

## Bisherige Koeffizientenmatrizen

### PW-Methode

$$M_{s,t}^{PW} = \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_t^2 - E_{\mathbf{k}} \right] \delta_{s,t} + V(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t)$$

### OPW-Methode

$$M_{s,t}^{OPW} = \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_t^2 - E_{\mathbf{k}} \right] \delta_{s,t} + V(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t) - \sum_{j(\text{Core})} (E_j - E_{\mathbf{k}}) \mu_{\mathbf{k}_s,j}^* \mu_{\mathbf{k}_t,j}$$

### APW-Methode

$$M_{s,t}^{APW} = \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_t^2 - E_{\mathbf{k}} \right] \delta_{s,t} - \frac{4\pi}{\Omega_0} r_{\text{MT}}^2 \left\{ \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{k}_t - E_{\mathbf{k}} \right] \frac{j_1(|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_t| r_{\text{MT}})}{|\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_t|} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta_{s,t}) j_l(k_s r_{\text{MT}}) j_l(k_t r_{\text{MT}}) \times \left[ \frac{d}{dr} R_l(r; E) / R_l(r; E) \right]_{r=r_{\text{MT}}} \right\}.$$

mit  $\mathbf{k}_i = \mathbf{k} + \mathbf{K}_i$ .

### KKR-Methode

$$M_{lm;l'm'} \propto \cot \eta_l \sqrt{E} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} + A_{lm;l'm'}(E)$$

## Der Variationsansatz der APW-Methode:

$$\begin{aligned}
 E \int_{i+a} d^3r u^* u &= \int_{i+a} d^3r u^* \hat{H} u + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2} \int_{(S)} d\mathbf{s} \cdot [\nabla u_a^* + \nabla u_i^*] (u_a - u_i) \\
 &\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2} \int_{(S)} d\mathbf{s} \cdot [\nabla u_a - \nabla u_i] (u_a^* + u_i^*). \quad (1)
 \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung von

$$\hat{H}u_t = E_t u_t \quad u_i = u_t + \delta u_i \quad u_a = u_t + \delta u_a$$

sowie

$$E = E_t + \delta E$$

ergibt sich die Gleichung (15.5):

$$\begin{aligned}
 \delta E \int_{i+a} d^3r u_t^* u_t &= \int_i d^3r u_t^* \hat{H} \delta u_i + \int_a d^3r u_t^* \hat{H} \delta u_a + \\
 + \frac{\hbar^2}{2m} \int_S d\mathbf{s} \cdot [u_t^* \nabla(\delta u_i) - \delta u_i \nabla u_t^*] &- E_t \int_i d^3r \delta u_i u_t^* - \\
 - \frac{\hbar^2}{2m} \int_S d\mathbf{s} \cdot [u_t^* \nabla(\delta u_a) - \delta u_a \nabla u_t^*] &- E_t \int_a d^3r \delta u_i u_t^*.
 \end{aligned}$$

Umformung der Integrale, die den Operator  $\hat{H}$  enthalten,  
Hilfe des *Gaußschen Integralsatzes*

$$\int_V d^3r \nabla f(\mathbf{r}) = \int_S d\mathbf{s} f(\mathbf{r}) \quad :$$

Es gilt:

$$u_t^* \hat{H} \delta u_i = -\frac{\hbar^2}{2m} u_t^* \nabla^2 \delta u_i + u_t^* V(\mathbf{r}) \delta u_i.$$

Mit der Identität

$$u_t^* \nabla^2 \delta u_i \equiv \nabla(u_t^* \nabla \delta u_i) - \nabla(\delta u_i \nabla u_t^*) + (\delta u_i \nabla^2 u_t^*)$$

erhält man weiter

$$u_t^* \hat{H} \delta u_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla [u_t^* \nabla \delta u_i - \delta u_i \nabla u_t^*] + \delta u_i \hat{H} u_t^*.$$

Daraus resultiert das Ergebnis

$$\int_i d^3 r u_t^* \hat{H} \delta u_i - \int_i d^3 r \delta u_i \hat{H} u_t^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_S d\mathbf{s} \cdot [u_t^* \nabla \delta u_i - \delta u_i \nabla u_t^*] \neq 0.$$

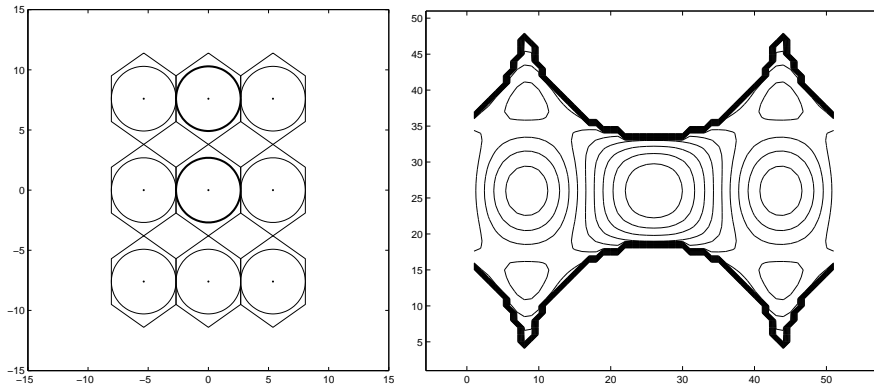
Für den Integranden  $u_t^* \hat{H} \delta u_a$  erhält man eine äquivalente Umformung. Somit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \int_i d^3 r u_t^* \hat{H} \delta u_i &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_S d\mathbf{s} \cdot [u_t^* \nabla \delta u_i - \delta u_i \nabla u_t^*] + E_t \int_i d^3 r \delta u_i u_t^* \\ \int_a d^3 r u_t^* \hat{H} \delta u_a &= +\frac{\hbar^2}{2m} \int_S d\mathbf{s} \cdot [u_t^* \nabla \delta u_a - \delta u_a \nabla u_t^*] + E_t \int_a d^3 r \delta u_a u_t^* \end{aligned} \quad (2)$$

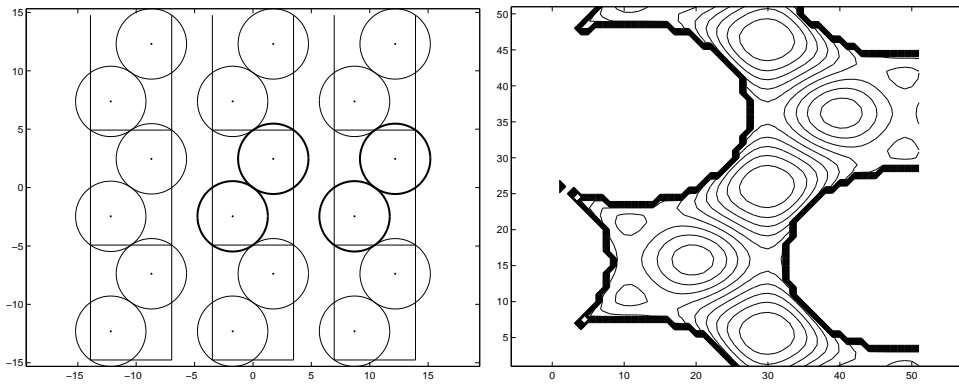
Setzt man diese Ausdrücke in die Gleichung (15.5) ein, ergibt sich unmittelbar die *Stationaritätsbedingung*

$$\delta E \int d^3 r u_t^* u_t = 0.$$

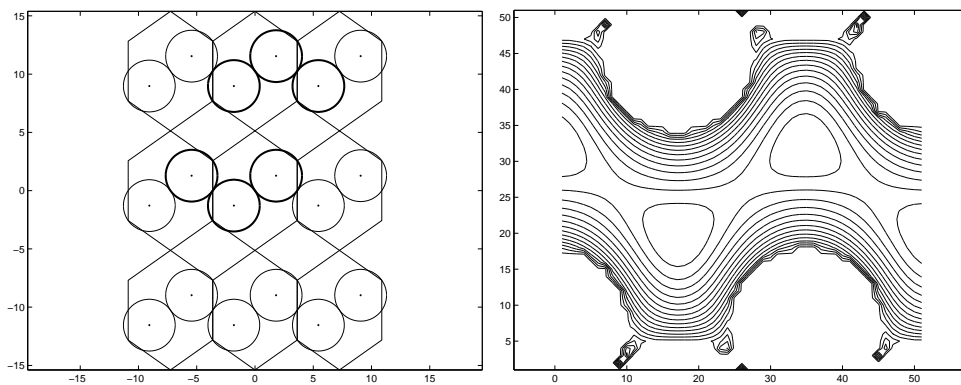
## Zur muffin-tin-Näherung



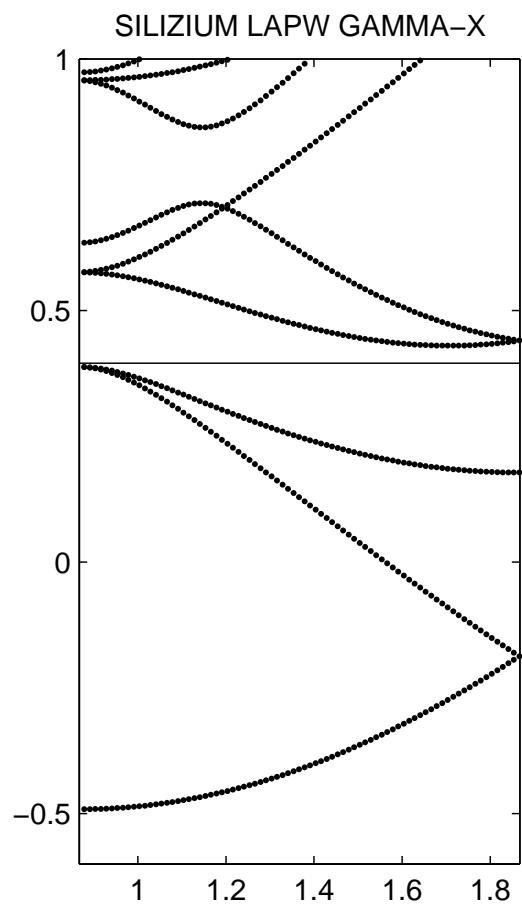
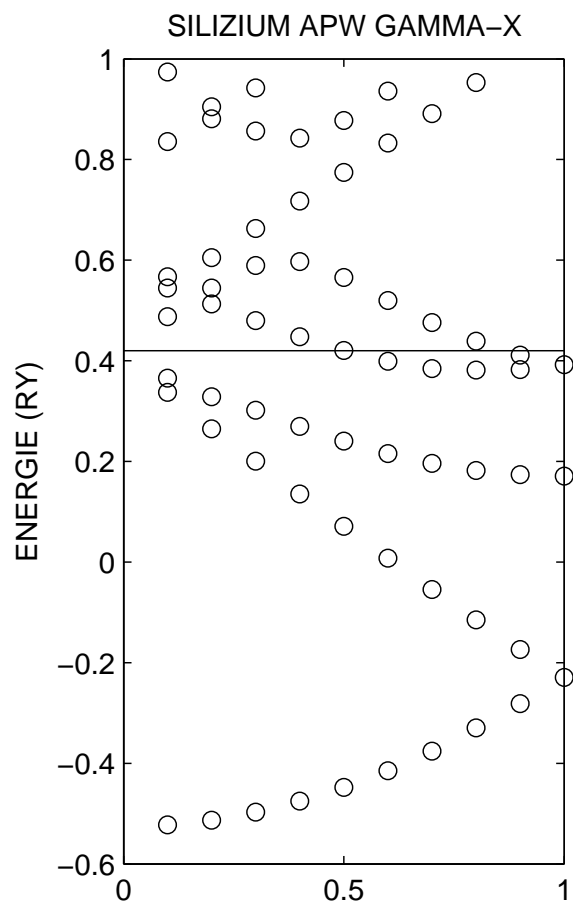
Struktur der Atomkugeln und Interstitial-Potential: fcc (Kupfer)



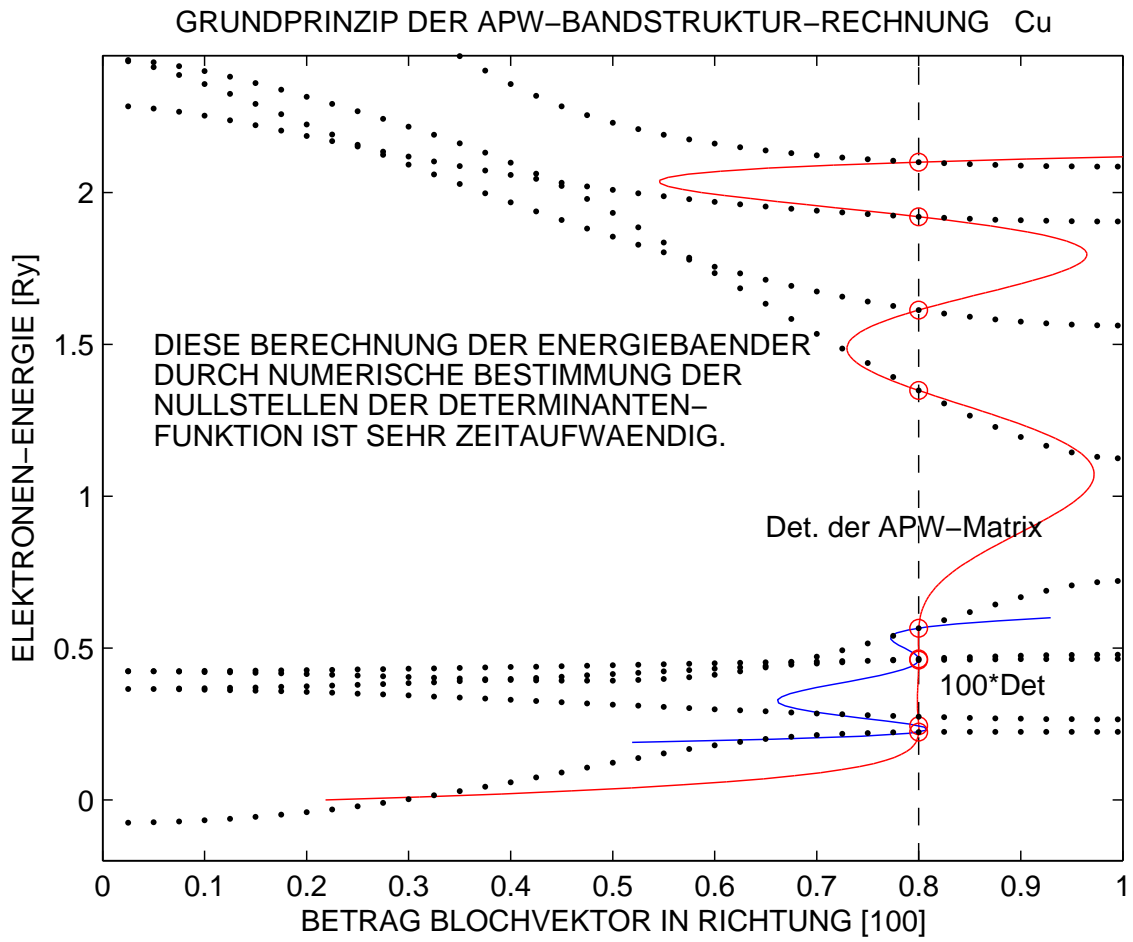
Struktur der Atomkugeln und Interstitial-Potential: hcp (Magnesium)

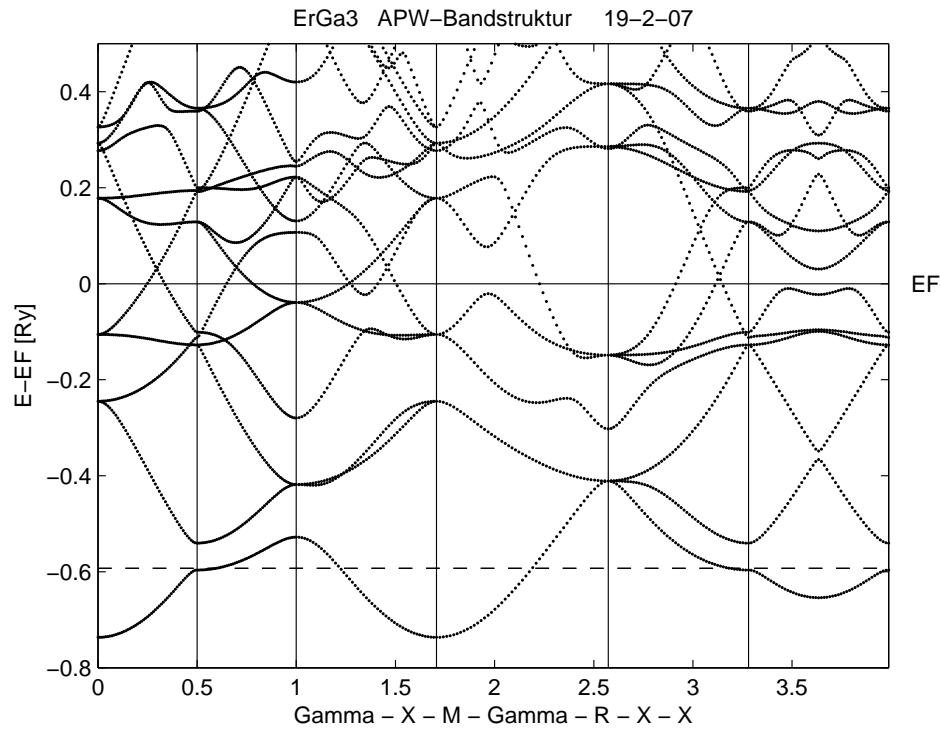


Struktur der Atomkugeln und Interstitial-Potential: diamant (Silizium)

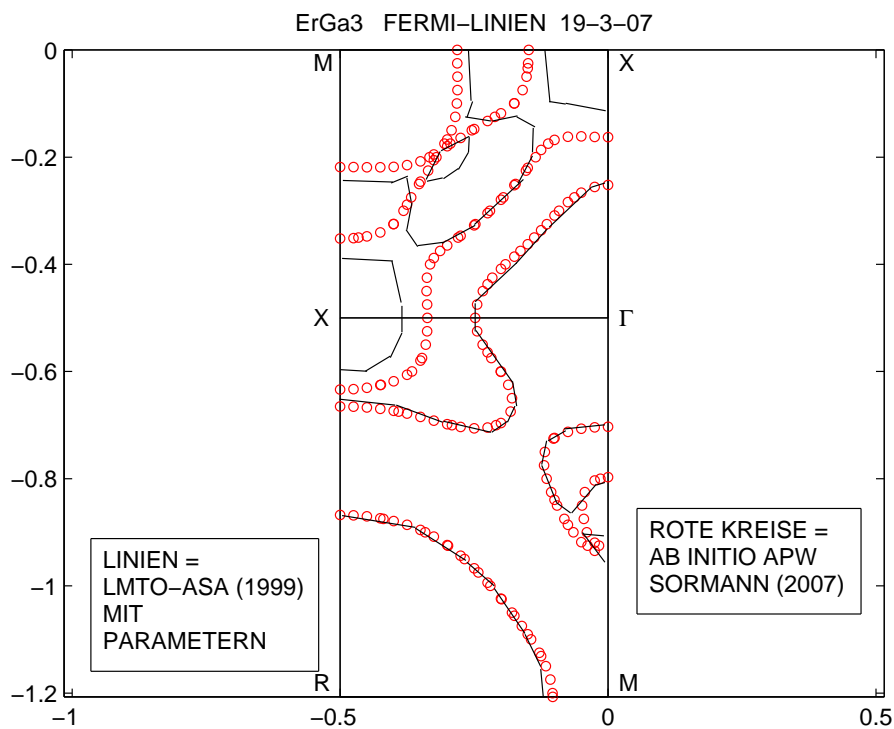


Das Hauptproblem der APW: ein nicht-lineares EW-Problem





APW-Bandstruktur für ErGa<sub>3</sub> (Sormann 2007).



„Fermi-Schnittlinien“ (*Fermi cuts*).