

Programma corso Teoria Quantistica della Materia (6CFU) A.A. 2012-2013

Docenti:

Prof. Olivia Pulci olivia.pulci@roma2.infn.it, corridoio C0, tel. 4548

Prof. Maurizia Palumbo maurizia.palumbo@roma2.infn.it corridoio C0 tel. 4894

Dr. Adriano Mosca Conte Adriano.mosca.conte@roma2.infn.it , corridoio C0, Tel. 4741

Seconda quantizzazione

- Generalità
- Sistemi di molti fermioni
 - Rappresentazione Schroedinger Heisenberg e di Interazione
- Operatori di creazione e distruzione
- Regole di anticommutazione
- Operatori ad una e due particelle
- Operatori di campo
- Gas elettronico omogeneo (jellium)
- Approssimazione di Hartree-Fock (con applicazione al jellium)

DFT e TDDFT

- Teoria del Funzionale Densità (DFT): Teorema di Hohenberg-Kohn, equazioni di Kohn-Sham.
- Approssimazioni per il potenziale di scambio e correlazione: LDA, GGA, ibridi
- Descrizione interazione elettroni-nuclei con gli Pseudopotenziali
- Esercitazioni al computer: costanti reticolari, struttura a bande elettronica, proprietà ottiche

- Teoria della risposta lineare.
- Teoria del Funzionale Densità Dipendente dal Tempo (TDDFT): Teoremi di Runge Gross
- Esercitazioni al computer: spettri di assorbimento ottico

Many-Body Perturbation Theory

- Funzioni di Green a singola particella
 - Relazione con osservabili fisiche
 - Rappresentazione di Lehman
 - Sviluppo perturbativo della funzione di Green
- Diagrammi di Feynman
- Equazione di Dyson
- Equazioni di Hedin
 - Equazione di quasi-particella
- L'approssimazione GW per la self-energia
- Esercitazioni al computer: calcoli di strutture a bande elettroniche

- La Bethe Salpeter equation (cenni)
- Esercitazioni al computer: spettri di assorbimento ottico

Libri di testo:

Fetter-Walecka, Grosso-Pastori Pallavicini. Da consultare: Economou, Strinati