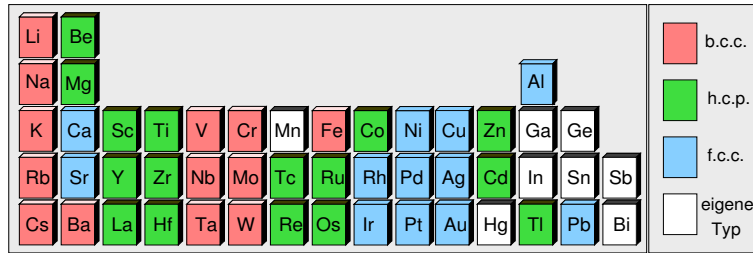
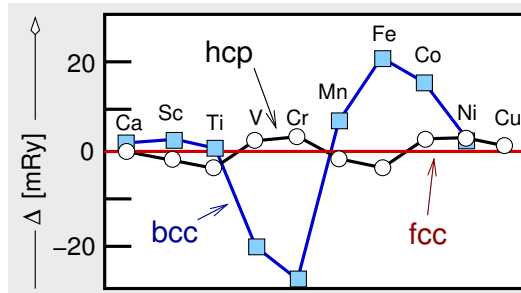


3. NFE-Ansatz (Forts.)

3.3. 3-dimensionaler Fall: Einfache Metallstrukturen



Strukturen metallischer Elemente



(1 Ry = 13.6 eV)

E-Differenzen unterschiedlicher Strukturtypen für die 3d-Metallreihe relativ zu f.c.c.

4. Bandstruktur und Bindungstyp, strukturelle Stabilitäten

4.1. Übersicht

	ionisch	kovalent	metallisch
Bandstruktur			
totale DOS			
partielle DOS	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;">  Anionen                             </div> <div style="text-align: center;">  Kationen                             </div> </div>	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;">  A                             </div> <div style="text-align: center;">  B                             </div> </div>	

Prinzipielles zu Bandstruktur, totaler DOS und partiellen DOS von Festkörpern mit unterschiedlicher chemischer Bindung