

CHAPITRE 5. Nanotubes

Exercices

I. STRUCTURE ÉLECTRONIQUE DES NANOTUBES

1. **Zone de Brillouin** Prouvez que la distance entre la ligne WW' est la pointe K est $\frac{2m+n}{3}\mathbf{K}_1$. Notez que la design n'est pas précise.

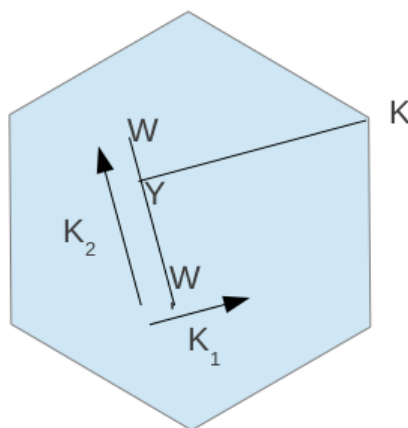


FIG. 1: La première zone de Brillouin pour graphene/nanotubes.

2. **Vitesse de l'électrons Bloch** Calculez la vitesse des électrons dan le π -bande (de conduction) de trans-polyacétylène. Exprimez le résultat dans des unités physiques. Si vous pouvez, faire un dessin montrant la vitesse comme une fonction du vecteur de l'onde.
3. **Principe de Variation** En utilisant le principe de variation, calculez l'état plus bas d'un atome d'hélium avec la fonction $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\alpha^2}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)}$. Quel est le résultat dans le premier ordre de la théorie de perturbation (avec l'interaction électron -électron comme perturbation)? Quelle est l'énergie d'ionisation dans chaque cas? (Notez que la partie de la fonction d'onde pour le spin donne l'antisymétrie.)

CHAPITRE 6. DFT

Exercices

1. Prouve que $\frac{\delta f[n]g[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = \frac{\delta f[n]}{\delta n(\mathbf{r})}g[n] + f[n]\frac{\delta g[n]}{\delta n(\mathbf{r})}$.
2. Determine $\frac{\delta}{\delta n(\mathbf{r})} \int (\Delta n(\mathbf{s}))^2 d\mathbf{s}$.
3. Determine $\frac{\delta}{\delta n(\mathbf{r})} \int \frac{n(\mathbf{s}_1)n(\mathbf{s}_2)}{|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|} d\mathbf{s}_1 d\mathbf{s}_2$

II. AB INITIO

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