

GOMP
O.P.T.A.

A.A. 2016/17

Insegnamento (ITA) TEORIA DEI SOLIDI E MODELLI MOLECOLARI
Insegnamento (ENG) THEORY OF SOLIDS AND MOLECULAR MODELS

Docente Maurizia PALUMMO – Olivia Pulci

Obiettivi Formativi	ITA	<p>Il corso descrive quali sono i principali metodi di calcolo teorico/computazionale per affrontare lo studio delle proprietà strutturali ed elettroniche dei materiali. Il problema dell' hamiltoniana a molti-elettroni e nuclei interagenti è affrontato sia con metodi semi-empirici (come il tight-binding, OPW, Pseudopotenziali empirici) che con metodi ab-initio come Hartree-Fock e la Teoria del Funzionale Densità (DFT).</p> <p>Lo studio delle proprietà elettroniche (livelli energetici, strutture a bande) è completato dalla descrizione del calcolo microscopico delle funzioni dielettriche dei materiali e dalla loro relazione con le osservabili fisiche (assorbimento, trasmittanza, indice di rifrazione etc.). Ciò è fatto partendo da semplici modelli come quello di Lorentz-Drude fino alla moderna teoria della risposta lineare e più specificatamente sulla Teoria del Funzionale Densità Dipendente dal Tempo (TDDFT). Infine vengono forniti concetti basilari riguardanti le moderne teorie di stato eccitato basate sulla Teoria delle Perturbazioni a molti corpi (MBPT) nell' ambito del formalismo delle funzioni di Green (in particolare metodo GW ed equazione di Bethe-Salpeter).</p> <p>Parte del corso è dedicata all' installazione e all' uso di codici di calcolo basati sulla DFT e sulla MBPT direttamente da parte degli studenti, supportati dal docente ed alcuni collaboratori. In questo modo lo studente oltre ad acquisire nozioni teoriche ha la possibilità di affrontare in pratica, e in prima persona, lo studio e la simulazione al computer delle proprietà dei materiali con le moderne teorie ab-initio, oltre ad acquisire parallelamente nozioni basilari di comandi in ambiente linux e di programmazione.</p>
	ENG	<p>The course describes what are the main methods to calculate the structural and electronic properties of materials. The solution of the many - body Hamiltonian of interacting electrons and nuclei is addressed both with semi-empirical methods (such as the tight-binding , OPW, empirical pseudopotentials) and with ab-initio methods such as Hartree -Fock and Density Functional Theory (DFT) .</p> <p>The study of the electronic properties (energy levels , band structures) is complemented by the description of the microscopic calculation of the dielectric function of materials, discussed also in relationship with physical observables such as absorption, transmittance , refractive index , etc. .</p> <p>This is done by starting from simple models such as the Lorentz - Drude to the modern Time Dependent Density Functional theory (TDDFT) .</p> <p>Finally, the course provides basic information about ab-initio excited state theories based on the many-body perturbations (MBPT) in the formalism of Green's functions (in particular GW method and Bethe- Salpeter equation) .</p> <p>Part of the course is devoted to practical lessons dedicated to the installation and to use of computer DFT, TDDFT and MBPT codes.</p> <p>This is done directly by the students , supported by the help of the teacher and some co-workers . In this way, students acquire theoretical knowledge as well as have the possibility to deal in practices, and in the first person , with computer simulations of materials properties by using modern theories , At the same time the student acquire basic knowledge of commands and programming in linux ambient.</p>
Programma	ITA	<p>L'approssimazione di Born-Oppenheimer L'approssimazione adiabatica Il teorema di Hellmann-Feynman e di Epstein Teoria delle bande nei solidi Teorema di Bloch, boundary conditions Metodo variazionale, Metodo tight-binding e sue applicazioni Onde-Piane Ortogonalizzate, Pseudopotenziali e sviluppo in onde piane della Funzione d'onda 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 Densità' 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 Proprietà' ottiche Indice di rifrazione complesso. Coefficiente di assorbimento.</p>

O Obiettivi formativi

P Programma

T Testi

A Altre informazioni per la trasparenza

GOMP
O.P.T.A.

		<p>La Riflettività'. 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 funzione dielettrica per metalli, semiconduttori, isolanti. Densità degli stati congiunta(JDOS) Andamento della JDOS vicino ai punti critici.</p> <p>Teoria della risposta lineare e TDDFT. Effetti eccitonici: modello idrogenoide di Mott-Wannier</p> <p>Teorie ab-initio di stato eccitato Funzioni di Green classiche. Formalismo della seconda quantizzazione. 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. Metodo GW. Equazione di Bethe-Salpeter per il calcolo ab-initio di effetti eccitonici nella risposta ottica. Esercitazioni al computer su DFT, TDDFT, GW e BSE che prevedono anche una introduzione ai principali comandi in ambiente linux.</p>
	ENG	<p>The Born-Oppenheimer approximation The adiabatic approximation The Hellmann - Feynman theorem , Epstein theorem. Band theory in solids Bloch theorem , boundary conditions variational method , tight-binding method and its applications – Orthogonalized Plane Waves, pseudopotentials . Ab-initio methods : Hartree and Hartree Fock equation , Koopmans theorem , potential for gas exchange electronic homogeneous Fourier Transform Coulomb potential of the homogeneous electron gas with the Hartree Fock. Approximation of Slater, Thomas Fermi approximation. functional derivatives Density Functional Theory . Theorem of Hohenberg and Kohn , Kohn and Sham equations . The Local Density Approximation . The problem of the gap in DFT Examples of applications of DFT Optical properties Complex refractive index. The absorption coefficient. The reflectivity . The dielectric function . Kramers Kronig relations and sum rules Fermi's golden rule : Calculation of the dielectric function in the dipole approximation Examples of dielectric function for metals, semiconductors, insulators . Joint density of states (JDOS) and its behaviour near the critical points. Linear response theory and TDDFT . Excitonic effects : model hydrogen- Mott – Wannier. Ab-initio excited state theories Classical Green's functions . Formalism of second quantization . Quantum propagator of a single electron / hole and its representation of Lehmann and relationship with electronic excitations . Dyson equation . Self- energy concept . Quasi-particle Equation. GW method . Bethe- Salpeter equation for the calculation of excitonic effects in the optical response . Practical lessons at computer of DFT , TDDFT , GW and BSE which include an introduction to the main commands in linux environment</p>
Testi	ITA	Grosso Pastori Parravicini, "Solid State Physics" , Dispense delle lezioni fornite della docente
	ENG	Grosso Pastori Parravicini, "Solid State Physics" , Teacher lecture notes.

Valutazione	Prova Scritta	NO
	Prova Orale	SI
	Prova Pratica	SI
	Test Attitudinale	NO
	Valutazione Progetto	NO
	Valutazione Tirocinio	NO
	Valutazione in itinere	NO