

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΟΓΔΩΟ : Η ΘΕΩΡΙΑ ΤΟΥ ΣΥΝΑΡΤΗΣΙΑΚΟΥ ΤΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ (Density Functional Theory)		Σελ.
8.1	Τα βασικά θεωρήματα της θεωρίας του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας	2
8.2	Η προσέγγιση της Τοπικής Ηλεκτρονιακής Πυκνότητας (ΤΗΠ)	6
8.3	Η προσέγγιση της Τοπικής Σπino-ηλεκτρονιακής Πυκνότητας (ΤΣΗΠ)	8
8.4	Φυσική εικόνα της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής και συσχέτισης	10
8.5	Αξιολόγηση των αποτελεσμάτων της προσέγγισης της ΤΗΠ	15
8.5.1	Αποτελέσματα της προσέγγισης της ΤΗΠ	15
8.6	Προσπάθειες βελτίωσης της προσέγγισης της ΤΗΠ	23
8Π1	Παράρτημα : Αναπαράσταση Τελεστών στη θεωρία της δεύτερης κβάντωσης - Τελεστές πεδίου	28
8Π2	Παράρτημα : Το δυναμικό ανταλλαγής στην προσέγγιση της ΤΗΠ	31
8Π3	Παράρτημα : Συναρτησιακά και συναρτησιακή παράγωγος	34
8Π4	Παράρτημα : Εξισώσεις των Kohn και Sham	37
8Π5	Παράρτημα : Το ΣΗΠ στην γενικευμένη προσέγγιση της απόκλισης της ηλεκτρονιακής πυκνότητας (Generalized Gradient Approximation-GGA)	39
	Ασκήσεις	42
 ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΕΝΝΑΤΟ : ΛΥΣΗ ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΤΟΥ SCHRODINGER ΜΕ ΑΜΕΣΗ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ		 49
9.1	Ηλεκτρόνιο σε δυναμικό αζιμουθιακής συμμετρίας	50
9.1.1	Το πρόβλημα της μεταλλικής επιφάνειας στην προσέγγιση jellium	51
9.1.2	Διάγραμμα ροής αλγορίθμου λύσεως του προβλήματος της μεταλλικής επιφάνειας στην προσέγγιση jellium	57
9.1.3	Αξιολόγηση αποτελεσμάτων της προσέγγισης jellium για τις μεταλλικές επιφάνειες	58
9.2	Ηλεκτρόνιο σε δυναμικό αζιμουθιακής συμμετρίας : Γενικευμένη προσέγγιση jellium	59

9.2.1	Περιγραφή ενός ημιαπείρου πλέγματος Bravais : Συμβολισμός	60
9.2.2	Λύση της εξίσωσης Schrödinger με ανάπτυξη σε διδιάστατα επίπεδα κύματα	63
9.2.3	Αριθμητική Επίλυση της διαφορικής εξίσωσης πίνακα - Πίνακας μεταφοράς	67
9Π.1	Πρόγραμμα : RK-matrix Αριθμητική Επίλυση της γραμμικής διαφορικής εξίσωσης πίνακα με την μέθοδο των Runge-Kutta	71
9Π1	Παράρτημα : Αριθμητική επίλυση της διαφορικής εξίσωσης $y'' = F(x, y)$ με την μέθοδο των Runge-Kutta	79
9Π.2	Πρόγραμμα : shooting1 Αριθμητική επίλυση της γραμμικής διαφορικής εξίσωσης $y''(x) = -\omega^2 y(x)$, $y(0) = y(1) = 0.00$, ; $\omega \in R$ με την μέθοδο της στόχευσης	82
9Π.3	Πρόγραμμα : shooting2 Εύρεση των ιδιοκαταστάσεων ηλεκτρονίου σε πηγάδι σταθερού δυναμικού με την μέθοδο της στόχευσης	89
9Π.4	Πρόγραμμα : gen-jel-surf Το πρόβλημα της μεταλλικής επιφάνειας στην γενικευμένη προσέγγιση jellium	101
9.3	Ηλεκτρόνιο σε δυναμικό σφαιρικής συμμετρίας	131
9.3.1	Ηλεκτρόνιο σε δυναμικό σφαιρικού πηγαδιού σταθερής τιμής	132
9.3.2	Σκέδαση από μερονωμένο σφαιρικό σκεδαστή	133
9Π2	Παράρτημα : Συναρτήσεις Bessel	139
9Π3	Παράρτημα : Πολυώνυμα Legendre - Σφαιρικές Αρμονικές	143

9.3.3	Υπολογισμός του δυναμικού σφαιρικού σκεδαστή στην προσέγγιση της ΤΗΠ	146
9.3.4	Αριθμητική λύση διαφορικής εξίσωσης δευτέρου βαθμού με την μέθοδο Numerov	148
9.4	Η μέθοδος Hartree-Fock για ελεύθερα άτομα στην μη-τοπική σφαιρική προσέγγιση	152
9.4.1	Σύγκριση τοπικής και μη-τοπικής προσέγγισης Hartree-Fock	157
9Π4	Παράρτημα : Υπολογισμός των δυναμικών Hartree και ανταλλαγής σε περίπτωση ουσιώματος με σφαιρική συμμετρία	158
9.5	Ηλεκτρόνιο σε δυναμικό κρυστάλλου	160
9.5.1	Προσέγγιση muffin-tin	161
9.5.2	Η κυβελιδική μέθοδος	162
9.5.3	Η μέθοδος APW (Augmented Plane Wave)	164
9Π5	Παράρτημα : Θεωρία μεταβολών για συναρτήσεις με ασυνέχεια παραγώγου	170
9Π6	Παράρτημα : Κυματοσυναρτήσεις του τύπου του ατόμου του Υδρογόνου	172
9Π.5	Πρόγραμμα : Potentials Υπολογισμός των μονοηλεκτρονιακών δυναμικών ενός ελεύθερου ατόμου στην προσέγγιση Hartree-Fock	173
9Π.6	Πρόγραμμα : Radials Λύση της εξίσωσης του Schrodinger για ηλεκτρόνιο σε δυναμικό σφαιρικής συμμετρίας στην προσέγγιση της ΤΗΠ. Εφαρμογή στο ελεύθερο άτομο του Na	190
9Π.7	Πρόγραμμα : Shifts Υπολογισμός των μετατοπίσεων φάσεως	223
9Π.8	Πρόγραμμα : muffin-tin Κατασκευή δυναμικού τύπου muffin-tin	235
9Π.9	Πρόγραμμα : apw Υπολογισμός της δομής των ενεργειακών ζωνών του Na με την μέθοδο APW	238
	Ασκήσεις	265

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΔΕΚΑΤΟ :
ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ GREEN

10.1	Συναρτήσεις Green - Ορισμοί	279
10.1.1	Αναπαράσταση πίνακα της συνάρτησης Green	281
10.1.2	Ο πίνακας σκέδασης	283
10.2	Πρακτικές εφαρμογές των συναρτήσεων Green	284
10.2.1	Υπολογισμός της συνάρτησης Green που αντιστοιχεί σε απλή διαφορική εξίσωση δευτέρου βαθμού	285
10.2.2	Η συνάρτηση Green που αντιστοιχεί στην εξίσωση Poisson	289
10.2.3	Η συνάρτηση Green που αντιστοιχεί στην χαμιλιτονιανή ελεύθερου ηλεκτρονίου	291
10.2.4	Υπολογισμός της συνάρτησης Green από τις συναρτήσεις Green που ορίζονται σε υποχώρους ενός ουστημάτος. Η μέθοδος σύζευξης	294
10Π.1	Πρόγραμμα : Poisson Λύση της εξίσωσης Poisson για εντοπισμένη σφαιρική κατανομή φορτίου	300
10Π.2	Πρόγραμμα : expan-green Υπολογισμός της συνάρτησης Green με ανάπτυξη σε σειρά βασικών συναρτήσεων	313
10.3	Συναρτήσεις Green για πλέγματα Bravais	325
10.3.1	Η θεωρία των πολλαπλών σκεδάσεων : Η μέθοδος των Kottlinga-Kohn-Rostoker (KKR)	327
10.3.2	Ο τελεστής της διαδρομής σκέδασης	332
10.3.3	Αναλυτικές εκφράσεις των συναρτήσεων Green για πλέγματα Bravais	336
10.3.4	Προβλήματα στον αριθμητικό υπολογισμό των συναρτήσεων Green για πλέγματα Bravais	338
10.4	Συναρτήσεις Green για πλέγματα Bethe	340
10.4.1	Συναρτήσεις Green για περιοδικά πλέγματα Bethe	342

10.4.2	Συναρτήσεις Green για περιοδικά πλέγματα Bethe με μια πρόσρειξη αντικαταστάσεως	344
10Π1	Παράρτημα : Υπολογισμός της συνάρτησης Green του ελευθέρου ηλεκτρονίου	346
10Π.3	Πρόγραμμα : greenf-sc Υπολογισμός της συνάρτησης Green του Si δομής πλέγματος απλού κυβικού	347
	Ασκήσεις	359
 ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΕΝΔΕΚΑΤΟ : Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ ΣΥΜΜΟΡΦΟΥ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ (COHERENT POTENTIAL APPROXIMATION-CRA)		372
11.1	Η μέθοδος της ισχυρής σύζευξης σε συστήματα μιας ενεργειακής στάθμης και πλέγματος Bravais	374
11.1.1	Η χαμιλιτονιαή διμερούς μείγματος στην προσέγγιση της ισχυρής σύζευξης	377
11.2	Η προσέγγιση του συμμόρφου δυναμικού κατά το πρότυπο της ισχυρής σύζευξης (TB-CRA) σε συστήματα μιας ενεργειακής στάθμης	379
11.2.1	Αριθμητική επίλυση της εξίσωσης του συμμόρφου δυναμικού	383
11.2.2	Υπολογισμός φυσικών ποσοτήτων	386
11Π.1	Πρόγραμμα : cra-simple Μελέτη διμερούς κράματος $A_x B_{1-x}$ με την απλή ΜΣΔ	389
11.3	Γενικευμένες προσεγγίσεις συμμόρφου δυναμικού κατά το πρότυπο της ισχυρής σύζευξης σε συστήματα μιας ενεργειακής σταθμης	399
11.3.1	Πρώτη γενικευμένη προσέγγιση συμμόρφου δυναμικού (ΓΠΣΔ-1)	399
11.3.2	Δεύτερη γενικευμένη προσέγγιση συμμόρφου δυναμικού (ΓΠΣΔ-2)	403
11.3.3	Η ενσωμάτωση των ηλεκτρονικών συσχετίσεων στην ΠΣΔ	406

11Π.2	Πρόγραμμα : cpa-1g Μελέτη διμερούς κράματος A_xB_{1-x} με την μέθοδο της ΓΠΣΔ-1	408
11Π.3	Πρόγραμμα : cpa-2g Μελέτη διμερούς κράματος A_xB_{1-x} με την μέθοδο της ΓΠΣΔ-2	420
11.4	Η μέθοδος της ισχυρής σύζευξης σε ουστήματα πολλών ενεργειακών σταθμών και πλέγματος Bravais	439
11.5	Η προσέγγιση του συμμόρφου δυναμικού κατά το πρότυπο της ισχυρής σύζευξης σε ουστήματα πολλών ενεργειακών σταθμών	441
11.6	Η μέθοδος KKR-CPA	445
11.6.1	Πίνακας σκέδασης για ηλεκτρόνιο σε δυναμικό κρυστάλλου με μια ατέλεια αντικατάστασης	446
11.6.2	Υπολογισμοί σε περιοδικά ουστήματα με μια ατέλεια αντικατάστασης	448
11.6.3	Τεχνικές λεπτομέρειες επίλυσης της εξίσωσης KKR-CPA	454
11.7	Η χαμιλτονιανή Hubbard	457
11.7.1	Γραμμικοποίηση της χαμιλτονιανής Hubbard	461
11.7.2	Χρήση της ΜΣΔ στη λύση της χαμιλτονιανής Hubbard	464
	Ασκήσεις	467
	Κείμενο Προγράμματος gen-jel-surf	483
	Ευρετήριο Ονομάτων	508
	Ευρετήριο Εννοιών	515