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

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

APW-Methode

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

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

KKR-Methode

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

Der Variationsansatz der APW-Methode:

$$E \int_{i+a} d^3r\, u^*\, u \;=\; \int_{i+a} d^3r\, u^*\, \hat{H}\, u + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2}\int_{(S)} d\mathbf{s}\cdot\left[\nabla u_a^* + \nabla u_i^*\right](u_a - u_i)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2}\int_{(S)} d\mathbf{s}\cdot\left[\nabla u_a - \nabla u_i\right](u_a^* + u_i^*)\,. \qquad (1)$$

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):

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

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

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

Es gilt:

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

Mit der Identität

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

erhält man weiter

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

Daraus resultiert das Ergebnis

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

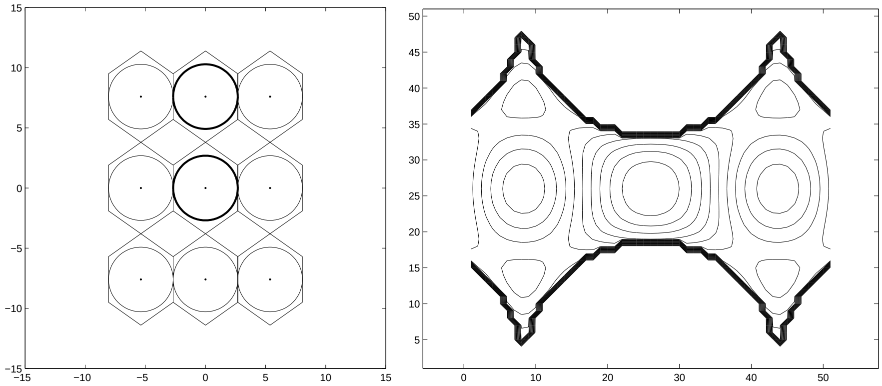
Für den Integranden $u_t^\star \hat{H}\delta u_a$ erhält man eine äquivalente Umformung. Somit ergibt sich:

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

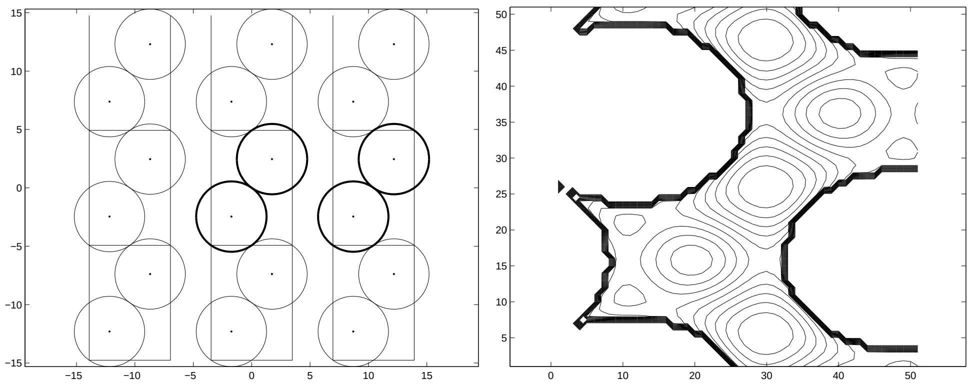
Setzt man diese Ausdrücke in die Gleichung (15.5) ein, ergibt sich unmittelbar die *Stationaritätsbedingung*

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

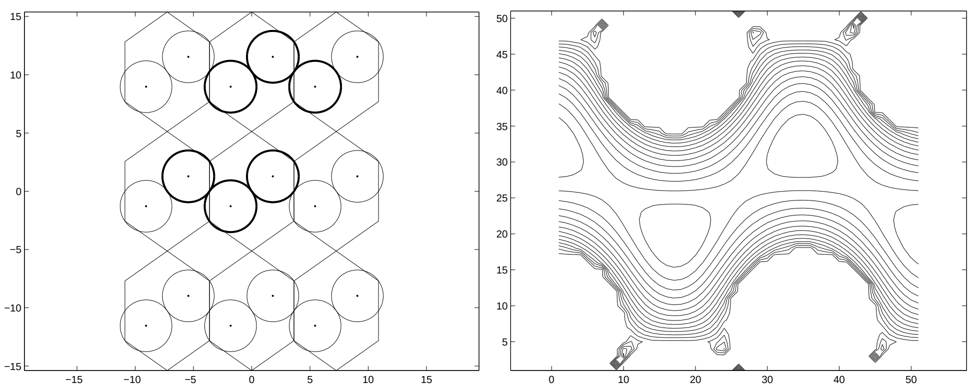
Zur muffin-tin-Näherung



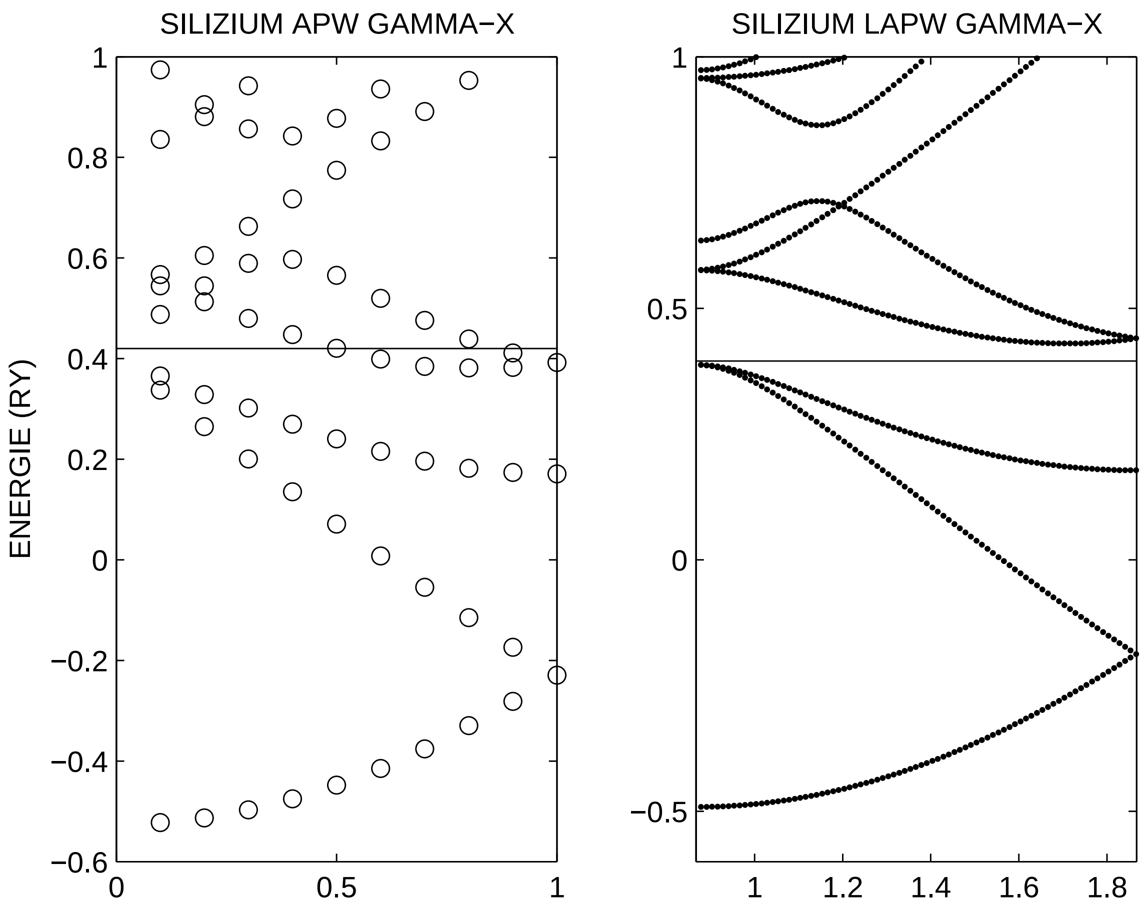
Struktur der Atomkugeln und Interstitial-Potential: fcc (Kupfer)



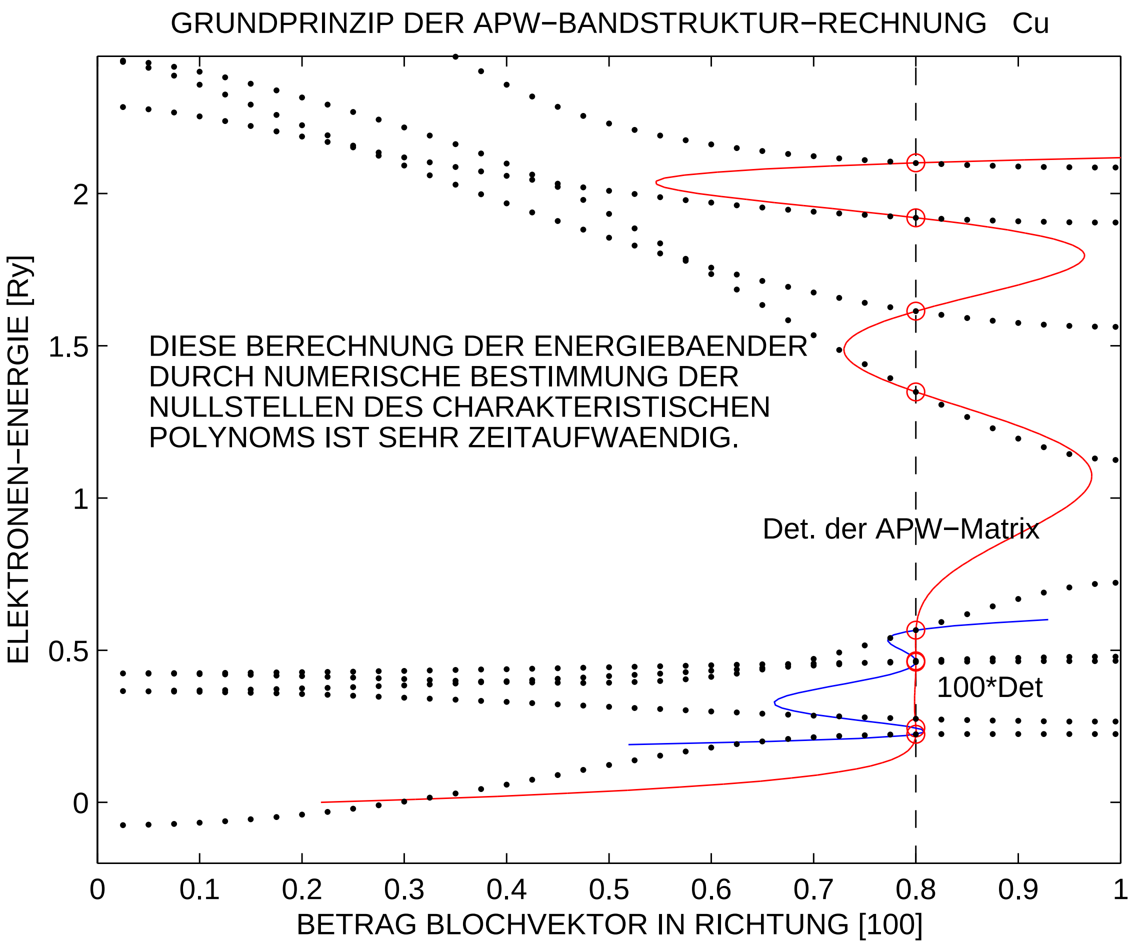
Struktur der Atomkugeln und Interstitial-Potential: hcp (Magnesium)

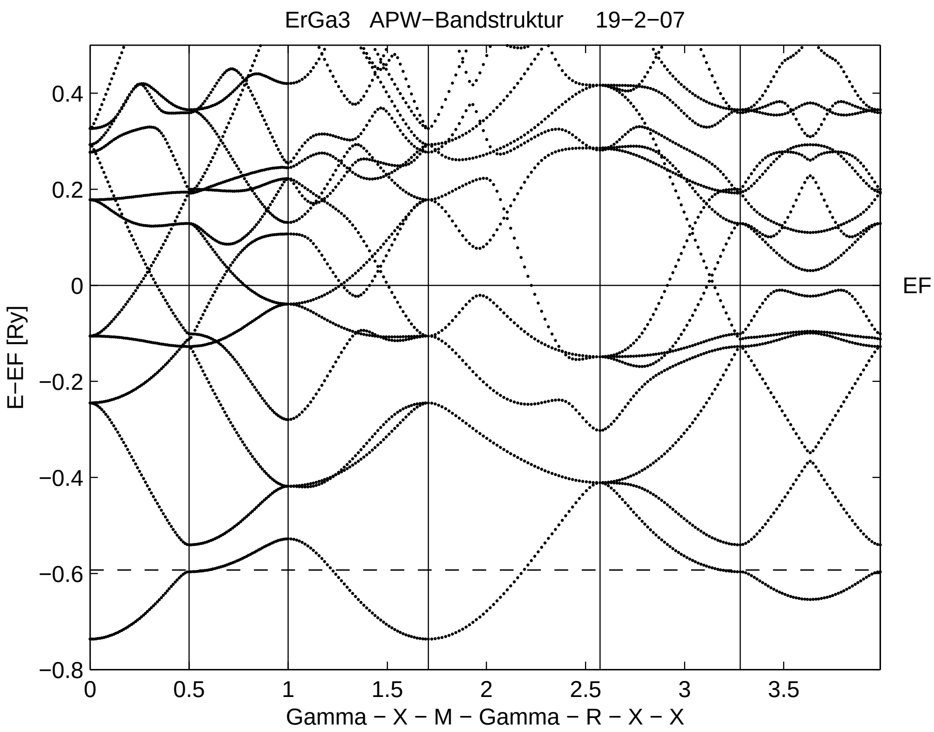


Struktur der Atomkugeln und Interstitial-Potential: diamant (Silizium)

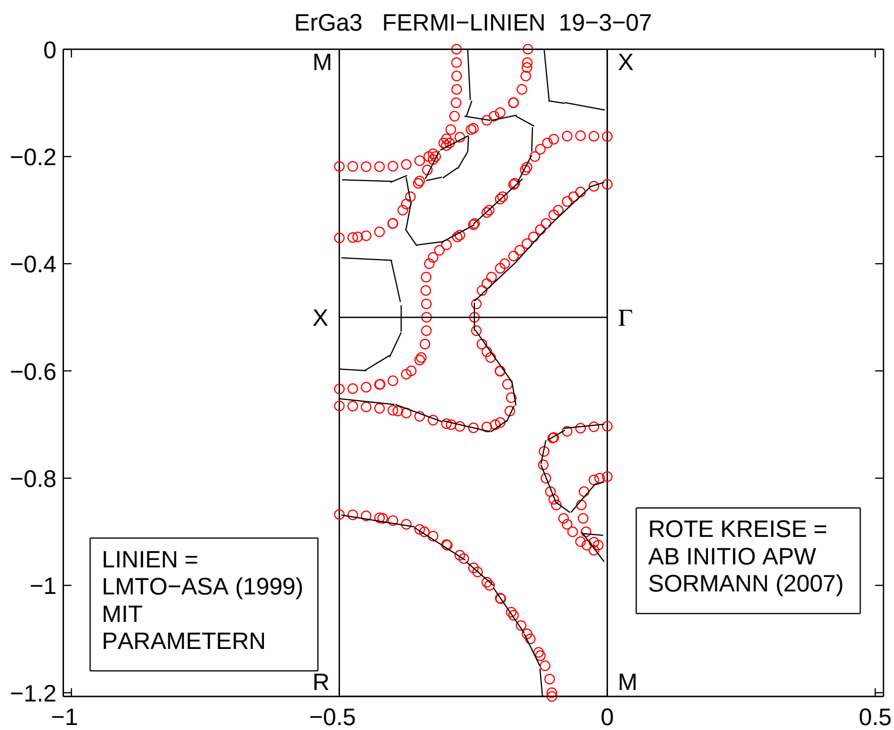

SILIZIUM APW GAMMA−X
SILIZIUM LAPW GAMMA−X
ENERGIE (RY)
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
−0.2
−0.4
−0.6
0
0.5
1
1
0.5
0
−0.5
1
1.2
1.4
1.6
1.8

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





APW-Bandstruktur für $ErGa_3$ (Sormann 2007).



„Fermi-Schnittlinien“ (*Fermi cuts*).