

به نام خدا

دانشگاه صنعتی اصفهان - دانش‌گدهی فیزیک

تمرین سری ۵ - ساختار الکترونی

یکشنبه ۳۰ فروردین ۱۳۹۴

۱. قضیه اول هونبرگ-کان را برای یک سیستم مغناطیسی اثبات کنید. در این اثبات علاوه بر چگالی یعنی ρ از چگالی مغناطیسی، m ، نیز استفاده کنید.

Density Functional Theory: An advanced course by Engel (section 2.5)

۲. قضیه Janak یعنی

$$\frac{\partial E}{\partial \theta_i} = \varepsilon_i$$

را اثبات کنید. θ_i در معادله بالا عدد اشغال i امین اربیتال کان-شم و ε_i ویژگی مقدار آن اربیتال است.

Density Functional Theory... By Yang and Parr (pp. 171)

۳. نشان دهید که ضریب لاگرانژ که به صورت زیر برای تابعی انرژی $E[\rho]$ در نظر می‌گیریم:

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left\{ E[\rho] - \mu_L \left(\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - N \right) \right\} = 0$$

با پتانسیل شیمیایی که به صورت زیر تعریف می‌کنیم یکسان است:

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}(N)$$

۴. فرض کنید می‌توانیم قدرت برهمکنش بین الکترون‌ها را با پارامتر λ کنترل کرد. مقدار این پارامتر بین ۰ یعنی بدون برهمکنش و ۱ یعنی برهمکنش کامل می‌تواند تغییر کند. اگر تابعی $F_\lambda[\rho]$ را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$F_\lambda[\rho] = \min_{\Psi \rightarrow \rho} \langle \Psi | \hat{T} + \lambda \hat{U}_{ee} | \Psi \rangle = \langle \Psi_\rho^\lambda | \hat{T} + \lambda \hat{U}_{ee} | \Psi_\rho^\lambda \rangle$$

نشان دهید که (به شرط اینکه وقتی λ تغییر می‌کند چگالی حالت پایه تغییر نمی‌کند):

$$\frac{\partial F_\lambda[\rho]}{\partial \lambda} = \langle \Psi_\rho^\lambda | \hat{U}_{ee} | \Psi_\rho^\lambda \rangle$$

«موفق باشید»