

Kontinuum Gleichung: Bewegung 1 T im mean field  
 → off 1T Problem

HF: Austausch WW noch hinzugefügt (Pauli)  
 antisymmetrisch & Slater Det

G. 22 und folgend §§ fehlen!

Dichtefunktionaltheorie:

Basiert auf freiem  $e^-$  Gas: Austauschenergie  $\propto \rho^{1/3}$   
 → alle Gleichungen als Funktionen d. Dichteschreiben

Kohn Sham:

Energie d. GZ ist Fkt der Teilchendichte

Bei SGL ↓ Fkt d. WF

Dichte hängt nur vom Ort ab

WF hängt von  $10^{23} T$  ab

Dichtefkt kennt man nicht, ist auch nicht analytisch auszurechn.

Kohn Sham EW sind EW dieser Theorie

Bindungslänge f. Moleküle wichtig & f. Chemiker

Funktional hat sein Min. aufgr. einer Var. von  $n(\vec{r})$

Zeigen, dass Theoreme stimmen

$n_0$  soll ein  $E_0$  & nicht  $E_0'$  beschreiben

Äußeres Potential: wird von Ionen im Gitter auf  $e^-$   
 (Kerne)

ausgeübt

Fehler:  $E_0' < \langle \psi_0 | H' | \psi_0 \rangle$  — nicht H

Ein paar Fehler drin?

Es kann nur 1 Dichte geben zu 1er E

Variation bzgl. der Dichte muss verschwinden

Wenn man Fkt noch Per variiert muss man eine Fkt mit Minimum bekommen; Dieses Min ist GGW - grösse

// hier ist E bzgl n im Min

Funktional G definieren

freies  $e^-$  Modell ist nur f. einfache Elemente gut

Kupfer, Na, Kalium

Bei Hartree Fock Punkt G.83 nicht, da immer untersch

WF drin stehen  $\psi_a, \psi_b$  etc.

denn d T muss erh. bleiben

$$N = \int d^3r n(r)$$

G.86:  $\lambda$  kommt aus  $N = \int$  // Lagrange Multi.

$\mu$  kommt aus G.84

Problem: Punkt f T kennt man nicht!

→ Dichte als Fkt von WF  $\psi$  schreiben!

Man bekommt statt SGL; VielteilchenPot d. off. Einst Pot

ersetzen

Jetzt haben wir SGL von Dichte

Lösung des Vielteilchenproblems durch Transform auf

Einteilchenproblem EW sind OK solange es den GZ ist

Innerhalb der besetzten Zustände ...

Unbesetzte Zustände können nicht beschrieben werden (angeregte Zust.)

ZB bei Halbleitern systematische Fehler

Schwierig:  $\epsilon_{xc}$  &  $\mu_{xc}$  kennt man nicht !!

Muss man fitten

Problematisch werden Fd Fd dort, wo Korrelationen stark werden  
/ Fehler den man macht, wenn man von Viel auf Ein T Modell übergeht

Bei kleinen Dicken ist Kor. gering ( $e^-$  haben genügend Platz)

/  
mikroskopische Beschreibung der Bewegung der Teilchen  
Bewegung der T sind nicht mehr unabhängig

ZB 2  $e^-$  in Me: haben eig., sehr wahrscheinl. großen  
Abstand, aber nicht immer

Korrelation: zB bei Orbitalen; Oxide in Metallen zB  
machen große Korrelationen; Modelle ändern sich ...

## Kulband

$C_{ij}$ : erzeugt  $e^-$  mit Spin  $\sigma$  an Gitterpl.  $i$

T in Sight binding  $\sim t_{ij}$  // Energie zum Verschieben

Coulomb abstoßung:  $U$   $n$ : Besetzungszahl = 0 // 1

Vereinfachung: statt  $\frac{1}{U}$  bei abstoßung eine Konstante

$U$  kann man je nach Gebrauch variieren

Es gibt verschlechte Parameter ..

Grenzfälle,  $U=0 \rightarrow$  einfach

das mit Fourier Trafo

Ergebnis wie im tight binding Hauptteil wenn  $U \ll t$  ist

$t_{ij}$ : Hopping Parameter

$U$  groß:  $n_{\uparrow}, n_{\downarrow}$  annähern!  $\bar{n}$ : gemittelte Besetzungszahl

Coulomb WW erzeugt hier einen Magn Zustand

Heundsche Regeln sagen, dass spins zuerst  $\uparrow \uparrow$  sind

$\rightarrow$  magn  $n_{\uparrow}$  hier: wie viele  $\uparrow$  drauf schauen

LDA +  $U$  ?  $H$  ist nicht mehr variationell

// nicht mehr so aktuell

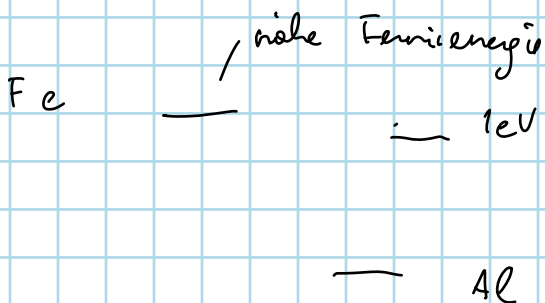
Beispiel: Fe Al gemacht. Std. Material hat besondere Eigenschaften

magn. GZ kommt heraus (experiment nicht bestätigt)

Fehler im LDA Bandbreite der d Zustände ist sehr klein

1 eV (normalerweise 6-7 eV)

Keine virt. Band Zustände - typischer Fall f. Korrelationen



Wenn man Kon. aufdreht ( $LDA + U$ ) dann wandern

Zustände die vorher mag. sind unter Starer Kridierung  $\rightarrow$   
sind nicht mehr magnetisch

FeAl: Korrelation unterdr. Magn

erst wenn  $U$  sehr groß: wieder Magn

DFT nicht vorgezogen

Polarisierbarkeit, Abschirmung etc. berücksichtigt