به نامِ خدا

دانشگاهِ صنعتیِ اصفهان ـ دانشکده‌یِ فیزیک

تمرین سری ۴ـ ساختار الکترونی

یکشنبه ۳۰ فروردین ۱۳۹۴

---

۱. نشان دهید که در تقریب LDA مقدار انرژی تبادلی به صورت زیر خواهد شد:

$$E_x = -C_x \int \rho(\mathbf{r})^{4/3} d\mathbf{r}, C_x = \frac{3}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}$$

مرجع:

Density Functional Theory... By Yang and Parr (section 6.1)

---

۲. وردش تابعی زیر را نسبت به $\rho(r)$ بدست آورید:

$$T[\rho(r)] = \frac{1}{8}\int \frac{\nabla\rho(\mathbf{r})\cdot\nabla\rho(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})} d\mathbf{r}$$

---

۳. یک حالت تبهگن زیر را با توابع موج تبهگن زیر در نظر بگیرید:

$$|\psi_{0,i}\rangle \quad i = 1, .., q$$

می دانیم که هر ترکیب خطی از این توابع را نیز می توان به عنوان تابع موج حالت پایه سیستم در نظر گرفت:

$$|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{q} d_i |\psi_{0,i}\rangle, \quad \sum_{i=1}^{q} |d_i|^2 = 1$$

نشان دهید که به صورت کلی نمی توان برای چگالی که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^{q} c_i \rho_i(r) \quad , c_i = c_i^*, \quad \sum_{i=1}^{q} c_i = 1$$

(که $\rho_i(r) = \langle\psi_{0,i}|\psi_{0,i}\rangle$) پتانسیل خارجی پیدا کرد.

مرجع:

Density Functional Theory... By Engel (pp. 22)

---

۴. برای بدست آوردن معادلات کان‌ـشم می توان چنین عمل کرد:

ابتدا قید مسئله را بر روی توابع تک ذره ای سیستم بدون برهمکنش به صورت زیر در نظر می گیریم:

$$\int \phi_i(\mathbf{x})^* \phi_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

ابتدا دلیل این انتخاب را توضیح دهید و سپس با توجه به این قید نشان دهید که می توان با کمینه کردن کمیت زیر معادلات کان‌ـشم را بدست آورد:

$$\Omega[\phi_i] = E[\rho] - \sum_i^N \sum_j^N \varepsilon_{ij} \int \phi_i(\mathbf{x})^* \phi_j(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

مرجع:

Density Functional Theory... By Yang and Parr (section 7.2)

---

۵. نشان دهید که ناتساوی زیر برقرار است:

$$T_s[\rho_0] = \langle \Phi_0 | \hat{T} | \Phi_0 \rangle \leq \langle \Psi_0 | \hat{T} | \Psi_0 \rangle$$

که در این معادله Φ_0 دترمینان‌ـاسلیتری که از توابع تک ذره‌ای کان‌ـشم بدست می‌آید و Ψ_0 تابع موج حالت پایه است.

«موفق باشید»