

# PROGRAMMA DEL CORSO DI TEORIA DEI SOLIDI E MODELLI MOLECOLARI

A.A. 2016-2017 8 CFU

## Docenti:

M. Palumbo (4CFU), O.Pulci (4CFU),

Esercitori :C.Hogan, S. Stella, D. Grassano

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 Ortogonalizzate, 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.

Modello Lorentz - Drude. Oscillazioni di Plasma.

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

### **Dinamica molecolare**

Dinamica classica

Dinamica ab-initio: Born-Oppenheimer e Car-Parrinello

### **Equazione di Boltzman per il trasporto**

Conducibilita' elettrica e termica

### **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. Cenni 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