

Programma del Corso Struttura della Materia 2
Laurea Magistrale in Fisica
Docente M. Palumbo (ANNO 2011-2012)

N.B. Programma aggiornato alla conclusione delle lezioni.

Strutture cristalline periodiche: periodicità traslazionale e definizione di cella elementare. Classificazione dei reticoli di Bravais in due e tre dimensioni.

Strutture cristalline semplici e composte.

Descrizione delle proprietà geometriche delle più importanti strutture cristalline. (appunti, cap.4 Ashcroft, oppure cap.2 Grosso)

Reticolo reciproco. Definizione, proprietà fondamentali, utilità.

Zona di Brillouin. Definizione, esempi.

Piani reticolari ed indici di Miller (appunti, cap. 5 Ashcroft)

Determinazione delle strutture cristalline tramite scattering elastico di particelle: raggi X, elettroni, neutroni

Teoria dello scattering elastico di raggi X, intensità del fascio diffratto.

Formulazione della legge di Von Laue ed equivalenza con la legge di Bragg.

Fattore di struttura geometrico. Esempi.

Metodi sperimentali: costruzione della sfera di Ewald, metodo di Laue, metodo del cristallo rotante, metodo delle polveri (appunti, cap 6 Ashcroft, par. 1 e 2 del cap X Grosso)

Hamiltoniana a singolo elettrone in un potenziale periodico. Teorema di Bloch. Prima e seconda dimostrazione. Condizioni periodiche al contorno.

Concetto di banda elettronica. (appunti, cap. 8 Ashcroft)

Teoria dell'elettrone libero (Sommerfeld). Grandezze fondamentali.

Introduzione del parametro adimensionale rs . Espressione dell' energia totale, in termini di rs . Superficie di Fermi. (appunti, cap. 2 Grosso oppure cap.2 Ashcroft)

Teoria dell'elettrone quasi-libero. Condizioni di Bragg. Gap di energia. (appunti, cap. 9 Ashcroft)

Definizione di velocità e tensore massa effettiva per elettrone di Bloch.
(Appunti, Appendice E Ashcroft, oppure par. 6.2 del cap. II Grosso)
Densità degli stati e punti critici.
Formule per sistemi 1D,2D,3D. (appunti, par. 7 del cap. II Grosso)

Metodo del legame forte (tight-binding): ipotesi fisiche e descrizione del metodo per reticoli semplici e con base. Esempi: catena unidimensionale con atomi tutti uguali (orbitali s, s px, s px py pz), catena unidimensionale con 2 atomi diversi per cella, orbitali di tipo s.

Reticolo fcc : orbitali s e solo px,py,pz.

Struttura a bande del grafene: soli orbitali pz. Punti di Dirac. Proprietà elettroniche dei nanotubi zig-zag e armchair. (Appunti, cap. 5 Grosso, cap.10 Ashcroft)

Funzioni di Wannier: definizione, utilità. (ultimo paragrafo del cap. 10 Ashcroft)

Sviluppo in onde piane: vantaggi e svantaggi (Problema del collasso variazionale). Onde Piane ortogonalizzate. Metodo dello pseudopotenziale (appunti, par. 3 e 4 del cap. 5 Grosso). Cenni al metodo cellulare, APW,LMTO, KKR (par.5-6-7 cap 5 Grosso)

Introduzione ai metodi ab-initio: Hamiltoniana elettronica a molti elettroni. Metodo di Hartree-Fock. Ipotesi e uso del principio variazionale. Espressione dell' energia totale di stato fondamentale. Energie di ionizzazione.: teorema di Koopmans. Energie di transizione: concetto di eccitone. (par. 1-2-3-4-5.1-5.2 cap. IV Grosso)

Approssimazione HF nel gas elettronico omogeneo (appunti, par. 7 fino a pag. 125, cap IV Grosso)

Bande dei principali composti: solidi di gas-rari, ionici, covalenti, metalli semplici e nobili. (appunti, cap. VI del Grosso)

Hamiltoniana generale di un solido: principio adiabatico.
Dinamica nucleare classica.

Approssimazione armonica della superficie di energia potenziale.
(par. 1 e 2.1 cap. VIII Grosso)

Dinamica reticolare nei cristalli: Proprieta' della matrice delle costanti di forza. Catena unidimensionale monoatomica e biatomica. Branche acustiche ed ottiche. (appunti, par. 1 e 2 cap. IX Grosso)

Dinamica di un cristallo 3-D: branche acustiche, ottiche. Modi longitudinali e trasversi. Esempi di dispersioni fononiche per cristalli omopolari ed eteropolari (appunti, par.3 e 4 cap. IX Grosso)

Calore specifico vibrazionale: modello Einstein e Debye.
(appunti, par. 5 cap. IX Grosso)

Calore specifico elettronico: espansione Sommerfield, dipendenza da T del potenziale chimico. (appunti, par. 2 e 3 cap. IX Grosso)

Proprieta' ottiche dei materiali: equazioni di Maxwell, equazione delle onde elettromagnetiche in un mezzo. Funzione dielettrica, indici di rifrazione, conduttivita' e relazione con osservabili fisiche: assorbimento, riflettivita', trasmissione. Modello di Lorentz-Drude. (appunti del corso, par. 1 e 2 cap XI Grosso, par. 2.4-2.5-2.6 e par. 3.1-3.2-3.3 del Wooten)

Interazione radiazione-materia: teoria quantistica. Regola d'oro di Fermi. Probabilita' di Transizione e connessione con la parte immaginaria della funzione dielettrica. (appunti del corso, par. 1 e 2 del cap.XII Grosso)

Proprieta' di trasporto ed equazione di Boltzmann. Soluzione in presenza di campi elettrici e gradienti di temperatura. (appunti del corso, par. 3, 4.1 e 6.1 del cap XI del Grosso)

Semiconduttori intrinseci omogenei: esempi principali.

Legge di azione di Massa. Livello di Fermi

Semiconduttori drogati omogenei: livelli di impurezza. Modello idrogenoide.

Condizione di neutralita' di carica Livello di fermi e concentrazione di portatori in semiconduttori drogati.

(appunti del corso, cap. 28 Ashcroft, par.1, 2,3 cap.XIII Grosso)

Semiconduttori drogati inhomogenei: giunzione p-n (cap. 29
Ashcroft fino a pag. 600)

Testi di riferimento:

G. Grosso G. P. Parravicini Solid State Physics
N.W. Ashcroft N.D. Mermin Solid State Physics
Kittel Fisica dello Stato Solido
Wooten Optical Properties of Solids

N.B. I riferimenti ai capitoli dei libri
sono da considerarsi come integrazione agli appunti del corso
ove essi non siano stati presi in modo completo.
In alcuni casi trovate come riferimento sia il Grosso che l'Aschroft
ma spesso molte informazioni che trovate su un libro le trovate anche nell'
altro.