

Evoluzione temporale della struttura elettronica

Fulvio Ciriaco

11 novembre 2025



$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H(x,t)\psi(x,t)$$

applicazioni:

- ▶ eccitazione elettromagnetica
- ▶ urto
- ▶ car-parrinello
- ▶ ricerca alternativa dello stato fondamentale
- ▶ calcolo degli stati eccitati



$$H(x, t) \equiv H(x)$$
$$H(x)\phi_k(x) = E_k\phi_k(x)$$

soluzioni stazionare:

$$\psi(x, t = 0) = \phi_k(x)$$
$$\psi(x, t) = e^{iE_k t/\hbar} \phi_k(x)$$
$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -i\hbar \frac{iE_k}{\hbar} \psi = E_k \psi = H\psi$$



soluzione generale

$$\psi(x, t) = \sum_k a_k(t) \phi_k(x)$$

$$\psi(x, t=0) = \sum_k a_k(t=0) \phi_k$$

e sostituendo

$$-i\hbar \sum_k \dot{a}_k(t) \phi_k = \sum_k a_k(t) H \phi_k = \sum_k a_k E_k \phi_k$$

$$a_k(t) = a_k(t=0) e^{iE_k t/\hbar}$$

$$\psi(x, t) = \sum_k a_k(t=0) e^{iE_k t/\hbar} \phi_k(x)$$



- ▶ TDHF
- ▶ TDDFT
- ▶ EOMCC





