

Programma per il corso di Chimica Fisica dello Stato Solido.

Fulvio Ciriaco

Trattazione del moto nucleare

L'oscillatore armonico monodimensionale, trattazione classica e quantistica

Generalizzazione del problema dell'oscillatore armonico. Coordinate normali e diagonalizzazione simultanea dell'operatore energia cinetica e dell'operatore potenziale armonico. Applicazione alla dinamica nucleare nelle molecole

Moto nucleare nei cristalli. Introduzione delle condizioni periodiche al contorno e delle coordinate collettive. Soluzione analitica del problema e descrizione qualitativa delle proprietà dello spettro di dispersione dei solidi

Confronto dello spettro vibrazionale nelle molecole e nei solidi. Descrizione qualitativa degli effetti della perturbazione delle proprietà di periodicità del cristallo.

La struttura elettronica a temperature ordinarie

Fattorizzazione del moto nucleare nell'approssimazione Born-Oppenheimer

Requisiti di simmetria delle funzioni d'onda fermioniche. Approcci alla antisimmetrizzazione della funzione d'onda

Densità elettronica e matrici densità

Osservazioni sulla natura degli operatori energia cinetica ed interazione elettrostatica

Soluzione delle equazioni Hartree-Fock nelle molecole e nei cristalli. Vincoli di simmetria e teorema di Bloch.

Correlazione. Breve introduzione ai concetti del funzionale densità

Descrizione qualitativa delle differenze tra la struttura elettronica dei cristalli e quella delle molecole. Effetti della perturbazione della simmetria traslazionale dei cristalli

Teoria della conduzione

Dinamica degli elettroni nell'approssimazione degli elettroni indipendenti

Approssimazione dell'elettrone quasi libero. Soluzione perturbativa.

Trattazione semiquantitativa degli effetti della presenza di difetti locali nella struttura del cristallo

Esercitazioni

Calcolo della struttura di banda e dei parametri geometrici di Si,Al per sviluppo degli orbitali in onde piane e dettaglio dei parametri rilevanti

Calcolo della struttura di banda e dei parametri geometrici di Si,Al per sviluppo degli orbitali in funzioni atomocentriche gaussiane

Calcolo della struttura vibrazionale nei cristalli a partire dalla soluzione delle equazioni del moto per piccole oscillazioni (approssimazione armonica)

Calcolo della struttura vibrazionale da dinamica molecolare

Bibliografia

F. Ciriaco: *Dispense*: <http://puccini.chimica.uniba.it/didattica/corsi/statosolido>

L.D. Landau, E.M. Lifšitz, L.P. Pitaevskij: *Fisica Statistica*

A.S. Davidov: *Meccanica Quantistica*

W. Jones, N.H. March: *Theoretical Solid State Physics*

A.S. Davidov: *Teoria del Solido*

G. Grosso, G.P. Parravicini: *Solid State Physics*

abinit, programma opensource di calcolo della struttura elettronica: <http://www.abinit.org>

CRYSTAL, programma di calcolo della struttura elettronica: <http://www.crystal.unito.it>