بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی
واحد تهران مرکزی
دانشکده علوم ، **گروه** فیزیک
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد (M.Sc)
گرایش : حالت جامد
عنوان :
بررسی نظری چگالی حالات ساختارزیرکونیم در فاز BCC و تاثیر فشار بر روی ساختار الکترونی

استاد راهنما :
دکتر محمود جعفری
استاد مشاور :
دکتر ناصر زارع دهنوی
پژوهشگر :
یلدا ایران نژاد

بهمن ۱۳۹۰

تعهد نامه اصالت پایان نامه کارشناسی ارشد

اینجانب یلدا ایران نژاد دانش آموختــه مقطــع کارشناســی ارشــد نــا پیوســته بــه شــماره دانشــجویی ۸۷۰۸۵۱۱۶۲۰۰ در رشته فیزیک که در تاریخ ۱۳۹۰/۱۱/۱۹

از پایان نامه خود تحت عنوان : بررسی نظری چگالی حالات ساختارزیرکونیم در فاز BCC و تــاثیر فشــار بــر روی ساختار الکترونی با کسب نمره و درجه دفاع نموده ام بدینوسیله متعهد می شوم :

۱- این پایان نامه حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه ، کتاب ، مقاله و ...) استفاده نموده ام ، مطابق ضوابط و رویه های موجــود ، نــام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست ذکر و درج کرده ام .

۲- این پایان نامه قبلاً برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح ، پایین تر یــا بــالاتر) در ســایر دانشــگاهها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است .

۳- چنانچه بعد از فراغت از تحصیل ، قصد استفاده و هرگونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب ، ثبت اختراع و ... از این پایان نامه داشته باشم ، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم .

۴- چنانچه در هر مقطع زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود ، عواقب ناشی از آن را بپذیرم و واحد دانشــگاهی مجــاز است با اینجانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخــواهم داشت .

نام و نام خانوادگی : یلدا ایران نژاد

تاریخ و امضاء :

بسمه تعالی

درتاریخ : ۱۳۹۰/۱۱/۱۹

دانشجوی کارشناسی ارشد خانم یلدا ایران نژاد از پایان نامه خود دفاع نموده وبا نمره بحروف و با درجه مورد تصویب قرار گرفت .

امضاء استاد راهنما

تقدیم به :

پدر و مادرعزیزم که همیشه و همه جا
کمک و یاورم بوده اند.

تشکر و قدردانی

با قدرانی از همه عزیزانی که در جمع آوری مطالب این پایان نامه اینجانب را یاری کردن و با تشکر از کمک های بی دریغ جناب آقای مهندس مهدی پور.

چکیده پایان نامه :

زیرکونیم یکی از عناصر فلزی گروه **4B** می باشد که مورد توجه بسیاری از محققین و پژوهشگران قرار دارد در دما و فشارهای مختلف فازهای شناخته شده و پایداری دارد که یکی از آنها **β** است. این فاز در دمای بالا شکل می گیرد و دارای ساختار مکعبی مرکز حجمی می باشد . به دلیل خواص ویژه ای که دارد دارای کاربردهای فراوان در صنایع و تکنولوژی است لذا شناخت خواص فیزیکی آن می تواند نقش تعیین کننده ای در پیشبرد این اهداف داشته باشد .هدف از این پروژه بررسی چگالی حالت زیرکونیم و محاسبه نوارهای انرژی آن می باشد کلیه محاسبات به کمک نرم افزار **Wien2k** و با استفاده از روش **FLAPW** وتقریب شیب تعمیم یافته **GGA** انجام می گیرد و با استفاده از اثر فشار بر روی پارامتر شبکه می توان به چگونگی تغییرات ساختار نواری پی برد .در نهایت این نتیجه به چشم می خورد که با افزایش ثابت شبکه دانسیته چگالی حالت افزایش می یابد وهمچنین با افزایش فشار از میزان رسانش زیرکونیم در فاز مکعب مرکزدار **(BCC)** کاسته خواهد شد **.**

نظر استاد راهنما برای چاپ در پژوهش نامه دانشگاه مناسب است. تاریخ و امضاء:

فهرست مطالب

عنوان: **صفحه:**

فصل اول

چکیده ---------- ۲

۱-۱- دستگاه بس ذره ای ---------- ۳

۱-۲- توماس- فرمی ---------- ۵

۱-۳- معادله اصلی توماس- فرمی ---------- ۶

۱-٤- محاسبه انرژی به روش توماس - فرمی ---------- ۸

۱-٥- تابع توزیع فرمی- دیراک ---------- ۹

۱-٦- تقریب هارتری ---------- ۱۱

۱-۷- تقریب هارتری _ فوک ---------- ۱٦

۱-۸- تقریب بورن – اوپنهایمر ---------- ۲۰

۱-۹- قضیه هوهنبرگ – کوهن ---------- ۲۲

۱-۱۰- معادلات کوهن - شم ---------- ۲۳

۱-۱۱- تقریب شیب تعمیم یافته GGA ---------- ۲۸

فصل دوم

۲-۱- جدول تناوبی ---------- ۳۱

۲-۲- اوربیتال ---------- ۳۲

۲-۲-۱- شکل اوربیتال ها ---------- ۳٥

۲-۲-۲- نامگذاری اوربیتالها ---------- ۳۷

۲-۳- نظریه نوارها ---------- ٤۰

۲-٤- زیرکونیوم ---------- ٤۲

۲-٤-۱- تاریخچه ---------- ٤۲

۲-٤-۲- پیدایش ---------- ٤۳

۲-٤-۳- خصوصیات قابل توجه ---------- ٤٤

۲-٤-٤- کاربردها ---------- ٤٤

۲-٤-٥- ایزوتوپها ---------- ٤٥

۲-٤-٦- هشدارها ---------- ٤٥

فصل سوم

۳-۱- اطلاعات ساختار ---------- ٥۱

۳-۲- محاسبه K_{point} و$R_{mt}\times K_{max}$ بهینه ---------- ٦۲

۳-۳- نمودار دانسیته و انرژی ---------- ٦٦

۳-٤- محاسبه ثابت شبکه بهینه ---------- ۸۰

۳-۵- بررسی اعمال فشار ---------- ۸۳

۳-٦- بررسی رسانش پس از اعمال فشار ---------- ۸۷

۳-۷- بررسی چگالی حالت پس از اعمال فشار ---------- ۱۰۸

فصل چهارم

نتیجه گیری ---------- ۱۳۰

فهرست منابع و ماخذ

مراجع ---------- ۱۳۲

فهرست جدول ها

عنوان: صفحه:

جدول ۲-۱- خصوصیات زیرکونیوم ---------- ٤٧

جدول ۳-۱- همسایه ها و فاصله ها ---------- ٥١

جدول۳-۲- انرژی اتم های اوربیتال ها ---------- ٦٠

جدول۳-۳- مقایسه $R_{mt} \times K_{max}$ ها بر اساس انرژی کل ---------- ٦٣

جدول۳-٤- مقایسه K_{point} ها بر اساس انرژی کل ---------- ٦٥

جدول ۳-٥- ثابت شبکه بهینه ---------- ٨١

جدول ۳-٦- انرژی و فشار و ثابت شبکه بر حسب حجم جدید ---------- ٨٥

جدول ۳-۷- ثابت شبکه ها و انرژی های فرمی ---------- ٨٧

فهرست نمودارها

عنوان: **صفحه:**

نمودار ۳-۱- انرژی بر حسب $R_{mt}*K_{max}$ ---------- ٦٤

نمودار۳-۲- نمودار Dos مربوط به اتم زیرکونیوم ---------- ٦٧

نمودار۳-۳- نمودار Dos مربوط به سهم اوربیتالهایS ---------- ٦٨

نمودار۳-٤- نمودار Dos مربوط به سهم اوربیتالهایP ---------- ٦٩

نمودار۳-٥- نمودار Dos مربوط به سهم اوربیتالD ---------- ٧٠

نمودار۳-٦- نمودار Dos سهم مربوط به اوربیتال D-EG ---------- ٧١

نمودار۳-۷- نمودار Dos سهم مربوط به اوربیتال D-T2G ---------- ٧٢

نمودار۳-۸- نمودار Dos سهم مربوط به اوربیتال F ---------- ٧٣

نمودار۳-۹- ساختار ترازهای انرژی اتم زیرکونیم ---------- ٧٥

نمودار۳-۱۰- نوارهای اوربیتال هایp ---------- ٧٦

نمودار۳-۱۱- نوار های اوربیتال D-t2g ---------- ٧٧

نمودار ۳-۱۲- نوار های اوربیتال D-eg ---------- ٧٨

نمودار۳-۱۳- نوارهای اوربیتال D ---------- ٧٩

نمودار ۳-۱٤- نمودار حجم بر حسب انرژی ---------- ٨٢

نمودار ۳-۱۵- (Band Structure) ثابت شبکه = ٤,٠٩٥١ Å ---------- ۸۹
نمودار ۳-۱٦- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,۹۰٤۳ Å ---------- ۹۰
نمودار ۳-۱۷- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,۸٥۳٦ Å ---------- ۹۱
نمودار ۳-۱۸- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,۸۰۱٥ Å ---------- ۹۲
نمودار ۳-۱۹- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,۷٤۸ Å ---------- ۹۳
نمودار ۳-۲۰- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٦۹۲۸ Å ---------- ۹٤
نمودار ۳-۲۱- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٦۳٦ Å ---------- ۹٥
نمودار ۳-۲۲- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٦۱۲۸ Å ---------- ۹٦
نمودار ۳-۲۳- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٦۰۱۱ Å ---------- ۹۷
نمودار ۳-۲٤- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٥۸۹۳ Å ---------- ۹۸
نمودار ۳-۲٥- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٥۷۷٤ Å ---------- ۹۹
نمودار ۳-۲٦- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٥٦٥٤ Å ---------- ۱۰۰
نمودار ۳-۲۷- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٥٥۳٤ Å ---------- ۱۰۱
نمودار ۳-۲۸- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٥٤۱۲ Å ---------- ۱۰۲
نمودار ۳-۲۹- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٥۱٦۷ Å ---------- ۱۰۳
نمودار ۳-۳۰- (Band Structure) ثابت شبکه = ۳,٤٥۳۹ Å ---------- ۱۰٤
نمودار ۳-۳۱- (Band Structure) ثابت شبکه =۳,۳۸۸۷ Å ---------- ۱۰٥
نمودار ۳-۳۲- (Band Structure) ثابت شبکه =۳,۳۲۰۹ Å ---------- ۱۰٦
نمودار ۳-۳۳- (Band Structure) ثابت شبکه =۳,۲٥۰۳ Å ---------- ۱۰۷
نمودار۳-۳٤- (Dos) ثابت شبکه = ٤,٠٩٥١ Å ---------- ۱۰۹
نمودار۳-۳٥- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۹۰٤۳ Å ---------- ۱۱۰
نمودار۳-۳٦- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۸٥۳٦ Å ---------- ۱۱۱
نمودار۳-۳۷- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۸۰۱٥ Å ---------- ۱۱۲
نمودار۳-۳۸- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۷٤۸ Å ---------- ۱۱۳
نمودار۳-۳۹- (Dos) ثابت شبکه = ۳,٦۹۲۸ Å ---------- ۱۱٤
نمودار۳-٤۰- (Dos) ثابت شبکه = ۳,٦۳٦ Å ---------- ۱۱٥
نمودار۳-٤۱- (Dos) ثابت شبکه = ۳,٦۱۲۸ Å ---------- ۱۱٦
نمودار۳-٤۲- (Dos) ثابت شبکه = ۳,٦۰۱۱ Å ---------- ۱۱۷

نمودار۳-٤۳- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۵۸۹۳ Å ---------- ۱۱۸
نمودار۳-٤٤- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۵۷۷٤ Å ---------- ۱۱۹
نمودار۳-٤۵- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۵٦۵٤ Å ---------- ۱۲۰
نمودار۳-٤٦- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۵۵۳٤ Å ---------- ۱۲۱
نمودار۳-٤۷- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۵٤۱ Å ---------- ۱۲۲
نمودار۳-٤۸- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۵۱٦۷ Å ---------- ۱۲۳
نمودار۳-٤۹- (Dos) ثابت شبکه = ۳,٤۵۳۹ Å ---------- ۱۲٤
نمودار۳-۵۰- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۳۸۸۷ Å ---------- ۱۲۵
نمودار۳-۵۱- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۳۲۰۹ Å ---------- ۱۲٦
نمودار۳-۵۲- (Dos) ثابت شبکه = ۳,۲۵۰۳ Å ---------- ۱۲۷

فهرست شکل ها

عنوان: صفحه :

شکل۱-۱- نحوه پر شدن اوربیتال ها ---------- ۳۸

فصل اول

چکیده

حل سیستم های بس ذره ای همواره یکی از مسائل مورد علاقه فیزیکدانان بوده است . می توانید دستگاه بس ذره ای را به دو روش کلاسیکی و کوانتومی مورد مطالعه و بررسی قرار داد . در روش کوانتومی حل این مسائل به علت پیچیدگی های موجود در هامیلتونی سیستم بسیار دشوار می باشد ، بنابر این برای حل این گونه مسائل بایست از تقریب ها به گونه ای استفاده کرد که در عین ساده سازی هامیلتونی ، تغییر عمده ای در جواب های نهایی ایجاد نشود . اولین تلاشها برای حل سیستم های بس ذره ای در سال ۱۹۲۷ توسط توماس و فرمی مطرح شد . سپس در سال ۱۹۳۰ دیراک برای رفع نارسایی های موجود ، تصحیحاتی بر این نظریه اعمال کرد اما این نظریه به خاطر نواقص اولیه اش به دست فراموشی سپرده شد. در سال ۱۹۲۸ هارتری تابع موج را به عنوان متغیر

اساسی در نظر گرفت و با اعمال تقریب هایی که در ادامه آنها را ذکر خواهیم کرد ، به حل سیستم های بس ذره ای پرداخت ، اما به خاطر اشکالات موجود (عدم وجود خاصیت پاد تقارنی در تابع موج) در سال ۱۹۳۰ هارتری و فوک تابع موج را به صورت دترمینان اسلاتر تغییر دادند . نتایج این روش نسبت به روش قبل سازگاری بهتری با نتایج تجربی داشتند و بنابراین بیشتر مورد استفاده قرار گرفت .

در سال ۱۹٦٤ هوهنبرگ و کوهن ، با کمک دو قضیه یکبار دیگر از نظریه تابع چگالی استفاده کردند. ظهور نظریه تابع چگالی به این صورت منجر به ارائه معادلات کان شم و حل سیستم های بس ذره ای با دقتی بیشتر از نظریه تابعی موج گردید .

در این فصل نظریه تابعی چگالی را معرفی و به بررسی آن می پردازیم.

۱-۱-دستگاه بس ذره ای

در فیزیک ماده چگال بررسی دستگاه بس ذره ای از اهمیت خاصی برخوردار است . یک دستگاه بس ذره ای به مجموعه ای از یون ها و الکترون ها گفته می شود که به صورت های مختلف مانند اتم ، مولکول ، بلور گرد هم جمع شده اند . در دهه های اخیر بعد از بررسی خواص اتم ها و مولکول ها بررسی خواص ساختاری و الکترونی بلورها مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است .در این راستا نظریات زیادی مطرح شده و هر کدام نتایجی را به بار آورده اند . پژوهشگران همواره به دنبال نظریاتی هستند که هم نتایج آنها با تجربه در توافق باشد و هم اینکه از نظر محاسباتی مقرون به صرفه و مورد قبول باشند.

یک دستگاه بس ذره ای را می توان به دو روش کلاسیکی و کوانتومی مورد مطالعه و بررسی قرار داد. در بررسی کلاسیکی دستگاههای بس ذره ای بین اتم ها یک پتانسیل در نظر می گیریم و نیروی وارد بر هر اتم و انرژی کل دستگاه را با استفاده از این پتانسیل به دست می آوریم . مشکل اصلی این روش در انتخاب نوع پتانسیل مناسب برای هر ماده است . زیرا نمیتوان پتانسیل واحدی را برای تمام مواد انتخاب کرد و ما ناچاریم برای هر ماده یا لااقل دسته ای از مواد پتانسیل خاص آن را بسازیم . علاوه بر این موارد ، پتانسیل با تغییر شرایط نظیر اعمال فشار بر دستگاه تغییر می کند .
در چنین صورتی گفته می شود که پتانسیل انتقال پذیر نیست و به محیط اطراف وابسته است . این

مشکل را می توان علی الوصول با به کارگیری پارامترهای بیشتر در عبارت پتانسیل رفع کرد که این کار حجم محاسبات را افزایش می دهد و از طرف دیگر در صورت کاهش تعداد این پارامترها محاسبات دیگر دقت لازم را نخواهد داشت . مزیت اصلی روش کلاسیکی سرعت بالای محاسبات است که در نتیجه می توان با به کارگیری کامپیوترهای نه چندان سریع دستگاه های بسیار بزرگ را نیز با این روش بررسی نمود . به عنوان مثال می توان بسیاری از خواص ماکروسکوپی یک بلور مانند دما را با استفاده از این روش مورد بررسی قرار داد .

در بررسی معادله کوانتومی ، یک معادله شرودینگر برای مجموعه الکترون ها و هسته های موجود در درون بلور نوشته می شود با اعمال تقریب هایی این معادله شرودینگر بس ذره ای حل و کلیه خواص بلور از جمله انرژی آن استخراج شود .

بررسی کوانتومی یک دستگاه بس ذره ای به دلیل وجود آثار کوانتومی به مراتب پیچیده تر از بررسی کلاسیکی است. بررسی دقیق آرایه ای از اتم های بلور به عنوان یک دستگاه بس ذره ای مستلزم حل معادله شرودینگر کل بلور ، جهت تعیین توابع موج و ویژه مقادیر انرژی خواهد بود . حل چنین معادله شرودینگری به دلیل همیلتونی پیچیده آن (به خاطر وجود جملات بر همکنشی که معمولاً در هیچ دستگاهی قابل جدا سازی نیستند) عملاً غیر ممکن است . تنها راه موجود استفاده از روش های تقریبی مختلفی است که برای دستگاه های بس ذره ای در فیزیک ماده چگال ارائه شده اند . اکثر خواص فیزیکی یک دستگاه بس ذره ای مانند بلور به نحوی به انرژی کل و یا تغییر در آن مربوط است . گرچه خواص یک بلور به عنوان یک دستگاه بس ذره ای را از پارامترهای مختلفی می توان بدست آورد.ولی بستگی این خواص به انرژی کل از اهمیت بیشتری برخوردار است .از اینرو انرژی همانند یک وسیله آزمایشگاهی چند منظوره برای بررسی خواص گوناگون بلور به کار گرفته می شود .مثلاً اگر در بلوری با ساختارهای متعدد به دنبال پیدا کردن پایدارترین ساختار در یک دما و فشار خاص باشیم ، باید کمترین انرژی ساختار را جستجو کنیم . مزیت استفاده از روش کوانتومی ، مستحکم بودن مبنای کار است . زیرا بر پایه اصول اولیه مکانیک کوانتومی استوار است و تنها در این روش است که می توان خصوصیات کوانتومی دستگاه را مورد بررسی قرار داد . خواص بلوری مانند گرادیان میدان الکتریکی ، میدان مغناطیسی فوق ریز در اطراف هسته و .... که به رفتار الکترون ها مربوط می شوند تنها با استفاده از این روش قابل بررسی هستند و در فرمول کلاسیکی ظاهر نمی شوند . مشکلی که در روش کوانتومی وجود دارد حجم بالای محاسبات است . به عنوان مثال می دانیم که هر مول از یک جسم دارای $۱۰^{۲۳}$ (عدد آووگادرو) یون و از همین مرتبه الکترون می باشد و معادله شرودینگر باید برای این مجموع از ذرات نوشته و حل شود .این مطلب

حکایت از حجم زیاد محاسبات دارد که با استفاده از روش های تقارنی و اعمال تقریب های مناسب این حجم زیاد محاسبات را تا حدودی کاهش می دهیم .

۱-۲ – توماس- فرمی

توماس و فرمی در سال ۱۹۲۷ در بررسی کوانتومی دستگاه های بس ذره ای ، برای اولین بار به جای استفاده از تابع موج بس ذره ای ، چگالی الکترونی آن را به عنوان متغیر اصلی برای حل مسئله مطرح کردند و با قید ثابت بودن تعداد ذرات سیستم و با وردش انرژی بر حسب چگالی ، چگالی حالت پایه و انرژی حالت پایه را محاسبه کردند. آن ها نشان دادند که بررسی های استاتیکی را می توان با استفاده از تخمین چگونگی توزیع الکترون ها در یک اتم بدست آورد . در این طرح از روابط مربوط به گاز الکترونی همگن استفاده کردند و آنها را به طور موضعی برای ابر الکترونی غیر همگن که در اتم ها ، مولکول ها و جامدات وجود دارند به کار بردند. در این ایده آمده است که الکترون ها به صورت یکنواخت در فضای فاز شش بعدی توزیع شده اند. فرمول های توماس فرمی بر اساس چنین فرضیاتی بیان شده است :

فضا را به شکل سلول های مکعبی به اندازه $\Delta V= l^{۳}$ درنظر می گیریم (۱). که در هر سلول به تعداد ΔN الکترون وجود دارد .ممکن است در هر سلول تعداد الکترون ها متفاوت باشند . در هر حجم $l^{۳}$ ، الکترون ها تحت تاثیر پتانسیل موثر از طرف بار هسته و توزیع دیگر الکترون ها قرار دارند . فرض می کنیم که در هر سلول الکترون ها رفتاری شبیه به فرمیون های مستقل داشته باشند . البته این فرضیات در دمای صفر درجه کلوین صورت می گیرد همچنین سلول ها مستقل از یکدیگر می باشند .

۱-۳- معادله اصلی توماس – فرمی

برای یک گاز الکترونی همگن در فضای وارووون ، کره ای به شعاع فرمی k_f داریم . حجم اشغال شده توسط هر ذره در این فضا برابر $(۲\pi/l)^{۳}$ می باشد . در نتیجه تعداد کل نقاط به صورت زیر محاسبه می شود .

(۱-۱)

$$k \text{ تعداد نقاط در فضای } = \frac{\text{حجم کره به شعاع } k_f}{\text{حجم وابسته به هر نقطه}}$$

(۲-۱)

$$\text{تعداد نقاط } = \frac{\frac{4}{3}\pi k_f^3}{(\frac{2\pi}{l})^3} = \frac{V k_f^3}{6\pi^2}$$

(۳-۱)

$$\text{تعداد الکترون ها } = N = 2\times \frac{V k_f^3}{6\pi^2}$$

(٤-۱)

$$\text{چگالی } = \rho_0 = \frac{N}{V}$$

$$k_f = \{3\pi^2 \rho_0\}^{\frac{1}{3}}$$

با استفاده از اندازه حرکت فرمی ، چگالی پایه سیستم محاسبه شده و سپس بر حسب متغیر مکان تعمیم داده می شود.

(۵-۱)

$$P_f = \hbar k_f = \frac{h(3\rho_0\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{2\pi} \quad \rightarrow \quad \rho_0 = \frac{8\pi P_f^3}{3h^3}$$

(٦-۱)

$$\mathrm{P}(\vec{r}) = \frac{8\pi p_{f\,(\vec{r})}^3}{3h^3}$$

با استفاده از رابطه انرژی معادله اصلی توماس – فرمی بدست می آید :

(۷-۱)

$$\varepsilon_f = \frac{p_f^2}{2m} + V(\vec{r})$$

(۸-۱)

$$\mathrm{P}(\vec{r}) = \frac{8\pi}{3h^3}\{2m\left(\varepsilon_f - V(\vec{r})\right)\}^{3/2}$$