UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Advanced Solid State Physics

2425-1-FSM01Q021

Obiettivi

Gli obiettivi di questo corso avanzato di Fisica dello Stato Solido sono di fornire quegli strumenti concettuali e quelle nozioni che sono particolarmente utili a chi intraprende un percorso di approfondimento dei materiali per le tecnologie digitali e per le tecnologie quantistiche. Tuttavia, questo corso rimane utile anche per chi è interessato ai materiali per l'efficienza energetica, come quei materiali che entrano nei cavi superconduttori, nei LED e nei dispositivi per l'elettronica di potenza.

Contenuti sintetici

Oltre il modello di elettroni non interagenti in un solido perfetto: teorie a multi-elettroni, schermo elettronico, effetti di un campo magnetico, ferromagnetismo e superconduttività. Training pratico basato su simulazioni nell'ambito della Teoria del Funzionale Densità per materiali semiconduttori e materiali magnetici, utilizzando i codici Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) o Quantum Espresso.

Programma esteso

Il problema a molti elettroni e gli effetti dello screening elettronico

• Dal sistema a molti elettroni all'equazione di campo medio: l'equazione di Hartree
• Le equazioni di Hartree-Fock e significato del contributo energetico di scambio
• Il gas interagente di elettroni liberi
• Fondamenti della teoria del funzionale densità: i teoremi di Hohenberg e Kohn
• Equazioni di Kohn-Sham
• Proprietà dello stato fondamentale ed eccitazioni elementari

• Potenziale di muffin tin e onde piane aumentate
• Ortogonalizzazione di stati di valenza a stati DI core: onde piane ortogonalizzate e pseudopotenziali
• Schermo elettronico nel modello Thomas-Fermi
• Schermo elettronico nel modello perturbativo di Lindhard
• Legame e struttura cristallina in metalli semplici e altri solidi

Teoria del funzionale densità (DFT) in pratica

• Cosa può prevedere la DFT? Proprietà strutturali, Energie coesive/di formazione/superficiali, Proprietà elettroniche, Proprietà vibrazionali, Proprietà ottiche
• Ci fidiamo della DFT? Precisione e accuratezza
• Dove fallisce la DFT? Come superare i problemi?
• Simulazioni high-throughput ed esplorazione di database DFT (ad esempio MaterialsProject, MaterialsCloud, C2DB, ...).

Simulazioni di DFT (I): Proprietà strutturali ed elettroniche del semiconduttore GaAs in fase zincoblenda

• Comandi basilari in ambiente Linux.
• Spiegazione delle flag e delle informazioni contenute nei file di input e output dei codici DFT.
• Prima simulazione di un ciclo autoconsistente per GaAs.
• Test di convergenza in funzione della griglia di punti k nella zona di Brillouin e soglia energetica per lo sviluppo in onde piane.
• Calcolo della costante reticolare di equilibrio del GaAs utilizzando l'equazione di stato di Birch-Murnaghan e confronto con gli esperimenti.
• Calcoli della struttura a bande (I): costruzione del percorso di punti k nello spazio reciproco lungo linee ad alta simmetria, simulazione non autoconsistente della struttura a bande per GaAs e utilizzo dei relativi strumenti di visualizzazione.
• Stima del band-gap del DFT e della massa efficace.
• Densità di stati (DOS): simulazione non autoconsistente per GaAs di DOS totali e DOS proiettati su atomi e orbitali.

Proprietà magnetiche dei solidi

• Modello di Stoner per il ferromagnetismo di banda nei solidi metallici
• Effetto della temperatura nel modello di Stoner, temperatura di Curie
• Il ferromagnetismo nei solidi isolanti e l'hamiltoniana di Heisenberg
• Antiferromagnetismo e suscettività magnetica anisotropa
• Stati magnetici eccitati: onde di spin e magnoni
• Scattering di neutroni, ruolo dei magnoni a bassa temperatura
• Domini ferromagnetici

Simulazioni di DFT (II): Sistemi magnetici

• Previsioni DFT per proprietà magnetiche: panoramica della letteratura
• Simulazioni DFT per solidi magnetici elementari.
• Utilizzo del criterio di Stoner per prevedere la comparsa del magnetismo: confronto di Fe-bcc con e senza polarizzazione di spin.
• Effetti magnetostrittivi: tracciare la curva Energia vs Volume E(V) per bcc-Fe magnetico e non magnetico.
• DFT per magneti 2D: i) Accoppiamento spin-orbita ed energia di anisotropia magnetica. ii) Ordinamento magnetico a lungo raggio (incluso antiferromagnetismo) e stima da principi primi dei parametri in Hamiltoniane di spin

Superconduttività

• Introduzione alla superconduttività: esperimento di Onnes ed effetto Meissner-Ochsenfeld

• Le equazioni di London e London: penetrazione delle correnti e dei campi magnetici
• La termodinamica della fase superconduttiva: energia libera, entropia e capacità termica
• Coppie di Cooper e instabilità del mare di Fermi
• Stato fondamentale nella teoria di Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS).
• Esistenza del gap, sua natura e definizione degli stati eccitati nella teoria BCS
• La supercorrente come stato stazionario, valori critici di corrente e campo magnetico ed effetto Meissner nella teoria BCS
• Misure sperimentali del gap, sua dipendenza dalla temperatura ed effetto isotopico
• Superconduttori ad alta Tc

Prerequisiti

Teoria dei solidi perfetti e infiniti nello schema di particella singola (corso di base dello stato solido). Meccanica quantistica.

Modalità didattica

Lezioni, esercitazioni e discussione con gli studenti.

- 16 lezioni da 2 ore svolte in modalità erogativa in presenza (32 h totali);
- 4 attività di laboratorio computazionale da 4 ore svolte in modalità interattiva in presenza (16h totali);
- 4 attività di laboratorio computazionale da 2 ore svolte in modalità interattiva da remoto (8h totali).

Materiale didattico

Tutto il materiale didattico strettamente necessario all'esame è caricato sotto forma di presentazioni .pdf delle lezioni sulla pagina e-learning del Corso

TESTI PRINCIPALI

• H. IBACH AND H. LUTH, Solids State Physics, Fourth Edition, Springer Verlag 2009.
• N.W ASHCROFT AND N.D. MERMIN, Solid State Physics, Saunders College Publishing
• R. M. MARTIN, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press

TESTI ADDIZIONALI

• F. BASSANI E U. GRASSANO, Fisica dello Stato Solido, Casa Editrice Boringhieri
• G. GROSSO AND G. PASTORI PARRAVICINI, Solid state Physics, Academic Press
• S. BLUNDELL, Magnetism in Condensed Matter, Oxford University Press.
• M. L. COHEN & S. G. LOUIE, Fundamentals of Condensed Matter Physics, Cambridge University Press

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Second Semester

Modalità di verifica del profitto e valutazione

Esame orale con tre domande aperte, riferite alle diverse parti del programma. Breve presentazione orale incentrata sui risultati ottenuti durante una delle sessioni pratiche di DFT. Il voto riflette una media delle tre risposte e della discussione dei risultati ottenuti nelle simulazioni. Non verranno svolte prove in-itinere.

Orario di ricevimento

Su appuntamento tramite e-mail con il docente

Sustainable Development Goals

ISTRUZIONE DI QUALITÁ | IMPRESE, INNOVAZIONE E INFRASTRUTTURE