

3. NFE-Ansatz

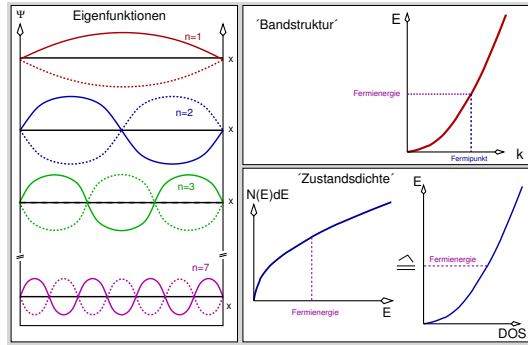
3.1. 1-dimensionaler Fall (ohne Kernpotentiale)

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:

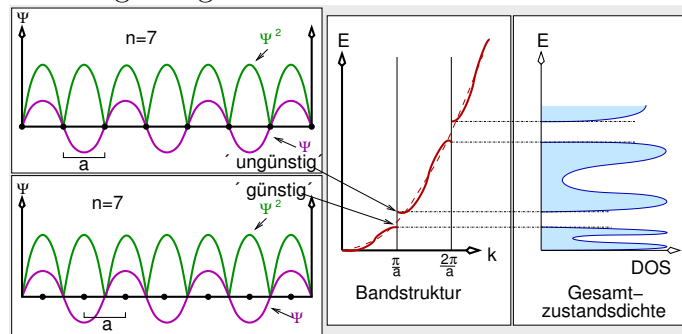
(1) Energieeigenwerte
 (Quantenzahl n, 'Kastenlänge' L):
 $E = \frac{\hbar^2 n^2}{8m_e L^2}$ bzw. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ mit $k = \pm \frac{2\pi}{L} n$

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

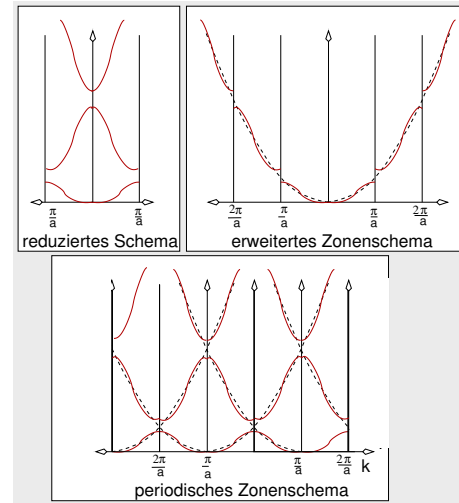


3.1. 1-dimensionaler Fall (mit Kernpotentialen)

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



Darstellungen der Bandstruktur:



3.2. 2-dimensionaler Fall

