

Zusammenfassung: Zustandsdichten, Bandstrukturen (NFE-Ansatz)

1-dimensionaler Fall (ohne Kernpotentiale)

Kinetische Energie der Elektronen:
 $(\hat{H} - E)\psi(x) = 0$ bzw. $(\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\delta^2}{\delta x^2} - E)\psi(x) = 0$

Lösungen:

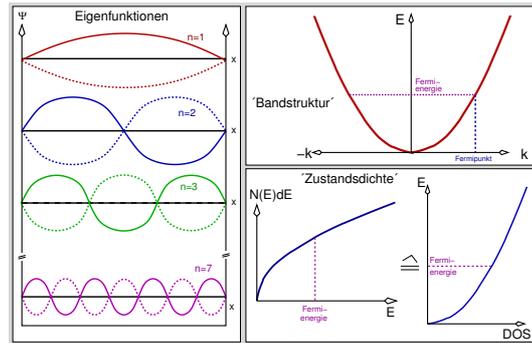
(1) Energieeigenwerte

(Quantenzahl n, 'Kastenlänge' L):

$E = \frac{\hbar^2 n^2}{8m_e L^2}$ bzw. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ mit $k = \pm \frac{2\pi}{L} n$

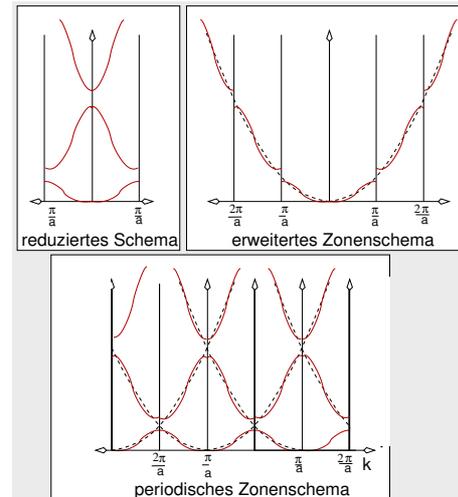
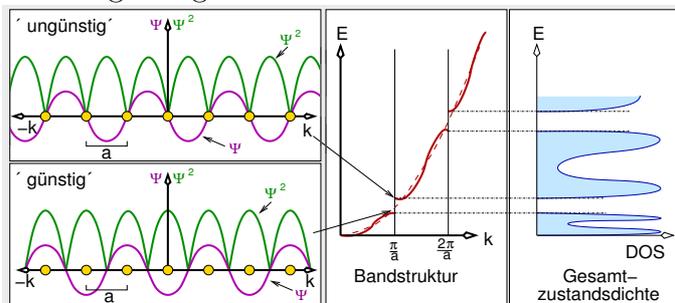
(2) Eigenfunktionen: $\psi = e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx$

1-dimensionaler Fall (mit Kernpotentialen)



Darstellungen der Bandstruktur:

für $\lambda = 2a$ (mit $k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow k = \frac{\pi}{a}$) \mapsto 'günstige' und 'ungünstige' Coulomb-WW \mapsto Bandlücke



2-dimensionaler Fall

