Master en Sciences Physiques

Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 6. DFT

Exercises

I. THOMAS-FERMI THEORY

1. **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.

2. **Functionale cinétique**

   (a) Développez l'expression pour l'énergie cinétique en fonction de la densitié dans le modelé Thomas-Fermi en supposant que il y a *seulement un* électron par état (le cas "spin polarized").

   (b) Évaluer l'énergie cintetique pour la densité donne par l'état 1s d'hydrogen.

   (c) Fait comparison avec l'énergie cinétique donné par l'expression $< \psi|\hat{T}|\psi >$ où $\hat{T}$ est l'operateur d'énergie cinétique.

3. **Théorème virial**

   (a) En suppossant que $n(\mathbf{r})$ et la solution de l'equation Thomas-Fermi (ca veux dire que il minimizer la fonctionale d'énergie Thomas-Fermi, $E_{TF}[n]$), definessez $n_\lambda(\mathbf{r}) = \lambda^3 n(\lambda\mathbf{r})$. 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?), developpez un théorème virial qui lien la énergie cinétique et la énergie potentielle.

4. **L'énergie d'une atom dans le theorie 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 cet resultat et la fait que $\Psi'(0) = -1.5881$, quelle est l'énergie cinétique pour les électrons d'une atom?

   (c) En utilisant la théorème virial, quelle est l'énergie totale?

   (d) Fait un comparison pour hydrogèn.