

Relazione scientifica finale

Programma STM

Visita di José Lorenzana al gruppo del Prof. C. Proetto, Instituto Balseiro, Bariloche Argentina.

Titolo del programma: Density Functional Theory for Correlated Systems

La visita si è svolta come programmato. All'inizio della visita ho fatto due seminari, uno rivolto a tutta la comunità dell'Istituto sui risultati di modellizzazione di esperimenti di superconduttività fuori dall'equilibrio e un altro rivolto al gruppo teorico più specifico sulle tematiche del progetto di DFT. Il nostro partner ha sottomesso un lavoro sulle stesse tematiche del progetto nei primi giorni della visita per cui abbiamo avuto modo di discutere a lungo sugli risultati ottenuti in entrambi i gruppi. Una volta aggiornati sui risultati abbiamo deciso di concentrare i nostri sforzi sul problema della discontinuità del potenziale di scambio e correlazione al aggiungere una particella su un sistema isolante. Abbiamo concluso che il nostro formalismo fornisce la discontinuità ma in un modo piuttosto banale, attraverso le energie di ionizzazioni note e non fornendo nuove informazioni.

Poi abbiamo deciso di concentrarci sul calcolo del potenziale di scambio e correlazione per una molecola eteroatomica che era l'obiettivo principale del soggiorno. Siamo riusciti a mettere i risultati del potenziale in termini di funzioni di correlazione di un hamiltoniano modello generalizzando quanto fatto per le molecole omoatomiche (Zu-Jian Ying, et al. Phys. Rev. B 94, 075154). Attualmente stiamo validando i risultati ottenuti con la nostra tecnica con risultati numerici praticamente esatti. Appena questo compito sarà finito scriveremo e sottometteremo un lavoro. Inoltre, abbiamo trovato il modo di generalizzare i nostri risultati semi-analitici per il potenziale di scambio e correlazione per sistemi arbitrari di atomi descritti con degli Hamiltoniani modello tipo Hubbard. Questi risultati sono molto incoraggianti per lo sviluppo di una tecnica generale per la correzioni di funzionali approssimati di DFT con dei risultati di Hamiltoniani modelli come dimostrato nel lavoro già citato per sistemi molecolari. Insieme al Prof. Proetto abbiamo preparato un progetto per continuare con questo sviluppo che sarà presentato in varie agenzie. In vista dei risultati scientifici raggiunti e delle prospettive di sviluppo future consideriamo l'esito della visita molto soddisfacente.

José Lorenzana