

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta

Band: 41 (1968)

Heft: 6-7

Artikel: Verallgemeinerung der MAPW-Methode für ein beliebiges Potential

Autor: Bross, Helmut

DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-113918>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 01.04.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Verallgemeinerung der MAPW-Methode für ein beliebiges Potential

von **Helmut Bross**

Sektion Physik der Universität München

(I. V. 68)

Zur Berechnung der Einelektronenzustände in Kristallen wird eine Verallgemeinerung der Modifizierten Augmented Plane Wave (MAPW)-Methode beschrieben, bei der die Ortsabhängigkeit des Einelektronenpotentials $V(\mathbf{r})$ völlig beliebig sein kann.

1. Problemstellung

Theoretische Untersuchungen der Bandstruktur von Festkörpern sind in den letzten Jahren sehr häufig durchgeführt worden. Ermöglicht wurde diese Entwicklung durch den Bau leistungsfähiger Rechenautomaten, welche die umfangreichen Untersuchungen in relativ kurzer Zeit durchzuführen gestatten. Weiterhin wurden sie gefördert durch eine Reihe von experimentellen Methoden, welche bestimmte elektronische Eigenschaften, wie z. B. die Gestalt der Fermioberfläche, die relative Lage der Energiebänder gegeneinander, die effektive Masse und Zyklotronmasse, der direkten Messung zugänglich machen und die den Wunsch aufkommen lassen, diese Erscheinungen theoretisch zu verstehen.

Obwohl die Valenz- und Leitungselektronen, die für die typischen Eigenschaften von Metallen und Halbleitern verantwortlich sind, über die Coulombsche Abstossung miteinander gekoppelt sind, wird man bei allen Überlegungen von einer Einteilchennäherung ausgehen, in die man möglichst viel vom Vielkörperaspekt hineinsteckt. Vorschläge, wie man dies zweckmässigerweise machen kann, sind schon verschiedentlich veröffentlicht worden [1–7]. Die Einteilchennäherung selbst besteht im wesentlichen darin, dass man die Schrödingergleichung für *ein* (eventuell fiktives) Teilchen löst, das sich in einem periodischen Potential bewegt. Hierzu sind eine Reihe von Verfahren vorgeschlagen worden; für die heute zur Verfügung stehenden Rechenautomaten haben sich die OPW-Methode [8], die APW-Methode [9] sowie die Korringa-Kohn-Rostocker-Methode [10] als am besten geeignet erwiesen, wenn man von der Pseudopotentialmethode [11] absieht, die mehr den Charakter eines Interpolationsverfahrens hat. Alle genannten Verfahren lösen das gestellte Problem mehr oder weniger gut. Auf den ersten Blick scheint das OPW-Verfahren am vorteilhaftesten zu sein. Hierbei stellt man bekanntlich die Wellenfunktion durch eine Linearkombination von Funktionen dar, die aus einer ebenen Welle und einer atomaren Wellenfunktion so zusammengesetzt sind, dass jede dieser Funktionen auf den Wellenfunktionen der Rumpfelektronen orthogonal ist. Die Wellenfunktionen in der OPW-Methode sind also im ganzen Raum stetig; darüber hinaus kann das Potential völlig beliebig sein. Trotzdem besitzt das Verfahren eine Reihe von Mängeln, die seine Brauchbarkeit

wesentlich einschränken, auf die jedoch hier nicht weiter eingegangen werden soll [12–13]. Sowohl bei der APW-Methode als auch bei der Korringa-Kohn-Rostocker-Methode wird vorausgesetzt, dass das Potential sog. muffin-tin-Form hat. Man versteht darunter ein Potential, das innerhalb von Kugeln, deren Mittelpunkte mit den Atomkernen zusammenfallen, sphärisch symmetrisch und im Restgebiet konstant ist. Als weiteren Nachteil der beiden Verfahren sei erwähnt, dass die Wellenfunktionen an der Grenzfläche, welche die beiden verschiedenen Potentialgebiete trennt, nicht mehr stetig sind. Solange man sich nur für den qualitativen Verlauf der Bandstruktur interessiert, scheint diese Unstetigkeit belanglos zu sein. Das wird sicherlich nicht mehr der Fall sein, wenn man Erscheinungen verstehen will, bei denen explizit die Ortsabhängigkeit der Wellenfunktionen benötigt wird. Sowohl für die APW-Methode als auch für die Korringa-Kohn-Rostocker-Methode wurden inzwischen Verfeinerungen vorgeschlagen, bei denen die Wellenfunktionen im ganzen Raum stetig sind und bei denen auch das Potential in den Gebieten zwischen den Kugeln eine beliebige Ortsabhängigkeit haben kann [14–15]. Innerhalb der einzelnen Kugeln wird jedoch das Potential weiterhin als sphärisch vorausgesetzt. Schon im einfachsten Fall lässt sich zeigen, dass diese Voraussetzung näherungsweise nur dann erfüllt werden kann, wenn man die Kugeln nicht zu gross macht. Als Modell wollen wir das freie Elektronengas betrachten, in dem die Ionen als Ladungspunkte mit der Kernladung Z an den Gitterplätzen \mathbf{R}_n lokalisiert sein mögen. Bis auf eine Konstante, die wir gegebenenfalls gleich Null setzen, ergibt sich das Potential aus

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Z e^2}{|\mathbf{r}|} + Z e^2 \sum_{\mathbf{R}_n \neq 0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|}. \quad (1.1)$$

Wenn der Wertebereich von \mathbf{r} auf das Atompolyeder mit $\mathbf{R}_n = 0$ beschränkt ist, ist $|\mathbf{r}|/|\mathbf{R}_n| < 1$, und wir können den Nenner in der Gittersumme in bekannter Weise nach Multipolen entwickeln¹⁾.

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Z e^2}{|\mathbf{r}|} + Z e^2 \sum_{l=1}^{\infty} r^l \sum_{\mathbf{R}_n \neq 0} \frac{P_l(\mathbf{r}^0 \cdot \mathbf{R}_n^0)}{|\mathbf{R}_n|^{l+1}} \quad (1.2)$$

P_l : Legendresche Polynome.

Das Potential ergibt sich somit als winkelabhängig, und die Anisotropie nimmt mit wachsendem $|\mathbf{r}|$ zu. Ähnliche Überlegungen lassen sich auch für heteropolare Kristalle anstellen. Als Beispiel seien nur die III-V-Verbindungen erwähnt, bei denen bekanntlich der elektronische Zustand dadurch demjenigen von Germanium ähnlich wird, dass jeweils – grob gesprochen – das fünfwertige Ion ein Elektron an das dreiwertige Ion abgibt. Hierdurch entsteht ein heteropolares Gitter, das auch zu einem Potential mit nichtsphärischem Anteil führt. Eine noch stärkere Abweichung von der sphärischen Symmetrie ist dann zu erwarten, wenn das Potential über die Poissongleichung aus der Ladungsdichte der Elektronen und diese wiederum aus den Kristallwellenfunktionen bestimmt wird. Für solche Selbstkonsistenz-Untersuchungen scheiden auch die verfeinerten Formulierungen der APW- und der Korringa-Kohn-Rostocker-

¹⁾ In den meisten Fällen werden infolge der Gittersymmetrie verschiedene Gittersummen in (1, 2) bei festem l verschwinden. In einem Kristall mit kubischer Symmetrie beginnt z. B. die Summe erst bei $l = 4$.

Methode aus, weil der Fehler, der dadurch entsteht, dass nur der sphärische Anteil des Potentials berücksichtigt wird, grösser als die Genauigkeitsschranke werden kann, die man sich bei der Selbstkonsistenzforderung setzt. Ziel der vorliegenden Arbeit wird es sein zu zeigen, wie sich die MAPW-Methode ohne viel Mühe auch auf beliebige Potentiale erweitern lässt.

2. Kurzer Abriss des Verfahrens

Wie beim ursprünglichen MAPW-Verfahren [14] wird das Atompolyeder durch eine einbeschriebene Kugel in die beiden Bereiche I und II unterteilt²⁾. Den Radius der Kugel r_0 wählen wir so, dass die Abweichungen des Potentials vom sphärischen Mittelwert

$$V_{sph}(r) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_r V(r) \quad (2.1)$$

gering sind. Damit die Wellenfunktionen der im Kristall mehr oder weniger freien Valenz- bzw. Leitungselektronen auf den Wellenfunktionen der Rumpfelektronen orthogonal sind, müssen sie im Bereich des Ionenrumpfes oszillieren. Wir stellen sie deshalb im Bereich I, der durch $0 \leq r \leq r_0$ bestimmt ist, durch Produkte von Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\mathbf{r}^0)$ und Lösungen der Radialdifferentialgleichung

$$\frac{d^2 R_l}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_l}{dr} + \left[E_l - \frac{l(l+1)}{r^2} - V_{sph}(r) \right] R_l = 0 \quad (2.2)$$

dar. Im Unterschied zum entsprechenden Problem beim freien Atom sind die Separationsparameter E_l nicht durch Randbedingungen festgelegt, sondern sind zunächst als freie Grössen anzusehen, über die später noch verfügt wird. Die zu einer Drehimpulsquantenzahl l gehörende Radialfunktion R_l wird man im allgemeinen aus einer Reihe von im Nullpunkt regulären Lösungen der Differentialgleichung $R_{n,l}$ mit verschiedenen Energien $E_{n,l}$ zusammensetzen, die wir durch den weiteren Index n unterscheiden wollen. Die Unterscheidung wird so durchgeführt, dass n die Zahl der Knoten der Funktionen $R_{n,l}$ im Bereich $0 \leq r \leq r_0$ abzählt. Da im allgemeinen die $E_{n,l}$ von den Eigenwerten $E(\mathbf{k})$ verschieden sind, und da wir zunächst nur den sphärischen Teil des Potentials berücksichtigt haben, wird weder ein Produkt $Y_{lm} R_{n,l}$ noch eine Linearkombination von solchen Produkten eine Lösung der Schrödingergleichung sein. Wie die bisherigen Überlegungen gezeigt haben, bedeutet dieser Verzicht auf die exakte Lösung der Schrödingergleichung im Bereich I keine wesentliche Einbusse an Genauigkeit, wenn die Lösungen wenigstens das der Schrödingergleichung äquivalente Extremalprinzip erfüllen, wenn sie ausserdem im ganzen Raum stetig sind und das richtige Translationsverhalten zeigen. Das Extremalprinzip löst man zweckmässigerweise mit dem Ritzschen Verfahren, wobei für die Vergleichsfunktionen im Bereich I der Ansatz

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}}^I(\mathbf{r}) = & \sum_n \sum_{l=0}^L \sum_m (2l+1) i^{l+2m} A_{nlm} R_{nl}(r) Y_{lm}(\mathbf{r}^0) + \sum_{\mathbf{K}_j} \sum_{l=L+1}^{\infty} \sum_m v(\mathbf{K}_j) \\ & \times (2l+1) i^{l+2m} Y_{l,-m}(|\mathbf{k} + \mathbf{K}_j|^0) \times j_l(|\mathbf{k} + \mathbf{K}_j| r) Y_{lm}(\mathbf{r}^0) \quad (2.3) \end{aligned}$$

²⁾ In einem Gitter mit Basis wird man jedes Gitterion mit einer Kugel umgeben, deren Radius höchstens so gross gewählt wird, dass die einzelnen Kugeln sich gerade berühren.

gemacht wird. (\mathbf{K}_j : reziproker Gittervektor). Die komplexen Entwicklungskoeffizienten A_{nlm} und $v(\mathbf{K}_j)$ werden später durch das Variationsverfahren festgelegt. $j_l(x)$ sind sphärische Besselfunktionen. Wie wir gleich zeigen werden, wird durch die zweite Summe erreicht, dass die Wellenfunktionen einschliesslich ihrer ersten Ableitungen im ganzen Raum stetig sind. Über die obere Grenze L der Summe über die Drehimpulsquantenzahlen kann im allgemeinen frei verfügt werden; grösseres L bedeutet ebenso wie die Mitnahme von Radialfunktionen mit mehr Knoten eine bessere Annäherung an die wirkliche Wellenfunktion. Berücksichtigt man die Entwicklung einer ebenen Welle nach Kugelwellen, so lässt sich der obige Ansatz auch umordnen in

$$\Psi_{\mathbf{k}}^I(\mathbf{r}) = \sum_j v(\mathbf{K}_j) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\substack{l=0 \\ m}}^L (2l+1) i^{l+2m} Y_{lm}(\mathbf{r}^0) \left\{ \sum_n A_{nlm} R_{nl}(r) - \sum_j v(\mathbf{K}_j) Y_{l,-m}(\mathbf{k}_j^0) j_l(|\mathbf{k}_j| r) \right\}. \quad (2.4)$$

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

Der Vorteil dieser Darstellung (2.4) ist, dass sie nur endliche Summen umfasst, so dass Summation und Differentiation ohne weiteres vertauscht werden können.

Im Restgebiet des Atompolyeders wird die Wellenfunktion nicht stark ortsveränderlich sein, so dass eine Entwicklung nach ebenen Wellen mit relativ wenigen Gliedern ihren Verlauf gut wiedergeben wird.

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{II}(\mathbf{r}) = \sum_j v(\mathbf{K}_j) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.5)$$

Aus (2.5) ist leicht ersichtlich, dass die Wellenfunktion das richtige Translationsverhalten

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

besitzt. Ein Vergleich der beiden Darstellungen für die Wellenfunktionen zeigt, dass sie auf der Kugel $r = r_0$ stetig ineinander übergehen, wenn für diesen Wert r_0 die geschweifte Klammer von (2.4) verschwindet. In entsprechender Weise lässt sich auch die Stetigkeit der ersten Ableitungen zeigen. Die Stetigkeitsbedingungen lauten somit

$$\sum_n A_{nlm} R_{nl}(r_0) - \sum_j v(\mathbf{K}_j) Y_{l,-m}(\mathbf{k}_j^0) j_l(|\mathbf{k}_j| r_0) = 0 \quad (2.7a)$$

für $l \leq L$

$$\sum_n A_{nlm} \frac{dR_{nl}}{dr} \Big|_{r=r_0} - \sum_j v(\mathbf{K}_j) Y_{l,-m}(\mathbf{k}_j^0) \frac{dj_l(|\mathbf{k}_j| r)}{dr} \Big|_{r=r_0} = 0. \quad (2.7b)$$

Wie schon erwähnt, begnügen wir uns damit, dass die Vergleichsfunktionen genau so wie bei der OPW-Methode den Erwartungswert der Energie

$$\int d\tau \Psi_{\mathbf{k}}^* H \Psi_{\mathbf{k}} \quad (2.8)$$

zu einem Extremum machen. Als Nebenbedingung muss berücksichtigt werden, dass die Wellenfunktion $\Psi_{\mathbf{k}}$ normiert ist und dass die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung auf der Oberfläche der Kugel $r = r_0$ stetig sind. Hierzu benützen wir die Me-

thode der Lagrangeschen Multiplikatoren. Die genaue Durchrechnung, die wir hier nicht angeben wollen, führt zu dem Ergebnis, dass der Lagrangesche Multiplikator der über die Normierungsforderung der Wellenfunktion in den Formalismus eingeführt wird, mit der Gesamtenergie identisch ist. Die übrigen Lagrangeschen Multiplikatoren, die mit den Stetigkeitsbedingungen verknüpft sind, bezeichnen wir mit α_{lm} bzw. β_{lm} .

Die Extremalforderung führt auf das folgende System linearer Gleichungen

$$\sum_j \{ H_{jj'} - E(\mathbf{k}) \Omega_{jj'} \} v(\mathbf{K}_{j'}) - \sum_{lm} Y_{l,-m}^*(\mathbf{k}_j^0) j_l(|\mathbf{k}_j| r_0) \alpha_{lm} - \sum_{lm} Y_{l,-m}^*(\mathbf{k}_j^0) \left. \frac{dj_l(|\mathbf{k}_j| r)}{dr} \right|_{r=r_0} \beta_{lm} = 0 \quad \text{für alle } j \quad (2.9a)$$

$$\sum_{n'l'm'} \{ H_{nlm, n'l'm'} - E(\mathbf{k}) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \Omega_{nlm, n'l'm'} \} A_{n'l'm'} + R_{nl}(r_0) \alpha_{lm} + \left. \frac{dR_{nl}(r)}{dr} \right|_{r=r_0} \beta_{lm} = 0, \quad \text{für alle } n, l \text{ und } m, \quad (2.9b)$$

wobei folgende Abkürzungen verwendet werden

$$\Omega_{jj'} = \Omega_0 \delta_{jj'} - 4\pi \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mathbf{k}_j^0 \cdot \mathbf{k}_{j'}^0) \int_0^{r_0} dr r^2 j_l(|\mathbf{k}_j| r) j_l(|\mathbf{k}_{j'}| r) \quad (2.10a)$$

$$\Omega_{nlm, n'l'm'} = 4\pi (2l+1) \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \int_0^{r_0} dr r^2 R_{nl}(r) R_{n'l}(r) \quad (2.10b)$$

$$\begin{aligned} H_{jj'} &= \frac{\hbar^2}{4m} [k_j^2 + k_{j'}^2] \Omega_{jj'} + \Omega_0 \tilde{V}(|\mathbf{K}_{j'} - \mathbf{K}_j|) \\ &+ 4\pi \int_0^{r_0} dr r^2 V_{sph}(r) \{ j_0(|\mathbf{K}_{j'} - \mathbf{K}_j| r) - \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mathbf{k}_j^0 \cdot \mathbf{k}_{j'}^0) j_l(|\mathbf{k}_j| r) j_l(|\mathbf{k}_{j'}| r) \} \\ &- \sum (2l+1)(2l'+1) i^{l'-l} (-1)^{m+m'} Y_{l,-m}(\mathbf{k}_j^0) Y_{l',-m'}^*(\mathbf{k}_{j'}^0) \int d\Omega_r Y_{lm}^*(\mathbf{r}^0) \\ &\times Y_{l'm'}(\mathbf{r}^0) K_{l'l'}(\mathbf{r}^0) \times \int_0^{r_0} dr r^2 j_l(|\mathbf{k}_j| r) j_{l'}(|\mathbf{k}_{j'}| r) \tilde{V}(l'', r) \end{aligned} \quad (2.11a)$$

$$\begin{aligned} H_{nlm, n'l'm'} &= 2\pi (2l+1) \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \delta_{mm'} [E_{nl} + E_{n'l}] \int_0^{r_0} dr r^2 R_{nl}(r) R_{n'l}(r) \\ &+ \sum_{l'' > 0}^{l+l'} (2l+1)(2l'+1) i^{l'-l} (-1)^{m+m'} \int d\Omega_r Y_{lm}^*(\mathbf{r}^0) Y_{l'm'}(\mathbf{r}^0) K_{l'l''}(\mathbf{r}^0) \\ &\times \int_0^{r_0} dr r^2 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \tilde{V}(l'', r). \end{aligned} \quad (2.11b)$$

Ω_0 : Volumen des Atompolyeders. $\tilde{V}(\mathbf{r})$ bezeichnet die Abweichung

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \begin{cases} V(\mathbf{r}) - V_{sph}(r) & \text{für } 0 \leq r \leq r_0 \\ V(\mathbf{r}) & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.12)$$

vom muffin-tin-Potential. Sie lässt sich durch die Fourierreihe

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \sum_j V(\mathbf{K}_j) e^{i\mathbf{K}_j \cdot \mathbf{r}} \quad (2.13)$$

darstellen. Im Bereich I erweist es sich als zweckmässig, $V(\mathbf{r})$ nach sphärischen Harmonischen $K_l(\mathbf{r}^0)$ zu entwickeln, die invariant sind gegenüber allen Deckoperationen des betrachteten Kristalls [16].

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \sum_l \tilde{V}(l, r) K_l(\mathbf{r}^0) \quad \text{für } 0 \leq r \leq r_0. \quad (2.14)$$

In (2.11) erstrecken sich die Oberflächenintegrale über die Einheitskugel; sie lassen sich aber ohne weiteres durch Clebsch-Gordan-Koeffizienten ausdrücken. In (2.11) sind alle Summen endlich, so dass keine Konvergenzschwierigkeiten zu erwarten sind.

Im Unterschied zum ursprünglichen MAPW-Verfahren [14] ist es nicht mehr möglich, einen Teil der Unbekannten, die durch das homogene Gleichungssystem (2.9) und durch die Nebenbedingungen (2.7) bestimmt sind, zu eliminieren. Der Rang der Koeffizientendeterminante, welche die Eigenwerte $E(\mathbf{k})$ festlegt, wird dementsprechend grösser sein.

Die vorliegende Formulierung hat andererseits den Vorteil, dass das Eigenwertproblem von Standardform ist, so dass beim praktischen Rechnen Routineprogramme verwendet werden können. Beim ursprünglichen MAPW-Verfahren hingegen mussten die Nullstellen der Säkulardeterminante iterativ aufgesucht werden. Alle übrigen Überlegungen verlaufen analog der ursprünglichen Formulierung, so dass wir darauf nicht weiter einzugehen brauchen. Hervorzuheben ist vielleicht noch, dass die vorliegende Formulierung auch gut dazu geeignet ist, die Fehler abzuschätzen, die durch die alleinige Berücksichtigung eines sphärischen Potentials im Bereich I bedingt sind.

Literaturverzeichnis

- [1] J. GOLDSTONE, Proc. Roy. Soc. (London) *A* 239, 267 (1957).
- [2] J. HUBBARD, Proc. Roy. Soc. (London) *A* 240, 539 (1957); *A* 243, 336 (1957); auch *A* 244, 199 (1958).
- [3] D. S. FALK, Phys. Rev. *118*, 105 (1960).
- [4] G. W. PRATT, Phys. Rev. *118*, 462 (1960).
- [5] F. BASSANI, J. ROBINSON, G. GOODMAN and J. R. SCHRIEFFER, Phys. Rev. *127*, 1969 (1962).
- [6] L. HEDIN, Phys. Rev. *139*, A 796 (1965).
- [7] H. BROSS, Veröffentlichung demnächst.
- [8] C. HERRING, Phys. Rev. *57*, 1169 (1940).
- [9] J. C. SLATER, Phys. Rev. *51*, 846 (1937); sowie T. LOUCKS, *Augmented Plane Wave Method* (W. A. BENJAMIN, New York–Amsterdam 1967).
- [10] J. KORRINGA, Physica *13*, 392 (1967); W. KOHN and N. ROSTOCKER, Phys. Rev. *94*, 1111 (1954).
- [11] J. C. PHILLIPS, Phys. Rev. *112*, 685 (1958); J. C. PHILLIPS and L. KLEINMAN, Phys. Rev. *116*, 287 (1959); sowie W. A. HARRISON, *Pseudo-Potentials in the Theory of Metals* (W. A. Benjamin, New York–Amsterdam 1966).
- [12] J. CALLAWAY, Phys. Rev. *97*, 933 (1955); sowie Solid St. Phys. (F. SEITZ and D. TURNBULL), Vol. 7, p. 99 (Academic Press Inc., New York 1958).
- [13] E. BROWN and J. A. KRUMHANSL, Phys. Rev. *109*, 30 (1958).
- [14] H. BROSS, Phys. Kondens. Mat. *3*, 119 (1964).
- [15] H. BROSS and K. H. ANTHONY, Phys. Stat. Sol. *22*, 667 (1967).
- [16] Siehe z. B. H. BROSS, Z. Naturf. *15a*, 859 (1960).