

Metodi topologici e variazionali per operatori di Schrödinger periodici

Docenti: Adriano Pisante, Gianluca Panati (Dipartimento di Matematica - Sapienza)
orario: martedì e giovedì ore 14:30-16:30,
aula G, Dipartimento di Matematica "G. Castelnuovo"
inizio: martedì 28 gennaio
fine: giovedì 27 marzo

Diario delle lezioni (con riferimenti bibliografici)

Lezione 1 (28.01)

Introduzione e sinossi: solidi cristallini e operatori di Schrödinger periodici; teoria di Bloch-Floquet e bande di Bloch; dinamica in potenziali periodici perturbati; localizzazione spaziale di stati "concentrati" su una singola banda di Bloch; funzioni di Wannier e relative proprietà di localizzazione; il funzionale di localizzazione di Marzari-Vanderbilt.

Riferimento: G. Panati, *Dynamics of electrons in crystalline solids: Wannier functions, Berry curvature and related issues*, appeared in Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics, Springer (2013). [[Disponibile sulla pagina web del corso](#)]

Lezione 2 (30.01)

Integrale diretto di operatori in spazi di Hilbert. Integrale diretto di spazi di Hilbert. Operatori decomponibili (o fibrati) e operatori diagonali. Integrale diretto di operatori non-limitati. Ricostruzione dello spettro di un operatore decomponibile a partire dalle fibre.

Digressione sul tipo spettrale: richiami su calcolo funzionale, misura spettrale, classificazione dello spettro.

Riferimento: M. Reed, B.Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. IV (Analysis of Operators), Sec. XIII.16. [[Disponibile in biblioteca](#)]

Lezione 3 (04.02)

Operatori di Schrödinger periodici. 1. Autoaggiuntezza: operatori H_0 -limitati e infinitesimamente H_0 -limitati (*Kato-small*). Teorema di Kato-Rellich (enunciato). Condizioni su V_Γ che garantiscono l'auto-aggiuntezza di $H_\Gamma = -\Delta + V_\Gamma$.

2. Teoria di Bloch-Floquet: definizione della trasformata di Bloch-Floquet; proprietà di periodicità o pseudo-periodicità di elementi del range; estensione ad un operatore unitario. Proprietà di *mapping* della trasformata di Bloch-Floquet.

Riferimenti:

1) per la teoria di Kato-Rellich sull'auto-aggiuntezza:

- M. Reed , B.Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. II, Sec. X.2.

2) per una rivisitazione moderna della teoria di Bloch-Floquet:

- G. Panati, A. Pisante. *Bloch bundles, Marzari-Vanderbilt functional and maximally localized Wannier functions*, Commun. Math. Phys. 322, 835-875 (2013). Sec. II.

Lezione 4 (06.02)

3. L'operatore Hamiltoniano in rappresentazione di Bloch-Floquet : decomponibilità, auto-aggiuntezza dell'operatore fibra, τ -covarianza.

Analiticità. Funzioni analitiche a valori in uno spazio di Banach (VAAF = *vector-valued analytic functions*). Esempio: il risolvente di un operatore autoaggiunto. Famiglie analitiche di operatori **non-limitati**. Un teorema di Kato e Rellich sulle famiglie analitiche di tipo (A). Applicazione: analiticità della fibra dell'operatore H_Γ .

4. Il proiettore di Bloch: teorema sulle proprietà del proiettore relativo a una famiglia composta di bande di Bloch.

Riferimenti:

1) per la teoria di Kato-Rellich sulle famiglie analitiche di operatori:

- M. Reed , B.Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics*, Vol. IV, Sec. XII.2.

2) per una versione moderna del teorema sul proiettore di Bloch:

- G. Panati, A. Pisante. *Bloch bundles, Marzari-Vanderbilt functional and maximally localized Wannier functions*, Commun. Math. Phys. 322, 835-875 (2013). Sec. II.

Lezione 5 (11.02)

Corollario dell'ultimo teorema: analiticità delle bande di Bloch.

Localizzazione degli elettroni nei solidi cristallini. Funzioni di Bloch e funzioni di Wannier. Relazione tra localizzazione della funzione di Wannier e regolarità della funzione di Bloch corrispondente. Variante del teorema di Paley-Wiener e localizzazione esponenziale. Ostruzione topologica all'esistenza di funzioni di Bloch analitiche e (pseudo)-periodiche.

Energia di Fermi, gap spettrale. Classificazione dei solidi cristallini: isolanti, semiconduttori, metalli.

Il caso di bande composte. Funzioni di **quasi-Bloch** e funzioni di Wannier **composte**.

Il problema della localizzazione esponenziale: ostruzione topologica all'esistenza di un frame di Bloch continuo.

Lezione 6 (13.01)

Fibrati di Bloch: costruzione e proprietà fondamentali. Classi di Chern (cenni). Simmetria di inversione temporale e banalità del fibrato di Bloch.

Caso magnetico: effetto Hall quantistico e fibrato di Bloch magnetico (cenni).

Lezioni successive (dal 18.02)

Funzionale di localizzazione di Marzari-Vanderbilt. Funzioni di Wannier ottimamente localizzate. Spazi di Sobolev tra varietà, mappe Sobolev nel gruppo unitario. Metodo diretto del calcolo delle variazioni ed esistenza dei minimi del funzionale di localizzazione. Equazioni di Eulero-Lagrange.

Sistemi ellittici a crescita quadratica del gradiente. Regolarità e analicità delle soluzioni deboli continue (teoria di Calderon-Zygmund e di Schauder, teorema di Morrey e analicità).

Maggiore integrabilità per soluzioni deboli. Spazi BMO e di Hardy, dualità di Fefferman. Continuità in dimensione due via maggiore integrabilità "per compensazione". Continuità in dimensione tre via riscaldamento. Formula di monotonia e decadimento dell'eccesso (ϵ -regolarità). Blow-up e mappe armoniche tangenti nel gruppo unitario. Variazione seconda e quantizzazione dell'energia. Teorema di Liouville.