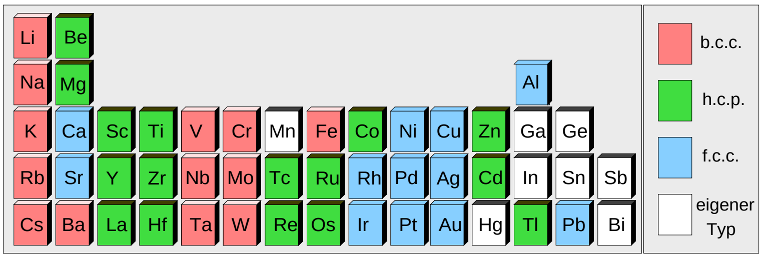
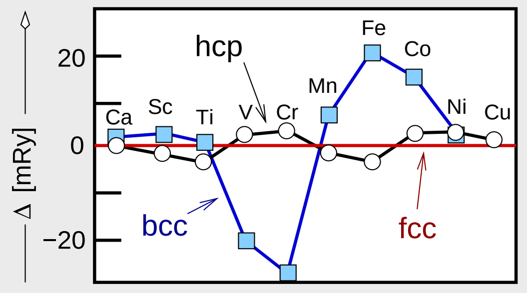
3. NFE-Ansatz (Forts.)

3.3. 3-dimensionaler Fall: Einfache Metallstrukturen



Strukturen metallischer Elemente

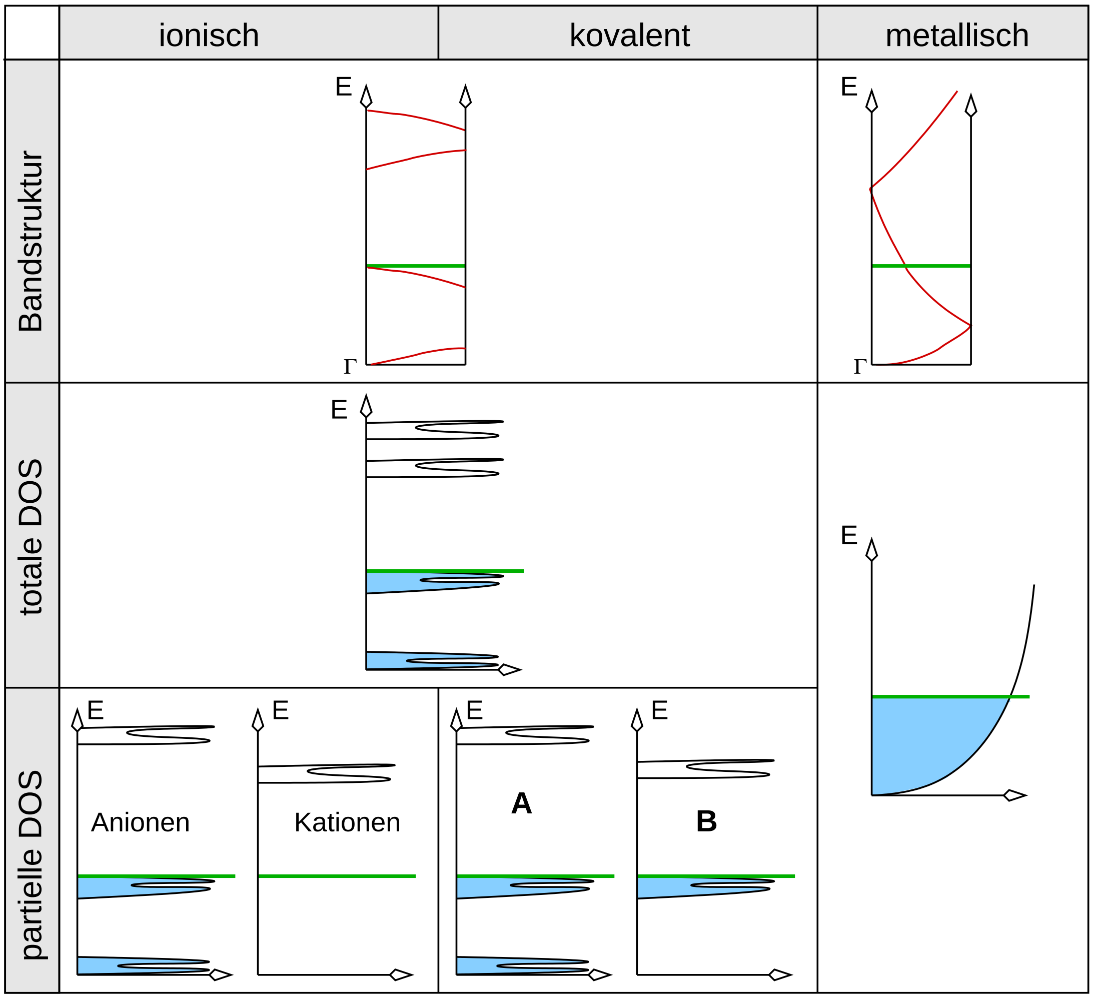
(1 Ry = 13.6 eV)



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

4. Bandstruktur und Bindungstyp, strukturelle Stabilitäten

4.1. Übersicht



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