

図 1・1 NaCl 中の価電子密度の等高線図——中央が Na^+ イオン、周りは Cl^- イオン (Jansen らによる計算)

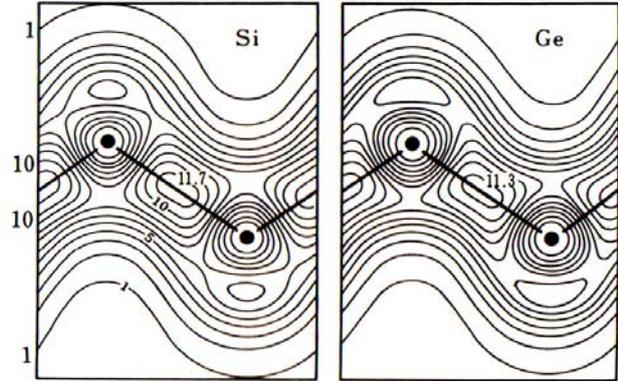


図 1・2 Si と Ge 結晶の価電子密度の等高線図 (110 面, Yin らによる計算)

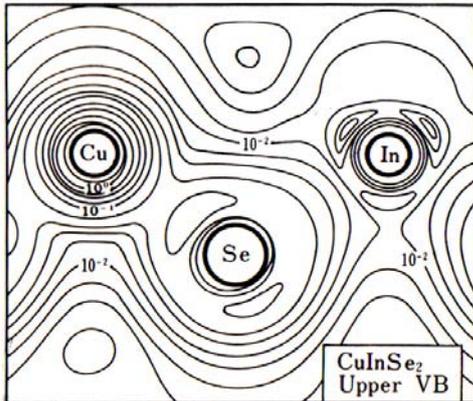
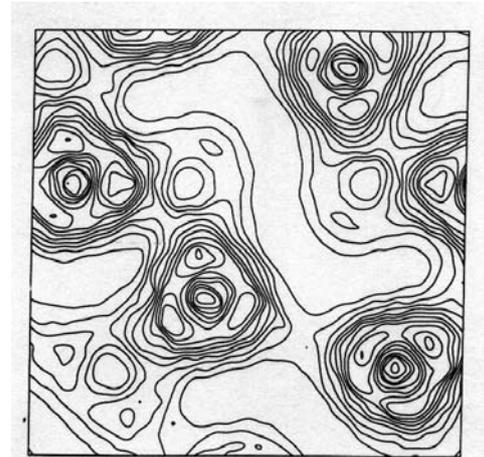


図 1・3 CuInSe_2 の価電子密度の等高線図 (単位は単位原子体積当りの電子数 electrons/ AU^3 , Jaffe らによる計算)



GaAs の価電子密度分布