

Master en Sciences Physiques
Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 6. DFT

Exercices

I. NOTIONS DE BASE

1. **Prouve la Gibb's inequality** $x \ln(x) \geq x - 1$.
2. **La densité locale d'un fluide** Prouvez que la densité locale dans un système sans champ extérieur (et avec une potentielle qui depend seulement sur la distance entre les particule) est homogène.
3. **Gaz parfait** Dérivez le DFT fonctionnel pour un gaz parfait comme dans la conférence: ajoutez toutes les étapes.
4. **DFT pour un petit volume** Il y a un champ qui vaut infini dehors un volume V et qui vaut arbitraire dans le volume. Le volume est si petit qu'il peut tenir un atom au maximum. Deriver le résultat exacte pour la fonctionnelle $F[\rho]$:
 - (a) Développer la fonction de partition dans l'ensemble grand canonique.
 - (b) En utilisant ce résultat, développez l'expression pour la densité locale moyenne.
 - (c) Trouver l'expression pour la champ en termes de la densité locale.
 - (d) Substitute pour le champ dans l'équation Euler-Lagrange. Intégrez pour avoir la fonctionnelle $F[\rho]$.

II. MODÈLES

5. **La MWDA** La modèle MWDA est définie par ces conditions:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\bar{\rho}V}F_{ex}[\rho] &= \frac{1}{\hat{\rho}_{MWDA}V}F_{ex}(\hat{\rho}_{MWDA}[\rho]) \equiv \frac{1}{\hat{\rho}_{MWDA}[\rho]}f_{ex}(\hat{\rho}_{MWDA}[\rho]) \equiv \psi_{ex}(\hat{\rho}_{MWDA}[\rho]) \\ \lim_{\rho(\mathbf{r}) \rightarrow \bar{\rho}} \frac{\delta^2 \beta F_{ex}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r}_1) \delta \rho(\mathbf{r}_2)} &= -c_2^{(PY)}(r_{12}; \bar{\rho}), \quad \bar{\rho} \equiv \int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ \hat{\rho}_{MWDA}[\rho] &= \frac{1}{\bar{\rho}V} \int w_{MWDA}(r_{12}; \hat{\rho}_{MWDA}[\rho]) \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ \int w_{MWDA}(r; \hat{\rho}_{MWDA}[\rho]) d\mathbf{r} &= 1\end{aligned}$$

Trouvez la forme explicite de la fonction de poids, w_{MWDA} .

III. MON PREMIER CALCUL DFT

6. **Coexistence liquide-gaz** En utilisant la modèle de van der Waals,

$$\Omega[\rho] = \int \left(\omega(\rho(\mathbf{r})) + \frac{1}{2} K (\nabla \rho(\mathbf{r}))^2 \right) d\mathbf{r}$$

ou $\omega(\rho) \equiv f(\rho) - \mu\rho$, $f(\rho)$ est l'énergie libre d'Helmholtz par unité de volume et μ est le potentiel chimique:

- (a) Dans la langue de DFT, développez les conditions de coexistence de deux phases uniformes (homogènes). (C'est-à-dire, pour le cas où il y a deux états (densités) ρ_v et ρ_l également stable.)
- (b) Développer l'équation Euler-Lagrange pour le cas d'une interface planaire entre les deux phases. (C'est-à-dire, $\rho(\mathbf{r}) = \rho(z)$ avec $\rho(-\infty) = \rho_v$ et $\rho(\infty) = \rho_l$.)
- (c) C'est possible d'intégrer l'équation Euler-Lagrange une fois. Dans cette manière, développez une expression pour $\frac{d\rho}{dz}$.
- (d) En utilisant ce résultat, donnez une expression pour l'énergie libre excédentaire (c'est-à-dire, la tension superficielle) $\gamma \equiv (\Omega[\rho] - \Omega(\rho_l))/A$ où A est la surface de l'interface.