

PROGRAMMA DEL CORSO DI TEORIA DEI SOLIDI E MODELLI MOLECOLARI

A.A. 2014-2015 8 CFU

Docenti:

M. Palummo, O. Pulci, A. Mosca Conte, C. Hogan

Laurea Specialistica in Scienze dei Materiali

L'approssimazione di Born-Oppenheimer

Approssimazione adiabatica.

L' approssimazione di Born Oppenheimer

Il teorema di Hellmann-Feynman; Teorema di Epstein

Teoria delle bande nei solidi

Teorema di Bloch, boundary conditions

Metodo variazionale, Metodo tight-binding e sue applicazioni

Onde-Piane Ortgonalizzate, Pseudopotenziali e

sviluppo in onde piane della Funzione d'onda

Metodi ab-initio

Equazione di Hartree e Hartree Fock, Teorema di Koopmans ,
potenziale di scambio

Gas elettronico omogeneo

Trasformata di Fourier del potenziale coulombiano

Il gas elettronico omogeneo con Hartree Fock

Approssimazione di Slater, Approssimazione di Thomas Fermi

Derivate funzionali

La teoria del Funzionale Densita'

Teorema di Hohenberg e Kohn

Equazioni di Kohn e Sham.

La Local density Approximation. Il problema della gap in DFT.

Esempi di applicazioni della DFT

Proprieta' ottiche

Indice di rifrazione complesso. Coefficiente di assorbimento.

La Riflettivita'. La funzione dielettrica.

Relazioni di Kramers Kronig e regole di somma

Regola d'oro di Fermi:

Calcolo della funzione dielettrica in approssimazione di dipolo

Esempi di calcoli di funzione dielettrica Densita' degli stati (DOS)

Andamento della DOS vicino ai punti critici.

Teoria della risposta lineare e TDDFT.

Effetti eccitonici: modello idrogenoide di Mott-Wannier

Teorie ab-initio di stato eccitato

Funzioni di Green classiche. Formalismo della seconda quantizzazione per fermioni. Propagatore quantistico di singolo elettrone/buca e sua rappresentazione di Lehmann e relazione con eccitazioni elettroniche. Equazione di Dyson. Concetto di Self-energia. Equazione di quasi-particella. Cenno al Metodo GW

Esercitazioni al computer su DFT e calcolo risposta lineare in approssimazione a singola particella. Tali lezioni hanno previsto anche un'introduzione ai principali comandi in ambiente linux.

Testi di riferimento

Appunti delle lezioni e materiale didattico distribuito dai docenti

Solid state physics - Grosso-Pastori-Parravicini

Optical properties of Solids - Wooten

Mattuck - A guide to Feynman Diagram of the many-body problem