

Kapitel 9

Bandstrukturmethoden Entwicklung nach ebenen Wellen (PW-Methode)

9.1 Allgemeines

Wie bereits im Abschnitt 1.10 dieses Skriptums grundsätzlich erläutert wurde, versteht man unter der *elektronischen Bandstruktur eines kristallinen Festkörpers* das Ergebnis der stationären Einteilchen-Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) - E(\mathbf{k}) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (9.1)$$

Das *effektive Kristallpotential* $V(\mathbf{r})$ ist gitterperiodisch, mit der Konsequenz, daß $V(\mathbf{r})$ in eine Fourierreihe nach den reziproken Gittervektoren \mathbf{K} des Kristalls entwickelt werden kann:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}} V(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}. \quad (9.2)$$

In dieser Formel bedeutet $V(\mathbf{K})$ den Fourierkoeffizienten eines Potentials, das seinen Ursprung im Zentrum der Wigner-Seitz-Zelle hat. Liegt ein „Gitter mit Basis“ vor, d.h. gibt es in der Wigner-Seitz-Zelle mehr als ein Ion an den Positionen \mathbf{r}_β , so kann die Entwicklung (9.2) in der allgemeinen Form

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}} \left(\sum_{\beta} V_{\beta}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_{\beta}} \right) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \quad (9.3)$$

geschrieben werden: $V_{\beta}(\mathbf{K})$ ist der Fourierkoeffizient des Potentials des β -ten Ions an der Position \mathbf{r}_{β} , und $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_{\beta})$ nennt man den *Strukturfaktor* dieses Ions.

Die gesuchte Wellenfunktion soll nun - unter Berücksichtigung der Tatsache, daß $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ eine *Blochwellen* ist - nach dem Funktionensystem $\phi_{\mathbf{k},s}$, $s = 1, \dots, \infty$

entwickelt werden:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_t a_t(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k},t}(\mathbf{r}), \quad (9.4)$$

wobei jedes Element dieser Funktionenbasis die Bloch-Bedingung (1.48) erfüllen muß.

Durch Einsetzen des Ansatzes (9.4) in die Schrödingergleichung (9.1), Multiplikation dieses Ausdrucks mit der Basisfunktion $\phi_{\mathbf{k},s}^*(\mathbf{r})$ und Integration über das Kristallvolumen Ω

$$\int_{\Omega} d^3r \phi_{\mathbf{k},s}^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) - E(\mathbf{k}) \right] \sum_t a_t(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k},t}(\mathbf{r}) = 0$$

ergibt sich das folgende *homogene, lineare Gleichungssystem* für die zu bestimmenden Linearkoeffizienten $a_t(\mathbf{k})$:

$$\sum_t a_t(\mathbf{k}) \left[H_{s,t}^{(\mathbf{k})} - E(\mathbf{k}) S_{s,t}^{(\mathbf{k})} \right] = 0 \quad \text{für } s = 1, \dots, \infty. \quad (9.5)$$

Dieses Gleichungssystem enthält die Hamilton-Matrix

$$H_{s,t}^{(\mathbf{k})} = \int_{\Omega} d^3r \phi_{\mathbf{k},s}^*(\mathbf{r}) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_{\mathbf{k},t}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{K}} \left(\sum_{\beta} V_{\beta}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}\beta} \right) \int_{\Omega} d^3r \phi_{\mathbf{k},s}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{k},t}(\mathbf{r}) \quad (9.6)$$

und die Struktur-Matrix

$$S_{s,t}^{(\mathbf{k})} = \int_{\Omega} d^3r \phi_{\mathbf{k},s}^*(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k},t}(\mathbf{r}). \quad (9.7)$$

Die Gleichungen (9.5)-(9.7) können als verallgemeinertes Eigenwertproblem der selbstadjungierten Matrizen \overline{H} und \overline{S} angeschrieben werden:

$$\left[\overline{H}^{(\mathbf{k})} - E(\mathbf{k}) \overline{S}^{(\mathbf{k})} \right] \mathbf{a}(\mathbf{k}) = 0. \quad (9.8)$$

9.2 Die Ebene-Wellen-Basis

bedeutet, daß die Basisfunktionen in der Form

$$\phi_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_s)\cdot\mathbf{r}} \quad (9.9)$$

dargestellt werden. Es kann sofort gezeigt werden, daß diese Funktionen *Bloch-Charakter* haben, denn

$$\begin{aligned} \phi_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_s)\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_s)\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \underbrace{e^{i\mathbf{K}_s\cdot\mathbf{R}}}_{=1} \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

und daß es sich dabei um eine orthonormale Basis handelt, welche die Auswertung der Strukturmatrix (9.7) und der Hamiltonmatrix (9.6) sehr vereinfacht:

$$S_{s,t}^{(\mathbf{k})} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r e^{i(\mathbf{K}_t - \mathbf{K}_s) \cdot \mathbf{r}} = \delta_{s,t}, \quad (9.10)$$

$$\begin{aligned} H_{s,t}^{(\mathbf{k})} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_s) \cdot \mathbf{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_t) \cdot \mathbf{r}} + \\ &+ \frac{1}{\Omega} \sum_{\beta} \sum_{\mathbf{K}} V_{\beta}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_{\beta}} \int_{\Omega} d^3r e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{K}_s + \mathbf{K}_t) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_s|^2 \delta_{s,t} + \sum_{\beta} V_{\beta}(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t) e^{i(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t) \cdot \mathbf{r}_{\beta}}. \end{aligned} \quad (9.11)$$

Das entsprechende homogene lineare Gleichungssystem (9.5) hat für den Ebene-Wellen-Ansatz die Form

$$a_s(\mathbf{k}) \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_s|^2 \sum_{\beta} V_{\beta}(\mathbf{0}) - E(\mathbf{k}) \right] + \sum_{t \neq s} a_t(\mathbf{k}) \sum_{\beta} V_{\beta}(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t) e^{i(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t) \cdot \mathbf{r}_{\beta}} = 0 \quad (9.12)$$

für $s = 1, \dots, \infty$.

Besonders einfach wird dieses Gleichungssystem im Falle eines *Bravais-Gitters*, wenn also nur ein Ion im Zentrum der Wigner-Seitz-Zelle (mit $\mathbf{r}_{\beta} = \mathbf{0}$) vorliegt:

$$a_s(\mathbf{k}) \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_s|^2 + V(\mathbf{0}) - E(\mathbf{k}) \right] + \sum_{t \neq s} a_t(\mathbf{k}) V(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t) = 0. \quad (9.13)$$

2 Anmerkungen zu den Fourierkoeffizienten des Kristallpotentials:

- $V(\mathbf{K}_t - \mathbf{K}_s) = V^*(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t)$ wegen der Hermitizität des Operators der potentiellen Energie.
- Ist das Potential zusätzlich noch *inversions-symmetrisch*, d.h. wenn $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$, so gilt weiters $V(\mathbf{K}) \in \mathbb{R}$ und $V(\mathbf{K}) = V(|\mathbf{K}|)$.

Geht man nun - testweise - einen Schritt zurück und nimmt $V(\mathbf{r}) \equiv 0$ an, so reduziert sich das lineare Gleichungssystem (9.12) weiter zu

$$a_s(\mathbf{k}) \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_s|^2 - E(\mathbf{k}) \right] = 0,$$

was unmittelbar zu den wohlbekannten Sommerfeld-Energien führt:

$$E_s(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_s|^2 \quad \text{mit} \quad (s = 1, 2, \dots, \infty).$$

9.3 Nachteile der Entwicklung nach ebenen Wellen

Die linearen Gleichungssysteme (9.12) bzw. (9.13) sind im Prinzip von der Ordnung unendlich, d.h. für eine exakte Berechnung der Eigenenergien und Eigenfunktionen der Bloch-Elektronen müßten unendlich viele reziproke Gittervektoren \mathbf{K} verwendet werden. Dies ist natürlich numerisch nicht möglich, sondern das Gleichungssystem muß nach einer endlichen Zahl von Gleichungen (d.h. nach einer endlichen Zahl von reziproken Gittervektoren) abgebrochen werden.

In diesem Abschnitt soll das Konvergenzverhalten der Plane-Wave-Methode in bezug auf die Zahl N der verwendeten reziproken Gittervektoren untersucht werden, d.h., es sollen die folgenden beiden Fragen beantwortet werden:

1. Wieviele reziproke Gittervektoren sind erforderlich, um die Energiebandstruktur $E_n(\mathbf{k})$ eines realistischen Testmaterials zu bestimmen,
2. wieviele reziproke Gittervektoren sind erforderlich, um die Blochfunktionen $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ der Elektronen in einem realistischen Testmaterial zu bestimmen,

Als Testmaterial wird im folgenden das einfachste Metall *Lithium* mit der Ordnungszahl 3 im Periodensystem der Elemente verwendet. Jedes Atom dieses in bcc-Struktur kristallisierenden Alkalimetalls enthält demnach die 3 Elektronen



Um die Qualität der *plane-wave*-Resultate beurteilen zu können, bedarf es einer Vergleichsrechnung durch ein weithin anerkanntes Verfahren zur Berechnung von elektronischen Bandstrukturen: für die folgenden Tests verwende ich das in einem späteren Kapitel dieses Skriptums vorkommende APW-Verfahren¹.

9.3.1 Die Konvergenz der Energiebänder

Die Abb. 9.1 zeigt die Energiebandstruktur von Li entlang der ΓH -Richtung in der Brillouinzone, wie man es mittels der APW-Methode erhält. Die wichtigsten Elemente dieser Bandstruktur sind folgende:

- Von Null Rydberg aufwärts erhält man zahlreiche Energiebänder mit mehr oder weniger ausgeprägter k -Abhängigkeit (k -Dispersion). Das „niederste“, ca. bei Null beginnende Band ist das 2s-Valenzband, welches zur Hälfte von den 2s-Elektronen des Li-Metalls besetzt wird. Die

¹APW bedeutet *augmented plane waves*, also „erweiterte ebene Wellen“.

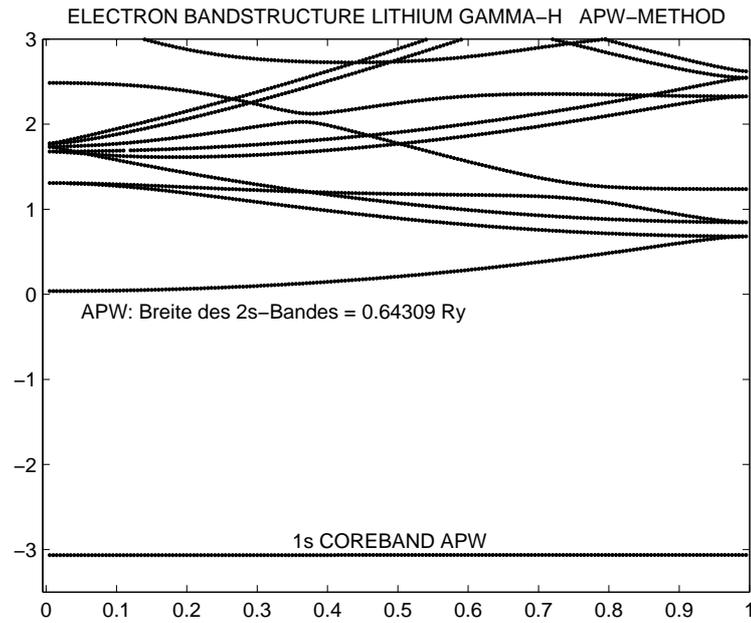


Abbildung 9.1: Elektronische Bandstruktur von Li entlang der Γ H-Richtung, berechnet mittels der APW-Methode.

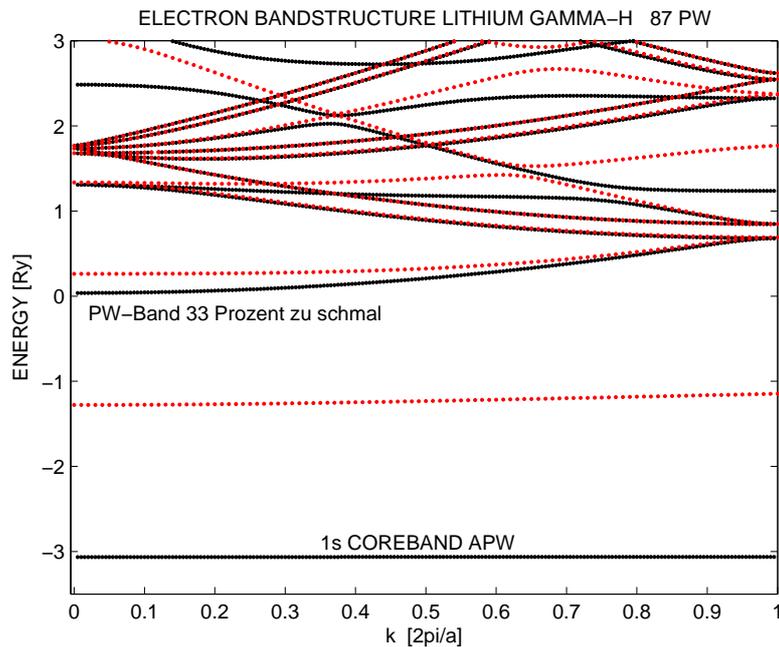


Abbildung 9.2: Elektronische Bandstruktur von Li entlang der Γ H-Richtung, berechnet mittels der APW-Methode (schwarze Punkte) bzw. mittels der PW-Methode unter Verwendung von 87 reziproken Gittervektoren (rote Punkte).

zweite Hälfte dieses Bandes und alle darüberliegenden Bänder sind (zumindest bei sehr tiefen Temperaturen) unbesetzt. Wie Sie sehen, kommt es innerhalb dieser Bänder zu mannigfachen Überlappungen und Überschneidungen.

Eine wichtige Kenngröße für die folgenden PW-Tests stellt die *Bandbreite* des 2s-Valenzbandes dar, definiert durch die Energiedifferenz dieses Bandes am H-Punkt bzw. am Γ -Punkt: die APW-Rechnung ergibt dafür einen Wert von 0.64309 Ry.

- Deutlich nach tieferen Energien hin abgesetzt (bei ca. -3 Ry) liegt das Band, welches die 1s-Elektronen des Li-Metalls enthält: dieses Band ist ein typisches *core*-Band mit einer extrem geringen k -Dispersion, wie sie für „nahe beim Atomkern“ liegende und dementsprechend massiv lokalisierte Elektronen charakteristisch ist.

Die nächste Abb. 9.2 zeigt nun einen Vergleich zwischen der APW-Bandstruktur und einer PW-Rechnung, basierend auf dem linearen homogenen Gleichungssystem (9.13), wobei allerdings nur die 87 betragskleinsten reziproken Gittervektoren in die Rechnung einbezogen wurden.

Der Vergleich PW-87 mit APW ist einigermaßen ernüchternd: im Valenzbandbereich kommt es zu sehr deutlichen Differenzen zwischen den PW- und den APW-Bändern, wobei allerdings interessant ist, dass diese Differenzen von Band zu Band quantitativ sehr verschieden ausfallen. Die Bandbreite der 2s-Valenzbandes nach der PW-87-Rechnung ist um 33 Prozent kleiner als die Bandbreite des entsprechenden APW-Ergebnisses.

Ganz schlimm steht es mit dem 1s-Coreband, das von der PW-87-Rechnung bei ca. -1.3 Ry lokalisiert wird, verglichen mit dem entsprechenden APW-Band bei ca. -3 Ry.

Nun ist es natürlich vom numerischen Standpunkt her kein Problem, die Größe der *Säkularmatrix* noch wesentlich zu erhöhen. So zeigt die Abbildungen 9.3 und 9.4 Ergebnisse einer PW-Berechnung der Li-Bänder unter Verwendung von nicht weniger als 2123 reziproken Gittervektoren. Man sieht, daß nicht einmal dieser relativ große Aufwand ausreicht, um eine befriedigende Übereinstimmung der PW-Bänder mit den APW-Bändern zu erzielen: die Position des 2s-Corebandes ist beim PW-Resultat noch immer um ca. 0.3 Ry zu hoch, das 2s-Valenzband ist immer noch um 4 Prozent zu schmal, und bei manchen unbesetzten Valenzbändern gibt es noch immer signifikante Unterschiede zwischen den PW- und den APW-Ergebnissen.

9.3.2 Die Konvergenz der Wellenfunktionen

Hat man das Eigenwertproblem (9.12) bzw. (9.13) gelöst, so kann man mit den daraus gewonnenen Koeffizienten $a_s(\mathbf{k})$ auch die Eigenfunktionen der

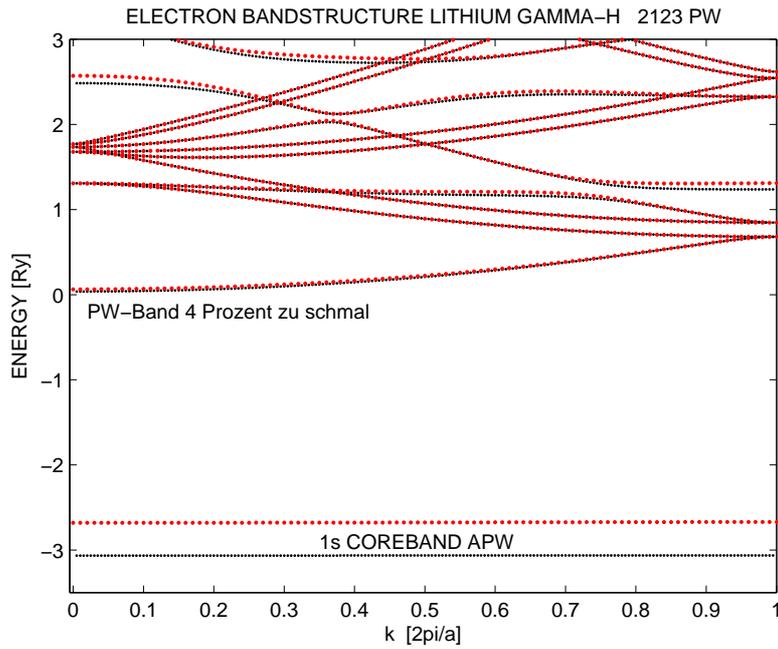


Abbildung 9.3: Elektronische Bandstruktur von Li entlang der ΓH -Richtung, berechnet mittels der APW-Methode (schwarze Punkte) bzw. mittels der PW-Methode unter Verwendung von 2123 reziproken Gittervektoren (rote Punkte).

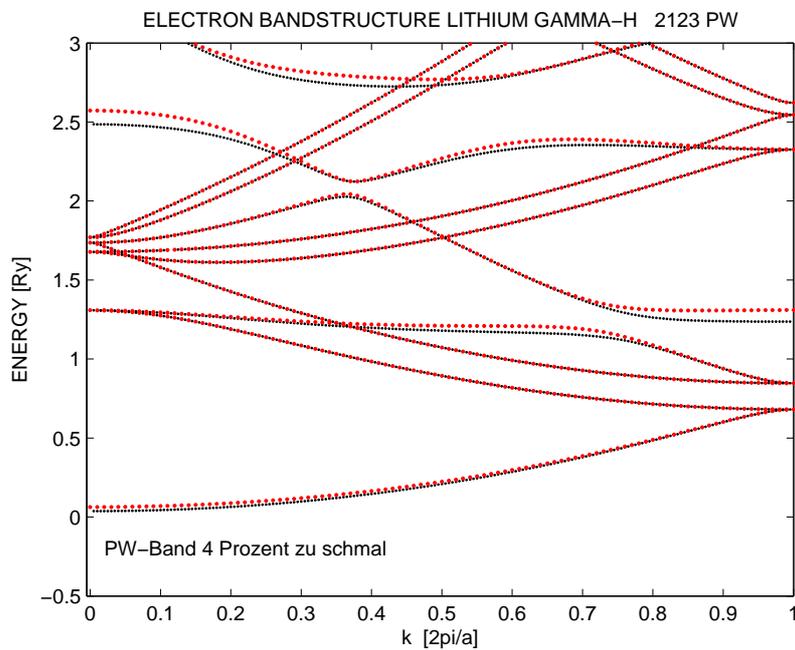


Abbildung 9.4: Wie Abb. 11.3, wobei jedoch nur der Valenzbereich der Bandstruktur dargestellt wird.

Schrödinger-Gleichung (9.1) auswerten, und zwar durch Einsetzen der „Ebene-Wellen-Basis“ (9.9) in die Entwicklungsgleichung (9.4). Man erhält das Resultat

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_s a_s(n, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_s)\cdot\mathbf{r}}. \quad (9.14)$$

Wie jede Wellenfunktion, so hat auch die obige Blochfunktion eine Normierungsbedingung in bezug auf Ihren Konfigurationsraum zu erfüllen; es muß also gelten:

$$\int_{\Omega} d^3r |\psi_{n,\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (9.15)$$

Das Einsetzen von (9.14) in die obige Gleichung führt zu einer Bedingung für die Absolutquadrate der Entwicklungskoeffizienten $a_s(n, \mathbf{k})$ in der Form

$$\sum_s |a_s(n, \mathbf{k})|^2 = 1. \quad (9.16)$$

Beim nun folgenden *plane-wave*-Test gehen wir wieder von APW-Ergebnissen aus, und zwar von 3 Blochfunktionen von Elektronen im Kupferkristall, welche 3 unterschiedliche Zustände beschreiben:

- (A) ist ein ausgeprägt lokalisierter Zustand, der ca. 0.3 Rydberg (Ry) unter der Fermienergie liegt. Solche stark lokalisierten Zustände zeigen gewöhnlich eine sehr schlechte Konvergenz in bezug auf eine Entwicklung nach ebenen Wellen.
- (B) ist ein Elektronenzustand am Beginn des niedrigsten Valenzbandes (s. die Markierung in der Abb. 9.5).
- (C) ist ein Elektronenzustand am Ende des niedrigsten Valenzbandes.

Das Ergebnis der „Normalisierungs-Studie“ finden Sie in der Abb. 9.6: Wie nicht anders zu erwarten, benötigt der lokalisierte Corezustand (A) eine sehr große Zahl von ebenen Wellen bzw. reziproken Gittervektoren ($\gg 900$), um die Normierungsbedingung (9.16) zu erfüllen. Viel besser ist die Konvergenz für den Zustand B, der einen stark *delokalisierten* 4s-Valenzzustand beschreibt: in diesem Fall wird die Normierungsbedingung bei 900 ebenen Wellen schon fast perfekt erfüllt.

Auf den ersten Blick überraschend ist das Konvergenzverhalten des Zustandes (C): obwohl dieser Zustand demselben Elektronenband „entstammt“, konvergiert er deutlich langsamer als der Zustand (B).

Dieser Effekt ist wichtig genug, um ihm einen eigenen (kurzen) Abschnitt zu widmen.

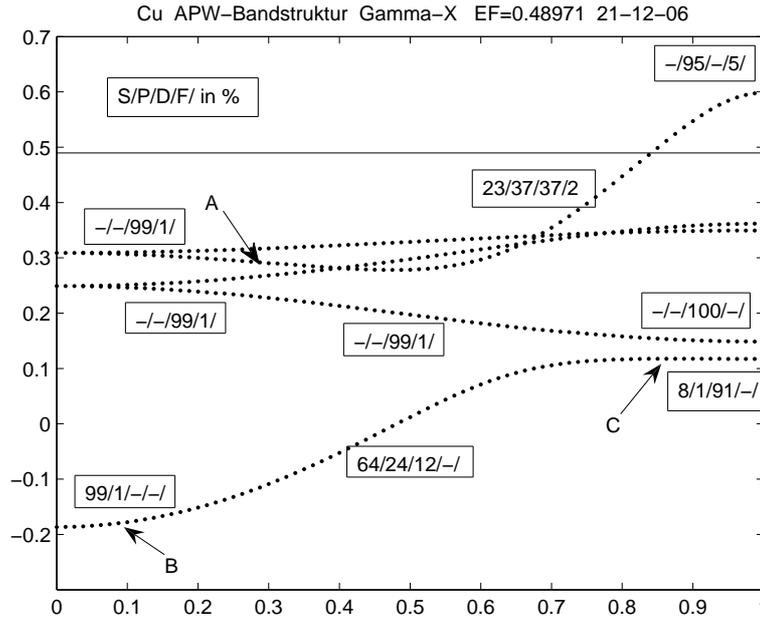


Abbildung 9.5: Der Valenzbereich der Elektronenbandstruktur von Kupfer in der ΓX -Richtung. Die Zahlenangaben werden im Abschnitt 11.3.3 diskutiert.

9.3.3 Zur Benennung von Elektronenbändern

Jeden, der sich mit der Physik von Blochzuständen, also von Elektronenzuständen im gitterperiodischen Kristallpotential, beschäftigt, sollte es irritieren, daß auch in *high-level* Publikationen und Lehrbüchern der Festkörperphysik immer ganz selbstverständlich von „s-Bändern“, „p-Bändern“, „d-Bändern“ usw. die Rede ist. Wie Sie wissen, sind die Bezeichnungen s-, p-, d-, f- usw. eng mit der Bahndrehimpuls-Quantenzahl ℓ von Atomzuständen, allgemeiner: von Quantenzuständen im radialsymmetrischen Potential verknüpft. Im kristallinen Festkörper gibt es nun kein radialsymmetrisches Potential mehr, sondern ein aus der Überlagerung atomarer Potentiale herrührendes gitterperiodisches Potential. Damit ist die Bahndrehimpuls-Quantenzahl *keine gute Quantenzahl mehr*, und ein Blochzustand oder gar ein Blochband läßt sich prinzipiell keinem atomaren Typus zuordnen.

Soweit die Theorie. In der Praxis ist es jedoch so, daß insbesondere die Elektronenzustände in den stark lokalisierten Corebändern noch so *atomic-like* sind, daß man mit einiger Berechtigung von 1s-, 2s-, 2p- usw. Corebändern reden kann.

Wie sieht das aber im Valenzbereich aus? Hier muß tatsächlich mit solchen Benennungen sehr vorsichtig sein. Um Ihnen das zu demonstrieren, enthält die Zeichnung 9.5 mit der Valenzbandstruktur von Kupfer eine Reihe von Zahlenangaben, die ich nun diskutieren möchte.

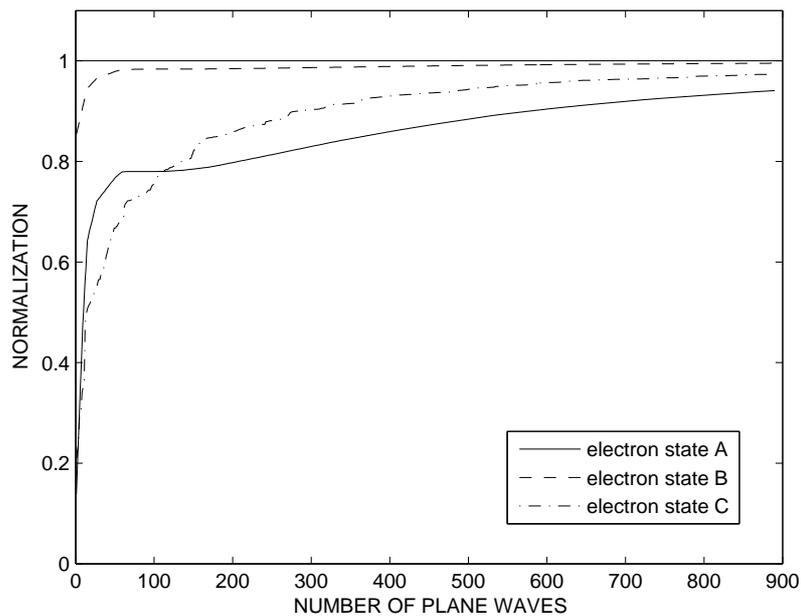


Abbildung 9.6: Abhängigkeit der Normalisierungsgröße dreier Blochzustände (A),(B),(C) in Cu von der Zahl der ebenen Wellen, die zur Entwicklung der Blochfunktionen verwendet werden.

Man kann zwar, wie gesagt, einem Blochzustand keinen eindeutigen Bahndrehimpuls zuordnen, niemand aber kann einen hindern, einen Blochzustand *nach Kugelflächenfunktionen zu entwickeln*, und genau das habe ich für die Zustände in Abb. 9.5 getan. Jeder Blochzustand wird demnach als Mischung verschiedener Bahndrehimpuls-Zustände angesehen, und die Kästchen in dieser Abbildung geben die jeweiligen Prozentsätze der verschiedenen Bahndrehimpulse an.

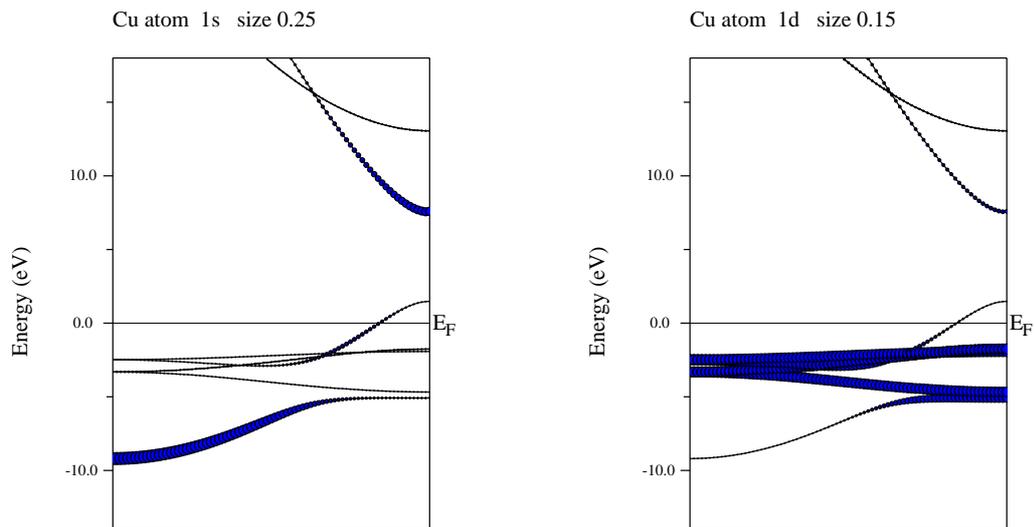
Betrachten Sie nun das energetisch tiefste Cu-Valenzband: für kleine k -Werte hat dieses Band tatsächlich eine fast perfekte s -Charakteristik (es stammt ja von den $4s$ -Elektronen der Kupferatome ab)! Es wäre aber grob falsch, dieses Band als $4s$ -Band zu bezeichnen, denn mit steigendem k -Wert nimmt der s -Charakter dieses Bandes kontinuierlich zugunsten eines steigenden p - und d -Anteils ab, und am Ende der k -Achse (nahe der Oberfläche der Brillouinzone) ist aus dem ursprünglich perfekten s -Band ein fast perfektes d -Band geworden.

Nehmen Sie nun das nächsthöhere, relativ flache Band unter die Lupe: dieses Band als $3d$ -Band zu bezeichnen, ist legitim, denn man sieht, daß es von Anfang bis zum Ende ausschließlich d -Charakter besitzt. Dies gilt im übrigen auch für die beiden anderen flachen Bänder in der Abb. 9.5.

Zum Unterschied dazu ist das höchste dargestellte Valenzband (jenes, das die Fermilinie schneidet) wieder eine interessante Mischung verschiedener

Drehimpuls-Zustände: „es beginnt“ als reines d-Band und „endet“ nach einem Zwischenstadium aus 23 % s-, 37 % p- und 37 % d-Charakter als fast perfektes p-Band.

Mit modernen Bandstruktur-Programmen (z.B. WIEN2k usw.) ist es möglich, die ℓ -Charakteristik der Elektronenbänder bzw. der Blochzustände graphisch darzustellen (etwa durch Kreise, deren Radien proportional zu einer bestimmten ℓ -Charakteristik sind):



Hier sehen Sie als Beispiel die Bandstruktur von Kupfer entlang der ΓX -Richtung: *links* ist die s -Charakteristik der Cu-Bänder dargestellt, und *rechts* die d -Charakteristik.

Beachten Sie hier vor allem das Verhalten des untersten Valenzbandes: dieses beginnt am Gamma-Punkt als fast reines s -Band; der Bandcharakter wandelt sich aber (fast) vollständig von s zu d , wenn man sich der Oberfläche der Brillouinzone (dem Punkt X - rechts im Diagramm) nähert.

Resumee der Geschichte: Im „Arbeitsjargon“ wird man weiterhin von s -, p -, d -Bändern usw. sprechen; man sollte aber immer bedenken, daß derlei Zuordnungen manchmal durchaus vernünftig sind, manchmal aber die physikalische Realität in keiner Weise wiedergeben!