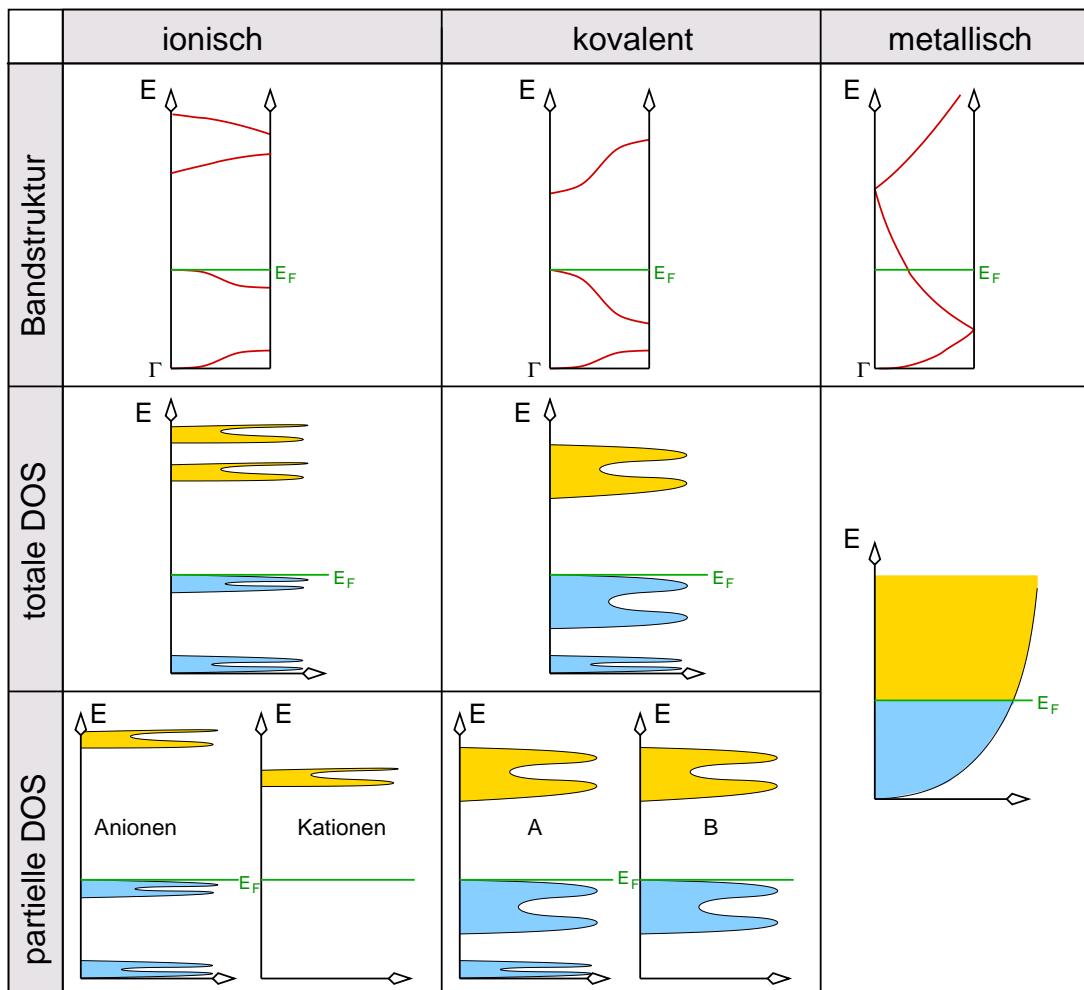


III. Berechnungen, Beispiele



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

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

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)