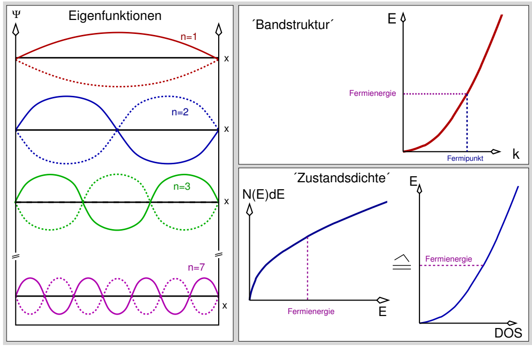
3. NFE-Ansatz

3.1. 1-dimensionaler Fall (ohne Kernpotentiale)

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



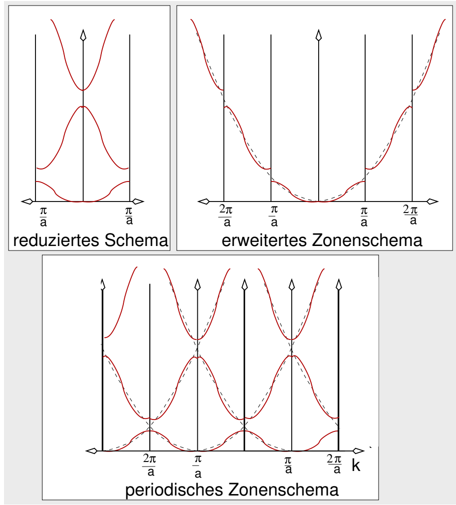
Lösungen:

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

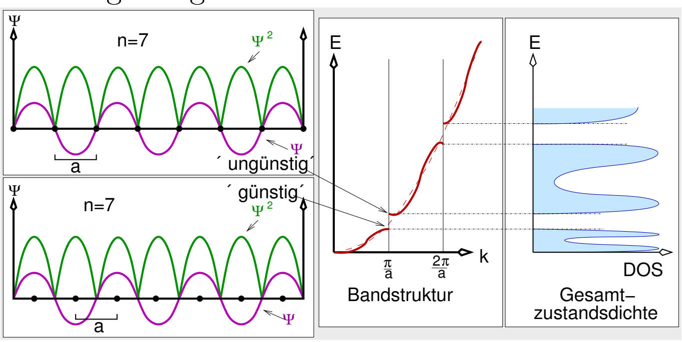
(2) Eigenfunktionen: $\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{ikx}} = \cos \mathrm{kx} + \mathrm{i} \sin \mathrm{kx}$

3.1. 1-dimensionaler Fall (mit Kernpotentialen)

Darstellungen der Bandstruktur:



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



3.2. 2-dimensionaler Fall