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

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

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

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