# Principe de la DFT :

On minimise une énergie qui est une fonctionnelle de la densité (ce qui veut dire que l’énergie est une fonction de la densité ; on emploie le terme de fonctionnelle pour une fonction lorsque cette fonction dépend d’une famille d’autres fonctions ; dans notre cas, cette famille de fonctions sont les densités) ce qui revient à déterminer la fonctionnelle pour laquelle l’énergie est minimale[[1]](#footnote-1).

Cette fonctionnelle nous ressort une densité. (bon je me répète)

Et la densité nous donne une unique fonction d’onde (par le premier théorème de Hohenbert et Kohn).

En première instance, le mode opératoire repose sur deux théorèmes et non pas des principes.

Ainsi, un code ab initio reposant sur de la DFT minimise avant tout une énergie.

## Retour sur la notion de fonctionnelle

L’énergie est une fonctionnelle sur l’ensemble des densités , si on écrit plus conventionnellement comme à la petite école :

Dans la formulation symbolique ci-dessus on remarque que l’on a écrit au lieu de . C’est ainsi que l’on écrit la fonctionnelle (fonction de fonction) par à une fonction : on remplace les parenthèses par des crochets.

Un exemple bien connu de fonctionnelle est celle d’intégrale que l’on notera . Formellement, cela donne

En revanche, la dérivation n’est pas une fonctionnelle car, bien que prenant une fonction, elle nous renvoie une fonction et non une valeur (scalaire) :

1. *Cf* le cours de Ferreira en mécanique analytique de licence de Grenoble. L’action est une fonctionnelle des trajectoires (qui sont des fonctions du temps vers l’espace (un instant donne une position). La trajectoire retenue est celle qui minimise l’action (c’est ce qu’on appelle le principe de moindre action). [↑](#footnote-ref-1)