Tarea

1.
Un buen "ansatz" para la densidad en el modelo de Thomas–Fermi es :

$$\rho(\vec{r}) = C \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{3/2} e^{-r/\alpha} \tag{1}$$

a) Normalizar la densidad a N electrones
b) demostrar que $T = c_1 \frac{N^{5/3}}{\alpha^2}$ Cuál es el valor numérico de la constante c_1 ?

c) Sabiendo que además la energía potencial esta dada por $V_{ee} = \frac{2c_2 N^2}{\alpha}$ minimizar la energía total para un átomo con carga Z con respecto a α.

2.
Encontrar la expresión para la energía cinética en el modelo de Thomas Fermi en dos dimensiones.

3.

Demostrar que para un sistema descrito por un determinante con orbitales ϕ_i y densidad ρ , usando $\phi_i = \sqrt{\rho}\psi_i$, la energia cinética se puede escribir como el término de von Weiszaecker más una corrección que depende de la densidad y los orbitales ψ_i.

4.

Rederivar la ecuación "tipo Schroedinger" para la raiz de la densidad usando $\rho(\vec{r}) = \Psi(\vec{r})^2$ y minimizando $E[\Psi]$ bajo la restrición $\int \Psi(\vec{r})^2 d\vec{r} = N$. También hay que escribir $T_s = T_w + T_\theta$.