منابع و مراجع :

[۱]: L. J. Sham and M. Schluter, "Density-Functional Theory of the Energy Gap", Phys. Rev. Lett. ۵۱ (۱۹۸۳) ۱۸۸۸.

[۲]: H. J. Schnitzer, "The Hartree approximation in relativistic field theory", Phys. Rev. D ۱۰ (۱۹۷۴) ۲۰۴۲.

[۳]:J. P. Perdew, J. A. Chevary, etal, "Journal of Materials Chemistry ", Phys. Rev. B ۴۶ (۱۹۹۲) ۶۶۷۱-۶۶۸۶.

[۴]:R. M. Dreizler and E.K.U. Gross, " Density functional theory: An approach to the quantum many-body problem", Springer- Verlag, Berlin, ۱۹۹۰.

[۵]:R.G. Parr and W. Yang, "Density functional theory of atom and molecules", Oxford University, Press, Newyork, ۱۹۸۸.

[۶]:R.M. Dreizler and E.K.U. Gross, "Density functional theory", NATO ASI Series. Plenum, Press, Newyork, ۱۹۹۴.

[۷]: E. S. Kryachko, " Hohenberg – Kohn theorm", International Jornal Of Quantum Chemistry, (۱۹۸۰), ۱۰۲۹-۱۰۳۵.

[۸]:W. Kohn and L.J. Sham, "Self- Consistent equations including exchange and correlation effects", Phys.Rev. B ۷ (۱۹۶۵) A ۱۶۹۷,.

[۹]:P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomgeneous Electron Gas", Phys. Rev. B ۱۳۶ (۱۹۶۴) ۸۶۴.

[۱۰]:Greengard L, Science ۲۶۵ (۱۹۹۴) ۹۰۹.

[۱۱]:S. Burke, M. Ernzerhaf and J. P. Perdew, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", Phys. Rev. Lett. ۷۷ (۱۹۹۶) ۳۸۵۶.

[۱۲]: K. Burke, G. Cruz and K.C. Lam," Unambiguous exchang- correlation energy density", J. Chem. ۱۰۹, No. ۱۹, ۱۹۹۸.

[۱۳]: J. R. Reitz, "Methods of the One-Electron Theory of Solids", Solid State Phys ۱۱ (۱۹۵۵) ۱-۹۵.

[۱۴]: J. M. Wills, O. Eriksson et al.,"Total Energy and Force Calculations", arxiv: Cond-Mat/۹۹۱۲۱۷۳.

[۱۵]: S. Sunao, Y. Isaku, et al. , "The effects of Ni on structural and electronic properties of S", Jpn. J. Appl. ۳۶(۱۹۹۷) ۶۱۲۶-۶۱۳۲.

[۱۶]: D. K. Anderson, "Energy Levels of Light Nuclei", Solid State Commun. ۱۳(۱۹۷۳) ۱۳۳.

[۱۷]: J. C. Slater, "Computations, Glassy Materials, Microgravity Destructive Testing Solid-State Photoemission and Related methods", Phys. Rev. ۵۱(۱۹۳۷) ۸۶۴.

[۱۸]: S. Yu. Savrasov and D. Yu.Savrasov, "Full-potential linear-muffin-tin-orbital method for calculating total energies and forces", Phys. Rev. B ۴۶(۱۹۹۲) ۱۲۱۸۱.

[۱۹]:N. Trollier and J. L. Mmartins, "Efficient pseudopotentials for plane- wave caculations" , Phys. Rev. B. ۴۳(۱۹۹۳).

[۲۰]: D. Vanderbilt, "Soft self- consistent pseudopotentials in generalized eigen value formalism", Phys. Rev. B. ۳۲, (۱۹۸۵).

[۲۱]: H.Hellmann , " A new approximation method in the problem of many electrons", J. Chem. Phys. ۳(۱۹۳۵) ۶۱.

[۲۲]:J. C. Phillips and L. Kleinman, " New method for calculating wave function in crystals and molecules", Phys. Rev. ۱۱۶(۱۹۵۹) ۲۸۷.