

II. NFE-Ansatz

1-dimensionaler Fall (ohne Kernpotentiale)

Kinetische Energie der Elektronen:

$$(\hat{H} - E)\psi(x) = 0 \text{ bzw. } \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\delta^2}{\delta x^2} - E\right)\psi(x) = 0$$

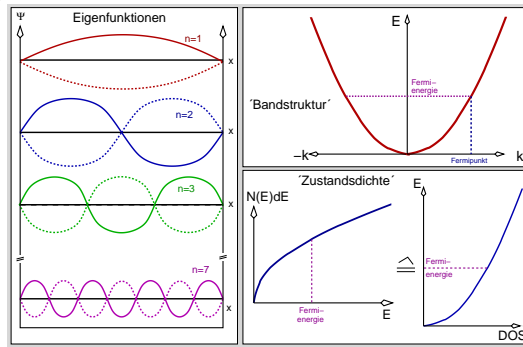
Lösungen:

(1) Energieeigenwerte

(Quantenzahl n, 'Kastenlänge' L):

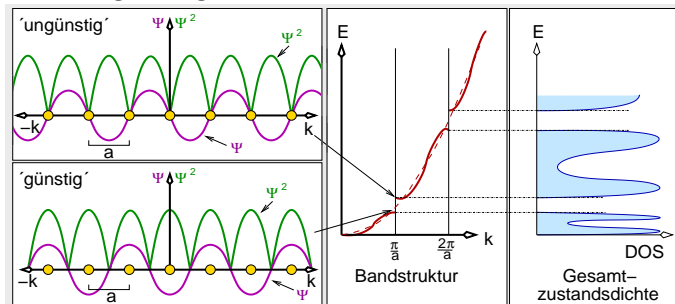
$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{8m_e L^2} \text{ bzw. } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \text{ mit } k = \pm \frac{2\pi}{L} n$$

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

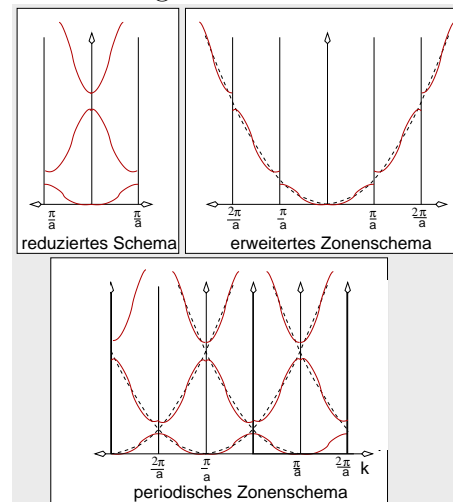


1-dimensionaler Fall (mit Kernpotentialen)

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:



2-dimensionaler Fall

