$\boxed{\textbf{DIE OPW-METHODE}}$

Entwicklung der Wellenfunktion für ein Valenzelektron

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{t=1}^{\infty} a_t(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_t}$$

Die OPW-Basisfunktionen

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \sum_{j(Core)} \mu_{\mathbf{k},j}\, \varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r})$$

Die Core-Funktionen

$$\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} w_j(\mathbf{r} - \mathbf{R})\,.$$

Aus der Orthogonalitätsbedingung

$$< \phi_{\mathbf{k}} | \varphi_{\mathbf{k},j} >= 0$$

folgt für die Orthogonalitätskoeffizienten

$$\mu_{\mathbf{k},j} = \frac{1}{\sqrt{\Omega_0}} \int_{(\infty)} d^3r\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, w_j^{\star}(\mathbf{r})\,.$$

Komponenten der Strukturmatrix:

$$S_{s,t} = \delta_{s,t} - \sum_{j(Core)} \mu^*_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_s,j}\, \mu_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_t,j}$$

Komponenten der Hamilton-Matrix:

$$H_{s,t} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_s|^2 \delta_{s,t} + V(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_t) - \sum_{j(Core)} E_j\, \mu^*_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_s,j}\, \mu_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_t,j}$$

Das homogene lineare OPW-Gleichungssystem

$$a_s(\mathbf{k})\left[\frac{\hbar^2}{2m}|\mathbf{k}+\mathbf{K}_s|^2+V(\mathbf{0})-E(\mathbf{k})-\sum_{j(Core)}(E_j-E(\mathbf{k}))|\mu_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_s,j}|^2\right]+$$

$$+\sum_{t\neq s}a_t(\mathbf{k})\left[V(\mathbf{K}_s-\mathbf{K}_t)-\sum_{j(Core)}(E_j-E(\mathbf{k}))\,\mu^*_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_s,j}\,\mu_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_t,j}\right]=0$$

$$(s=1,\ldots,\infty)$$