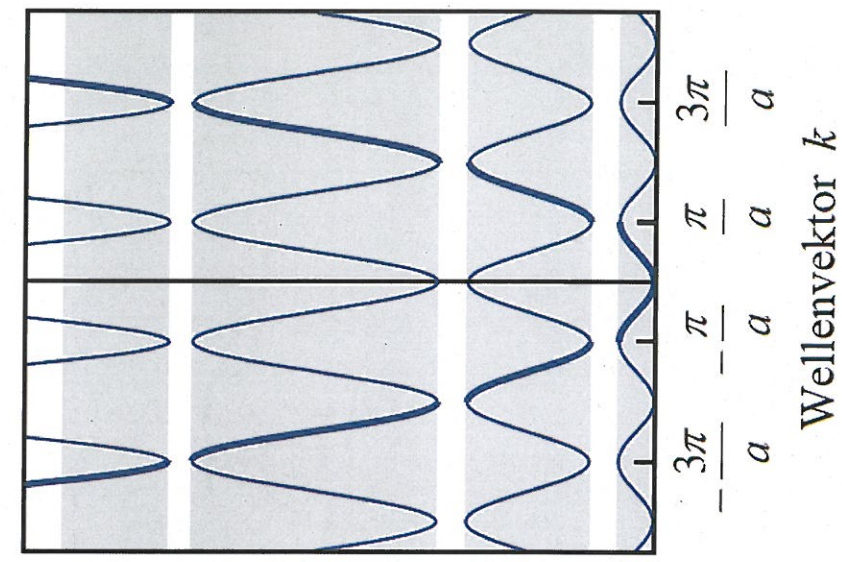
- Unterschiede

1D: nur zwei k -Werte: $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$, $E(\vec{k}') = E(\vec{k})$

2D, 3D: mehrere k -Werte können beitragen

z.B. 2D, kubisches Gitter $\Rightarrow$ 4 Punkte: $(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a})$
mit selber Energie





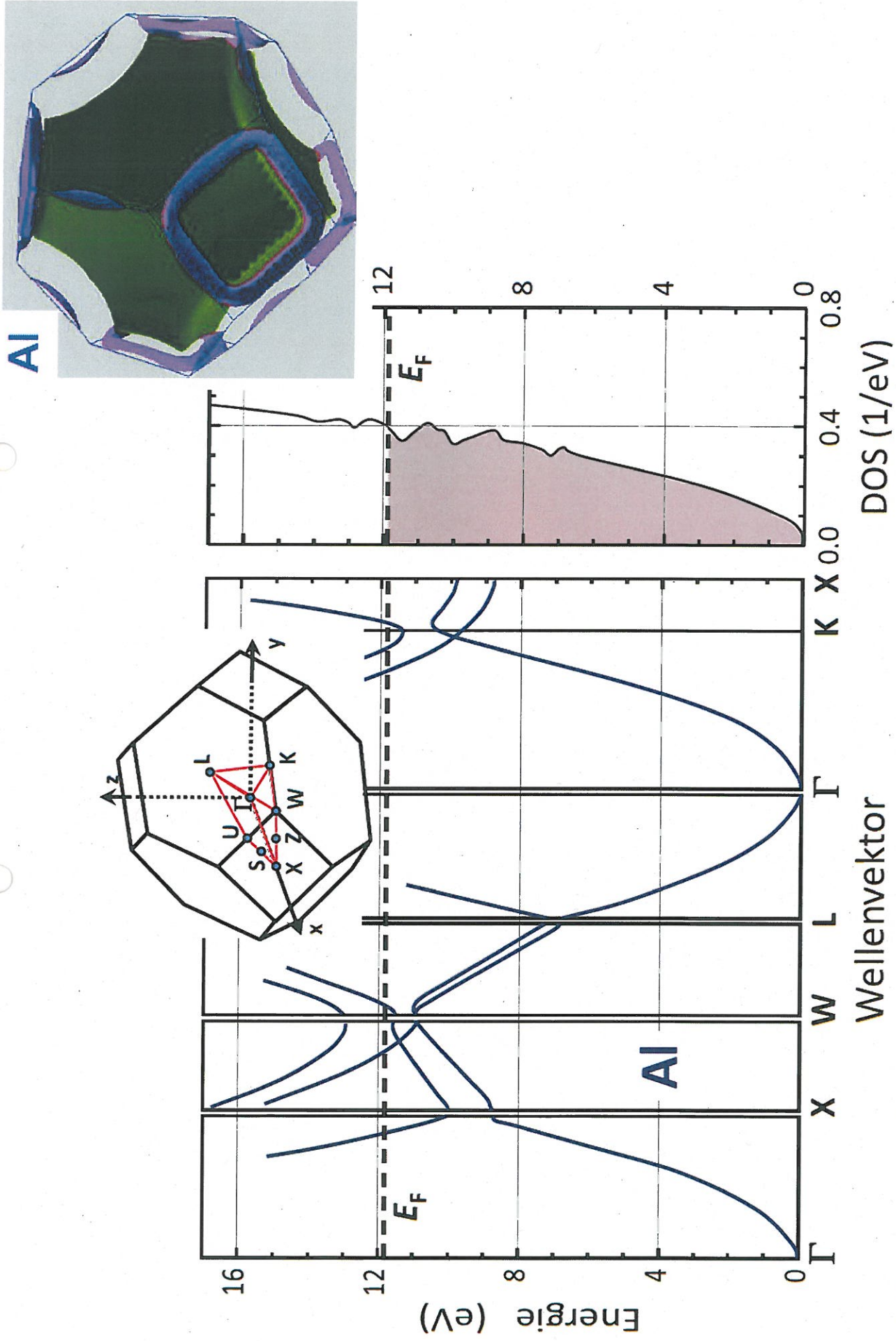
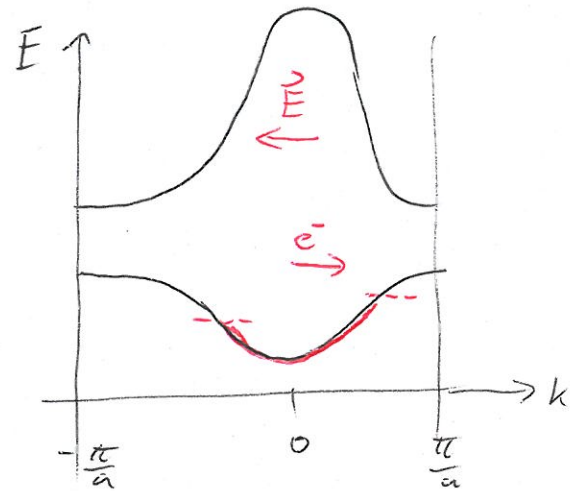
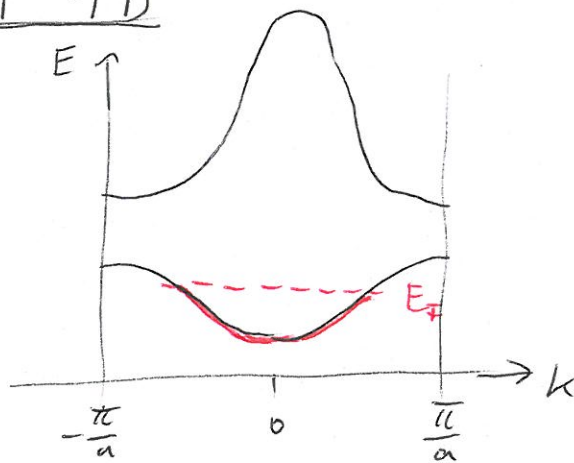


Abb. 8.20: Bandstruktur von Aluminium entlang von Richtungen hoher Symmetrie (links). Der Γ -Punkt ist das Zentrum der 1. Brillouin-Zone (siehe Inset). Die Bandlücken an der Zonengrenzen sind klein und der Bandverlauf kann in weiten Teilen durch parabelförmige Kurven angenähert werden.

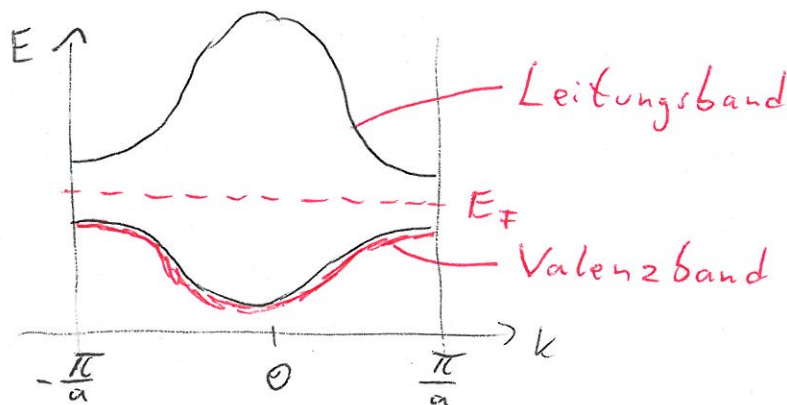
14.2 Füllung von Energiebändern

- im Kap. 10 hatten wir erste Diskussionen über das Füllen von Bandstrukturen

14.2.1 1D



- Anzahl der EZ $\hat{=}$ Anzahl der k-Werte
- für ein Valenz-Elektron $\Rightarrow$ Band halb gefüllt, da Spin $\uparrow \downarrow$
- elektrischer Strom kann fließen, da freie k-Zustände $\Rightarrow$ Metall



- für 2 Valenz-Elektronen ist das Band voll $\Rightarrow$ Band-Isolator
- Bandlücke (gap) zwischen Valenzband und Leitungsband
- Für eine Bandlücke $< 4\text{eV}$ $\Rightarrow$ Halbleiter, da bei 300 K ein paar e^- aktiviert sind $\approx$ freie e^- im Leitungsband
- Chemikersprache: "In einem Bandisolator sind alle e^- in chemischen Bindungen gebunden"

2. B. Kohlenstoff hat 4 Valenz- e^-

Im Diamant ist jedes e^- kovalent zu den 4 Nachbaratomen gebunden

$\Rightarrow$ kovalente Bindung von 2 e^-

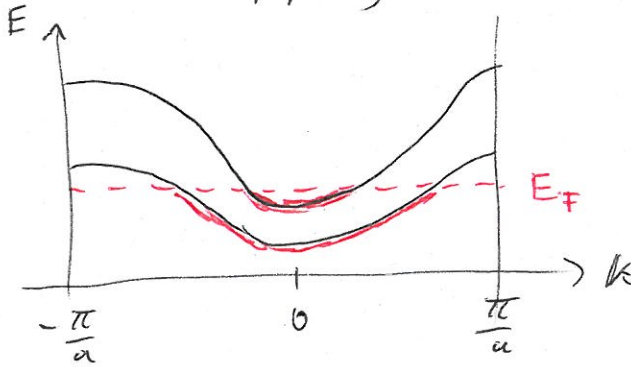
$\Rightarrow$ alle e^- sind fest gebunden

$\Rightarrow$ Isolator

• ein voller Band trägt keinen Strom (keine freien k -Zust)

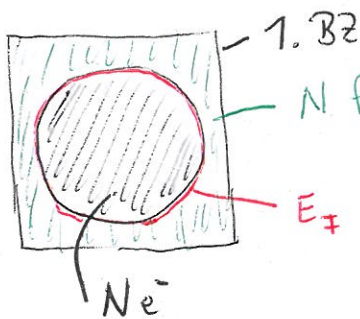
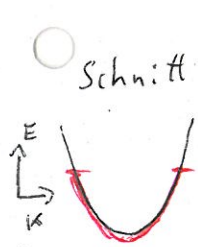
• eine andere Möglichkeit für 2 Valenz- e^- :

Bänderüberlappung: selbst für 2 Valenz e^- ist hier das System metallisch

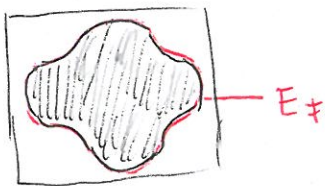


14.2.2 2 D

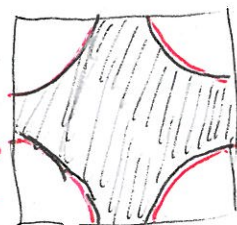
1. Beispiel: kubisch, 1 Valenz- e^-



a) freie e^-
 $\Rightarrow$ die Hälfte der BZ ist gefüllt

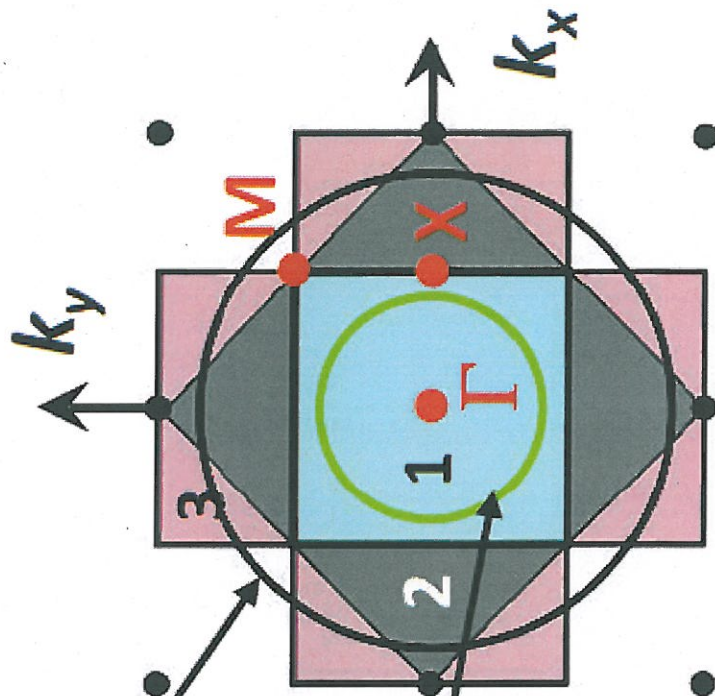
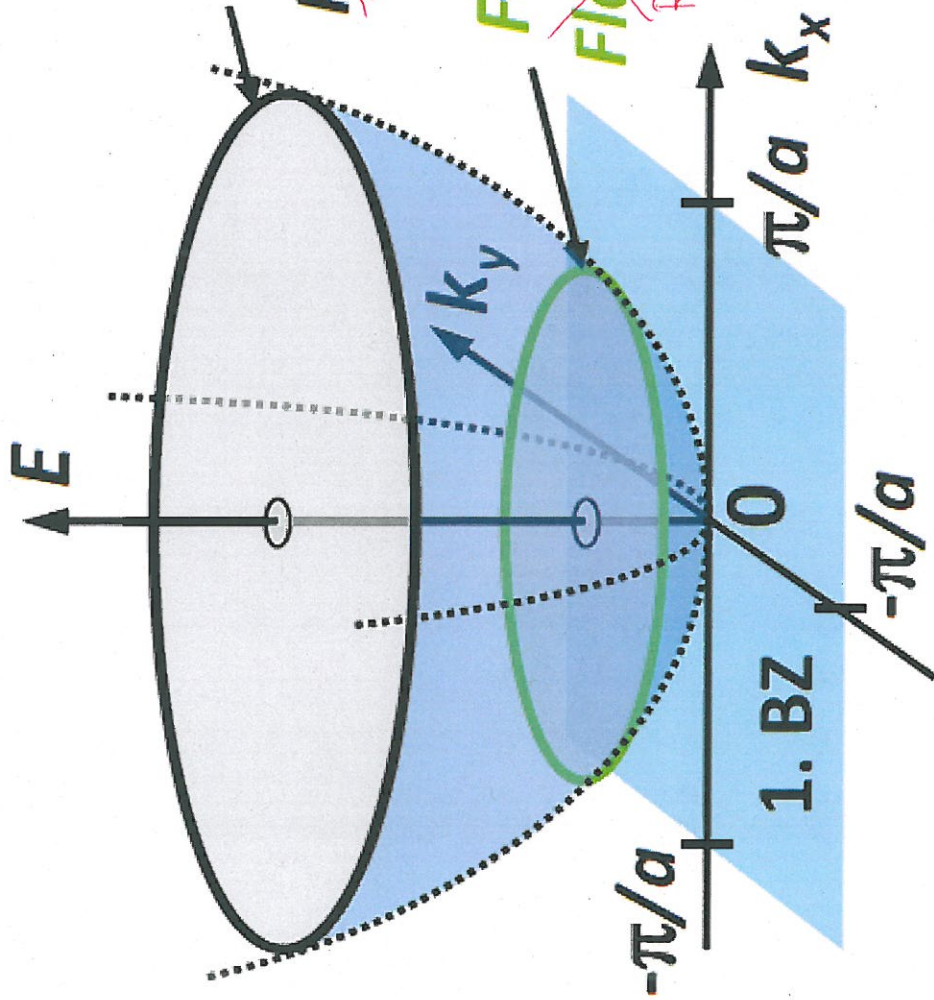


b) mit periodischen Potential
 $\Rightarrow$ Bandlücke am BZ-Rand



c) starkes periodisches Potential
(wenn man links aus der BZ geht, kommt man rechts wieder in die BZ)

Senkrecht zum Rand
Gruppengeschw. ist Null



ausgedehntes
Zonenschema

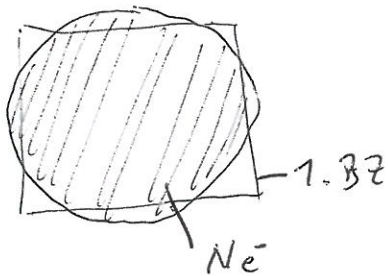
• Bild von 3D: Na, Li, Cu

Na: fast ideales, freies e^- - Metall

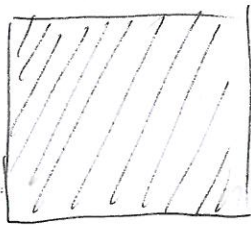
in allen drei Fällen ist die BZ halbgefüllt, da es monovalente Metalle sind

2. Beispiel: Kubisch, 2D, 2 Valenze e^-

$\Rightarrow 2 e^-$ ist genügend, um BZ auszufüllen



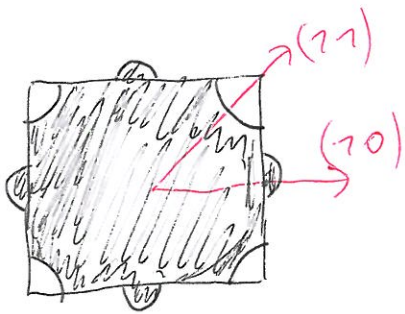
a) freie e^-



b) starkes periodisches Potential

$\Rightarrow$ große Bandlücke

$\Rightarrow$ BZ ist voll $\Rightarrow$ Isolator



c) schwaches period. Potential

$\Rightarrow$ Metall

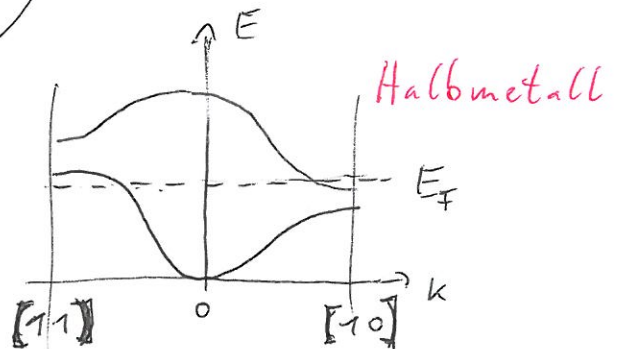
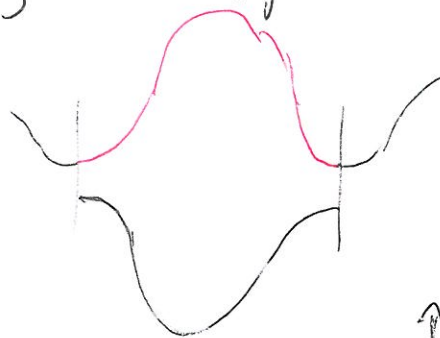
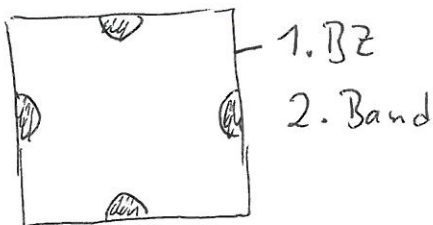
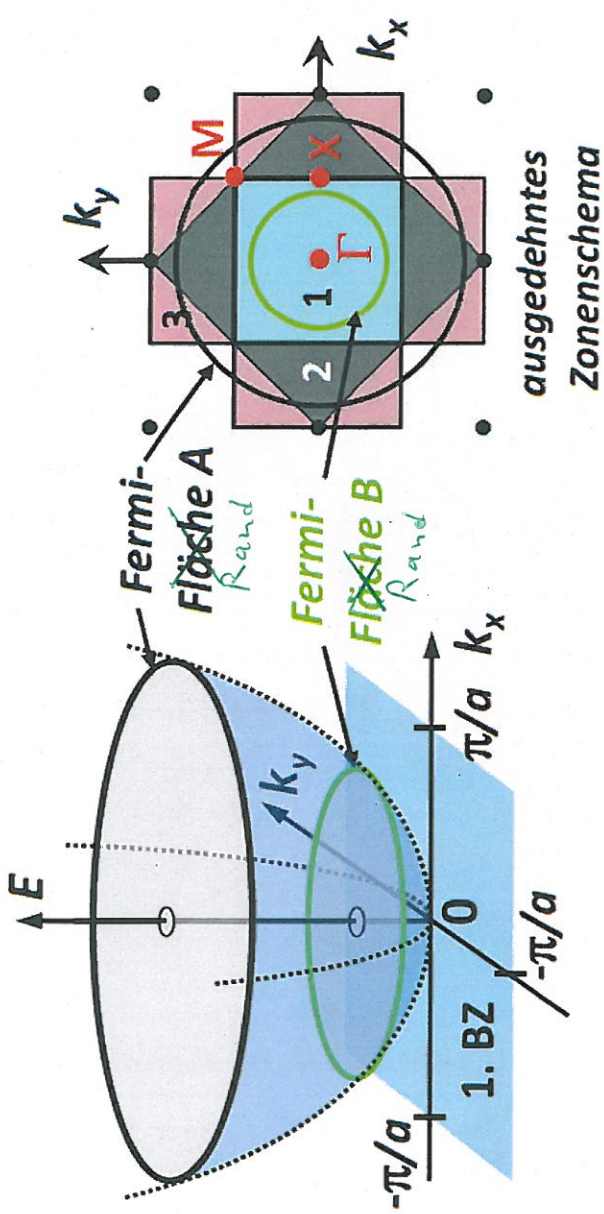


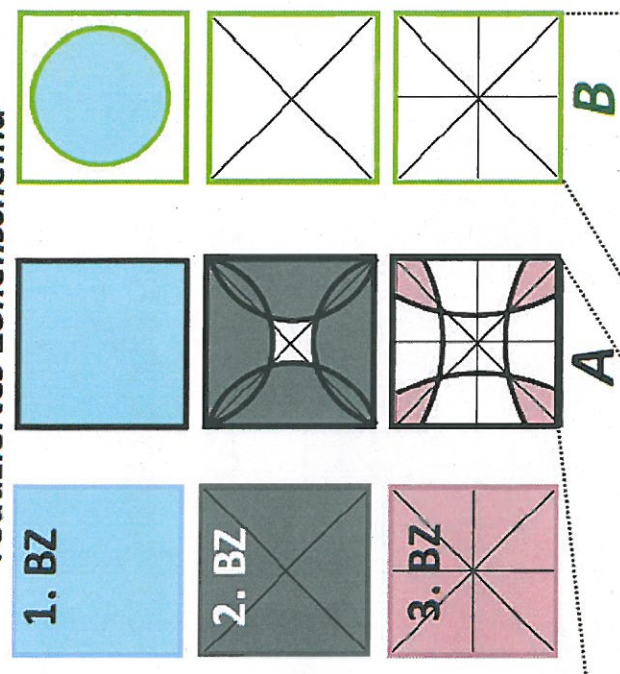
Bild 16.7 3D: Calcium

• für Materialien mit vielen Atomen pro BZ, muß man die Gesamtvalenz von allen Atomen zählen

- wenn geradzahlig und starkes Potential $\Rightarrow$ Bandisolator



reduziertes Zonenschema

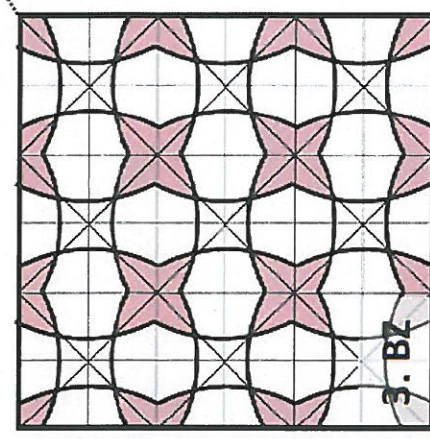
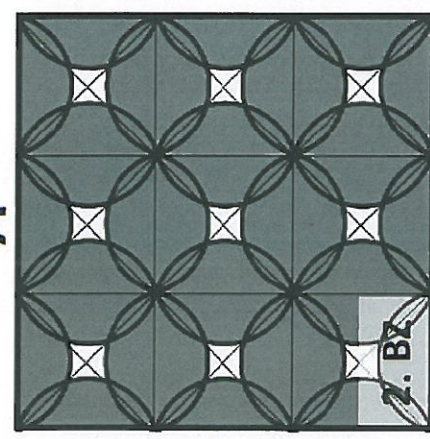
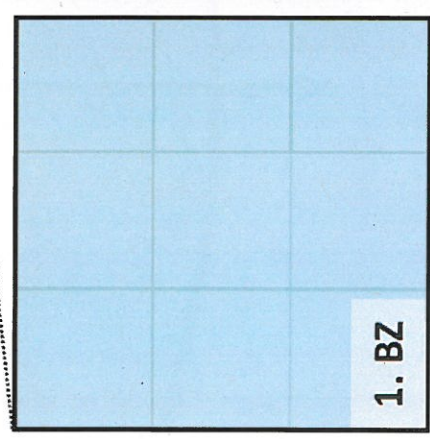


A

B

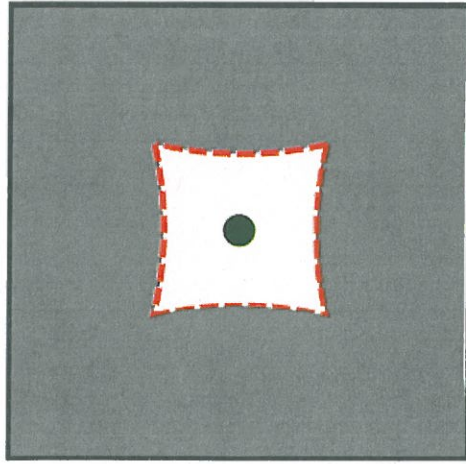
A

B

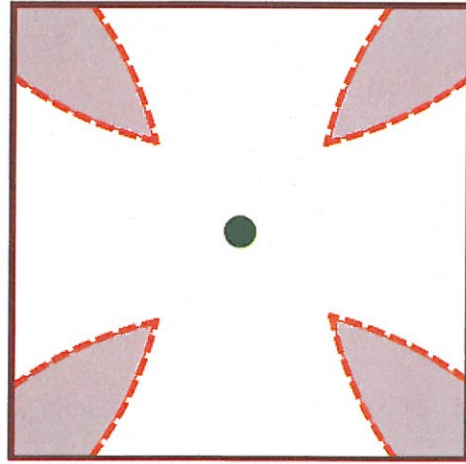


periodisches Zonenschema

2. BZ



3. BZ

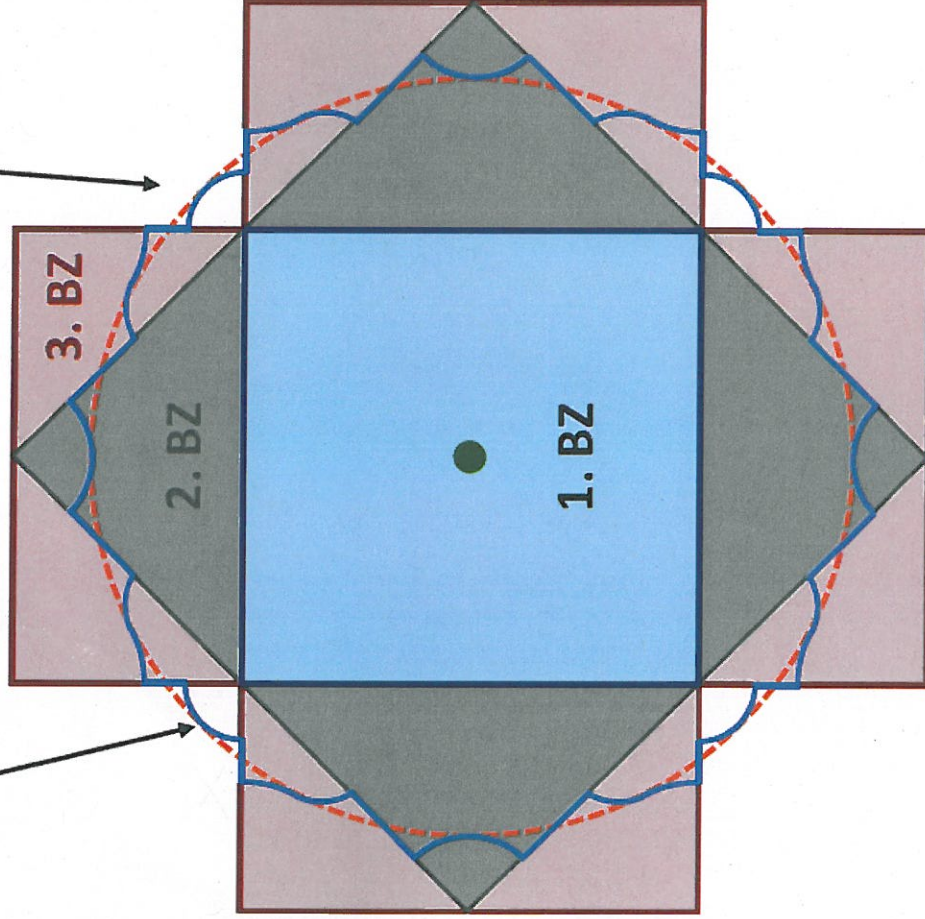


freie Elektronen

Fermi-Fläche

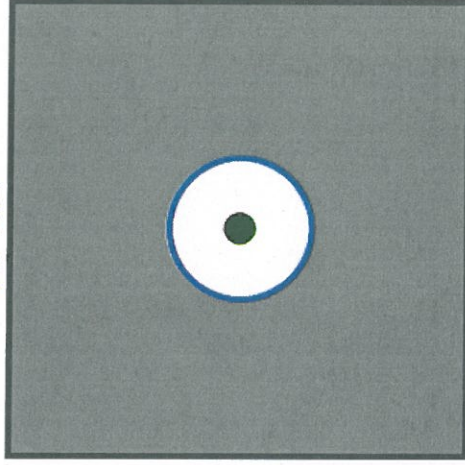
freie Elektronen

Kristallelektronen

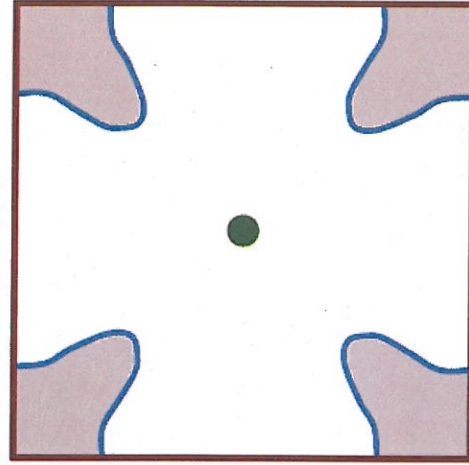


ausgedehntes Zonenschema

2. BZ



3. BZ



Kristallelektronen

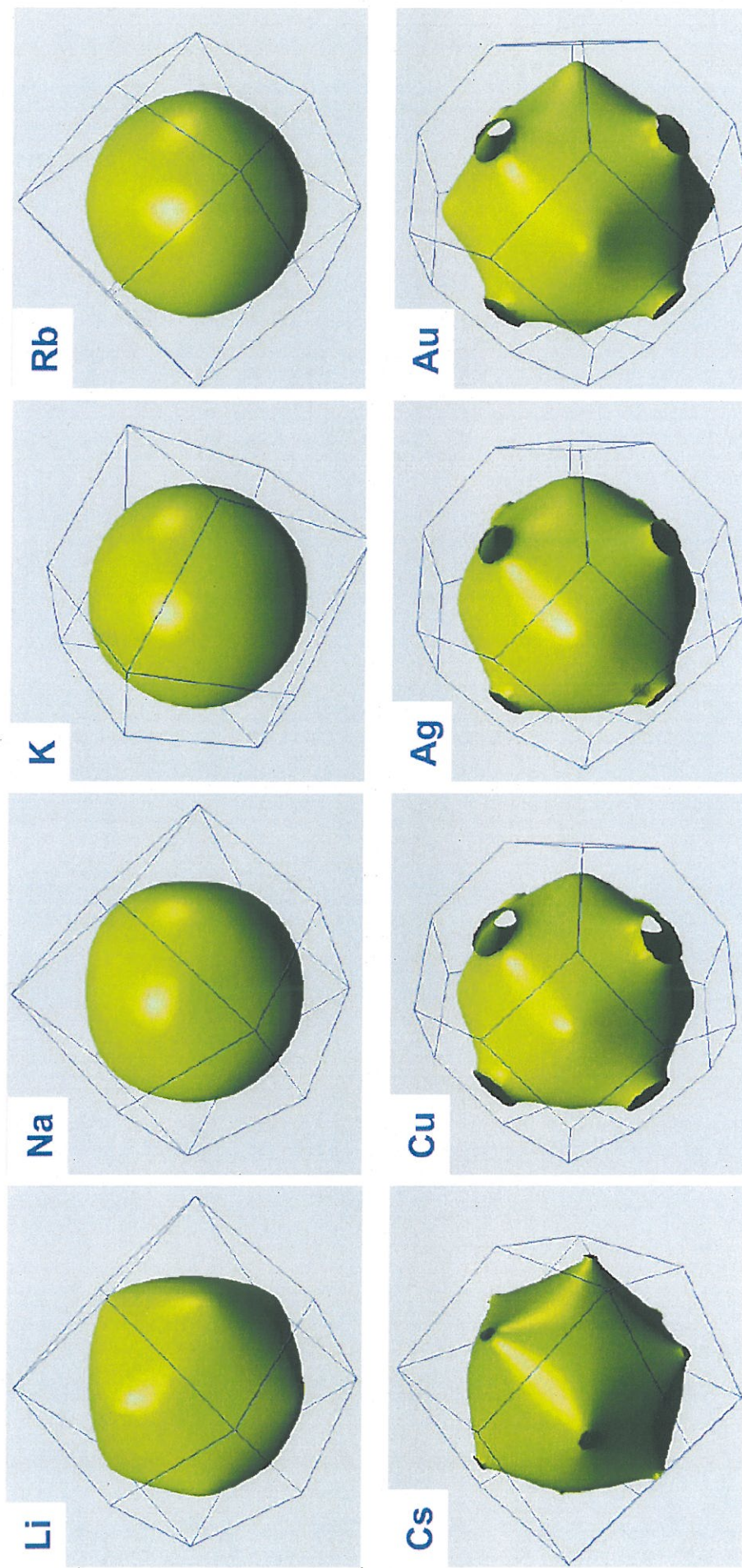


Abb. 8.27: Fermi-Flächen von einfachen Metallen. Die Alkali-Metalle kristallisieren in einem bcc-Gitter, Cu, Ag und Au in einem fcc-Gitter (Quelle: T.-S. Choy, J. Naset, J. Chen, S. Hershfield, C. Stanton, *A database of fermi surface in virtual reality modeling language (vrml)*, Bull. Am. Phys. Soc. 45, L36 42 (2000)). Die Linien deuten die 1. Brillouin-Zone an, die für ein bcc-Gitter ein rhombisches Dodekaeder und für ein fcc-Gitter ein abgestumpfter Oktaeder mit 8 Sechsecken und 6 Quadraten ist (vergleiche Abb. 2.4).

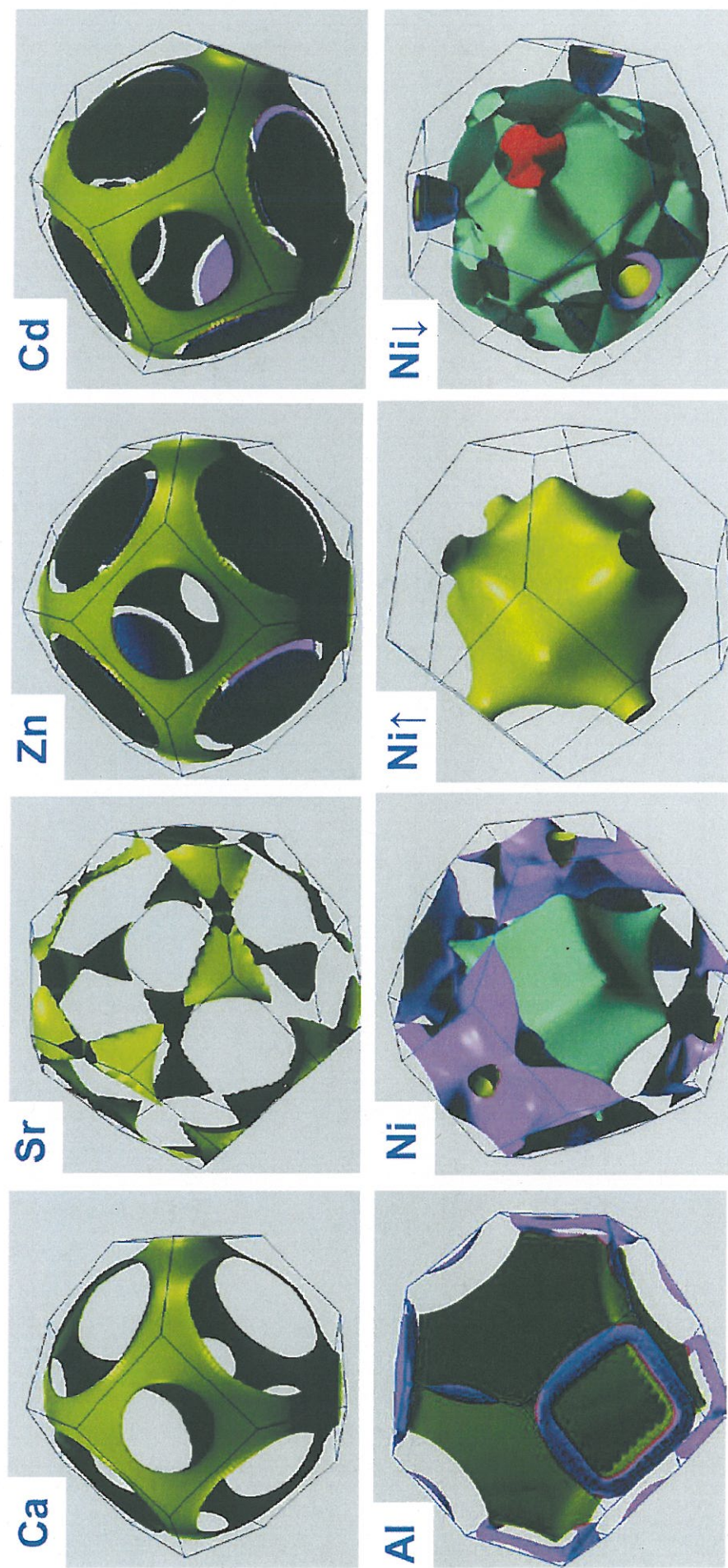


Abb. 8.28: Fermi-Flächen von komplexeren Metallen. Die Erdalkali-Metalle Ca und Sr kristallisieren in einem fcc-Gitter. Zn und Cd kristallisieren eigentlich in der hcp-Struktur, gezeigt ist allerdings die Fermi-Fläche für eine fcc-Struktur, um einen Vergleich zu Ca und Sr zu ermöglichen. Gezeigt sind ferner die Fermi-Flächen von Al (fcc-Struktur) und Ni (fcc-Struktur) gemittelt über beide Spin-Richtungen und für jede Spin-Richtung getrennt (Quelle: T.-S. Choy, J. Naset, J. Chen, S. Hershfield, C. Stanton, *A database of fermi surface in virtual reality modeling language (vrml)*, Bull. Am. Phys. Soc. 45, L36 42 (2000)).

Si und Diamant haben die selbe Struktur:

fcc mit Basis $[0,0,0], [\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$

SiC auch selbe Struktur

Si und C haben
Valenz 4

Si hat keine Energielücke, warum?

$\Rightarrow 8e^-$ pro EZ, da
2 Atome in EZ

- Streuung von X zu -X-Punkt

Miller: $(200) \rightarrow (\bar{2}00)$ -Streuung

(Eq. 13.13)

$$S = \underbrace{\int_{\text{Gitter}}}_{\text{Auswahlregel}} \cdot \int_{\text{Basis}}$$

$\sim (200)$

nur alle gerade/ungerade

(13.11)

$$S_{(hkl)} = \sum_{\substack{\text{atom } j \\ \text{EZ}}} f_j e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)}$$

$$\Rightarrow \int_{\text{Basis}} = f_{\text{Si}} + f_{\text{Si/C}} \cdot e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}$$

$$= -1 \text{ für } (hkl) = (200)$$

$$\Rightarrow S_{\text{Basis}} = 0 \text{ für Si}$$

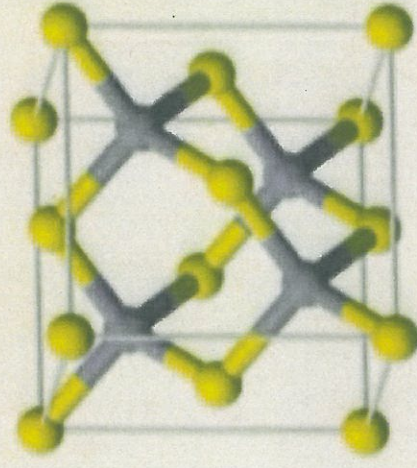
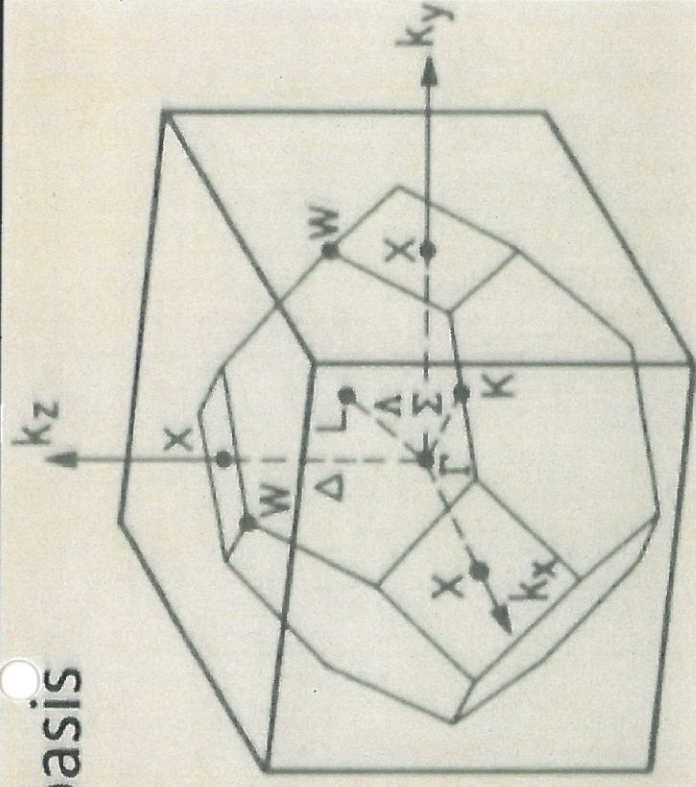
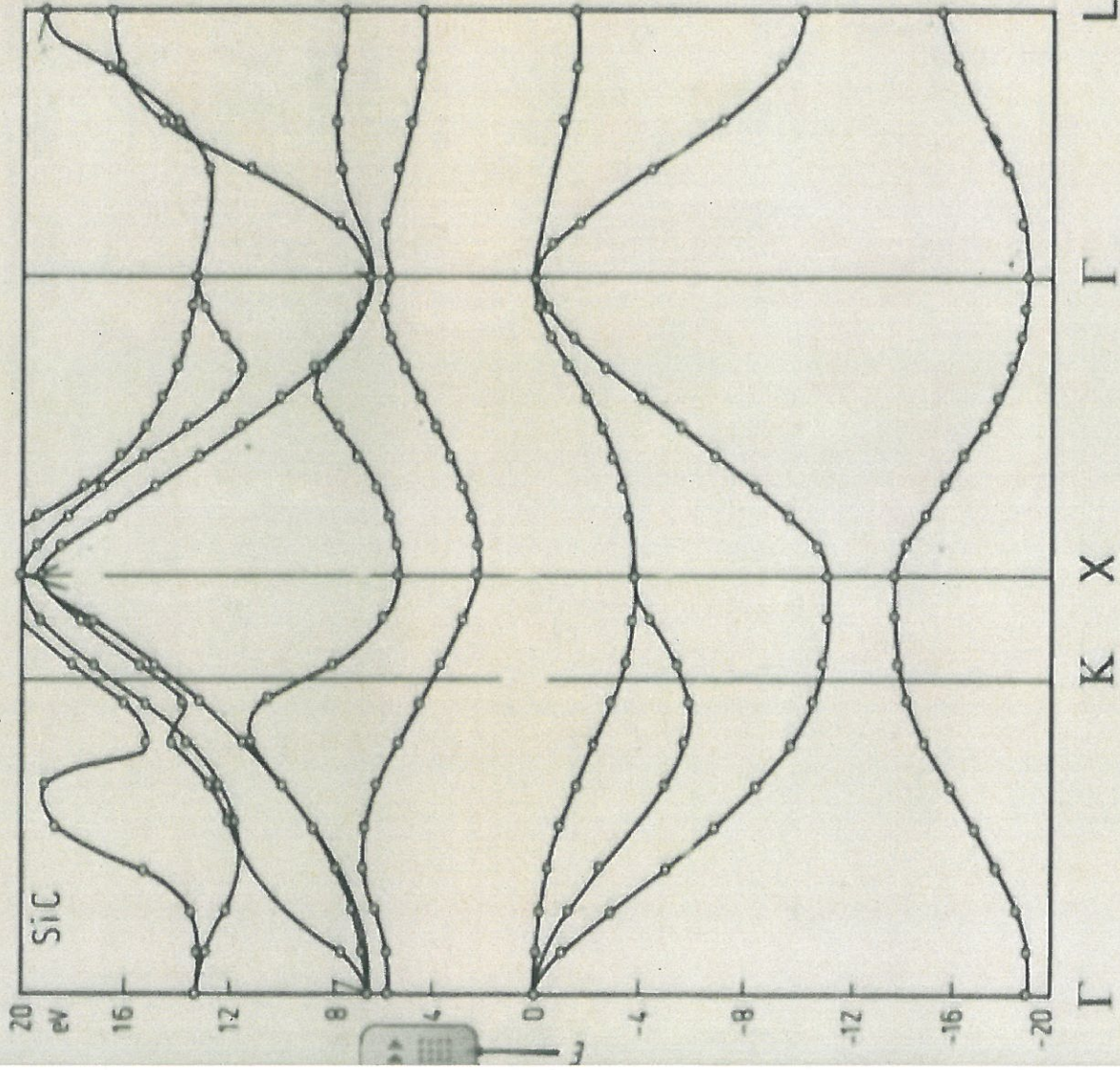
$$S_{\text{Basis}} \neq 0 \text{ für SiC}$$

↓
destruktive Interf.
der zwei Si-Atome

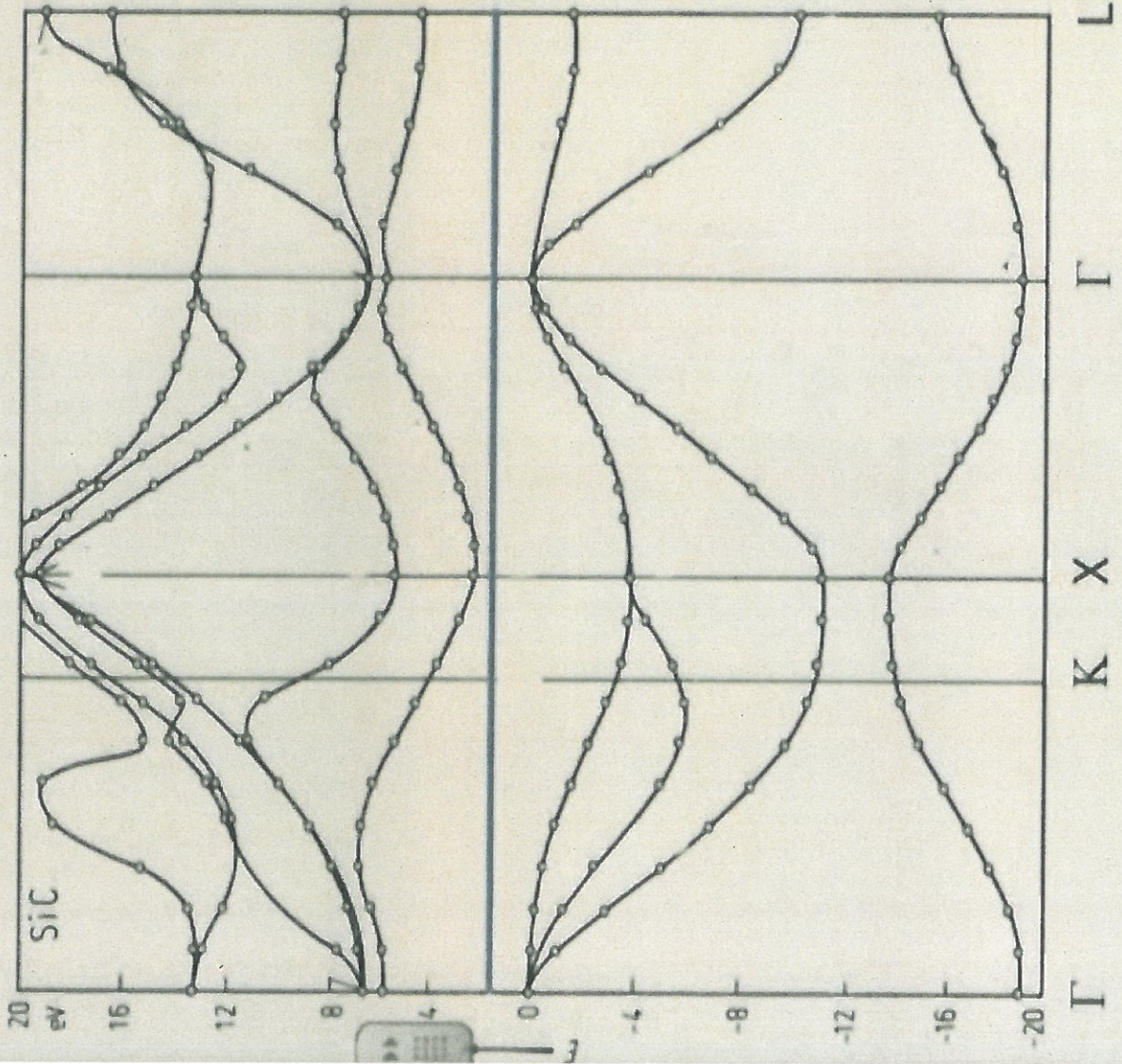
$\Rightarrow$ dies gilt auch für Phononen

6 Phononen zweige da 2 Atome in Basis, + 3 Richtungen

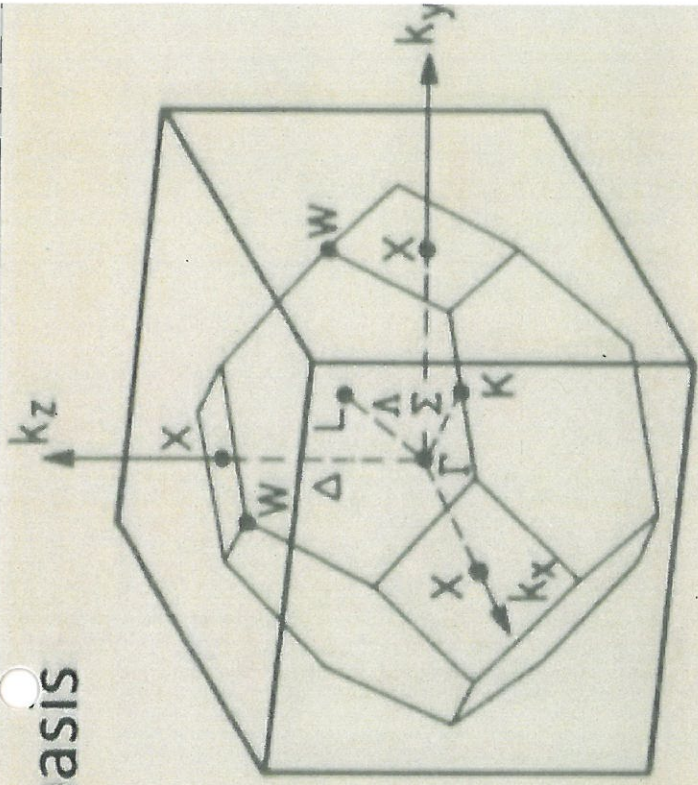
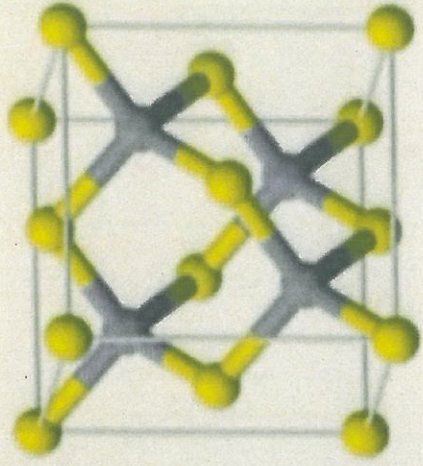
Silicon Carbide = FCC with a 2-atom basis
 Si @ $[0,0,0]$ and C @ $[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$



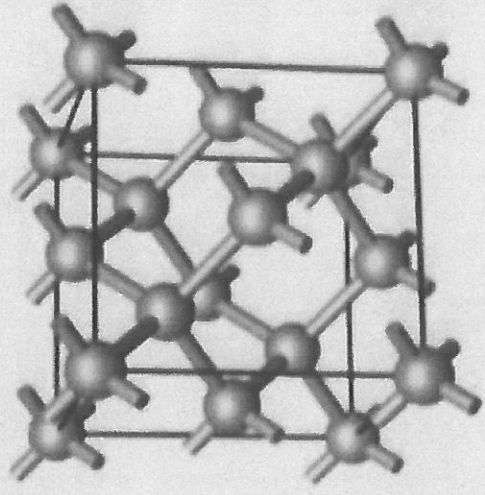
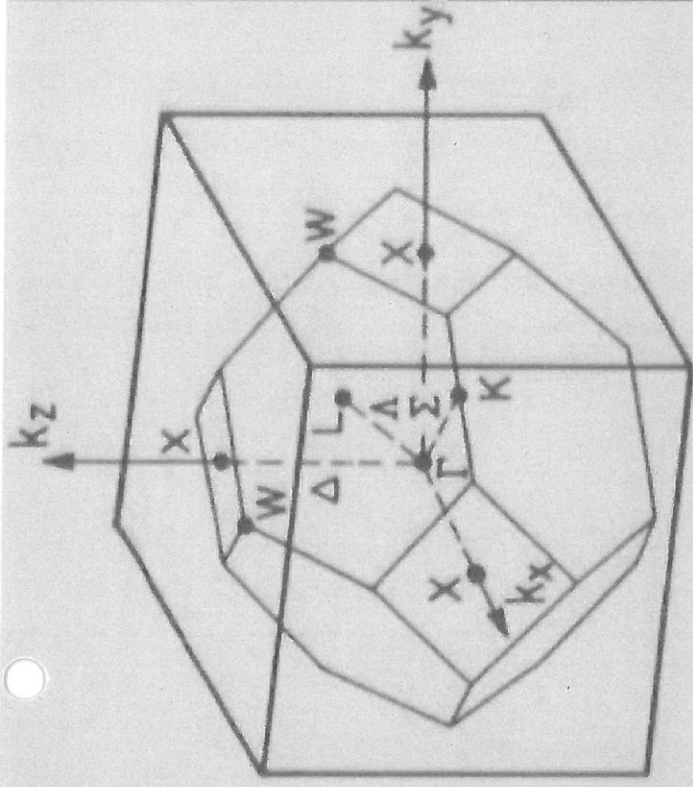
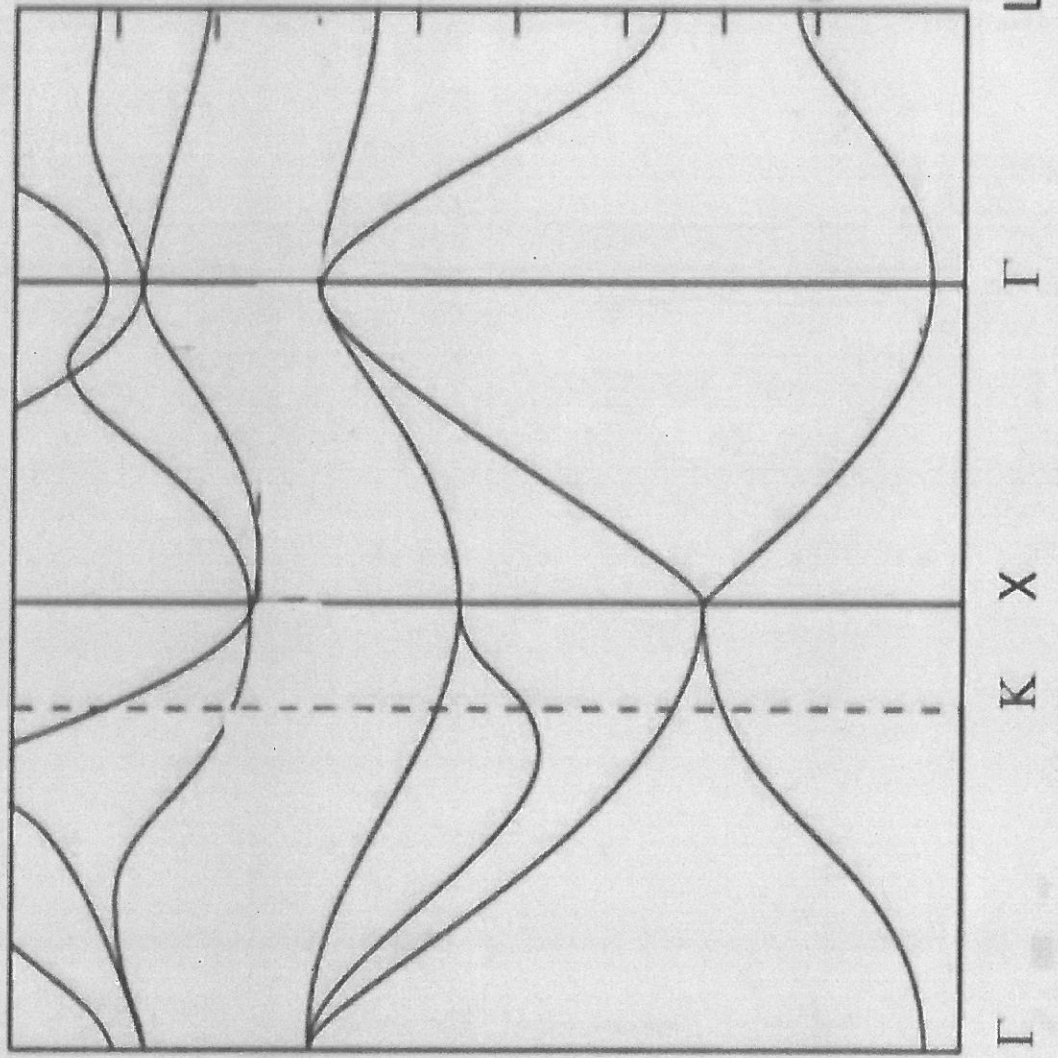
Silicon Carbide = FCC with a 2-atom basis
 Si @ $[0,0,0]$ and C @ $[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$



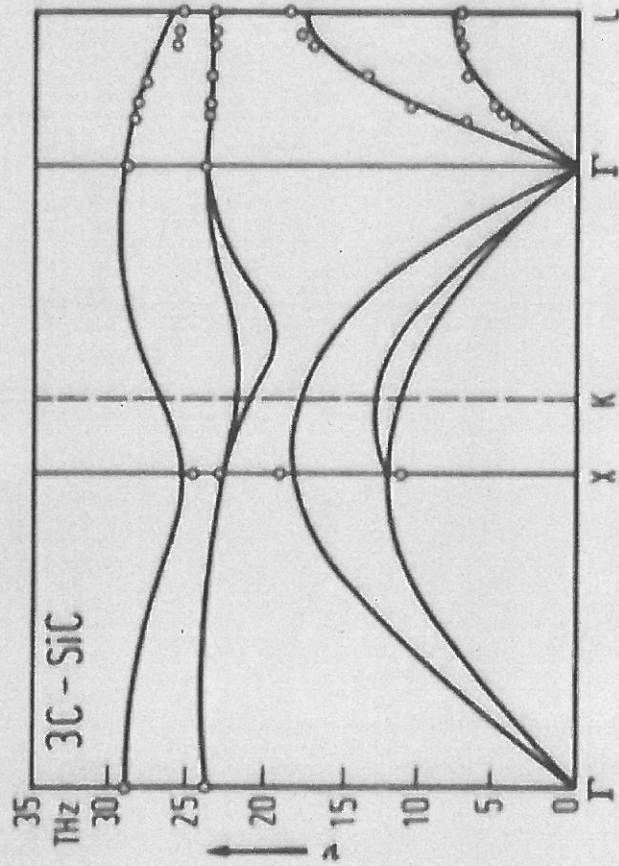
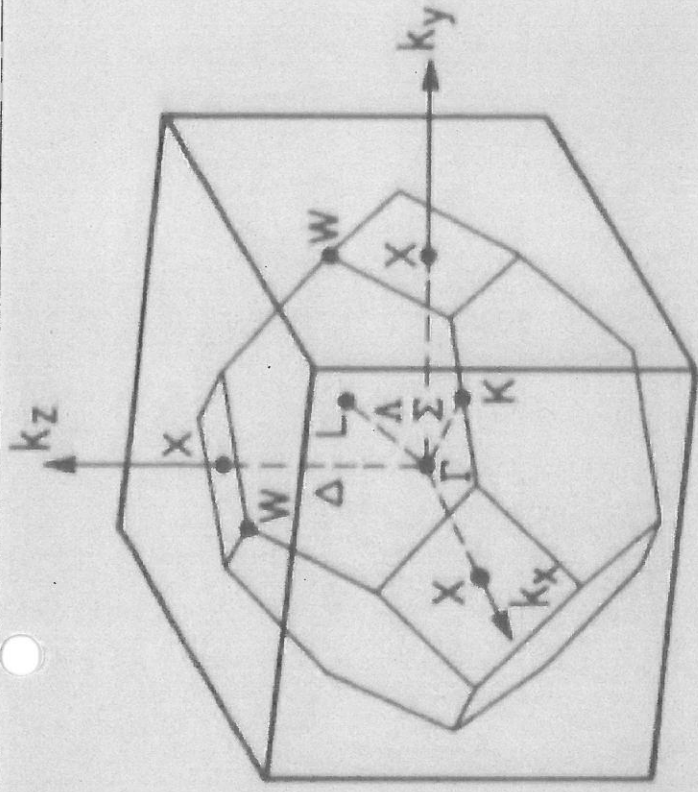
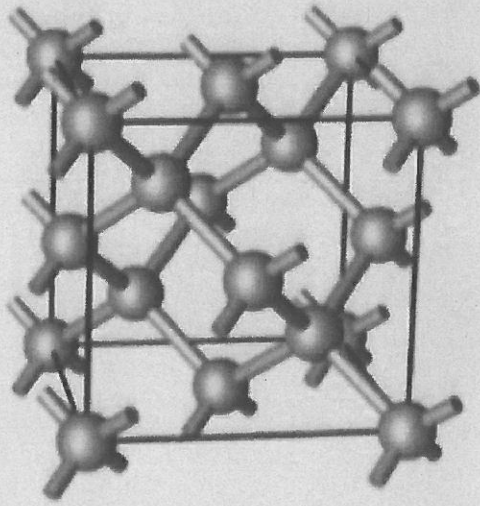
E_F



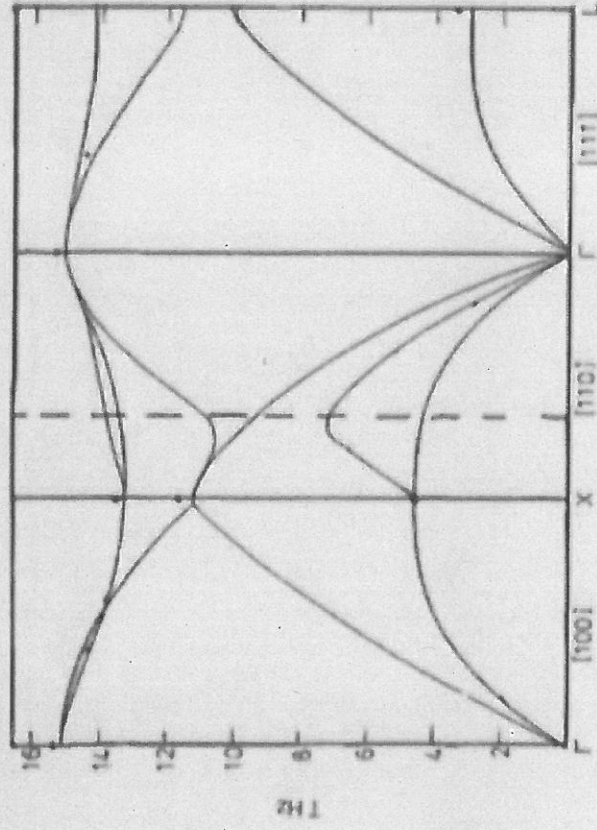
Silicon = FCC with a 2-atom basis
 Si @ $[0,0,0]$ and Si @ $[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$



Silicon = FCC with a 2-atom basis
 Si @ $[0,0,0]$ and Si @ $[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$



Silicon Carbide Phonons



Silicon Phonons

• Qualitative Eigenschaften bzgl. e^- im periodischen Potential

- 1) An BZ-Rändern treten Energielücken auf
- 2) Fermi-Fläche durchtritt senkrecht die Zonengrenze
- 3) Das periodische Potential rundet die scharfen Ecken und Kanten der Fermifläche ab
- 4) Das von der Fermifläche umschlossene Volumen hängt nur von der Elektronenkonzentration ab (unabhängig vom Verlauf des period. Pot.)

14.3 Bloch Theorem (1928)

- bisher hatten wir "fast freie Elektronen" ~~die schon~~ mit schwacher periodischer Störung
- die meisten Materialien haben aber starke periodische Potential $\Rightarrow$ Störungsrechnung nicht möglich
- können wir e^- trotzdem mit ebene Wellen beschreiben?
- der Impuls der ebene Welle ist nicht erhalten, aber der Kristall-Impuls, selbst für sehr starke Potentiale
- Felix Bloch hat dies in seiner Doktorarbeit 1928 entdeckt, kurz nach der Entdeckung der Schrödingergl.

Elektronen in Atom
4 Quantenzahlen
 n, l, m_l, m_s

Bloch Theorem

Ein Elektron in einem periodischen Potential hat folgende Eigenzustände

$$\psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r})$$

Indexation der Zustände mit $\vec{k}, \alpha, \text{spin}$

$u_{\vec{k}}^{\alpha}$ ist periodisch in der EZ (heißt Bloch-Funktion)...

$\vec{k}$ kann in der 1. BZ gewählt werden

α nummeriert die Bänder in der 1. BZ

$\psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r})$: modifizierte ebene Welle

Da $u_{\vec{k}}^{\alpha}$ die Bloch-Fkt $u_{\vec{k}}^{\alpha}$ periodisch ist, kann sie in einer Fourier-Reihe entwickelt werden

$$u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{u}_{\vec{G}, \vec{k}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

man sieht $u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r} + \vec{R})$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{u}_{\vec{G}, \vec{k}} e^{i(\vec{G} + \vec{k})\vec{r}} \quad (14.13)$$

$\Rightarrow$ jeder Eigenzustand kann durch eine Summe von ebene Wellen $\vec{k}$ darstellen, die sich nur um den reziproken Gittervektoren $\vec{G}$ unterscheiden

Wir sehen jetzt sofort, warum $\langle k' | V | k \rangle = 0$ außer wenn $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$

- Lösung der Schrödinger-gl. für periodische Potentiale

- Bild Abb. 8.2: Gross und Marx $\Rightarrow$ Indexation des Zustats
avec k, α, Spin

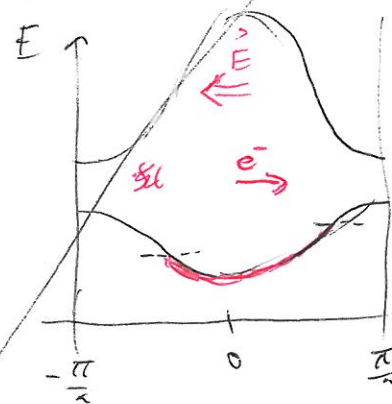
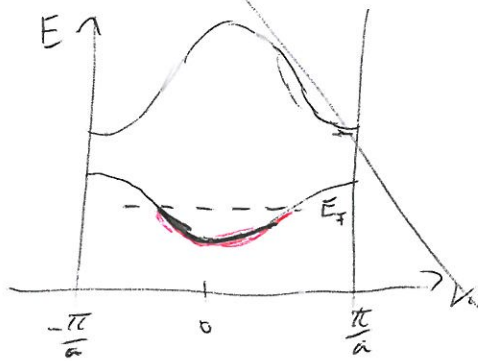


15. Insulator, Halbleiter, Metall

- in Kap. 10 hatten wir das tight binding model und erste Diskussion über ^{füllen von} Bandstrukturen

- Kap. 14 haben wir ähnliche Bandstrukturen gefunden

15.1 Energiebänder in 1D

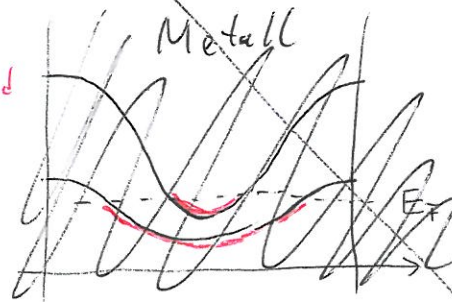
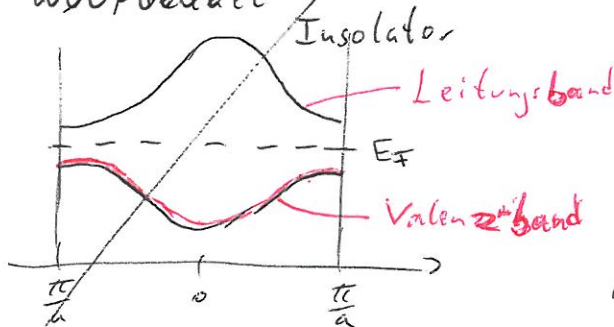


- Anzahl der EZ $\Rightarrow$ Anzahl der k -Werte

- für 1 Valenz-Elektron $\Rightarrow$ Band halb gefüllt, da Spin $\uparrow\downarrow$

- Strom kann fließen, da freie k -Zustände $\Rightarrow$ Metall

~~Metall~~

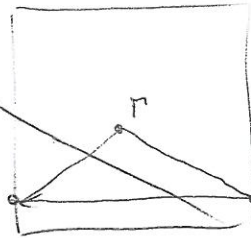
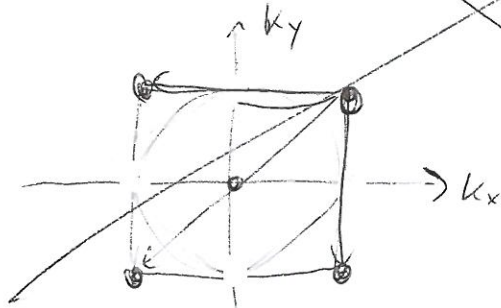


- für 2 Valenz-Elektron ist das Band voll $\Rightarrow$ ~~Metall~~
 $\Rightarrow$ Band-Insulator

- Für ein Bandlücke $< 4\text{eV} \Rightarrow$ Halbleiter, da bei ~~Zimmer~~ 300K ein paar e^- aktiviert sind $\Rightarrow$ freie Elektronen

Fast freie e^- in 2D, 3D

- sehr analog: am BZ-Rand öffnet sich eine Bandlücke
 - wichtiger Unterschied:
 - in 1D nur ein $\vec{k}'$ mit $\vec{k} - \vec{k}' = G$, $E(\vec{k}') = E(\vec{k})$
 - in 2D, 3D können mehrere $\vec{k}'$ beitragen
- z.B. 2D, kubischer Gitter $\Rightarrow$ 4 Punkte: $(\pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{\pi}{a})$



NB: Bandlücken am BZ-Rand ist ein allgemeines wird auch in anderen Systemen beobachtet.

z.B. Licht in Photonische Kristalle, Farbe der Schmetterlinge: mikronische Strukturen führen zu Bandstrukturen

die freie Licht Dispersion $\hbar\omega = \hbar c |\vec{k}|$ ist durch ein periodische Medium modifiziert die entstehenden Bandlücken können für "perfekte Spiegel" benutzt werden

Für ~~sehr~~ Photonenfrequenzen in der Bandlücke kann kein Licht ~~aufgenommen~~ ^{durchgelassen} werden $\Rightarrow$ durchgelassenes Licht hat destruktive Interferenz