INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. C. Jurecka
Dipl.-Phys. F. Heidrich-Meisner

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK WS 2001/2002

3. Übungsblatt

---

5. Hohenberg-Kohn-Sham Theorie

Die Dichtefunktionaltheorie basiert auf zwei Theoremen von Hohenberg und Kohn.

Theorem 1: Die Grundzustandsenergie eines Vielelektronensystems in der Anwesenheit eines externen Potentials $V(\mathbf{r})$ ist ein Funktional der Grundzustandselektronendichte $\rho_0(\mathbf{r})$ und kann als

$$E[\rho_0, V] = \int d^3r V(\mathbf{r})\rho_0(\mathbf{r}) + F[\rho_0]$$

dargestellt werden, wobei F eine unbekannte Funktion nur der Dichte $\rho_0(r)$ ist, die nicht mehr von $V(\mathbf{r})$ abhängt.

Theorem 2: $E[\rho, V]$ wird durch die Grundzustandsdichte $\rho_0(\mathbf{r})$ minimiert und der Minimalwert ist die Grundzustandsenergie E_0.

Bearbeiten Sie zum Beweis der beiden Theoreme die folgenden Punkte:

- Geben Sie an, wie die Dichte $\rho(\mathbf{r})$ mit der N-Elektronenwellenfunktion $|\psi\rangle$ zusammenhängt. Bestimmt die Dichte die Wellenfunktion eindeutig? Ist die Dichte durch die Wellenfunktion eindeutig bestimmt?
- Ein Vielelektronenhamiltonoperator kann o.b.d.A. in einen kinetischen Anteil H_{kin}, einen Wechselwirkungsanteil H_{int} und einen Anteil auf Grund des externen Potentials H_V zerlegt werden. Geben Sie den Erwartungswert von H_V an.
- $S(\rho)$ sei nun die Menge aller Wellenfunktionen ψ, die die gleiche Dichte ρ ergeben. Betrachten Sie nun das Funktional

  $$A[\rho] = \mathrm{Min}_{\psi\in S(\rho)}\langle\psi|A|\psi\rangle.$$

  Wählen Sie A geeignet, um Theorem 1 zu beweisen.
- Zum Beweis von Theorem 2 sei $|\psi_0\rangle$ die Grundzustandswellenfunktion, ρ_0 die mir Ihr verbundene Dichte und E_0 die Grundzustandsenergie. Die Wellenfunktion ψ_1 definiere die Dichte ρ_1 und sei außerdem die Wellenfunktion, für die $\langle\psi_1|F|\psi_1\rangle = F[\rho_1]$ gilt. Begründen Sie die Beziehung

  $$\langle\psi_1|F + V|\psi_1\rangle \geq \langle\psi_0|F + V|\psi_0\rangle$$

  Folgt daraus nicht

  $$E[\rho_1] \geq E_0$$
- Wählen Sie $\rho_1 = \rho_0$ um Theorem 2 zu zeigen.