Teoria del funzionale della densita'

$$H = \underbrace{T + V_{ext}}_{\text{operatore a 1 corpo}} + W \leftarrow \quad \text{2 corpi}$$

$$T = \sum_{i=1}^{N} -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} \qquad V_{ext} = \sum_{i=1}^{N} v_{ext}(i)$$

$$W = \frac{1}{2} \sum_{ij} w(i,j)$$

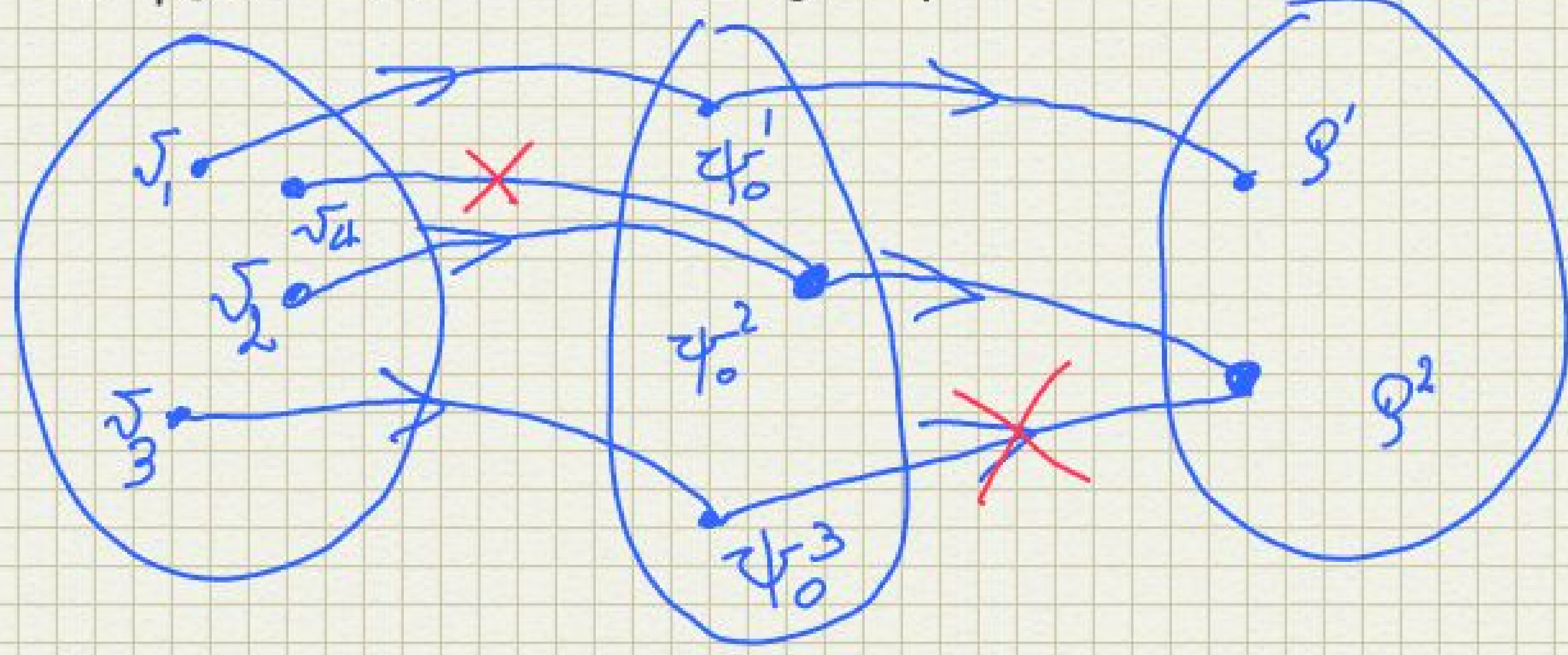
$$H|\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle$$

$$\rho(\vec{r}) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) | \Psi_0 \rangle$$ Densità di numero

---

Teorema di Hohenberg-Kohn

1) $\forall\, V_{ext} \quad \exists$ 1 solo $|\Psi_0\rangle$
2) $\forall\, |\Psi_0\rangle \quad \exists$ 1 sola $\rho(\vec{r})$



$$V_{ext} \longleftrightarrow |\psi_0\rangle \longleftrightarrow \rho_0(\vec{r})$$

a meno di una costante in V_{ext}

$|\psi_0(\rho_0)\rangle \longrightarrow$ funzionale della densità

Ogni osservabile risulta essere funzionale della densità. (Valore di aspettazione)

$$O(\rho) = \langle \psi(\rho) | O | \psi(\rho) \rangle$$

Sicuramente l'energia

$$E(\rho) = \langle \psi(\rho) | H | \psi(\rho) \rangle$$
$$= \underbrace{\langle \psi(\rho) | T + W | \psi(\rho) \rangle}_{F(\rho)} + \int d^3r \, V_{ext}(\vec{r}) \rho(\vec{r})$$

$F(\rho)$ Universale

$E_0 = \min E(\rho)$ Principio variazionale

E_0 — Energia dello stato fondamentale

Tante Hamiltoniane

Sistema di particelle interagenti

$$E_0(\rho_0) \qquad H = T + W + V_{ext}$$

$\exists \quad V_s \neq V_{ext}$ tale che ρ_0
sia la densità dello stato fondamentale
per un'hamiltoniana

Operatore ad 1 corpo $\rightarrow$ $H_s = T + V_s = \sum_i \left(t_i + v_s(i)\right)$

Sistema KS (Kohn, Sham)

$$E(\rho) = T_s(\rho) + E_H(\rho) + E_{ext}(\rho) + E_{xc}(\rho)$$

Hartree Esterno Scambio-correlazione

$$E_H(\rho) = \int d^3r\, \rho(\vec{r}) \underbrace{\frac{1}{2}\int d^3r'\, w(\vec{r},\vec{r}')\,\rho(\vec{r}')}_{\text{Potenziale di Hartree } v_H(\rho)}$$

$$E_{ext}(\rho) = \int d^3r\, \rho(\vec{r})\, v_{ext}(\vec{r})$$

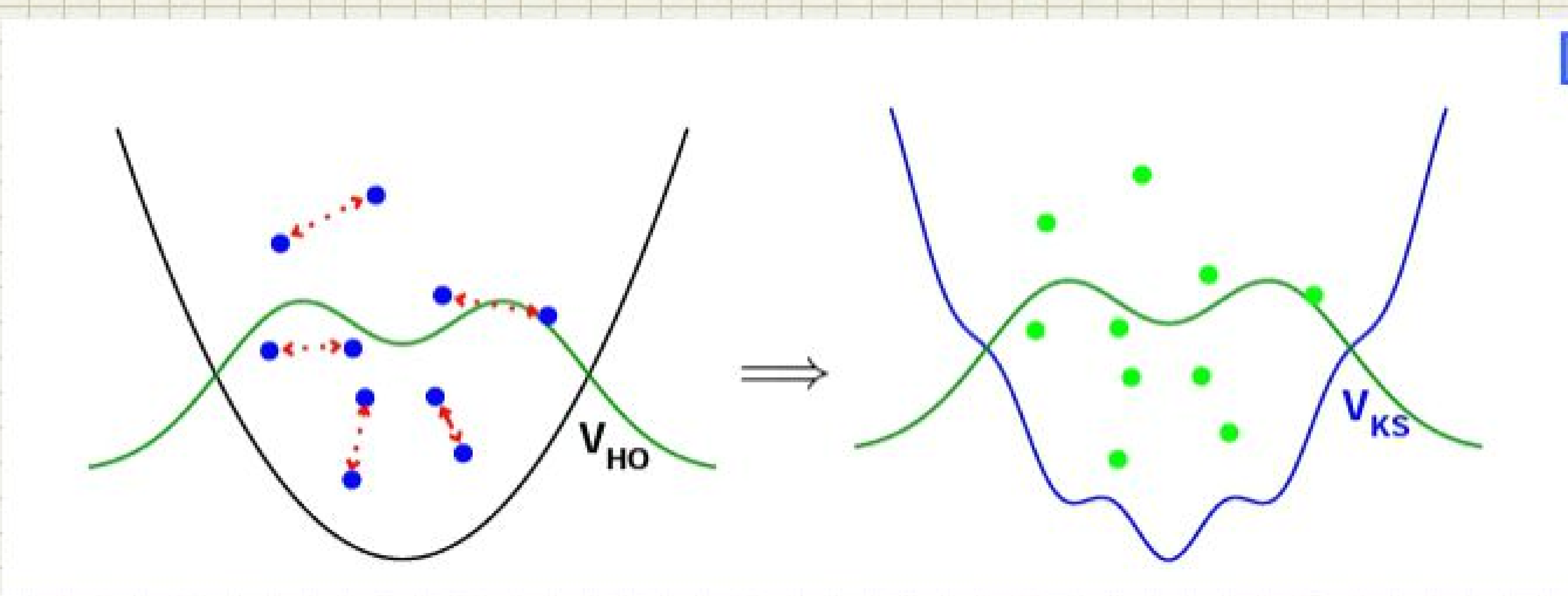
$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i \leq \varepsilon_F} |\phi_i(\vec{r}_i)|^2$$

Applicazione del principio variazionale su ϕ_i

Equazione di Kohn Sham

$$\left\{-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + v_{ext}(\vec{r}) + v_H(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r})\right\}\phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\vec{r})$$

dipendenti da ρ



Matrice densità

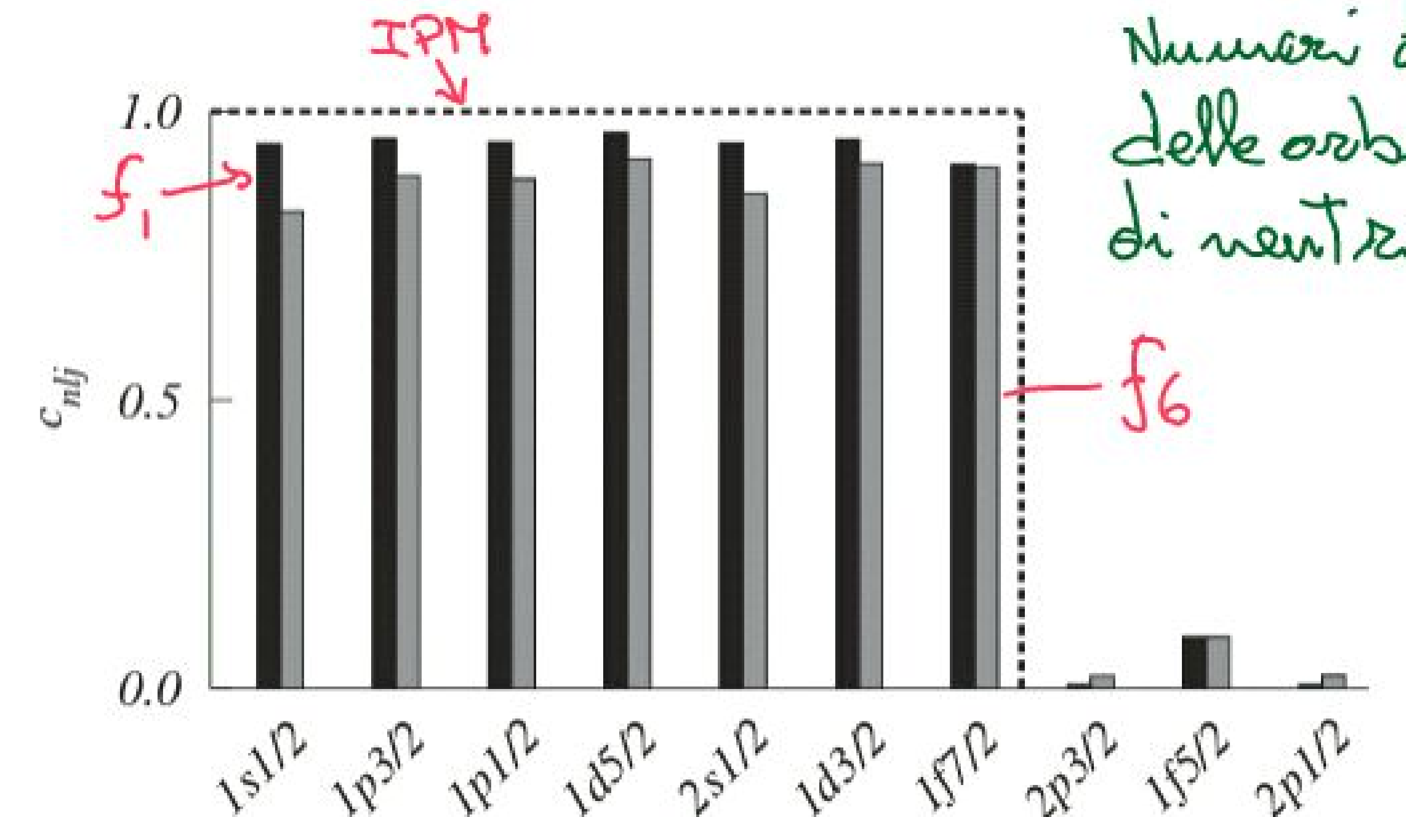
$$\rho(\vec{r}_1,\vec{r}_1') = \int d^3r_2 \dots d^3r_N \, \psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2 \dots \vec{r}_N)\, \psi(\vec{r}_1',\vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) \frac{N}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$\rho(\vec{r}_1) = \rho(\vec{r}_1,\vec{r}_1')\,\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_1')$$; p.te diagonale

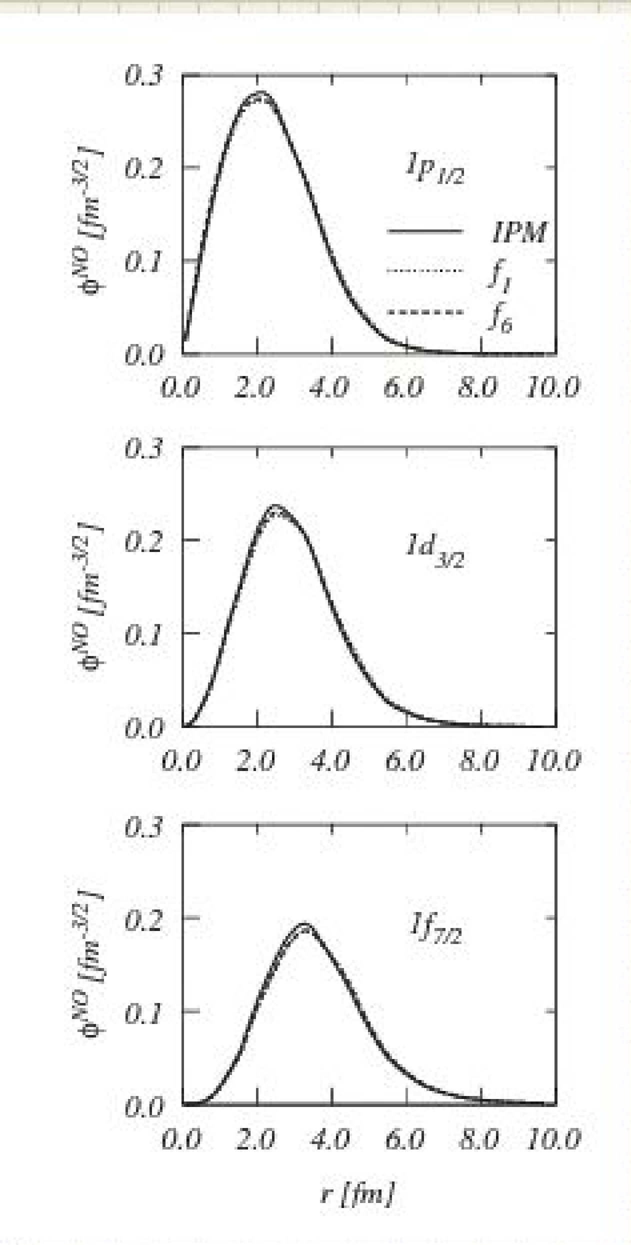
Orbite naturali

$$\rho(\vec{r}_1,\vec{r}_1') = \sum_\alpha c_\alpha \, \phi^{*NO}_\alpha(\vec{r}) \, \phi^{NO}_\alpha(\vec{r}')$$

Diagonalizzano la matrice densità
La somma non è limitata alla superficie di Fermi



Numeri d'occupazione delle orbite naturali di neutroni in ^{48}Ca



Orbite naturali in ^{48}Ca neutroni

Distribuzione dei momenti

$$n(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \int d^3 r_1 \, d^3 r_1' \, e^{i \vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_1')} \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_1')$$