



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DELL'AQUILA

DIPARTIMENTO DI SCIENZE FISICHE E CHIMICHE



Avviso di seminario

***Teoria del Funzionale di Densità
per i Superconduttori***

Dr. Antonio Sanna

*Max-Planck Institute for Microstructure,
Weinberg, Halle (Germany)*

Lunedì 29 Ottobre 2018

Sala riunioni "G. Signorelli" – DSFC

ore 15:00

La teoria del funzionale densità (DFT) è uno dei pilastri della moderna fisica dei materiali. Tuttavia, si applica solo alla descrizione dello stato *normale*. Quando si è interessati a fasi a simmetria rotta (il magnetismo per esempio) o gli effetti di temperatura, la formulazione originale della DFT non è sufficiente e sono necessarie delle estensioni.

Una di queste è l'estensione della DFT ai sistemi superconduttivi (SCDFT) in presenza, oltre alle interazioni tra elettroni, dei fononi e dell'accoppiamento tra elettroni e fononi.

In questa presentazione si introdurrà il formalismo della SCDFT e si descriverà come è possibile costruire il funzionale di scambio-correlazione della teoria (che è alla base di qualunque DFT), collegando la DFT con la teoria delle perturbazioni in termini di funzioni di Green (connessione Sham-Schluter).

Per finire si daranno degli esempi di applicazione della teoria per la predizione della temperatura di transizione di materiali reali.