Master en Sciences Physiques

CHAPITRE 6. DFT

Exercices

I. FUNCTIONAL DERIVATIVES

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.)

III. THOMAS-FERMI THEORY

6. **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.
7. **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.

8. **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.

9. **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.