

Master en Sciences Physiques
Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 6. DFT

Exercices

1. Prove the functional product rule: $\frac{\delta F[n]G[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = \frac{\delta F[n]}{\delta n(\mathbf{r})}G[n] + F[n]\frac{\delta G[n]}{\delta n(\mathbf{r})}$
2. Prove the functional chain rule: $\frac{\delta F[n[s]]}{\delta s(\mathbf{r})} = \int \frac{\delta F[n[s]]}{\delta n(\mathbf{r}';[s])} \frac{\delta n(\mathbf{r}';[s])}{\delta s(\mathbf{r})} d\mathbf{r}'$
3. What is $\frac{\delta}{\delta n(\mathbf{r})} \int f(n(\mathbf{s}))d\mathbf{s}$ where $f(x)$ is an ordinary function?
4. What is $\frac{\delta \tilde{n}(\mathbf{k})}{\delta n(\mathbf{r})}$ where $\tilde{n}(\mathbf{k})$ is the Fourier transform of $n(\mathbf{r})$?

I. AB INITIO

5. Développez l'expression pour la moyenne d'une operateur deux particule dans une état donnés par un "Slater determinant".
6. Prouvez "Koopman's théorème". (Négligez cette exercice si vous êtes trop occupés.)

II. THOMAS-FERMI THEORY

7. Une modele d'atom plus simple

- (a) Computez l'énergie pour un gaz *uniform* de Z électrons confiné dans une sphère de rayonne R et avec charge $+Z$ au centre de la sphère.
- (b) Ce qui est l'énergie cinétique des électrons si chaque electron est confiné au sphère avec rayon a . Supposez que $Za^3 = R^3$.
- (c) Minimisez par rapport au rayon et obtenez une expression pour la rayon et l'énergie.
- (d) Écrivez le resultat en termes du rayon et l'énergie du modele de Bohr.

8. Functionale cinétique

- (a) Développez l'expression pour l'énergie cinétique en fonction de la densité dans le modèle Thomas-Fermi en supposant que il y a *seulement un* électron par état (le cas "spin polarized").
- (b) Évaluer l'énergie cinétique pour la densité donnée par l'état 1s d'hydrogène.
- (c) Faites comparaison avec l'énergie cinétique donnée par l'expression $\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle$ où \hat{T} est l'opérateur d'énergie cinétique.

9. Théorème virial

- (a) En supposant que $n(\mathbf{r})$ est la solution de l'équation Thomas-Fermi (ce qui veut dire qu'il minimise la fonctionnelle d'énergie Thomas-Fermi, $E_{TF}[n]$), définissez $n_\lambda(\mathbf{r}) = \lambda^3 n(\lambda \mathbf{r})$. Prouvez que:

$$E_{TF}[n_\lambda] = \lambda^2 T_{TF}[n] + \lambda U_{TF}[n]$$

- (b) En utilisant le fait que $\lambda = 1$ au minimum (pourquoi?), développez un théorème virial qui lie l'énergie cinétique et l'énergie potentielle.

10. L'énergie d'un atome dans la théorie Thomas-Fermi

Pour un système avec symétrie sphérique:

- (a) Prouvez que

$$\int_0^\infty \frac{\Psi(x)^{5/2}}{\sqrt{x}} dx = -\frac{5}{7} \Psi'(0)$$

- (b) En utilisant ce résultat et le fait que $\Psi'(0) = -1.5881$, quelle est l'énergie cinétique pour les électrons d'un atome?
- (c) En utilisant le théorème virial, quelle est l'énergie totale?
- (d) Faites une comparaison pour l'hydrogène.