

Corso di Laurea Magistrale in Fisica,

Anno Accademico 2012-2013

Programma del corso di “Struttura della Materia” (8CFU)

Tenuto dal Prof. C. Pennetta

Il corso approfondisce ed amplia la discussione attorno ad alcuni argomenti già introdotti durante la laurea triennale, sviluppandoli secondo una trattazione maggiormente formale e sottolineando gli aspetti metodologici. Inoltre introduce alcuni ulteriori temi di fisica della materia, di carattere più avanzato. Gli argomenti trattati sono di seguito elencati. Per chiarimenti sulle modalità di esame gli studenti sono invitati a contattare il docente.

1) Metodi approssimati di soluzione dell'equazione di Schrödinger:

Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo: impostazione generale ed approssimazione al primo ordine. Il metodo variazionale: formulazione generale e limiti.

2) Atomi a molti elettroni:

Impostazione in termini generali dello studio degli atomi con N elettroni. Approssimazione a campo medio centrale auto-consistente: aspetti generali. Metodo di Hartree. Metodo di Hartree-Fock. Teorema di Koopmans. Limiti dell'approssimazione a campo medio. Metodo del funzionale densità e sua approssimazione a densità locale. Struttura dei multipletti. Interazione fra atomi e radiazione: derivazione delle regole di selezione per transizioni ottiche nel caso di atomi ad un elettrone. Regole di selezione per transizioni ottiche nel caso di atomi ad N elettroni.

4) Molecole:

Approssimazione adiabatica di Born-Oppenheimer e teorema di Hellmann-Feynman. Il problema elettronico nelle molecole: aspetti generali. Molecole biatomiche: simmetria e notazioni sugli stati elettronici. Calcolo degli stati elettronici dello ione idrogeno molecolare con i metodi LCAO e LCAO variazionale: confronto e discussione. Molecola di idrogeno ed altre molecole biatomiche omounucleari, legame covalente e metodo di Heitler-London.. Molecole biatomiche eteronucleari. Molecole poliatomiche, orbitali a simmetria adattata (ibridi). Approssimazione ad elettroni π e legame doppio coniugato. Metodo di Hückel e metodo esteso di Hückel: applicazione alle molecole di butadiene e benzene. Polimeri: distribuzione del grado di polimerizzazione ed altri aspetti generali. Vibrazioni dei nuclei in molecole poliatomiche: modi normali di vibrazione.

5) Fisica dello Stato Solido:

Proprietà generali dei solidi. Struttura periodica dei cristalli. Nozioni elementari di teoria dei gruppi. Reticoli di Bravais, esempi di strutture cristalline. Difetti dei cristalli, tipi di difetto e loro diffusione nel cristallo. Il

concetto di reticolo reciproco, proprietà ed esempi. Diffrazione di onde da parte di cristalli, legge di Laue, fattori di struttura e di forma, fattore di Debye. Vibrazioni reticolari e modi normali, modello di Einstein e modello di Debye. Gli stati elettronici nei cristalli: struttura a bande, teorema di Bloch, momento cristallino.

Bibliografia:

- Struttura della Materia*, R. Fieschi, R. De Renzi, Nuova Italia Scientifica, 1995
Teoria Quantistica della Materia, J.C. Slater, Zanichelli, 1985
Atoms and Molecules, M. Weissbluth, Academic Press, 1978
Introduzione alla Fisica dello Stato Solido, C. Kittel, Casa Editrice Ambrosiana, traduzione dell'edizione VIII a cura di E. Bonetti, C. E. Bottani, F. Ciccaci, Milano, 2008.
Solid State Physics, N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Holt-Saunders Int. Ed., Filadelfia, 1976.
Fisica dello Stato Solido, F. Bassani, U.M.Grassano, Bollati Boringhieri, 2000.
Solid State Physics, G. Grosso, G. Pastori Parravicini, Academic Press, San Diego, 2000.
The Physics of Polymers, G. R. Strobl, Springer, Berlin, 1997.