



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MILANO
Corso di Laurea Triennale in Fisica

TESI DI LAUREA

**STUDIO DI SISTEMI DI FERMIONI
NON-INTERAGENTI CONFINATI IN
UNA TRAPPOLA DI OSCILLATORE
ARMONICO**

Relatore:
Prof. Xavier Roca Maza

Candidato:
Riccardo Mattina

Anno Accademico 2020/2021

Riassunto

In questo elaborato mi sono proposto di studiare, sia dal punto di vista analitico che dal punto di vista numerico, le soluzioni di un sistema di fermioni non interagenti intrappolati in un potenziale di oscillatore armonico in una dimensione e in tre dimensioni.

Dal punto di vista analitico ho iniziato la trattazione partendo dalla densità di particelle costituenti il sistema per arrivare ad esprimere la densità di energia cinetica in funzione di quest'ultima. In questo modo si è dimostrata la possibilità di trovare l'espressione esatta per il funzionale della densità di questo sistema nel caso unidimensionale. Sempre per il caso unidimensionale ho riportato un esempio significativo, quello in cui solo lo stato più basso è occupato.

Una volta ottenuta la densità di energia cinetica ho svolto alcune verifiche sull'energia totale del sistema, sfruttando sia l'integrazione delle densità di energie sia attraverso il calcolo degli autovalori dell'Hamiltoniana.

Dal punto di vista numerico invece ho implementato un codice che mi ha permesso di graficare i risultati. Avere un'immagine visiva di quest'ultimi mi ha permesso di poterli confrontare con quelli presenti in letteratura. Sia nel caso monodimensionale che nel caso tridimensionale i risultati ottenuti mostrano un buon grado di accuratezza.

Concluderò la trattazione esponendo alcune possibili applicazioni approssimate per il caso del nucleo atomico.

Contents

Riassunto	i
1 Introduzione	1
2 Modello oscillatore armonico in 1D	3
2.1 Sistemi costituiti da N fermioni	3
2.2 Esempio con n=1	4
2.3 Matrice densità	5
2.4 Verifica dell'energia totale	8
3 Risultati e test del caso unidimensionale	11
3.1 Implementazione del codice e grafici	11
4 Modello oscillatore armonico in 3D	17
4.1 Sistemi tridimensionali costituiti da N particelle	17
4.2 Matrice densità	18
4.3 Energia totale del sistema	21
5 Risultati e test del caso tridimensionale	23
5.1 Implementazione del codice e grafici	23
6 Conclusioni	27

Chapter 1

Introduzione

Come anticipato, in questo elaborato abbiamo fatto uso della teoria del funzionale della densità. Ma cosa dice questa teoria? La teoria del funzionale della densità nasce con l'obiettivo di descrivere la struttura elettronica di atomi, molecole e solidi ma, in generale, può essere utilizzata per un qualsiasi sistema in cui le componenti siano particelle fermioniche, come i nuclei atomici. La teoria del funzionale densità si basa su due teoremi che Hohenberg e Kohn dimostrarono nel 1964 [5] secondo cui in un sistema di N fermioni interagenti soggetti ad un potenziale esterno esiste una relazione biunivoca tra l'energia del sistema E , definita come un funzionale della densità di particelle ρ , e la densità stessa. L'intera informazione relativa all'energia di un sistema di N fermioni risulta quindi contenuta nella densità a singolo corpo ρ , cioè una funzione reale dipendente da tre coordinate, senza richiedere la conoscenza della funzione d'onda ψ del sistema, rappresentata da una funzione complessa in $3N$ coordinate. Si tratta di una notevole semplificazione del problema studiato, in quanto il numero N di particelle considerate può essere arbitrariamente grande. Nei capitoli a venire, verranno quindi studiate le soluzioni esatte dell'oscillatore armonico in una dimensione e successivamente in tre dimensioni per un sistema di fermioni non interagenti. In questi capitoli cercheremo di analizzare con accuratezza una parte fondamentale nella teoria del funzionale della densità, ovvero l'energia cinetica in funzione della densità del sistema. Continuare questo lavoro di tesi potrebbe trovare applicazioni in diversi campi, come in fisica nucleare.

Nel secondo capitolo verrà presentato il modello di oscillatore armonico in una dimensione, focalizzando l'attenzione nel ricavare la densità di energia cinetica in funzione della densità di particelle. Verrà dedicato un intero paragrafo ad un esempio sullo stato fondamentale del sistema, il quale ci mostrerà, in una prima istanza, l'applicazione delle formule precedentemente analizzate nel caso più generale. Il paragrafo a conclusione di questo capitolo è atto a compiere una verifica sull'energia totale. Essa è stata calcolata tramite gli integrali delle energie cinetica e potenziale e tramite gli autovalori dell'Hamiltoniana.

Nel capitolo successivo vengono riportati tutti i risultati graficati, ottenuti tramite la progettazione di un programma fatto su misura per il caso.

Il quarto capitolo è incentrato sulla spiegazione del modello tridimensionale dell'oscillatore armonico isotropo, dove si è preferito passare alle coordinate sferiche per sfruttare le simmetrie del sistema. Anche in questo caso è stata dedicata particolare attenzione a ricavare la densità di energia cinetica, la quale è stata ricavata iniziando la trattazione dalla matrice densità per singola particella. Il paragrafo a conclusione di questo capitolo, come nel caso monodimensionale, è incentrato sulla verifica dell'energia totale. Essa viene calcolata tramite gli autovalori dell'hamiltoniana e tramite l'integrazione delle densità di energie cinetica e potenziale.

Nel quinto capitolo vengono riportati i risultati e i grafici ottenuti computazionalmente del caso tridimensionale.

Seguono le conclusioni, nelle quali verranno presentate le possibili applicazioni di questa teoria, come ad esempio nella fisica nucleare.

Chapter 2

Modello oscillatore armonico in 1D

2.1 Sistemi costituiti da N fermioni

Iniziamo la trattazione di questo elaborato considerando un sistema unidimensionale costituito da N fermioni non interagenti intrappolati in un potenziale armonico descritto dalla seguente hamiltoniana

$$H = T + V$$

dove T indica l'energia cinetica, mentre V il potenziale armonico. Si sceglie un potenziale armonico perché è quello che approssima ragionevolmente bene il potenziale reale a cui sono sottoposti i nucleoni all'interno del nucleo e ci permette di sfruttare diverse proprietà tra le quali il disaccoppiamento delle coordinate del centro di massa da quelle del moto relativo e ci permette di scrivere molte quantità, come l'energia cinetica e le funzioni d'onda, in funzione dei polinomi di Hermite. Riscrivendo l'Hamiltoniana in maniera esplicita nel caso unidimensionale otteniamo:

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (2.1)$$

dove m indica la massa delle singole particelle e ω la pulsazione del potenziale armonico. Il sistema così descritto è esattamente risolubile con diversi metodi. Tra i quali è possibile utilizzare le funzioni d'onda e la teoria del funzionale densità. In questo capitolo verranno utilizzati entrambi i metodi per sottolineare la veridicità della teoria precedentemente proposta. Possiamo quindi descrivere uno stato tramite una funzione d'onda $\psi(x)$ che soddisfa l'equazione di Schrodinger:

$$H\psi = (T + V)\psi = \left[\frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + m^2 \omega^2 x_i^2 \right) \right] \psi_i = E_i \psi_i \quad (2.2)$$

Da questo momento in poi adotteremo il sistema di unità naturali, $\hbar = \omega = m = 1$, per non appesantire la notazione. Ci focalizzeremo a capire come poter definire l'energia cinetica di un gruppo di particelle in funzione della loro densità. Il punto di partenza di questo paragrafo è la conoscenza delle autofunzioni, esprimibili tramite i polinomi di Hermite $H_n(x)$, secondo la formula:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) \quad (2.3)$$

dove per $n = 1$ si indica lo stato con energia più bassa, con $n = 2, 3, \dots$ gli stati con energia via via crescente. Le autofunzioni così definite godono della proprietà di ortonormalità:

$$\int \psi_n(x) \psi_m(x) = \delta_{nm} \quad (2.4)$$

2.2 Esempio con n=1

Arrivati a questo punto è utile fare una verifica per il caso più semplice, dove solo il livello più basso è occupato. Una volta fatto questo esanderemo la nostra teoria per sistemi più complessi e generali. La funzione d'onda è dunque quella con $n = 1$:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (2.5)$$

Inserendola nella formula generale della densità di energia cinetica:

$$t = -\frac{1}{2} \sum_i \psi_i \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x^2} \quad (2.6)$$

otteniamo:

$$t = -\frac{1}{2} \psi_1 \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

dove:

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial x} = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)(-x) \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)(x^2 - 1) \quad (2.9)$$

e sostituendole, otteniamo:

$$t(x) = \frac{1}{2} \frac{1}{\pi^{1/2}} \exp(-x^2)(1 - x^2) \quad (2.10)$$

Sapendo però che:

$$\rho = |\psi_1|^2 = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{2}}} \exp(-x^2) \quad (2.11)$$

possiamo riscrivere l'energia cinetica in funzione della densità:

$$t = \frac{1}{2} \rho (1 + \ln \pi^{\frac{1}{2}} + \ln \rho) \quad (2.12)$$

Siamo quindi arrivati a far vedere come la densità di energia cinetica dipenda solo dalla densità locale ρ . A questo punto possiamo esaminare la sua derivata parziale rispetto alla densità:

$$\frac{\partial t}{\partial \rho} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} (\ln \rho + \frac{1}{2} \ln \pi) + \frac{1}{2} = 1 + \frac{1}{2} (\ln \rho + \frac{1}{2} \ln \pi) \quad (2.13)$$

Tramite qualche manipolazione possiamo esprimere quest'ultima formula rispetto a x . Per fare questo analizziamo la funzione inversa della densità (eq. 2.11):

$$-x^2 = (\ln \rho + \frac{1}{2} \ln \pi) \quad (2.14)$$

che andiamo a sostituire. Otteniamo così l'equazione:

$$\frac{\partial t}{\partial \rho} = 1 - \frac{1}{2} x^2 \quad (2.15)$$

che possiamo mettere in relazione con l'esatta equazione di Eulero della teoria del funzionale densità [4]:

$$\frac{\partial t}{\partial \rho} = \mu - V \quad (2.16)$$

dove μ è il potenziale chimico. Per l'oscillatore armonico l'assunzione della densità locale implica il risultato seguente:

$$\frac{\partial t}{\partial \rho} = (\mu - \frac{1}{2} x^2) \quad (2.17)$$

E' possibile notare che questa relazione è identica a quella da noi precedentemente ottenuta (formula 2.15) se $\mu = N$. Abbiamo quindi dimostrato il notevole risultato che l'assunzione di densità locale porta all'esatta equazione differenziale per ρ per il caso dell'oscillatore armonico.

2.3 Matrice densità

Avvenuta questa verifica possiamo ora espandere la teoria per sistemi più complessi e generalizzabili. In questo capitolo faremo ancora uso del sistema di unità naturali ($\hbar = \omega = m = 1$). Iniziamo pertanto a studiare la matrice densità, la quale ci permetterà di analizzare il problema con più particelle. La matrice densità è descritta tramite la formula:

$$\rho(x, x') = \sum_{k=1}^n \psi_k^\dagger(x') \psi_k(x) \quad (2.18)$$

Ora utilizzando la relazione derivante dai polinomi di Hermite:

$$\sqrt{2}x\psi_k(x) = \sqrt{k+1}\psi_{k+1}(x) + \sqrt{k}\psi_{k-1}(x) \quad (2.19)$$

e moltiplicando vettorialmente quest'ultima prima per $\psi_k(x)$ e successivamente per $\psi_k(x')$ e facendone la sottrazione, otteniamo:

$$\begin{aligned} -\sqrt{2}x\psi_k(x)\psi_k(x') + \sqrt{2}x\psi_k(x)\psi_k(x) &= \\ &= -\sqrt{k+1}\psi_{k+1}(x)\psi_k(x') + \sqrt{k+1}\psi_{k+1}(x)\psi_k(x) + \\ &\quad -\sqrt{k}\psi_{k-1}(x)\psi_k(x') + \sqrt{k}\psi_{k-1}(x)\psi_k(x) = \\ &= -\sqrt{k+1}[\psi_{k+1}(x)\psi_k(x') - \psi_k(x)\psi_{k+1}(x)] + \\ &\quad + \sqrt{k}[\psi_k(x)\psi_{k-1}(x) - \psi_{k-1}(x)\psi_k(x')] \end{aligned} \quad (2.20)$$

e quindi:

$$\begin{aligned} \sqrt{2}(x-x')\psi_k(x)\psi_k(x') &= \\ &= \sqrt{k+1}[\psi_{k+1}(x)\psi_k(x') - \psi_k(x)\psi_{k+1}(x)] + \\ &\quad - \sqrt{k}[\psi_k(x)\psi_{k-1}(x) - \psi_{k-1}(x)\psi_k(x')] \end{aligned} \quad (2.21)$$

che inserendola nella formula della matrice densità si ottiene l'eq. espressa in funzione delle funzioni d'onda delle particelle occupanti i diversi orbitali:

$$\begin{aligned} \rho(x, x') &= \sum_{k=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}(x-x')} \sqrt{k+1}[\psi_{k+1}(x)\psi_k(x') - \psi_k(x)\psi_{k+1}(x)] + \\ &\quad - \sqrt{k}[\psi_k(x)\psi_{k-1}(x) - \psi_{k-1}(x)\psi_k(x')] = \\ &= \sqrt{\frac{N}{2}} \frac{1}{(x-x')} \begin{vmatrix} \psi_N(x) & \psi_N(x') \\ \psi_{N-1}(x) & \psi_{N-1}(x') \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Adesso usando $\psi'_N(x) = -x\psi_N(x) + \sqrt{2}N\psi_{N-1}(x)$ possiamo riscriverla in funzione solo dell'ultimo orbitale occupato e, grazie ad un'altra proprietà dei polinomi di Hermite, della sua derivata:

$$\rho(x, x') = -\frac{1}{2}\psi_N(x)\psi_N(x') + \frac{1}{2(x-x')} \begin{vmatrix} \psi_N(x) & \psi_N(x') \\ \psi'_N(x) & \psi'_N(x') \end{vmatrix} \quad (2.23)$$

Espandendo $\psi_N(x')$ e $\psi'_N(x')$ in serie di Taylor infinite centrate in x e ponendo $x = x'$, si può trovare l'espressione esatta per la densità in termini di $\psi_N(x)$, $\psi'_N(x)$ e $\psi''_N(x)$ data dalla formula:

$$\rho(x) = -\frac{1}{2}\psi_N^2(x) + \frac{1}{2}[\psi'_N(x)^2 - \psi_N(x)\psi''_N(x)] \quad (2.24)$$

Ora utilizzando l'equazione di Schrodinger e prendendo in considerazione solo l'orbitale N:

$$-\psi_N'' + \frac{x^2}{2}\psi_N = (N - \frac{1}{2})\psi_N \quad (2.25)$$

possiamo scrivere l'eq. precedente come una funzione di ψ_N e ψ_N' :

$$\rho(x) = \frac{1}{2}\psi_N'(x)^2 + (N - \frac{x^2}{2})\psi_N(x)^2 \quad (2.26)$$

E' possibile notare che grazie alle proprietà dei polinomi di Hermite siamo riusciti ad esprimere la densità in funzione solo dell'ultimo stato occupato.

Adesso che abbiamo trovato l'espressione della densità $\rho(x)$ vogliamo utilizzarla per riuscire ad esprimere l'energia cinetica del sistema. Sappiamo che l'energia cinetica in funzione delle funzioni d'onda è data dalla seguente formula:

$$t(x, x') = -\frac{1}{2} \sum_k \psi_k^\dagger(x') \frac{\partial^2 \psi_k(x)}{\partial x^2} \quad (2.27)$$

Grazie alla non dipendenza di x di $\psi_k^\dagger(x')$ e che è possibile portar fuori dalla somma la derivata per la convergenza di quest'ultima, è possibile riscrivere la formula, senza perdita di generalità, come:

$$t(x, x') = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sum_k \psi_k(x) \psi_k^\dagger(x') \quad (2.28)$$

Dato che il nostro interesse si focalizza sulla densità di energia cinetica, poniamo $x = x'$ ottenendo:

$$t(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\rho(x, x')]_{x=x'} \quad (2.29)$$

Una volta ottenuta questa formula, vediamo che è necessario derivare due volte la densità di particelle per ottenere l'espressione esplicita. Quindi derivando la densità:

$$\rho'(x) = -x\psi_N^2 + \psi_N\psi_N' \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \rho''(x) &= -\psi_N^2 - 2x\psi_N\psi_N' + \psi_N\psi_N'' + \psi_N'^2 = \\ &= -\psi_N^2 - 2x\psi_N\psi_N' + \psi_N'^2 + \psi_N(\frac{x^2}{2} - N + \frac{1}{2})\psi_N = \\ &= \psi_N^2(-2N + x^2) + \psi_N'^2 - 2x\psi_N\psi_N' \end{aligned} \quad (2.31)$$

otteniamo:

$$\begin{aligned} t(x) &= \frac{1}{12}\psi_N^2(x)[x^4 - x^2(4N + 1) + 2N + 4N^2] + \\ &\quad - \frac{1}{12}\psi_N'^2(x)[x^2 - 2N + 1] + \frac{1}{6}x\psi_N(x)\psi_N'(x) \end{aligned} \quad (2.32)$$

Arrivati a questo punto, vorremmo riscrivere l'energia cinetica in funzione della densità e non delle funzioni d'onda, ovvero di $\rho(x)$, $\rho'(x)$ e $\rho''(x)$. Innanzi tutto esprimiamo ψ_N^2 , $\psi_N\psi'_N$ e $\psi_N'^2$ come funzioni di ρ , ρ' e ρ'' invertendo le funzioni delle derivate della densità, per poi sostituirle nella formula dell'energia cinetica e ottenere:

$$t(x) = \frac{1}{6}(2N - x^2)\rho(x) - \frac{\rho''(x)}{12} \quad (2.33)$$

Per verificare la validità di questa formula la testiamo per un solo stato occupato e la confrontiamo con l'energia cinetica calcolata tramite le funzioni d'onda. Riprendiamo la densità di particella calcolata precedentemente nello stato $N = 1$ e ricaviamo la rispettiva derivata seconda:

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{2}}} \exp(-x^2) \quad (2.34)$$

$$\rho''(x) = -\frac{e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}} + 2x^2 \frac{e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}} + \frac{e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}}(x^2 - 1) + \frac{e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}}(x^2) = \frac{2e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}}(2x^2 - 1) \quad (2.35)$$

Una volta calcolate ci accingiamo ad inserirle nella formula della densità di energia cinetica ottenendo:

$$t(x) = \frac{1}{6}(2 - x^2) \frac{e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{12} \frac{2e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}}(2x^2 - 1) = \frac{1}{6} \frac{e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}}(3 - 3x^2) = \frac{1}{2} \frac{e^{-x^2}}{\pi^{\frac{1}{2}}}(1 - x^2) \quad (2.36)$$

La quale è manifestamente identica al risultato trovato con il calcolo svolto precedentemente con le funzioni d'onda (formula 2.10).

2.4 Verifica dell'energia totale

E' possibile fare un ulteriore verifica consistente nel calcolare l'energia del sistema in due diversi modi. Il primo deriva dalla teoria dell'oscillatore armonico unidimensionale. L'energia infatti può essere calcolata tramite gli autovalori dell'hamiltoniana secondo la seguente formula:

$$E = \hbar\omega(n - \frac{1}{2}) \quad (2.37)$$

dove per lo stato ad energia più bassa $n = 1$ e man mano che l'energia aumenta $n = 2, 3, \dots$. Se dovessimo considerare un sistema con molte particelle, ad esempio potremmo iniziare a considerarne $N = 20$, allora l'energia si ottiene sommando sugli autovalori. Utilizzando un formalismo più rigoroso e matematico scriviamo la formula:

$$E_{TOT} = \sum_{i=1}^N \hbar\omega(i - \frac{1}{2}) = \frac{N^2}{2} \quad (2.38)$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo preso in considerazione il sistema naturale, ovvero abbiamo posto $\hbar = \omega = 1$.

Il secondo metodo deriva dall'integrazione su tutto il volume della densità di energia, data dalla seguente formula:

$$\epsilon(x) = t(x) + \rho(x)V(x) \quad (2.39)$$

Sviluppando gli integrali separatamente:

$$\begin{aligned} T &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{6} \rho(x) dx + \frac{N}{3} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = \\ &= \int \frac{x^2}{6} [\frac{1}{2} \psi_N'^2 + (N - \frac{x^2}{2}) \psi_N^2] dx + \frac{N}{3} \int [\frac{1}{2} \psi_N'^2 + (N - \frac{x^2}{2}) \psi_N^2] dx = \\ &= \int \frac{x^2}{12} \psi_N'^2(x) dx - \int \frac{x^4}{12} \psi_N^2(x) dx + \int \frac{N}{6} \psi_N'^2(x) dx + \int \frac{N^2}{3} \psi_N^2(x) dx = \\ &= \int (\frac{x^2}{12} + \frac{N^2}{6}) (x^2 \psi_N^2(x) + 2N \psi_{N-1}^2(x) - 2\sqrt{2}N \psi_N(x) \psi_{N-1}(x)) - \frac{x^4}{12} \psi_N^2(x) + \frac{N^2}{3} \psi_N^2(x) = \\ &= \int (\frac{N}{6} x^2 + \frac{N^3}{3}) \psi_{N-1}^2(x) - (\frac{\sqrt{2}N x^2}{6} + \frac{\sqrt{2}N^2}{3}) \psi_N(x) \psi_{N-1}(x) + (\frac{N}{6} x^2 + \frac{N^2}{3}) \psi_N^2(x) = \\ &= -\frac{1}{3} \frac{N^2}{4} + \frac{N}{3} [\frac{1}{4} (2N+1) + N - N + N - \frac{1}{4} (2N+1)] = \\ &= -\frac{1}{3} \frac{N^2}{4} + \frac{N^2}{3} = \frac{N^2}{3} (\frac{3}{4}) = \frac{N^2}{4} \quad (2.40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)V(x) dx = \int \frac{x^2}{2} [\frac{1}{2} \psi_N'^2 + (N - \frac{x^2}{2}) \psi_N^2] dx = \\ &= \int \frac{x^2}{4} \psi_N'^2 dx + \int (N \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{4}) \psi_N^2 dx = \\ &= \int \frac{x^2}{4} x^2 \psi_N^2 + 2N \int \frac{x^2}{4} \psi_{N-1}^2 - \int 2 \frac{x^2}{4} x \sqrt{2N} \psi_N \psi_{N-1} + \int (N \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{4}) \psi_N^2 = \\ &= \int \frac{N}{2} x^2 \psi_{N-1}^2 - \sqrt{\frac{N}{2}} \int x^3 \psi_N \psi_{N-1} + \frac{N}{2} \int x^2 \psi_N^2 = \\ &= \frac{N}{2} \frac{1}{2} (2N-1) - \sqrt{\frac{N}{2}} \sqrt{\frac{N}{2}} (3N) + \frac{N}{2} \frac{1}{2} (2N+1) = \\ &= \frac{N}{4} (2N-1 - 3N + 2N+1) = \frac{N^2}{4} \quad (2.41) \end{aligned}$$

otteniamo:

$$E = T + U = \frac{N^2}{4} + \frac{N^2}{4} = \frac{N^2}{2} \quad (2.42)$$

Che è manifestamente identico al risultato trovato precedentemente con il calcolo degli autovalori (formula 2.38).

Chapter 3

Risultati e test del caso unidimensionale

3.1 Implementazione del codice e grafici

Analizzata la parte teorica ci siamo proposti di verificare i risultati ottenuti tramite la progettazione di un programma che svolgesse i calcoli. Verranno dunque qui riportate le verifiche fatte. Per testare la veridicità del programma scritto, sono stati svolti alcuni piccoli test che verranno evidenziati man mano nella trattazione. Innanzitutto è stata calcolata la densità di particelle in due modi differenti: il primo tramite la sommatoria del prodotto delle funzioni d'onda (formula 2.18 con $x = x'$), mentre il secondo tramite l'ultimo stato occupato (formula 2.26). I valori riportati derivano da un sistema costituito da $N = 50$ particelle. Abbiamo riportato sul grafico i valori ottenuti in funzione del raggio (Figura 3.1).

La prima verifica svolta è stata testare il programma anche per $N = 100$ particelle, ovvero con $n = 50$ stati occupati, per poterlo confrontare con il lavoro svolto da March e Nieto [3]. Vengono dunque riportati di seguito il grafico da noi ottenuto e quello dei due fisici (Figure 3.2 e 3.3).

A questo punto è stata fatta un'ulteriore verifica, cioè abbiamo calcolato l'integrale di queste quantità, con i relativi errori percentuali, per riottenere il numero di particelle di partenza. Quello che abbiamo ottenuto sono valori che si discostano da quello originario dello 0,000391%.

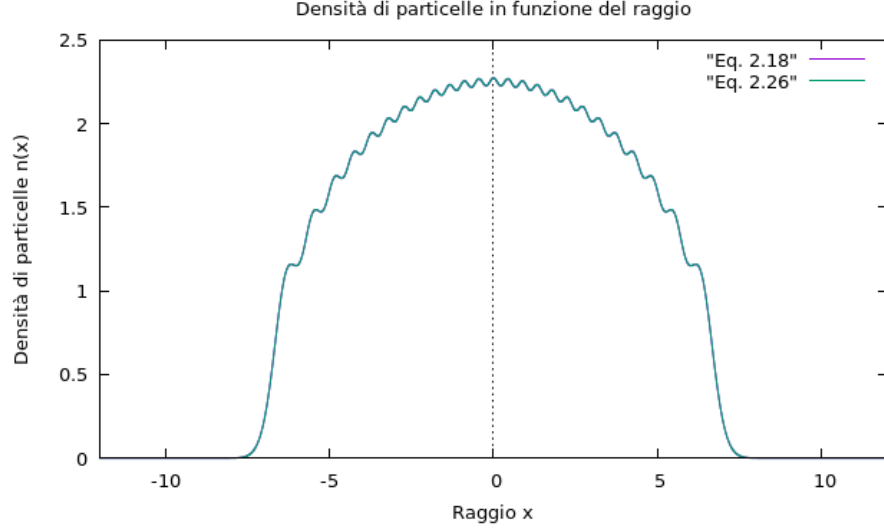


Figure 3.1: Densità di un sistema di $N = 50$ particelle non interagenti in una buca armonica in funzione della posizione.

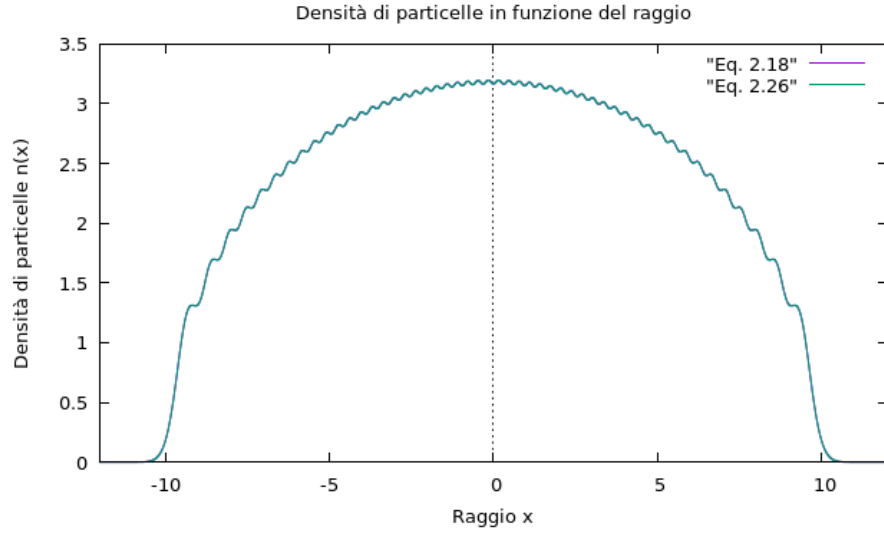


Figure 3.2: Densità di particelle di un sistema con $n = 50$ stati occupati in funzione della posizione.

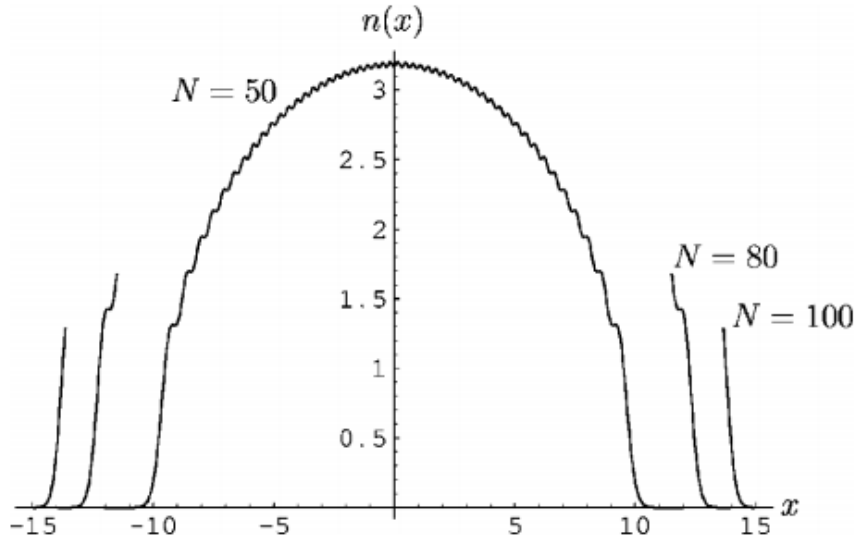


Figure 3.3: Densità di particelle di un sistema con $n = 50$ stati occupati in funzione della posizione ottenuto da March e Nieto.

```
Inserisci il numero di particelle: 50
Il numero di stati occupati è: 25

L'integrale della densità di particelle rho1 è: 50.000196
L'integrale della densità di particelle rho2 è: 50.000196
L'errore relativo percentuale per rho1 è: 0.000391
L'errore relativo percentuale per rho2 è: 0.000391
```

Il passo successivo è stato quello di calcolare la densità di energia cinetica. Anche questa è stata calcolata in due modi differenti: il primo tramite la formula 2.27 ponendo $x = x'$, il secondo tramite la formula 2.33. I dati ottenuti in funzione del raggio sono stati riportati sul grafico (Figura 3.4). Anche in questo caso l'abbiamo testato per $N = 100$ particelle per paragonarlo a quello ottenuto da March e Nieto nel loro elaborato [3] e che verrà riportato successivamente a termine di paragone (Figure 3.5 e 3.6).

Abbiamo poi integrato queste densità di energia cinetica, ottenendo così l'energia cinetica da confrontare con i valori di aspettazione dati dalla formula 2.38. Anche in questo caso sono stati calcolati gli errori relativi percentuali. Questa è un'ulteriore verifica dei dati ottenuti.

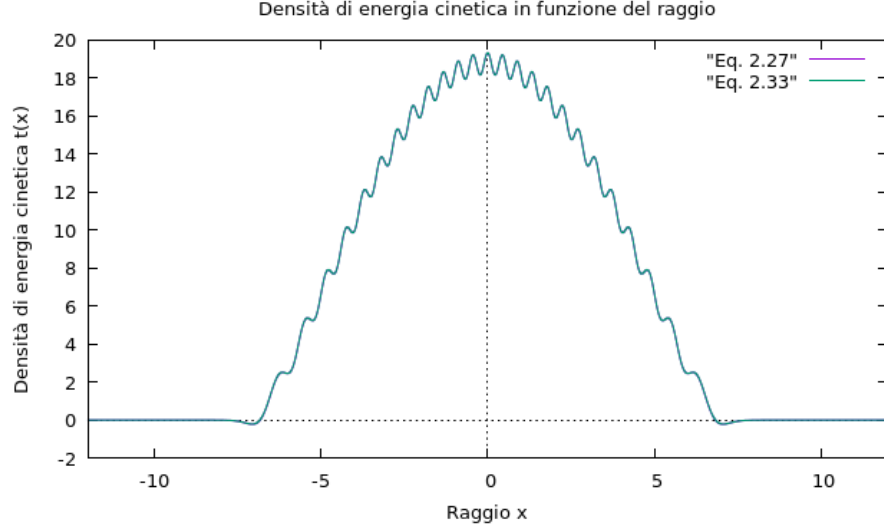


Figure 3.4: Densità di energia cinetica di un sistema di $N = 50$ particelle non interagenti in una buca armonica in funzione della posizione.

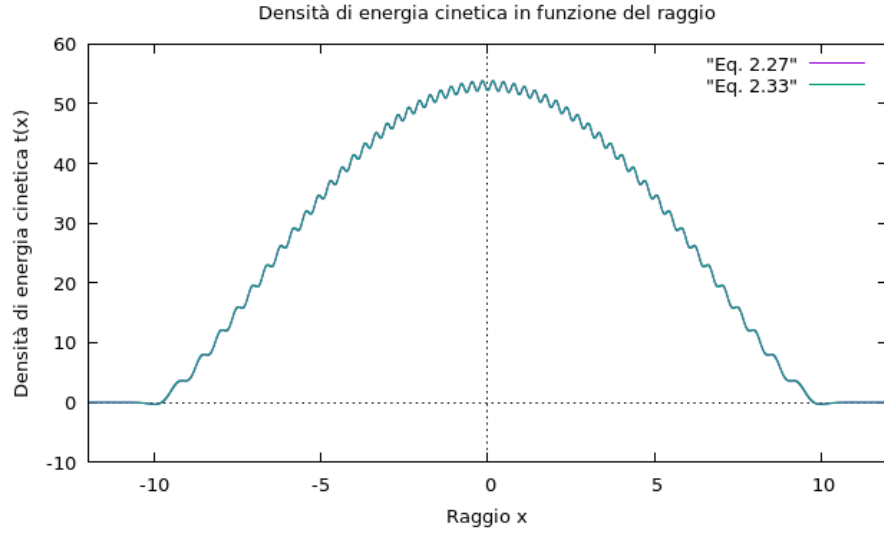


Figure 3.5: Densità di energia cinetica di un sistema di $n = 50$ stati occupati in funzione della posizione.

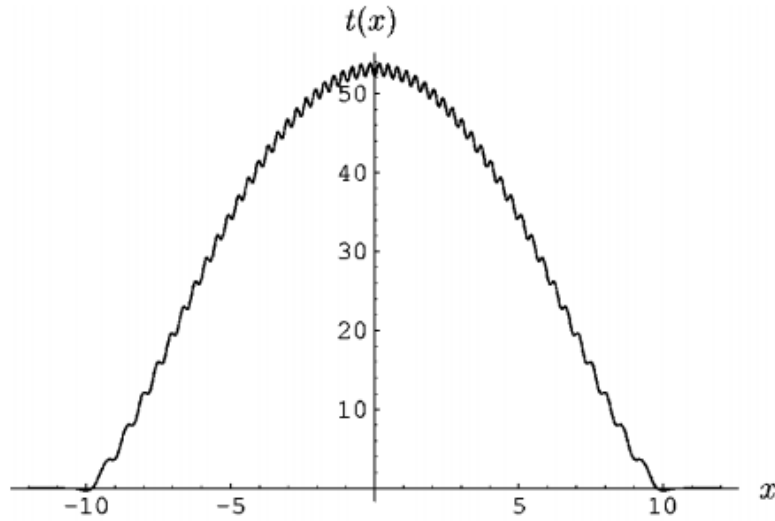


Figure 3.6: Densità di energia cinetica di un sistema di $n = 50$ stati occupati in funzione della posizione ottenuto da March e Nieto.

```
L'energia cinetica calcolata tramite l'integrale di 6 è: 156.250412 MeV
L'energia cinetica calcolata tramite l'integrale di 31 è: 156.250412 MeV
L'energia cinetica calcolata tramite  $N^2/4$  è: 156.250000 MeV
L'errore relativo percentuale della prima misura è: -0.000263 percent
L'errore relativo percentuale della seconda misura è: -0.000263 percent
```

L'ultima verifica che è stata fatta riguarda l'energia totale. Abbiamo calcolato l'energia totale tramite l'integrazione della formula 2.39, utilizzando come densità di energia cinetica le due precedentemente ottenute, e tramite la formula 2.38. Abbiamo poi confrontato questi valori.

```
L'energia totale calcolata tramite l'integrale 1 è: 312.501619 MeV
L'energia totale calcolata tramite l'integrale 2 è: 312.501619 MeV
L'energia totale calcolata tramite  $N^2/2$  è: 312.500000 MeV
L'errore assoluto tra le due energie totali è: 0.001619 MeV
L'errore assoluto tra le due energie totali è: 0.001619 MeV
```


Chapter 4

Modello oscillatore armonico in 3D

4.1 Sistemi tridimensionali costituiti da N particelle

Svolte le verifiche nel paragrafo precedente, il passaggio successivo è quello di estendere lo stesso calcolo per una trappola di oscillatore armonico isotropo in tre dimensioni. Per semplificare il problema sfrutteremo la simmetria sferica. Introduciamo quindi le formule necessarie per poter passare dalle coordinate cartesiane a quelle sferiche:

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad (4.1)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (4.2)$$

$$z = r \cos \theta \quad (4.3)$$

dove r indica la distanza dal polo, θ indica l'angolo formato con l'asse z mentre ϕ l'angolo formato dalla proiezione sul piano xy con l'asse x . In queste coordinate l'Hamiltoniana sarà data da:

$$H(r, \theta, \phi) = \frac{\vec{p}^2}{2} + V(\vec{r}) \quad (4.4)$$

dove $\vec{p} = p(r, \theta, \phi)$ ed è possibile notare che il potenziale $V(\vec{r}) = \frac{\vec{r}^2}{2}$ dipende solo dalla norma del vettore $\vec{r}$. Procedendo come nel caso unidimensionale possiamo descrivere uno stato tramite una funzione d'onda $\psi(r, \theta, \phi)$ che soddisfa l'equazione di Schrodinger:

$$\hat{H}\psi_i(r, \theta, \phi) = (\hat{T} + V(r))\psi_i(r, \theta, \phi) = \epsilon_i\psi_i(r, \theta, \phi) \quad (4.5)$$

Le funzioni d'onda espresse nelle coordinate sferiche si possono suddividere in una parte radiale $R(r)$, dipendente dai polinomi di Laguerre, ed in una dipendente solo dagli angoli: le armoniche sferiche $Y(\theta, \phi)$.

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = N_{n,l} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (4.6)$$

dove $N_{n,l}$ è una costante di normalizzazione. Esplicitando le parti alla destra dell'equazione precedente, possiamo riscrivere le funzioni d'onda come segue:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{(\frac{n-l}{2})! (\frac{n+l}{2})! 2^{n+l+2}}{(n+l+1)!}} r^l e^{-\frac{r^2}{2}} L_k^{l+\frac{1}{2}}(r^2) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (4.7)$$

dove $L_k^{l+\frac{1}{2}}(r^2)$ sono appunto i polinomi generalizzati di Laguerre, $k = \frac{n-l}{2}$ e n, l ed m sono i numeri quantici. Focalizzeremo ora la trattazione sulla densità di fermioni ρ , presentando la teoria per un numero arbitrario di shell chiuse, ad esempio $(M+1)$, di un oscillatore armonico isotropo tridimensionale.

4.2 Matrice densità

La matrice densità per particella singola può essere ottenuta dalla trasformata inversa di Laplace della matrice densità di Bloch [1]:

$$\rho(r, r') = \sum_{\epsilon_i < E_F} \psi_i^\dagger(r') \psi_i(r) = \mathcal{L}_{E_F}^{-1} \left(\frac{1}{\beta} C(r, r'; \beta) \right) \quad (4.8)$$

dove:

$$C(r, r'; \beta) = \sum_{all-i} \psi_i^\dagger(r') \psi_i(r) \exp(-\beta \epsilon_i) \quad (4.9)$$

$\mathcal{L}_{E_F}^{-1}$ rappresenta la trasformata inversa di Laplace fatta per tutte le energie inferiori all'energia di Fermi E_F e β un numero complesso.

Per trovare il valore esatto della densità locale bisogna valutare $\rho(r, r')$ in $r = r'$. Per quanto riguarda la densità di energia cinetica possiamo analizzare due espressioni:

$$t(r) = -\frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \psi_i^\dagger(r) \nabla^2 \psi_i(r) \quad (4.10)$$

oppure:

$$t_1(r) = \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} |\nabla \psi_i(r)|^2 \quad (4.11)$$

In presenza di simmetria per inversione temporale sono legate dalla formula:

$$t(r) = t_1(r) - \frac{1}{4} \nabla^2 \rho(r) \quad (4.12)$$

infatti è facile osservare che, sostituendo i valori, otteniamo un'identità:

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \psi_i^\dagger \nabla^2 \psi_i &= \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} |\nabla \psi_i|^2 - \frac{1}{4} \sum_{\epsilon_i < E_F} (\nabla^2 \psi_i^\dagger \psi_i + 2 \nabla \psi_i^\dagger \nabla \psi_i + \psi_i^\dagger \nabla^2 \psi_i) \\
-\frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \psi_i \nabla^2 \psi_i &= \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} |\nabla \psi_i|^2 - \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \psi_i \nabla^2 \psi_i - \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \nabla \psi_i \nabla \psi_i
\end{aligned} \tag{4.13}$$

dove al passaggio tra la prima e la seconda riga abbiamo fatto l'assunzione che $\psi^\dagger = \psi$ per la sua natura reale.

E' possibile inoltre analizzare la densità di energia cinetica, non tramite le funzioni d'onda come appena fatto, bensì attraverso la densità di particelle ρ . Questo è possibile farlo grazie alla formula ottenuta dall'integrazione della seguente equazione [2]:

$$\frac{1}{8} \frac{\partial}{\partial r} \nabla^2 \rho(r) + [(M+2) - V(r)] \rho'(r) + \frac{3}{2} \left[\frac{\partial V(r)}{\partial r} \right] \rho(r) = 0 \tag{4.14}$$

ottenendo specificatamente per il caso tridimensionale:

$$t(r) = \frac{du}{5} \frac{\rho^{\frac{5}{3}}}{\rho^{\frac{2}{3}}(0)} + \frac{\rho^{\frac{5}{3}}(r)}{20} \int_0^r \frac{1}{\rho^{\frac{5}{3}}} \frac{\partial}{\partial s} \nabla^2 \rho ds - \frac{\nabla^2 \rho(r)}{20} \tag{4.15}$$

dove $u = M + 2$.

E' conveniente ora introdurre una quantità data dalla media delle densità di energia cinetica espresse con le funzioni d'onda (formule 4.10 e 4.11):

$$\xi(r) = \frac{1}{2} (t(r) + t_1(r)) \tag{4.16}$$

in quanto le oscillazioni delle shell nelle quantità $t(r)$ e $t_1(r)$ sono esattamente opposte in fase, quindi la loro media $\xi(r)$ è una funzione regolare in r che (eccetto vicino al punto di inversione) rispecchia molto bene la densità di energia di Thomas-Fermi. Quest'ultima quantità si può esprimere anche in funzione della densità di particelle ρ tramite la seguente formula:

$$\xi(r) = -\frac{1}{2} \nabla^2 \rho(r) \tag{4.17}$$

E' possibile notare che integrando tutte e tre queste quantità ($t(r)$, $t_1(r)$ e $\xi(r)$) si ottiene la stessa ed esatta energia cinetica:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty t(r)dr &= \int_0^\infty -\frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \psi_i^\dagger(r) \nabla^2 \psi_i(r) dr = \\
&= -\frac{1}{2} \sum \psi_i \nabla \psi_i|_0^\infty + \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \int |\nabla \psi_i|^2 dr = \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \int |\nabla \psi_i|^2 dr = E_{Kin} \\
\int_0^\infty t_1(r)dr &= \int_0^\infty \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} |\nabla \psi_i(r)|^2 dr = \frac{1}{2} \sum_{\epsilon_i < E_F} \int |\nabla \psi_i|^2 dr = E_{Kin} \\
\int_0^\infty \xi(r)dr &= \frac{1}{2} \int_0^\infty t(r)dr + \frac{1}{2} \int_0^\infty t_1(r)dr = \frac{1}{2} E_{Kin} + \frac{1}{2} E_{Kin} = E_{Kin}
\end{aligned} \tag{4.18}$$

dove il primo integrale è stato svolto utilizzando l'integrazione per parti. Detto questo ci focalizziamo ora sull'esatta matrice densità di Bloch [1], che per il sistema dato è:

$$C(r; \beta) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sinh^{\frac{3}{2}}(\beta)} \exp \left(-r^2 \tanh\left(\frac{\beta}{2}\right) \right) \tag{4.19}$$

Per ottenere le densità delle particelle e dell'energia cinetica, dobbiamo eseguire le trasformate di Laplace inverse della funzione precedente. Per il fattore esponenziale vale la relazione:

$$\exp \left(-r^2 \tanh\left(\frac{\beta}{2}\right) \right) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n L_n(2r) e^{-r} (e^{-n\beta} + e^{-(n+1)\beta}) \tag{4.20}$$

Questa relazione vale se $|e^{-\beta}| < 1$, che è soddisfatta al contorno dall'integrale della trasformata inversa di Laplace nel piano complesso $\beta = it + c$ per $t \in (-\infty, \infty)$ e $c > 0$. Usando $E_F = (M + \frac{3}{2} + \delta)$, dove M indica il numero di shell chiuse e δ è un numero positivo infinitamente piccolo, otteniamo le espressioni generali:

$$\rho(r) = \left(\frac{1}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} 2 \sum_{\mu=0}^M F_{M-\mu}^{(3)} (-1)^\mu L_\mu(2r^2) e^{-r^2} \tag{4.21}$$

$$\xi(r) = \left(\frac{1}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{3}{2} \sum_{\mu=0}^M G_{M-\mu}^{(3)} (-1)^\mu L_\mu(2r^2) e^{-r^2} \tag{4.22}$$

I coefficienti $F_\nu^{(3)}$, $G_\nu^{(3)}$ sono dati da:

$$F_\nu^{(3)} = \nu + 1 + \sum_{m=1}^{[\nu/2]} (\nu + 1 - 2m) g_m^{(3)} \tag{4.23}$$

$$G_{\nu}^{(3)} = (\nu + 1)^2 + \sum_{m=1}^{[\nu/2]} (\nu + 1 - 2m)^2 g_m^{(3)} \quad (4.24)$$

dove $[\nu/2] \equiv \text{integer}(\nu/2)$ e (per $m \geq 1$) $g_m^{(3)} = \frac{(2m-1)!!}{(2m)!!}$, il doppio punto esclamativo indica il semifattoriale.

Le formule così ricavate per ρ e ξ (formule 4.21 e 4.22) sono molto più semplici da risolvere per i calcoli numerici, rispetto alle loro definizioni in termini di autofunzioni, che richiedono una complessità maggiore.

Nell'approssimazione del modello di Thomas-Fermi (TF) o della densità locale (LDA), ovvero il modello che descrive un sistema di fermioni interagenti sottoposti ad un potenziale agente sul singolo fermione contenente l'interazione con tutti gli altri, possiamo ricavare dal potenziale le seguenti densità locali, che riportiamo direttamente per il caso tridimensionale:

$$\rho_{TF}(r) = \frac{4}{3} \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2})} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} (E_F - \frac{x}{2})^{\frac{3}{2}} \quad (4.25)$$

$$\tau_{TF}(r) = \frac{4}{5} \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2})} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} (E_F - \frac{x}{2})^{\frac{3}{2}+1} \quad (4.26)$$

Dove $\Gamma(x)$ indica la funzione gamma.

La relazione funzionale TF tra τ e ρ è pertanto data da:

$$\tau_{TF}[\rho] = \frac{6\pi}{5} \left[\frac{3}{4} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \right]^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{5}{3}} = \frac{6\pi}{5} \left[\frac{3}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right]^{\frac{2}{3}} \rho^{\frac{5}{3}} = \frac{3\pi}{10} (9\pi)^{\frac{1}{3}} \rho^{\frac{5}{3}} \quad (4.27)$$

Il nostro obiettivo ora è di studiare numericamente la relazione di cui sopra usando le densità esatte e vedere quanto la teoria appena esposta descriva bene il sistema sia a livello locale che globale.

4.3 Energia totale del sistema

E' possibile, analogamente al caso unidimensionale, poter considerare l'energia totale del sistema con due differenti metodi.

Il primo deriva dalla teoria dell'oscillatore armonico tridimensionale. L'energia infatti può essere calcolata tramite gli autovalori dell'hamiltoniana secondo la seguente formula:

$$E = \hbar\omega(n + \frac{3}{2}) \quad (4.28)$$

dove per lo stato ad energia più bassa $n = 1$ e man mano che l'energia aumenta $n = 2, 3, \dots$

Il secondo metodo deriva dall'integrazione su tutto lo spazio della densità di energia, data dalla seguente formula:

$$\epsilon(r) = t(r) + \rho(r)V(r) \quad (4.29)$$

dove per la densità di energia cinetica è possibile utilizzare indifferentemente una delle formule 4.10, 4.11, 4.16 precedentemente riportate. Otteniamo quindi:

$$E_{TOT} = E_{Kin} + \int_{all-space} \rho V d^3r \quad (4.30)$$

dove abbiamo fatto uso delle formule 4.18 per il calcolo dell'energia cinetica.

Chapter 5

Risultati e test del caso tridimensionale

5.1 Implementazione del codice e grafici

Analogo al caso monodimensionale, terminata la trattazione prettamente teorica, ci siamo proposti di implementare un codice in grado di svolgere i calcoli affinché riuscissimo a verificare i risultati ottenuti. Riporteremo quindi le verifiche svolte.

Come primo obiettivo ci siamo proposti di calcolare e graficare la densità di particelle tramite la formula 4.21. Inizialmente abbiamo compilato il programma studiando un sistema costituito da $N = 20$ particelle e successivamente studiandone uno costituito da $N = 240$ particelle. Questi due differenti sistemi ci hanno permesso di analizzare come si comportano sia i sistemi costituiti da poche particelle sia quelli più complessi. Abbiamo riportato sul grafico i valori ottenuti in funzione del raggio (Figure 5.1, 5.2).

Il passo successivo è stato quello di calcolare la densità di energia cinetica. E' stata calcolata utilizzando la formula 4.22. Anche in questo caso abbiamo compilato il programma studiando due sistemi costituiti da $N = 20$ e $N = 240$ particelle. I dati ottenuti in funzione del raggio sono stati riportati sul grafico (Figure 5.3, 5.4). Abbiamo scelto di studiare un sistema costituito da $N = 240$ particelle per poterlo paragonare a quello ottenuto da Brack e van Zyl nel loro elaborato [1] e che verrà riportato successivamente a termine di paragone e verifica (Figura 5.5). In questo grafico sono rappresentate tre diverse curve, le quali raffigurano le densità di energia cinetica calcolate secondo le tre formule 4.10, 4.11 e 4.16 disegnate tramite una linea continua, una linea tratteggiata e una linea con i punti rispettivamente.

Focalizzandoci sulla linea con i punti e confrontandola con quella da noi ottenuta nel grafico 5.4 possiamo vedere una grande compatibilità tra le due curve.

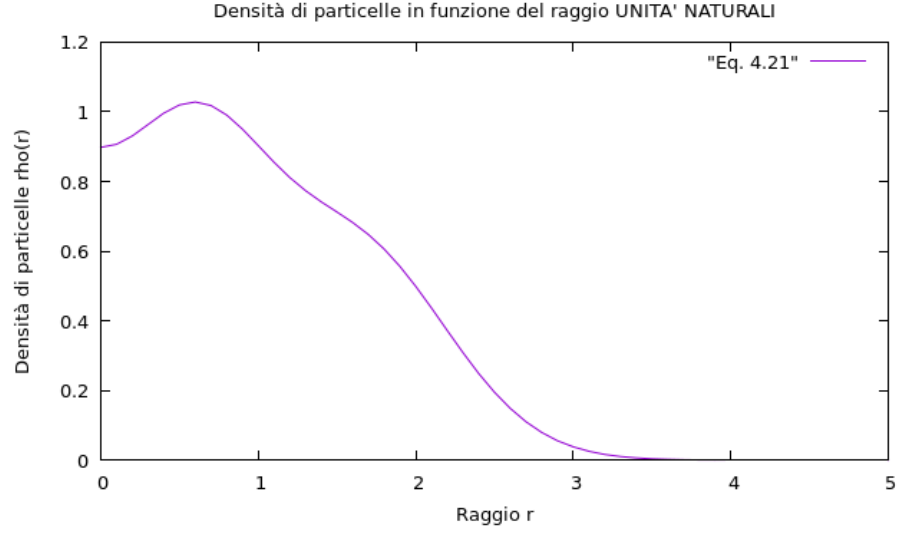


Figure 5.1: Densità di un sistema di $N = 20$ particelle non interagenti in una buca armonica tridimensionale in funzione della posizione.

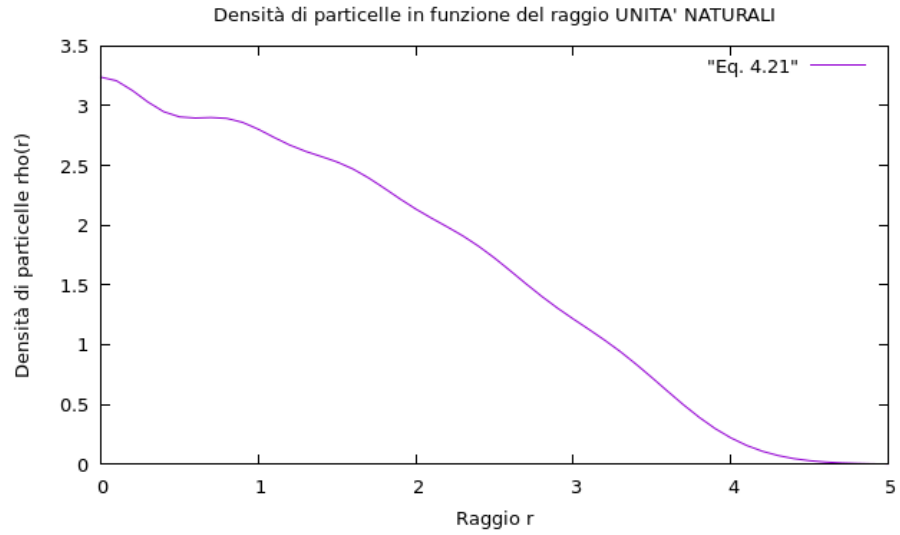


Figure 5.2: Densità di un sistema di $N = 240$ particelle non interagenti in una buca armonica tridimensionale in funzione della posizione.

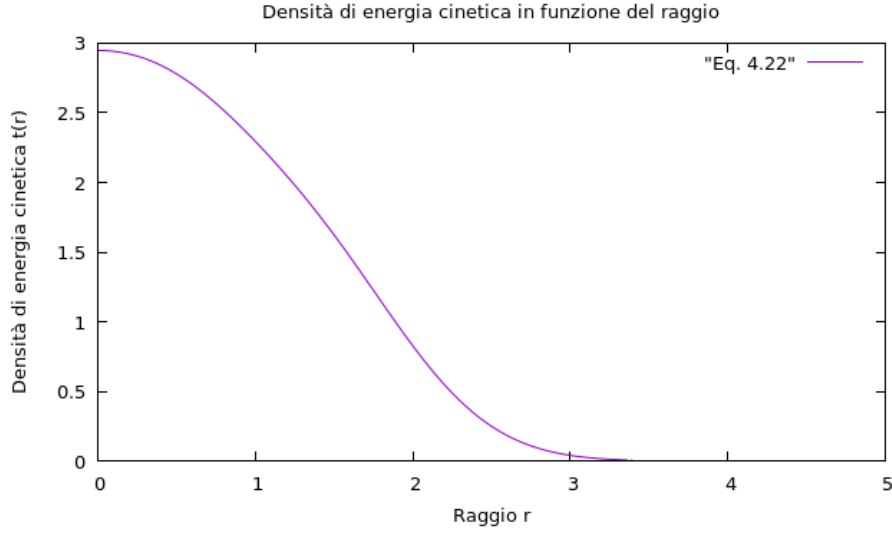


Figure 5.3: Densità di energia cinetica di un sistema di $N = 20$ particelle non interagenti in 3 shell piene di un oscillatore armonico isotropo 3D in funzione della posizione.

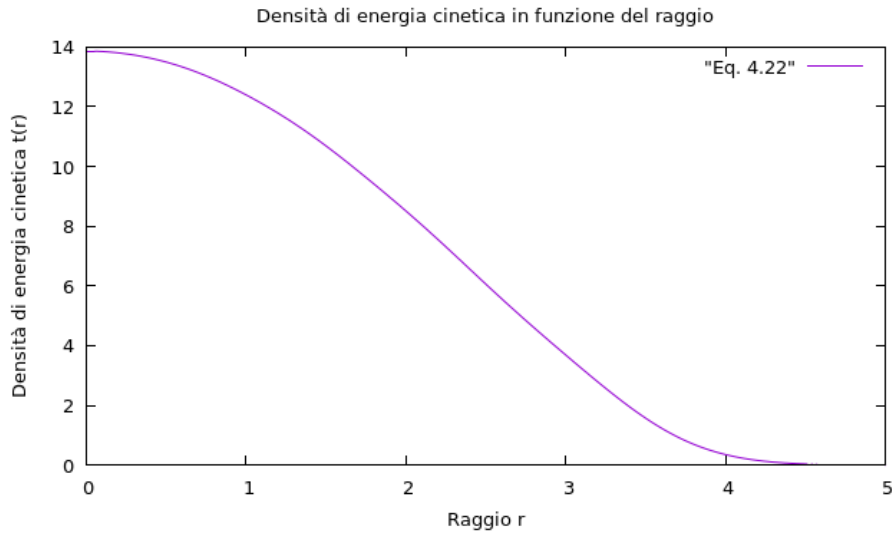


Figure 5.4: Densità di energia cinetica di un sistema di $N = 240$ particelle non interagenti in 8 shell piene di un oscillatore armonico isotropo 3D in funzione della posizione.

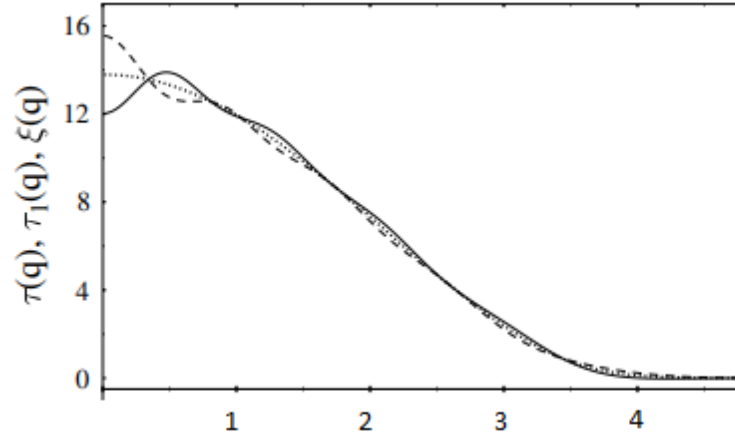


Figure 5.5: Densità di energia cinetica di un sistema di $N = 240$ particelle non interagenti in 8 shell piene di un oscillatore armonico isotropo 3D in funzione della posizione ottenuto da Brack e van Zyl.

La linea continua raffigura $t(q)$, la linea tratteggiata raffigura $t_1(q)$ mentre la linea con i punti rappresenta $\xi(q)$, dove q indica la posizione.

Chapter 6

Conclusioni

Nel presente elaborato mi sono proposto di analizzare il problema dell'oscillatore armonico quantistico per un sistema di fermioni non interagenti, studiandone le soluzioni in uno spazio unidimensionale e tridimensionale.

Questo problema, seppur molto semplice, è fondamentale per poter attuare prime approssimazioni su problemi complessi che rispecchiano di base questa teoria.

Sia nel caso monodimensionale che in quello tridimensionale ho evidenziato l'espressione della densità di energia cinetica in funzione della densità di particelle partendo dalla conoscenza delle funzioni d'onda e dall'Hamiltoniana, riportando i calcoli in modo dettagliato. Questo mi è stato possibile proprio per la semplicità del sistema.

Per sistemi che hanno Hamiltoniane più complesse però, non sempre è così immediato riuscire a ricavare informazioni sull'energia, ma la teoria del funzionale della densità garantisce che un funzionale dell'energia deve esistere. Nonostante ci sia questa garanzia però, non è immediato trovare il suddetto funzionale e per questo motivo approssimare i problemi complessi a sistemi più semplici rende il problema da me studiato così importante.

Per approfondire maggiormente il problema dell'oscillatore armonico quantistico nelle due dimensioni, mi sono preoccupato di graficare sia la densità di energia cinetica, sia la densità di particelle dalla quale sono partito con la trattazione. Tutti i grafici ottenuti, riportati nei rispettivi capitoli, sono stati paragonati a grafici presenti in letteratura, con i quali presentano una grande affinità.

La teoria del funzionale della densità è tra i metodi più popolari e versatili disponibili nella fisica della materia condensata, nella fisica computazionale e nella chimica computazionale. Un'ulteriore applicazione di questa teoria è nel campo della fisica nucleare, il cui obiettivo è quello di fornire una comprensione completa delle proprietà statiche dei nuclei atomici, dei loro spettri di eccitazione, della loro risposta ai campi esterni e dei loro decadimenti. Sebbene sia difficile raggiungere questi obiettivi all'interno di un'unica struttura è chiaro

che la teoria del funzionale densità ha probabilmente la più ampia gamma di applicabilità.

Bibliografia

- [1] M. Brack e B. P. van Zyl. “Simple Analytical Particle and Kinetic Energy Densities for a Dilute Fermionic Gas in a d-Dimensional Harmonic Trap”. In: *Physical Review Letters* 86 (Feb 2001), p. 1574.
- [2] N. H. March I. A. Howard and L. M. Nieto. “Complete functional theory for the fermion density of independent particles subject to harmonic confinement in d dimensions for an arbitrary number of closed shells”. In: *Physical Review A* 66 (2002), p. 054501.
- [3] N. H. March e L. M. Nieto. “Analytical relations between kinetic-energy and particle densities for one-dimensional harmonically confined Fermi vapors”. In: *Physical Review A* 63 (Mar 2001), p. 044502.
- [4] G. P. Lawes and N. H. March. “Exact local density method for linear harmonic oscillator”. In: *J. Chem. Phys* 71 (1979), p. 1007.
- [5] P. Hohenberg e W. Kohn. “Inhomogeneous Electron Gas.” In: *Physical Review* 136 (1964).