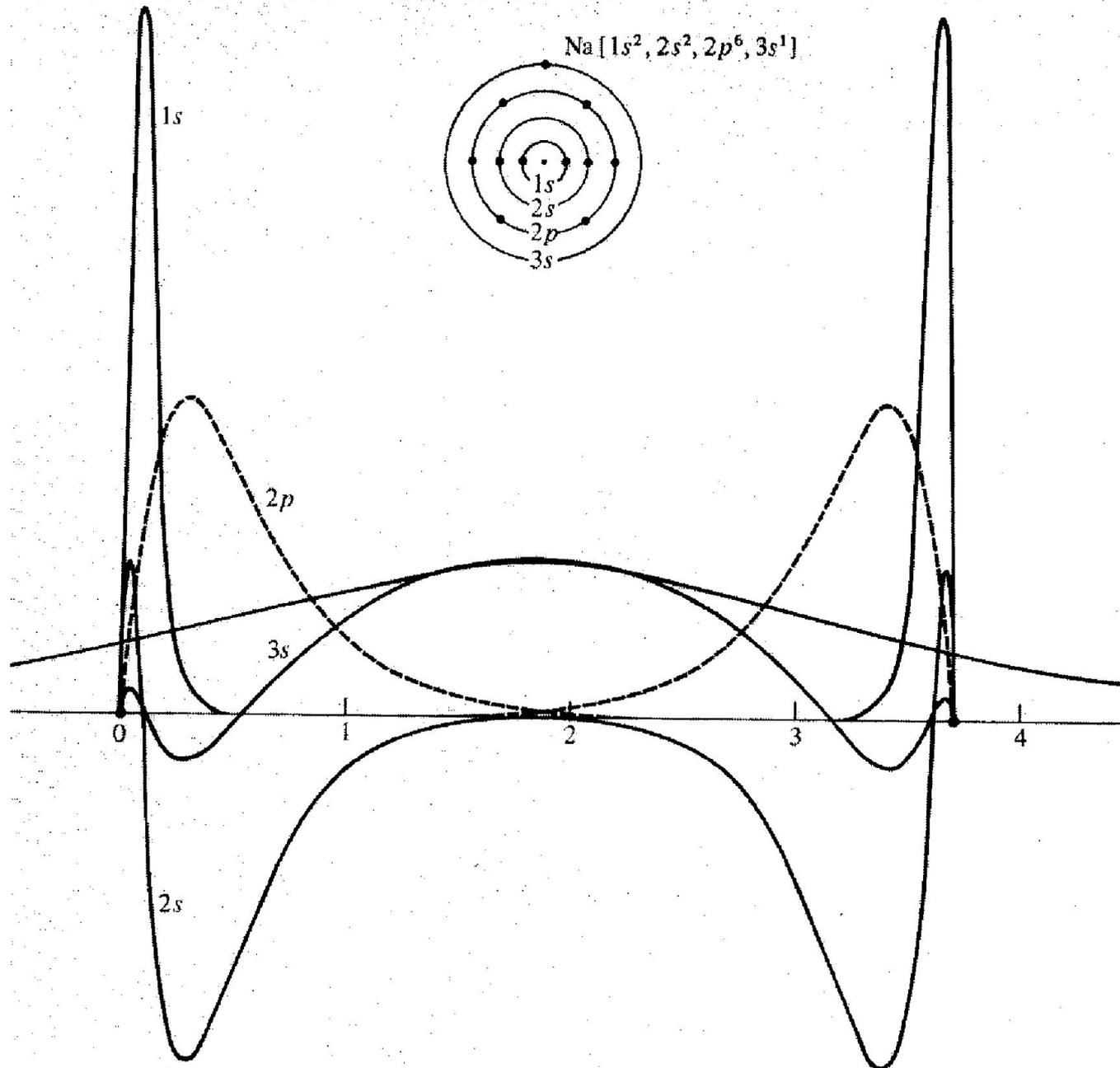
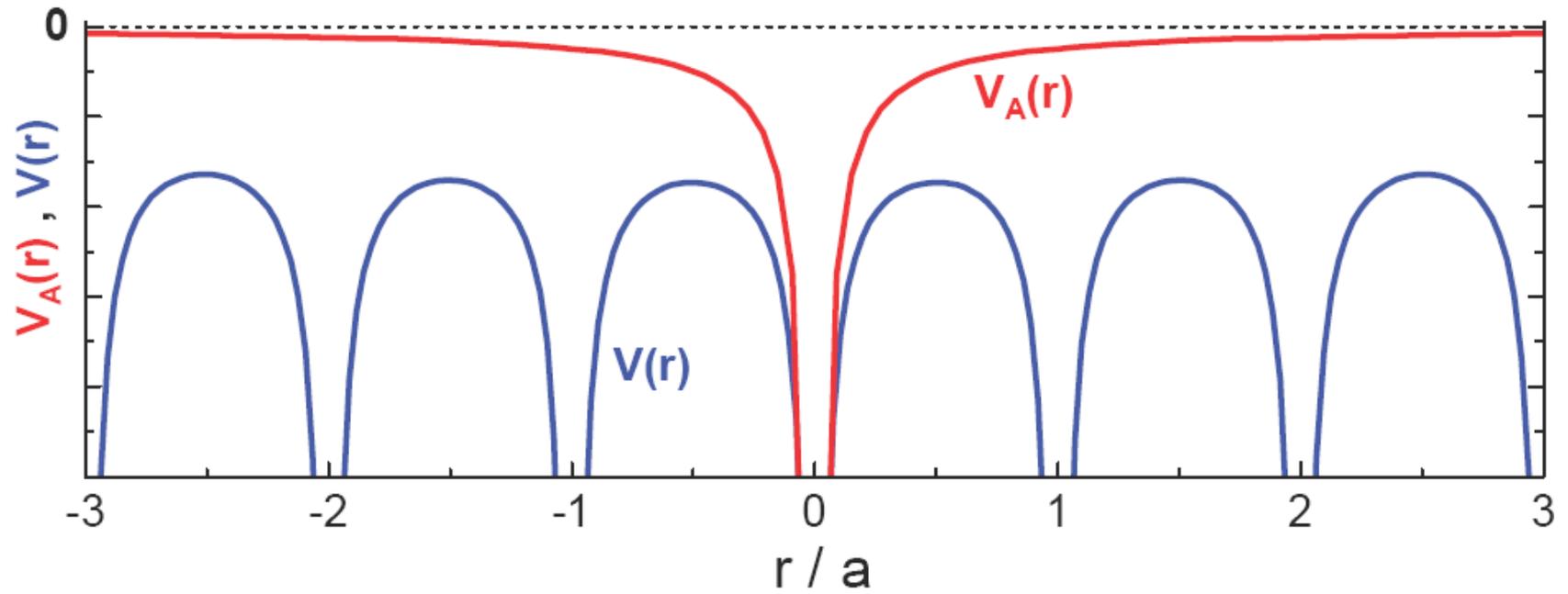


2 Na atoms at  $d_{\text{NN}} = 0.37$  nm distance

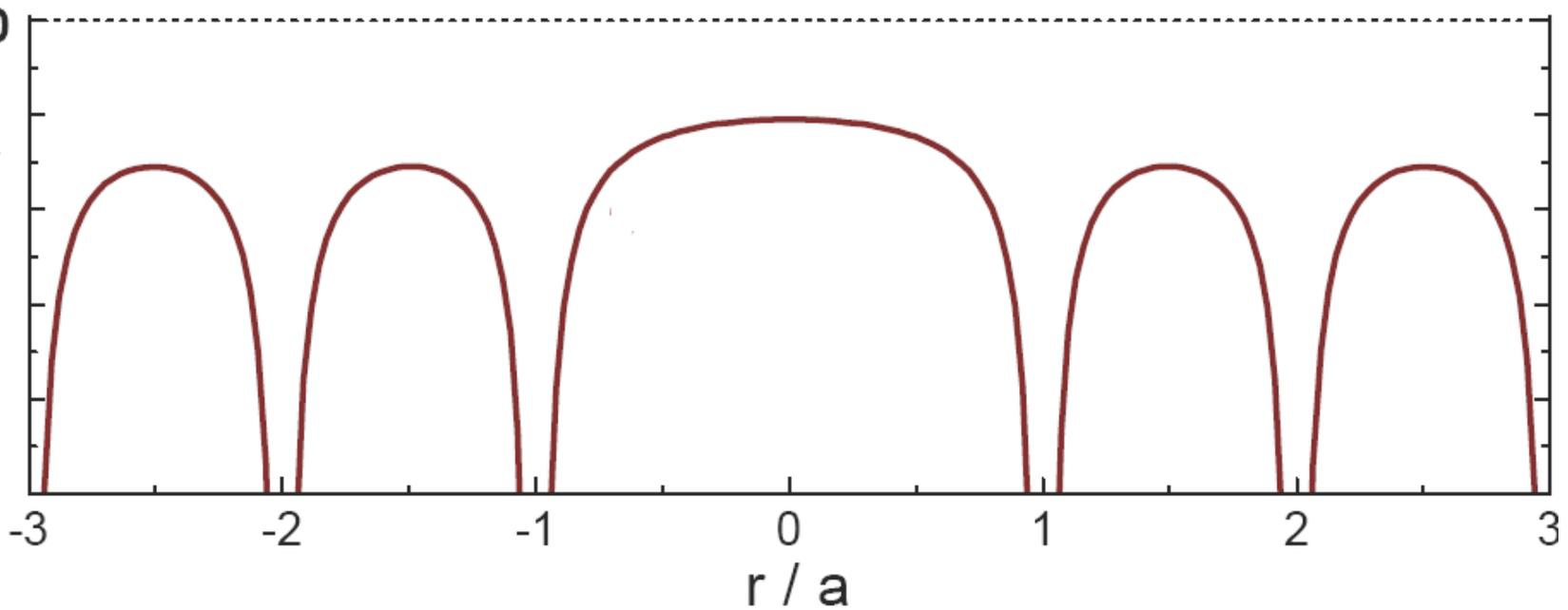
plot shows  $r \psi$

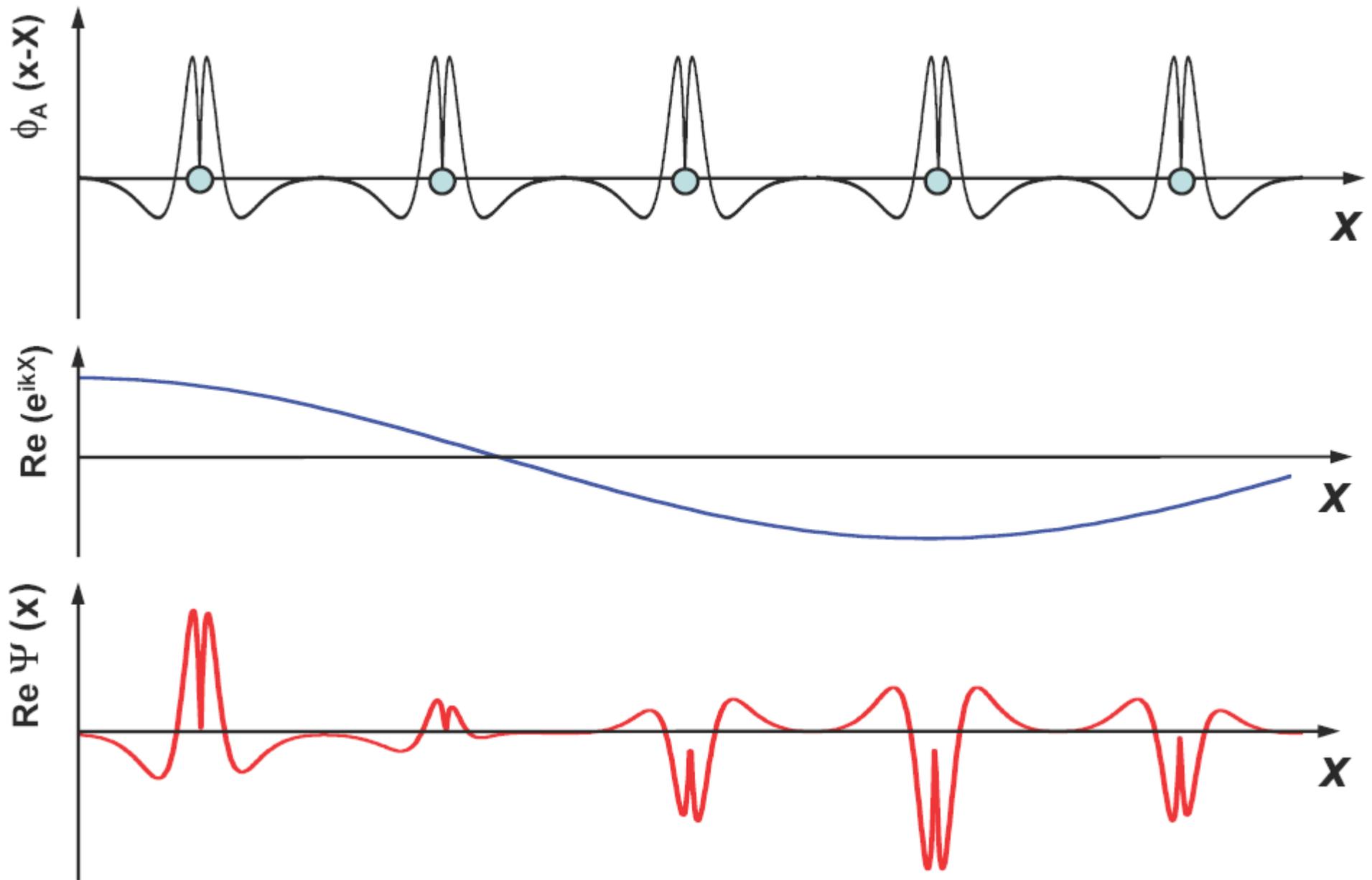


# Potentiale für Elektron in Kristall und freiem Atom



## Störpotential $V_A - V$

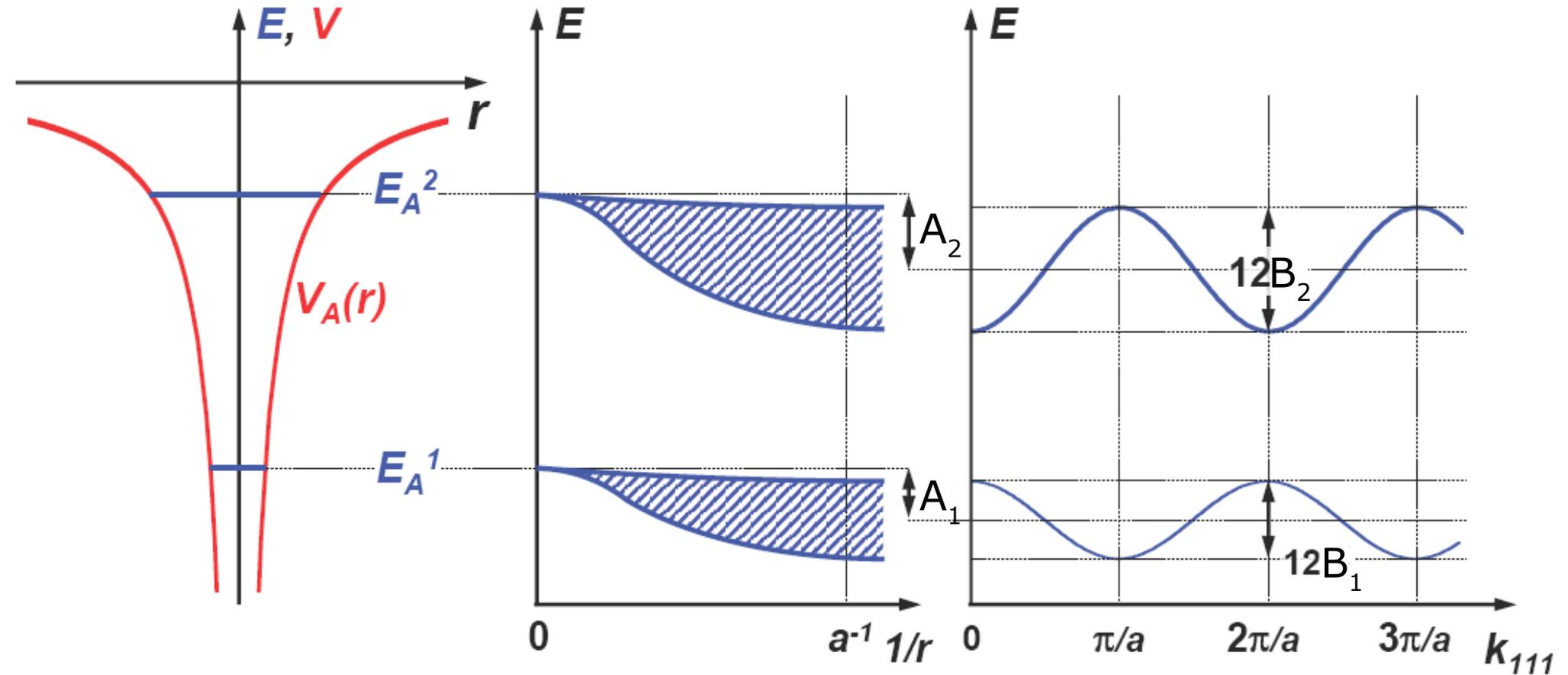




Realteil der Wellenfunktion in tight-binding Näherung.

Psi kombiniert aus atomaren psi (oben) und ebener Welle (Mitte).

# Aufspaltung atomarer Niveaus in Bänder im sc Gitter



Transferintegrale  $B_i$  bestimmen Bandbreiten

klein  $\rightarrow$  schmale (stark lokalisierte) Bänder ( $\rightarrow$  große effektive Massen, s. u.)

Einflussgrößen:

Kristallstruktur  $\rightarrow$  Ebenenabstand  $\rightarrow$  Bandbreite (in dieser  $k$ -Richtung)<sub>5</sub>  
atomare Wellenfunktion (s,p,d,f)