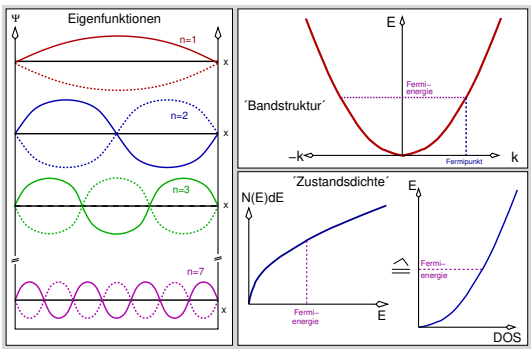
Zusammenfassung: Zustandsdichten, Bandstrukturen (NFE-Ansatz)

1-dimensionaler Fall (ohne Kernpotentiale)



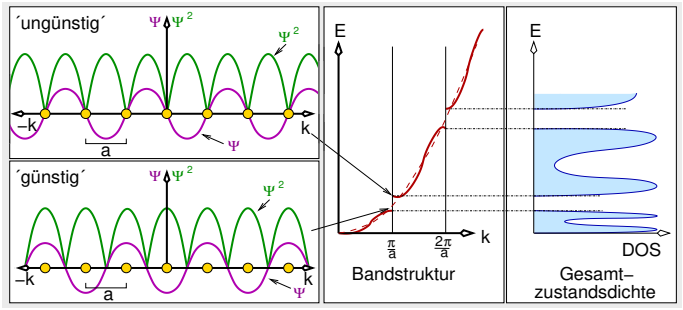
Kinetische Energie der Elektronen:
$(\hat{H} - E)\psi(x) = 0$ bzw. $(\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\delta^2}{\delta x^2} - E)\psi(x) = 0$

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

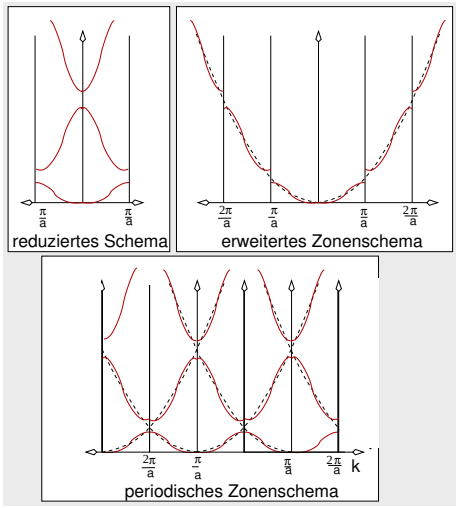
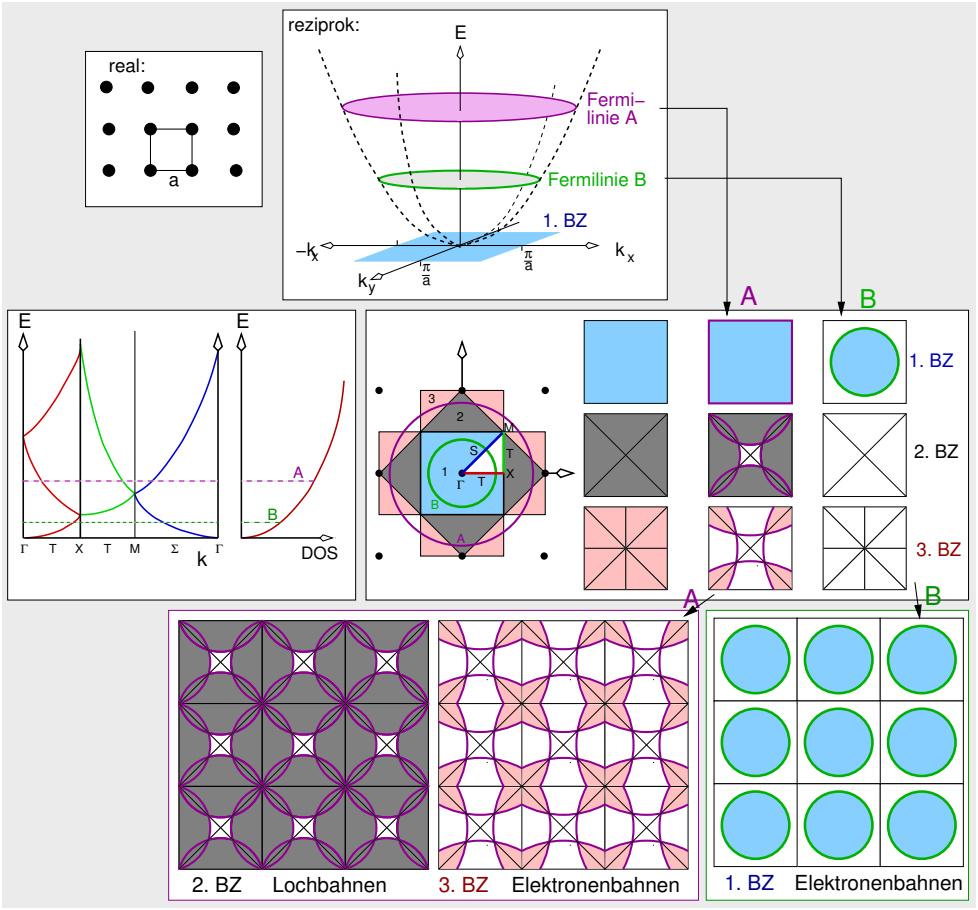
(2) Eigenfunktionen: $\psi = e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx$

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