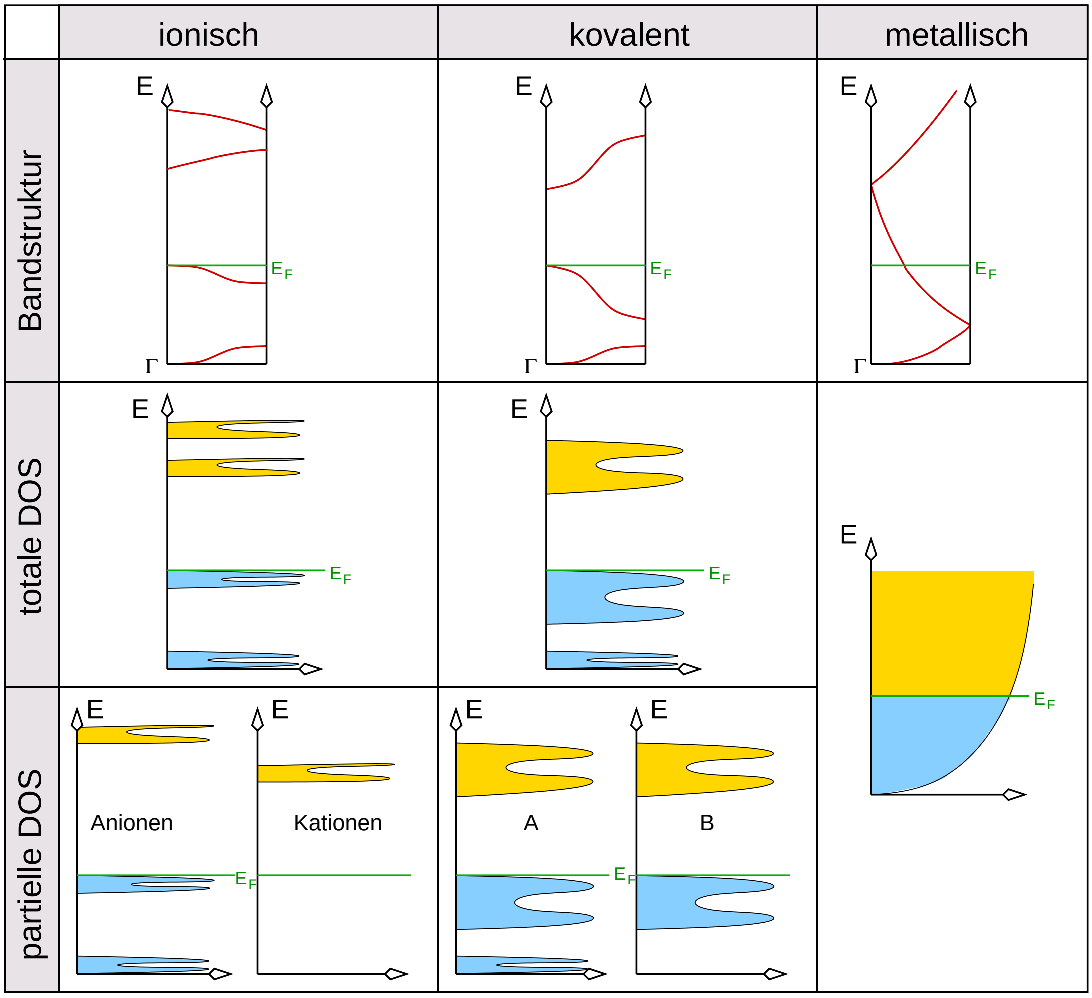
III. Berechnungen, Beispiele



Bandstruktur, tDOS, pDOS nach Bindungstypen: Übersicht

Berechnungen: Übersicht über verschiedene Rechenmethoden

Behandlung des Festkörpers:
nichtperiodisch (Cluster)
periodisch (Elementarzelle)

Behandlung von Spins:
non−spinpolarized
spin polarized
(mit bestimmter magn. Ordnung)

Relativistik:
non relativistic
semi−relativistic
fully−relativistic

Basisfunktionen:
plane waves (PW)
augmented plane waves (APW)
atomic orbitals: Slater (STO), Gaussians (GTA)
LMTO

Schrödinger−Gleichung

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{\nabla^2_{\vec{r}_i}}{m_e}}_{\hat{T}_e} + \underbrace{\frac{1}{8\pi\epsilon_0}\sum_{i\neq j=1}^{N} \frac{e^2}{\mid \vec{r}_i - \vec{r}_j \mid}}_{\hat{V}_{ee}} - \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{i=1}^{N}\sum_{n=1}^{M} \frac{Z_n e^2}{\mid \vec{r}_i - \vec{R}_n \mid}}_{\hat{V}_{en}} \right] \phi_i^k = \epsilon_i^k \phi_i^k$$

Austausch/Korrelations−Potential:
Hartree−Fock (HF) (+correlations)
Density functional theory (DFT)
Local density approximation (LDA)
Generalized gradient approximation (GGA)
LDA+U

Form des Potentials:
(non−)selfconsistent "Muffin−tin" (MT)
atomic sphere approximation (ASA)
full−potential (FT)
pseudopotential (PP)