

densità

Fulvio Ciriaco

11 novembre 2025



l'interpretazione base per funzioni di singola particella

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2$$

a quale operatore corrisponde?



l'interpretazione base per funzioni di singola particella

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2$$

a quale operatore corrisponde?

$$\rho(x) = \int \psi^*(x') \delta(x - x') \psi(x') dx' \implies \hat{d}(y) = \delta(y - x)$$



distribuzioni e δ

$$\sum_k f_k \delta_{I,k} = f_I$$

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 1 & \iff m = n \\ 0 & \iff m \neq n \end{cases}$$

$$\int f(x) \delta(y - x) dx = f(y)$$

$$\delta(x) = ?$$



estensione ad una funzione di più particelle identiche

$$\hat{d}(y) = \sum_n \delta(y - x_n)$$
$$\rho(y) = \int \psi^*(\mathbf{x}) \sum_n \delta(y - x_n) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$



il valore di aspettazione di un potenziale dipende solo dalla densità

$$\int \psi^*(\mathbf{x}) \sum_n V(x_n) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \rho(x) V(x) dx$$



il valore di aspettazione di un potenziale dipende solo dalla densità

$$\int \psi^*(\mathbf{x}) \sum_n V(x_n) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \rho(x) V(x) dx$$

infatti

$$\begin{aligned} \int \psi^*(\mathbf{x}) \sum_n V(x_n) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \\ \int \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \left(\int V(y) \sum_n \delta(y - x_n) dy \right) d\mathbf{x} &= \\ \int V(y) \left(\int \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \sum_n \delta(y - x_n) d\mathbf{x} \right) dy & \end{aligned}$$



densità bielettronica

per un sistema a due elettroni

$$\rho(x_1, x_2) = |\psi(x_1, x_2)|^2$$

$$\rho(y_1, y_2) = \int \psi^*(x_1, x_2) \delta(y_1 - x_1) \delta(y_2 - x_2) \psi(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$



densità bielettronica

per un sistema a due elettroni

$$\rho(x_1, x_2) = |\psi(x_1, x_2)|^2$$

$$\rho(y_1, y_2) = \int \psi^*(x_1, x_2) \delta(y_1 - x_1) \delta(y_2 - x_2) \psi(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

per un sistema con due o più elettroni:

$$\hat{d}(y_1, y_2) = \sum_{n < m} \delta(y_1 - x_n) \delta(y_2 - x_m) = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \delta(y_1 - x_n) \delta(y_2 - x_m)$$

$$\rho(y_1, y_2) = \int \psi^*(\mathbf{x}) \hat{d}(y_1, y_2) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$



applicazione della densità a due coordinate

come per la densità di singola particella, possiamo calcolare i valori di aspettazione di operatori moltiplicativi dalla densità

$$\int \psi^* \mathbf{x} \sum_{n < m} \frac{1}{|r_n - r_m|} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \rho(x_1, x_2) \frac{1}{|r_1 - r_2|} dx_1 dx_2$$



ma per funzioni d'onda monodeterminantali

$$\rho(y) = \int \psi^*(\mathbf{x}) \sum_n \delta(x_n - y) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_n |\phi_n(y)|^2$$

$$\begin{aligned}\rho(y_1, y_2) &= \psi^*(\mathbf{x}) \frac{1}{2} \sum_{n,m} \delta(x_n - y_1) \delta(x_m - y_2) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n,m} |\phi_n(y_1) \phi_m(y_2)|^2 - \phi_n^*(y_1) \phi_m^*(y_2) \phi_n(y_2) \phi_m(y_1)\end{aligned}$$

