

به نام خدا

دانشگاه صنعتی اصفهان - دانش‌گدهی فیزیک

تمرین سری ۴ ساختار الکترونی

سه شنبه ۵ خرداد ۱۳۹۴

---

۱. نقاط مستقل در مش بندی به روش Monkhorst-Pack را برای یک سیستم مکعبی با مش بندی  $4 \times 4 \times 4$  را همراه با وزن آنها بدست آورید. این کار را یکبار برای مش بندی با شیف  $\frac{1}{2N_i} b_i$  و یکبار بدون شیف بدست آورید. راهنمایی: در تقارن مکعبی تمام گردش های  $x, y, z$  معادل هستند و همچنین علامت های منفی آنها نیز با این گردش ها معادل هستند.

---

۲. قضیه بلاخ را با توجه به مطالبی که در فصل چهار کتاب Martin آمده است اثبات کنید.

---

۳. نشان دهید که شرط بار پایسته بودن در شبه پتانسیل های بار-پایسته، شرط برابری مشتق انرژی از مشتق لگاریتمی توابع موج را ارضاء می کند.

---

Electronic Structure by R. Martin (pp. 214)

«موفق باشید»