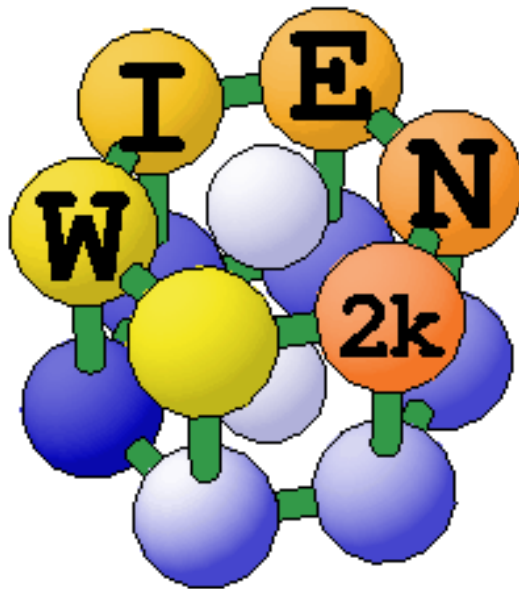


Die Rolle der Theorie (mit WIEN2k) in der Materialwissenschaften

Prof. Dr. Karlheinz Schwarz
Institut für Materialchemie/Theoretische Chemie, TU Wien



Für ein Verständnis von Materialeigenschaft auf der atomaren Skala ist eine Kombination verschiedenster Methoden erforderlich, die Interdisziplinarität erfordert. So sei z.B. erwähnt was für ein bestimmtes Material (der Fokus ist auf Festkörper) zu beachten ist: Synthese, Strukturbestimmung, Charakterisierung durch unterschiedliche Experimente (z.B. Spektren), Berechnungen mit Hilfe einer geeigneter Theorie. In vielen Fällen ist die elektronische Struktur die Grundlage für ein Verständnis. In den letzten 40 Jahren haben wir das Programmpaket wien2k entwickelt.

Das wien2k Programmpaket wird derzeit weltweit von etwa 3000 Gruppen (an Universtäten bzw. in der Industrie) verwendet um verschiedenste Größen zu berechnen, wie Gesamtenergie (für relative Stabilität), Kräfte (für Strukturoptimierung), Bandstruktur, Zustandsdichte, Elektronendichte, chemische Bindung, Phononen, Spektren, usw. Es kann für Metalle, Isolatoren, Halbleiter, Supraleiter oder magnetische Materialien eingesetzt werden. Es soll an einigen Beispielen gezeigt werden, was heute mit DFT Rechnungen geklärt werden kann: z.B. Invar-Legierungen, hexagonales Bornitrid (h-BN) auf einer Rh-Oberfläche (mit einer Superzelle mit über 1100 Atomen). Der Verwey Übergang zwischen „charge ordered“ und „valence mixed“ Strukturen mit Fe²⁺ und Fe³⁺. Die Stärke der Theorie liegt darin, daß sie für eine vorgegebene (idealisierte) Struktur – unabhängig ob real oder künstlich angenommen – Eigenschaften berechnen kann und dann erlaubt zu analysieren wodurch sie hervorgerufen werden.