

نظریه تابعی چگالی

و

گروه روشهای APW (L)

مؤلف: اس. کاتنیر

مترجم: لیلا صفایی کوچه سرائی

سرشناسه	Cottenire, S. اس. کاتنیر:
عنوان و نام پدیدآور	نظریه تابعی چگالی و گروه روشهای APW (L)، مولف کاتنیر؛ مترجم لیلا صفایی کوچه سرائی
مشخصات نشر	تهران: رازنهان، ۱۳۹۰
مشخصات ظاهری	۸۴ ص.
شابک	۹۷۸-۶۰۰-۲۵۸-۰۰۷-۸ :
وضعیت فهرست‌نویسی	فیا
موضوع	عنوان: Density Functional Theory and the Family of (L) APW-methods: a step-by-step introduction
موضوع	توابع چگالی
شابک افزوده	صفایی کوچه سرائی، لیلا، مترجم
رده‌بندی کنگره	۱۳۹۰ : ۵۴۱/۲۸ : QD ۴۶۲/۶۱-ت۹-ک۲
رده‌بندی دیویی	۵۴۱/۲۸ :
شماره کتابشناسی ملی	۲۵۲۷۴۸۴ :



عنوان: نظریه تابعی چگالی و گروه روشهای APW (L)

مؤلف: اس. کاتنیر

مترجم: لیلا صفایی کوچه سرائی

شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه

نوبت چاپ: اول ۱۳۹۰

قیمت: ۲۹۰۰ تومان

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۲۵۸-۰۰۷-۸

فهرست مطالب

فصل اول.....	۷
تئوری تابعی چگالی.....	۷
۱-۱ سیستمهای پس ذره ای.....	۹
۱-۲ تقریب بورن - اپن هایمر.....	۱۰
۱-۳ نظریه تابعی چگالی.....	۱۱
۱-۳-۱ قواعد هوهنبرگ و کوهن.....	۱۱
۱-۳-۲ معادلات کوهن - شم.....	۱۳
۱-۴ تقریب چگالی موضعی (LDA).....	۱۶
۱-۵ تقریب شیب نرمیم یافته (GGA).....	۱۷
۱-۶ تقریب هارتری.....	۱۸
۱-۷ تقریب هارتری-فوک-اسلینر.....	۱۹
۱-۸ حل معادلات.....	۲۰
فصل دوم.....	۲۵
روشهای محاسبات ساختار نواری.....	۲۵
۲-۱ روش بستگی قوی.....	۲۷
۲-۲ روش سلولی.....	۲۹
فصل سوم.....	۳۵
روش شبه پتانسیل و روشهای امواج تقویت شده.....	۳۵
۳-۱ روش امواج تخت افزوده یا تقویت شده (APW).....	۳۷
۳-۲ روش موج تخت افزوده شده خطی (LAPW).....	۴۴

۴۵	۳-۳ روش موج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل
۴۵	(FP-LAPW)
۴۷	۳-۴ (۳-۹) روش شبه پتانسیل
۵۰	۳-۵ LAPW با مدارهای موضعی (LAPW+ LO)
۵۳	فصل چهارم
۵۳	روش APW+10
۵۵	۴-۱ : مجموعه پایه خالص APW+10 :
۵۶	۴-۲ مجموعه های پایه مرکب LAPW و APW+10 :
۵۷	۴-۳ : APW+10 با مدارهای موضعی (APW+10+LO) :
۵۹	فصل پنجم
۵۹	نرم افزار Wien2k
۶۱	۵-۱ توضیحاتی درباره نرم افزار Wien2k
۶۳	۵-۲ مثالهایی برای WIEN2K :
۶۳	۵-۳ : انرژیهای خطی سازی در APW+10 + LAPW :
۶۴	۵-۳-۱ : آغاز نقض برای LAPW :
۶۵	۵-۳-۲ : انتخاب انرژیهای خطی برای LAPW + LO :
۷۴	۵-۳-۳ : انتخاب انرژیهای خطی سازی برای APW+10 :
۷۶	۵-۳-۴ تعیین خودکار انرژیهای خطی سازی :
۷۸	۵-۴ یافتن بهترین $R_{mi}K_{max}$ و شبکه k :