

che cos'è un funzionale

1) funzione di una variabile, di più variabili, differenziale min, max → differenziale nullo; gradiente...

2a) Esempio: energia elettrostatica di un sistema di cariche puntiformi

2b) generalizzazione ad una distribuzione continua di carica differenziale (variazione); derivata funzionale

esempio while $\left\{ \begin{array}{l} \text{min, max: differenziale nullo} \\ \text{min, max vincolati; principi variazionali} \end{array} \right.$

1) Funzione a 1 variabile → numero → numero $x \rightarrow f$ esempio x^2
 a 2 variabili → numero → funzione $x \rightarrow g(y)$ esempio $x+y^2$
 coppia numeri → numero $x, y \rightarrow f$
 a N variabili → N numeri → numero $x_1 \dots x_N \rightarrow f$
 $df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_N} dx_N = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i$

2a) Energia (elettrostatica) di una distribuzione discreta di N cariche q_i, \vec{r}_i

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

f. a N variabili: $E(r_1, r_2, \dots, r_N)$

$$\frac{\partial E}{\partial q_k} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\delta_{ik} q_j + q_i \delta_{jk}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^N \frac{q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^N \frac{q_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|} = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^N \frac{q_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|} = v(\vec{r}_k), \text{ potenziale elettrostatico cui}$$

è soggetta la k-ima carica q_k che si trova nel punto \vec{r}_k a causa delle altre N-1 cariche q_i con $i \neq k$.

2b) come si generalizza questo al caso continuo?

$$E_H = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' \quad v(\vec{r}) = \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r'$$

$E_H = E_H[n]$ numero $v(\vec{r}) = v[n]$ funzione di \vec{r}

differenziale di Gateaux $\delta F[\psi; \delta\psi] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{F[\psi + t\delta\psi] - F[\psi]}{t}$

esempio: se $F[\psi] = \int |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$ $\int d^3r (\psi \delta\psi^* + \psi^* \delta\psi) = \delta F[\psi; \delta\psi]$

derivata di Fréchet: $F[\psi + \delta\psi] - F[\psi] = \int F'_{\text{Fréchet}}[\psi] \cdot \delta\psi d^3r$

esempio: col precedente funzionale non posso fare uso (non esiste la derivata di $|\psi|^2$ in campo complesso)

$$F'_{\text{Fréchet}}[\psi] = \left. \frac{\delta F}{\delta \psi} \right|_r$$

IN DETTAGLIO:

$$E[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r'$$

diff. Gateaux $\delta E = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2} \frac{1}{t} \left\{ \int \frac{d^3r d^3r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} [n(\vec{r}) n(\vec{r}') + t \delta n(\vec{r}) n(\vec{r}') + t n(\vec{r}) \delta n(\vec{r}') + t^2 \delta n(\vec{r}) \delta n(\vec{r}')] - \int \frac{d^3r d^3r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} n(\vec{r}) n(\vec{r}') \right\} =$

$$= \frac{1}{2} 2 \int \frac{d^3r d^3r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \delta n(\vec{r}) n(\vec{r}') = \int d^3r \delta n(\vec{r}) \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r'$$

deriv. Fréchet $E[n + \delta n] - E[n] = \int E'[n] \delta n(\vec{r}) d^3r$

$$E[n + \delta n] - E[n] = \int \left[\int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' \right] \delta n(\vec{r}) d^3r$$

$$E'[n] = \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' = \left. \frac{\delta E}{\delta n} \right|_{\vec{r}}$$

esempio
while

$\left\{ \begin{array}{l} \text{min, max: differenziale nullo} \\ \text{min, max vincolati; principi variazionali} \end{array} \right.$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + v(\vec{r}) \quad \psi \text{ reale}$$

$$E[\psi] = \int \psi \hat{H} \psi d^3r$$

$$N[\psi] = \int \psi^2 d^3r$$

vincolo, superficie di vincolo, parametro di Lagrange

$$F[\psi] = E[\psi] - \lambda N[\psi]$$

$$\delta E = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{E[\psi + t\delta\psi] - E[\psi]}{t}$$

$$\delta N = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{N[\psi + t\delta\psi] - N[\psi]}{t}$$

$$\delta E = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left[\int \psi \hat{H} \psi d^3r + t \int \delta\psi \hat{H} \psi d^3r + t \int \psi \hat{H} \delta\psi d^3r + t^2 \int \delta\psi \hat{H} \delta\psi d^3r - \int \psi \hat{H} \psi d^3r \right] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left[2t \int \delta\psi \hat{H} \psi d^3r + t^2 \int \delta\psi \hat{H} \delta\psi d^3r \right]$$

$$= 2 \int \delta\psi \hat{H} \psi d^3r ; \quad \delta N = 2 \int \delta\psi \cdot \psi d^3r$$

$$\delta F = \delta(E + \lambda N) = 0 \Rightarrow \int \delta\psi (\hat{H} - \lambda) \psi d^3r = 0$$

$$\delta F = 0 \Rightarrow \hat{H} \psi = \lambda \psi$$

PER QUALUNQUE VARIAZIONE $\delta\psi$!

All'eq. di Schrödinger di una particella in un ^{potenziale} campo esterno $v(\vec{r})$ è associato il minimo del funzionale E per λ . Minimo? Anche estremo...