

תרגיל בית מספר 4 - DFT

1 תאוריה

1. הבסיס הפורמלי של DFT הוא ההוכחה של HK שכל האינפורמציה הרלוונטית על מערכת אטומית או מולקולרית מוכלת בתוך $\rho(x)$. מדובר בפישוט משמעותי על פני חישוב של פונקציית הגל. כמה משתנים דרושים לתיאור של פונקציית הגל של מערכת? כמה דרושים לתיאור פונקציית הצפיפות?

2. מהו הביטוי של פונקציונל האנרגיה במודל תומס פרמי?

3. מודל תומס פרמי כושל עקב הזנחת אנרגיית הקורלציה, אנרגיית השחלוף וקירוב האנרגיה הקינטית. KS עקפו את הבעיה האחרונה על ידי לקיחת מערכת רפרנס נטולת אינטראקציות הבנויה מאורביטלים, אשר הצפיפות שלה שווה לצפיפות מצב היסוד של המערכת האמיתית, וממנה ניתן לקבל את האנרגיה הקינטית בדיוק טוב.

(א) מהי הצורה של פונקציית הגל המדויקת למערכת רפרנס זו? האם היא זהה לפונקציית HF?

(ב) רשמו את ההמילטוניאן אשר האורביטלים המרכיבים את פונקציית הגל הינם עצמיים לו. הסבירו כיצד נבחר הפוטנציאל בהמילטוניאן זה.

4. ביטוי האנרגיה של המערכת האמיתית ניתן על ידי (משוואה 488 ברשימות הקורס)

$$E[\rho] = T_S[\rho] + J[\rho] + E_{Ne}[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad (1)$$

הסבירו מה המשמעות של כל אחד מאיברי המשוואה. אילו איברים אנחנו לא יודעים באופן מדויק? לו היינו יודעים את כל האיברים באופן מדויק - האם משוואות KS היו נותנות לנו את הערך המדויק של האנרגיה?

2 חישוב DFT עבור פרמיונים בקופסא

בשאלה זו תבצעו חישוב DFT בסיסי עבור פרמיונים בקופסא ותשוו את התוצאה לחישוב המדויק. עבדו ביחידות אטומיות, $e = \hbar = m = 1$ והשתמשו ב-mathematica ודומיה לצורך הערכת האינטגרלים.

1. מהן הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן של חלקיק פרמיוני בקופסא, $0 < x < L$, ומהן האנרגיות העצמיות שלו?

2. מהי צפיפות האנרגיה עבור מצב היסוד?

3. הניחו פונקציונל צפיפות מקורב מקומי עבור האנרגיה הקינטית מהצורה

$$T_s^{loc}[\rho] = 1.645 \int_{-\infty}^{\infty} n^3(x) dx$$

וחשבו באמצעותו את אנרגיית החלקיק. שימו לב לגבולות האינטגרציה!

4. השוו בין התוצאה המדויקת והתוצאה שקיבלתם מחישוב DFT שביצעתם.

5. חזרו על התהליך עבור שני פרמיונים בעלי ספין זהה בקופסא ועבור שלושה פרמיונים בעלי ספין זהה בקופסא. השוו את התוצאה המדויקת לחישוב ה-DFT שביצעתם עבור מקרים אלה. שימו לב: כיצד משפיעה העובדה שמדובר בפרמיונים על החישוב שלכם?

6. שרטטו את הצפיפות הכוללת של מצב היסוד עבור חלקיק אחד, שני חלקיקים, שלושה ועשרה (הניחו $L = 1$). מה קורה לצפיפות כאשר אנחנו מגדילים את מספר החלקיקים? כיצד עובדה זו מתיישבת עם הסטיות שחשבתם עבור חישובי ה-DFT מהתוצאה המדויקת?

3 קירוב LDA

1. כיצד מחושבת אנרגיית השחלוף-קורלציה, $E_{xc}[\rho]$, במסגרת local density approximation (LDA)?
2. רוב פונקציונלי XC מבוססים על מודל uniform electron gas. עבור אילו מבין המערכות הבאות פונקציונל מסוג זה צפוי לספק תיאור טוב של תכונותיה האלקטרוניות?
 - (א) גז ארגון.
 - (ב) סיליקון.
 - (ג) גליום.
 - (ד) מים.
3. נניח שאנחנו רוצים לנבא את אורך הקשר של מולקולת N_2 . האם לדעתכם שיטת HF עדיפה על פני חישוב DFT בקירוב LDA במקרה זה? (רמז: מהו סוג הקשר במולקולה?)