

## Problemas de Estructura 3 DFT y Pseudopotenciales

1. Calcular las energías del estado fundamental del Helio utilizando DFT
  - (a) Sin intercambio ni correlación, pero quitando la interacción propia (Ecuación 5.36 de Thijssen).
  - (b) Incluyendo el intercambio utilizando la Local Density Approximation.
  - (c) Incluyendo además un potencial de correlación (por ejemplo, Perdew–Zunger).
  
2. Generar un pseudopotencial para el estado fundamental de algún elemento cualquiera. Recordamos que el procedimiento consiste en reemplazar la parte interna del orbital correspondiente, por una función suave y sin nodos. El pseudopotencial se obtiene invirtiendo la ecuación de Schrödinger correspondiente.
  - (a) Calcular las energías del estado fundamental y de los primeros estados excitados. Compararlas con los resultados de Hartree–Fock.
  - (b) Dibujar las funciones de onda resultantes y compararlas con los orbitales de Hartree–Fock.
  - (c) Comparar el pseudopotencial generado con alguno de los que se utilizan comunmente (por ejemplo, los LDA de Troullier–Martins). Analizar las energías y los orbitales resultantes.
  
3. (\*) Generar un pseudopotencial para el Hidrógeno. Calcular la polarizabilidad del estado  $1s$ , utilizando las funciones de onda obtenidas mediante este potencial.