

Fisica degli Stati Condensati e della Radiazione,
Prof. Federico Boscherini e Dott. Cristian Degli Esposti Boschi
Programma di esame, Anno Accademico 2014-15

1. Struttura Atomica

1.1. Introduzione alla simmetria

Simmetrie. Trasformazioni isometriche. Congruenza diretta e opposta. Operazioni di simmetria: traslazione, rotazione, rototraslazione, inversione, riflessione, rotoriflessione, riflessotraslazione. Esempi grafici. Descrizione matriciale.

- Giacovazzo: 1.1, 1.2, 1.A
- Presentazione "Introduction to Symmetry in Condensed-Matter" depositata su campus.unibo.it.

1.2. Strutture cristalline in 2D.

Reticoli di Bravais in 2 dimensioni. Reticoli infiniti e cristalli finiti. Vettori primitivi. I cinque reticoli di Bravais in 2D. Strutture cristalline: reticoli con base. Esempio: il grafene.

Riduzione di simmetria e simmetria puntuale della base. Celle unitarie: primitive, convenzionali e di Wigner e Seitz. Gruppo spaziale. Dimostrazione dell'incompatibilità di un asse di rotazione di ordine 5 con la simmetria a lungo raggio. Gruppi simmorfi e non simmorfi. I 17 gruppi spaziali in 2D (gruppi planari). Esempi.

- Marder 1.2, 1.3
- Presentazione "2D crystals" depositata su campus.unibo.it.

1.3. Strutture cristalline in 3D

Strutture cristalline in 3 dimensioni. Reticoli monoatomici. Numero di coordinazione. Reticoli FCC, BCC: celle convenzionali, primitive e di Wigner e Seitz. Reticolo esagonale, struttura HCP. Impilamento di sfere. Struttura del diamante, NaCl, CaF₂, zincoblenda, wurtzite, perovskite. I 14 reticoli di Bravais e i 7 sistemi cristallini. Cenno agli stereogrammi, ai 32 gruppi puntuali cristallografici e ai 230 gruppi spaziali. Cenno alla relazione tra struttura atomica e proprietà fisiche; piroelettricità, piezoelettricità, attività ottica.

- Marder 2; Ashcroft & Mermin 4 e 7.
- Presentazione "3D crystals" depositata su campus.unibo.it.

1.4. Determinazione della struttura dei cristalli mediante diffusione di onde e particelle

Introduzione. Raggi X, elettroni e neutroni.

Approssimazione di atomi immobili, di diffusione elastica e di diffusione singola.

Diffusione da parte di un atomo nell'origine ed in posizione arbitraria. Diffusione da parte di un insieme di atomi. Atomi su reticolo, somme reticolari. Condizioni di Laue.

Reticolo reciproco. Piani reticolari e indici di Miller. Cenno alla spaziatura dei piani. Direzioni reticolari. Relazione tra piani reticolari e vettori del reticolo reciproco. Diffrazione da un reticolo con base, fattore di struttura geometrico. La sfera di Ewald. Cenno alle diverse geometrie di diffrazione, alla relazione lunghezza d'onda - energia per raggi X, neutroni e elettroni e alle sorgenti.

- Marder 3.2, 3.3 e 3.4 (parte)
- Presentazione "Scattering" depositata su campus.unibo.it.

2. Struttura Elettronica

2.1. Il gas di elettroni liberi

2.1.1. Hamiltoniana di base per la materia condensata. Discussione di varie approssimazioni di uso comune in fisica della materia condensata. Gas di elettroni liberi: giustificazione dell'approssimazione di reticolo statico e di elettroni indipendenti

- Marder: 6.1

2.1.2. Gas di elettroni liberi. Hamiltoniana e soluzione in termini di funzioni di singolo elettrone ad onda piana. Condizioni al contorno di Born - von Karman. Lo stato fondamentale. Sfera di Fermi. Energia, vettore d'onda, velocità e temperatura di Fermi; stime numeriche. Il modulo di compressione e confronto con l'esperimento. La distribuzione di Fermi - Dirac. Calore specifico del gas di elettroni liberi. Densità degli stati in funzione dell'energia. Dimostrazione dell'espansione di Sommerfeld. Dipendenza dalla temperatura del potenziale chimico. Espressione per il calore specifico; derivazione qualitativa, discussione. Confronto con l'esperimento.

- Ashcroft & Mermin 2, Marder: da 6.2 a 6.5
- Presentazione "Fermi gas" depositata su campus.unibo.it.

2.2. Limitazioni del modello ad elettroni liberi

Punti problematici: coefficiente Hall, magnetoresistenza, campo termoelettrico, legge di Wiedemann - Franz, dipendenza dalla temperatura e dalla direzione della conducibilità elettrica in corrente continua, dipendenza dalla frequenza dalla conducibilità elettrica in corrente alternata. Discussione delle approssimazioni: elettroni liberi, elettroni indipendenti, tempo di rilassamento.

- Ashcroft & Mermin 3
- Presentazione "Free electron model limitations" depositata su campus.unibo.it.

2.3. Elettroni non interagenti in un potenziale periodico

2.3.1. Conseguenze della simmetria traslazionale. Proprietà generali degli stati elettronici in un potenziale periodico. Idealizzazione del concetto di periodicità perfetta, esistenza ed importanza dei difetti ed impurezze. Il teorema di Bloch. Dimostrazione in termini di operatori di traslazione. Condizioni periodiche di Born - von Karman e vettori d'onda di Bloch. Dimostrazione del teorema di Bloch tramite espansione in onde piane della funzione d'onda elettronica e del potenziale. Equazione di

Schrödinger nello spazio reciproco. Indice di banda e quantità di moto cristallina. Bande di energia; rappresentazione nella prima zona di Brillouin, rappresentazione estesa, ridotta e ripetuta. Cenno alla apertura della gap. Lo stato fondamentale, differenza tra metalli e isolanti/semiconduttori. La densità degli stati, relazione con la struttura a bande e singolarità di van Hove. Dimostrazione della espressione per la velocità degli elettroni di Bloch.

- Ashcroft & Mermin 8; Marder 7.1 e 7.2
- Presentazione "Independent electrons in Periodic Potential" depositata su campus.unibo.it.

2.3.2. Elettroni quasi liberi. Elettroni indipendenti in un potenziale periodico debole. Caso del potenziale nullo, non - degenerare e degenerare. Potenziale debole: caso non - degenerare. Potenziale debole: caso quasi degenerare. Degenerazione ad un singolo piano di Bragg. Interpretazione geometrica in termini di piani di Bragg. Perpendicolarità delle superficie isoenergetiche ad i piani di Bragg. Rappresentazione delle bande in 1 dimensione nei diversi schemi. Rappresentazione delle bande in 3 dimensioni: caso del FCC per elettroni liberi. Costruzione delle superfici di Fermi. Zone di Brillouin di ordine superiore. La superficie di Fermi del rame. Superficie di Fermi per un metallo a valenza 4. Effetto di una base atomica. Analogia con la diffrazione di raggi X e onde.

- Ashcroft & Mermin 9; Marder da 8.1 a 8.3
- Presentazione "Electrons in Weak Periodic Potential" depositata su campus.unibo.it.

3. Vibrazioni reticolari e fononi

3.1. Limitazioni del modello a reticolo statico.

Proprietà di equilibrio: calore specifico, espansione termica. Proprietà di trasporto: dipendenza dalla temperatura del tempo di rilassamento elettronico, inadeguatezza della legge di Wiedemann – Franz, superconduttività. Interazione con la radiazione: riflettività dei cristalli ionici, diffusione anelastica della luce visibile, dei raggi X e dei neutroni.

- Ashcroft & Mermin 21
- Presentazione "Static Lattice Failures" depositata su campus.unibo.it.

3.2. Approssimazione adiabatica.

Separazione dell'equazione di Schrödinger totale in due equazioni a descrizione degli stati elettronici e del moto nucleare; ruolo dell'energia elettronica come energia potenziale per il moto nucleare. Approssimazione armonica.

- Grosso & Pastori Parravicini 8.1
- Presentazione "Lattice Vibrations and phonons" depositata su campus.unibo.it.

3.3. Vibrazioni reticolari in approssimazione armonica: limite classico.

Catena atomica unidimensionale, relazioni di dispersione Catena atomica con base, ramo acustico e ramo ottico. Vibrazioni reticolari in 3D nell'approssimazione armonica per un reticolo di Bravais. Sviluppo quadratico dell'energia. Condizioni periodiche al contorno per

il vettore d'onda. Proprietà della matrice Φ . Equazione del moto e matrice dinamica; autovalori e auto vettori. Esempio: relazioni di dispersione del Pb. Vibrazioni armoniche in un reticolo con base. Rami acustici e ottici. Ordine di grandezza delle frequenze dei modi vibrazionali e corrispondenza con l'intervallo spettrale dell'infrarosso.

- Marder 13; Ashcroft & Mermin 22
- Presentazione "Lattice Vibrations and phonons" depositata su campus.unibo.it.

3.4. *Vibrazioni reticolari in approssimazione armonica: descrizione quantistica.*

Richiami sull'oscillatore armonico quantistico in 1D. Espressione della Hamiltoniana per il cristallo armonico in termini degli operatori di creazione e distruzione. Fononi. Statistica di Bose - Einstein. Densità degli stati. Il calore specifico del reticolo. Limite di alta temperatura e legge di Dulong e Petit. Limite di bassa temperatura, andamento T^3 . Modelli di Einstein e di Debye.

- Marder 13.3; Ashcroft & Mermin 23
- Presentazione "Lattice Vibrations and phonons" depositata su campus.unibo.it.

3.5. *Diffusione anelastica di neutroni.*

Caratteristiche dei neutroni termici: energia e numero d'onda. Conservazione dell'energia e della quantità di moto nella diffusione dei neutroni da parte di un cristallo. Il potenziale di interazione. Cenno alla sezione d'urto e al fattore di struttura dinamico.

- Marder 13.4; Ashcroft & Mermin 24
- Presentazione "Inelastic phonon scattering" depositata su campus.unibo.it.

4. **Interazione radiazione – materia**

4.1. *Aspetti generali e descrizione classica*

Introduzione all'interazione radiazione - materia. Coefficiente di attenuazione e sezione d'urto. La risposta dielettrica della materia, fenomenologia. Permittività e suscettività. Indice di rifrazione: dispersione e attenuazione. Limite di interazione debole. Funzione dielettrica modello per polarizzazione statica. Funzione dielettrica di Kramers Heisenberg. Relazioni di Kramers Kronig. Diffusione da un oscillatore armonico smorzato. Limiti a bassa e alta frequenza. Diffusione risonante.

- Presentazione "Introduzione interazione radiazione – materia", depositata su campus.unibo.it
- Dispensa "Introduzione e approccio classico all'interazione radiazione – materia" (parte), depositata su campus.unibo.it

4.2. *Descrizione quantistica dell'interazione*

Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo. Regola d'oro di Fermi. Approssimazione semi-classica per l'interazione radiazione - materia. Gauge di Coulomb. Espressione del potenziale vettore per un'onda piana, monocromatica; sua normalizzazione ad un fotone

nel volume V. Hamiltoniana di interazione: termini lineari e quadratici. Sezione d'urto di assorbimento fotoelettrico in approssimazione di dipolo elettrico. Regole di selezione: derivazione e discussione. Diffusione della radiazione. Densità degli stati per fotoni. Sezione d'urto derivante dal termine quadratico nel potenziale vettore. Sezione d'urto di diffusione, caso generale. Discussione. Caso della diffusione elastica di radiazione polarizzata linearmente da parte di un atomo idrogenoide nello stato fondamentale. Limiti di bassa e alta energia.

- Dispensa "Interazione atomi idrogenoidi – radiazione" (parte), depositata su campus.unibo.it

5. Transizioni di fase (Dott. Cristian Degli Esposti Boschi)

Richiami di variabili e funzioni termodinamiche. Criterio di Gibbs-Duhem. Stabilità, metastabilità e instabilità. Transizioni di fase del I ordine e calori latenti. Transizioni di fase del II ordine. Fenomeni critici, parametro d'ordine e rottura spontanea di simmetria. Analogia fra transizione gas-liquido e transizione para-ferromagnetica. Approccio di van der Waals alla transizione gas-liquido, legge degli stati corrispondenti. Costruzione di Maxwell e coesistenza di fasi.

6. Elementi di magnetismo (Dott. Cristian Degli Esposti Boschi)

Richiami di termodinamica statistica e di magnetismo nei materiali (para-, dia- e ferromagnetismo). Hamiltoniane di spin. Campo medio alla Weiss. Legge di Curie $1/T$ nei paramagneti. Magnetizzazione spontanea come fenomeno critico ed equazione di autoconsistenza in campo nullo. Interpretazione atomica del comportamento diamagnetico e paramagnetico. Termini di Larmor, van Vleck e contributo al 1° ordine nel campo con fattori di Landè.

Bibliografia

- Ashcroft & Mermin: Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing (1976)
- Cotton: F. Albert Cotton, *Chemical Applications of Group Theory*, Third Edition, Wiley, [In biblioteca DIFA c'è prima edizione](#)
- Duan & Guojun: Feng Duan and Jin Guojun, *Introduction to Condensed Matter Physics, Volume 1*, World Scientific (2005).
- Giacovazzo: Carmelo Giacovazzo (editor), *Fundamentals of Crystallography*, Third Edition, Oxford University Press (2011). [In biblioteca DIFA c'è questa edizione](#)
- Grosso & Pastori Parravicini: Giuseppe Grosso and Giuseppe Pastori Parravicini, *Solid State Physics*, Second Edition, Academic Press (2014)
- Kittel: Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Eighth Edition, Wiley (2005); *Introduzione alla Fisica dello Stato Solido*, Casa Editrice Ambrosiana (2008).
- Mahan: Gerald D. Mahan, *Condensed Matter in a Nutshell*, Princeton University Press (2011)
- Marder: Michael P. Marder, *Condensed Matter Physics*, Second Edition, Wiley (2010)
- Tinkham: Michael Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*, Dover (2003) oppure McGraw Hill (1964). [Si trova in biblioteca DEI \(ediz 2003\) e in quella di Matematica \(ediz 1964\)](#).
- Vainshtein: Boris K. Vainshtein, *Fundamentals of Crystals: Symmetry, and Methods of Structural Crystallography*, Second Enlarged Edition, Springer (1994). [In biblioteca DIFA c'è la prima edizione](#)
- Vainshtein, Fridkin & Indenbom: Boris K. Vainshtein, Vladimir M. Fridkin and Vladimir L. Indenbom, *Modern Crystallography II: Structure of Crystals*, Springer (1979)
- Yu & Cardona: Peter Y. Yu and Manuel Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Second Edition, Springer (2000) [In biblioteca DIFA c'è la terza edizione](#). [In commercio la quarta](#).