

# 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. Grossi, 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>