



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

SYLLABUS DEL CORSO

Advanced Solid State Physics

2526-1-FSM02Q021

Obiettivi

Gli obiettivi di questo corso sono: 1) conoscenza e capacità di comprensione: fornire competenze in alcune aree chiave della fisica dello stato solido, come la modellizzazione dei materiali e i fenomeni quantistici nella fisica della materia condensata "dura"; 2) conoscenze e capacità di comprensione applicate: fornire strumenti adeguati per analizzare fenomeni complessi da un punto di vista fondamentale, attraverso la comprensione microscopica e simulazioni ab initio; 3) autonomia di giudizio: aiutare gli studenti a sviluppare un pensiero critico nell'analisi delle proprietà dei materiali, ad esempio sulla base dei risultati di simulazioni; 4) abilità comunicative: supportare gli studenti nell'apprendimento delle modalità di interazione con professionisti accademici e ricercatori nel campo della fisica dello stato solido, mediante l'uso di un linguaggio tecnico-scientifico adeguato, strumenti di presentazione e competenze correlate; 5) capacità di apprendere: sviluppare competenze scientifiche e computazionali che permettano agli studenti di analizzare criticamente la letteratura scientifica e di confrontarsi con i temi emergenti della fisica dello stato solido.

Contenuti sintetici

Oltre il modello di elettroni non interagenti in un solido perfetto: teorie a multi-elettroni, magnetismo e superconduttività. Training pratico basato su simulazioni nell'ambito della Teoria del Funzionale Densità per materiali semiconduttori e materiali magnetici, utilizzando il codice Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP).

Programma esteso

Il problema a molti elettroni

- Dal sistema a molti elettroni alle teorie di campo medio: le equazioni di Hartree
- Le equazioni di Hartree-Fock e contributo energetico di scambio

- Il gas di elettroni omogeneo
- Fondamenti della teoria della densità funzionale: i teoremi di Hohenberg e Kohn
- Equazioni di Kohn-Sham
- Potenziale di scambio e correlazione e approssimazione di densità locale
- Pseudopotenziali

Teoria della densità funzionale (DFT) in pratica:

- Cosa può prevedere la DFT? Esempi di rilevanti proprietà dei materiali ottenute ab-initio
- Ci fidiamo della DFT? Precisione e accuratezza
- Dove fallisce la DFT? Come superare i problemi?

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 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.
- Densità di stati (DOS): simulazione non autoconsistente per GaAs di DOS totali e DOS proiettati su atomi e orbitali.

Proprietà magnetiche dei solidi

- Introduzione a Ferro-/Antiferro-/Para-magnetismo
- Modello di Stoner per il ferromagnetismo di banda nei solidi metallici
- Il ferromagnetismo nei solidi isolanti e l'hamiltoniana di Heisenberg
- Antiferromagnetismo e scattering di neutroni
- Anisotropia magnetica
- Stati magnetici eccitati: onde di spin
- domini magnetici

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 Ni-fcc con e senza polarizzazione di spin.
- DFT per magneti 2D: i) Ordinamento magnetico a lungo raggio (incluso antiferromagnetismo) e stima da principi primi dei parametri di scambio in Hamiltoniane di spin; ii) Accoppiamento spin-orbita ed energia di anisotropia magnetica.

Superconduttività

- Introduzione alla superconduttività: esperimento di Onnes, effetto Meissner ed effetto isotopico
- Le equazioni di London e London: penetrazione delle correnti e dei campi magnetici
- La termodinamica della fase superconduttiva
- Coppie di Cooper
- Introduzione alla teoria di Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS).
- Esistenza del gap, sua natura e stati eccitati nella teoria BCS
- Introduzione alla teoria di Ginzburg-Landau: lunghezza di coerenza e lunghezza di penetrazione
- Superconduttori di tipo II e formazione di vortici
- Superconduttori ad alta T_c

Prerequisiti

Approfondite conoscenze di: teoria dei solidi perfetti e infiniti nello schema di particella singola (corso di base dello stato solido). Meccanica quantistica. Fisica quantistica atomica e molecolare

Modalità didattica

Lezioni, esercitazioni e discussione con gli studenti.

- 14 lezioni da 2 ore svolte in modalità erogativa in presenza;
- 2 lezioni da 2 ore ciascuna svolte in modalità erogativa in remoto;
- 12 attività di laboratorio computazionale da 2 ore svolte in modalità interattiva in presenza

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

- F. GIUSTINO, Materials Modelling using Density Functional Theory, Oxford University Press
- N.A. SPALDIN, Magnetic Materials, Cambridge University Press
- C.A. KITTEL, Introduction to Solid State Physics, Wiley

TESTI ADDIZIONALI

- R. M. MARTIN, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press
- R. TURTON, The Physics of Solids, Oxford University Press
- S. BLUNDELL, Magnetism in Condensed Matter, Oxford University Press.
- H. IBACH AND H. LUTH, Solids State Physics, Fourth Edition, Springer Verlag

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 QUALITÀ | IMPRESE, INNOVAZIONE E INFRASTRUTTURE
