che cos'è un funzionale

$\boxed{1}$ funzione di una variabile, di più variabili, differenziale
min, max → differenziale nullo ; gradiente...

$\boxed{2a}$ Esempio: energia elettrostatica di un sistema di cariche puntiformi

$\boxed{2b}$ generalizzazione ad una distribuzione continua di carica
differenziale (variazione); derivata funzionale

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

$\boxed{1}$ Funzione a 1 variabile → numero → numero $\quad x \to f \quad$ esempio x^2

a 2 variabili → numero → funzione $\quad x \to g(y)$ $\quad$ esempio $x+y^2$

coppia numeri → numero $\quad x, y \to f$

a N variabili → N numeri → numero $\quad x_1 .. x_N \to f$

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_N} dx_N = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i$$

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

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

fz. a N variabili: $E(r_1, r_2, .. r_N)$

$$\frac{\partial E}{\partial q_K} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} \frac{\delta_{iK} q_j + q_i \delta_{jK}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq K}}^{N} \frac{q_j}{|\vec{r}_j - \vec{r}_K|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq K}}^{N} \frac{q_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_K|} =$$

$$= \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq K}}^{N} \frac{q_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_K|} = v(\vec{r}_K),$$ 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 $i \neq K$.

$\boxed{2b}$ Come si generalizza questo al caso continuo?

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

$$E_H = E_H[n] \qquad v(\vec{r}) = v[n]$$

numero $\qquad$ funzione di $\vec{r}$

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

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

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

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

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

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

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

$$\left. + t\, n(\vec{r})\,\delta n(\vec{r}\,') + t^2\,\delta n(\vec{r})\,\delta n(\vec{r}\,')\right]$$

$$\left. - \int \frac{d^3r\, d^3r'}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, n(\vec{r})\, n(\vec{r}\,')\right\} =$$

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

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 utile

---

min, max: differenziale nullo

min, max vincolati; principi variazionali

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

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

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

vincolo, superficie di vincolo, parametro di Lagrange

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

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

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

$$\delta E = \lim_{t \to 0} \frac{1}{t}\Big[\cancel{\int \psi \hat{H} \psi \, d^3r} + t\int \delta\psi \hat{H} \psi \, d^3r + t\int \psi \hat{H} \delta\psi \, d^3r + t^2 \int \delta\psi \hat{H} \delta\psi \, d^3r$$

$$- \cancel{\int \psi \hat{H} \psi \, d^3r}\Big] = \lim_{t \to 0} \frac{1}{t}\Big[2t \int \delta\psi \hat{H} \psi \, d^3r + t^2 \int \delta\psi \hat{H} \delta\psi \, d^3r$$

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

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

PER QUALUNQUE VARIAZIONE $\delta\psi$!

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

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