

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

FISICA QUANTISTICA DEI MATERIALI

QUANTUM PHYSICS OF MATERIALS

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	SCIENZA DEI MATERIALI (L-Sc.Mat.)
Codice	8068674	Canale	Unico
CFU	9	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

Luca Persichetti

CODOCENTE

Modulo: MAURIZIA PALUMMO (MODULO FISICA DEI SOLIDI, 4CFU)

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI L'insegnamento fornisce allo studente le conoscenze quantistiche fondamentali per la comprensione delle proprietà dei materiali, integrando la fisica atomica e molecolare con la fisica dello stato solido. Esso costituisce il naturale completamento della meccanica quantistica e prepara lo studente ad altri insegnamenti caratterizzanti della Scienza dei Materiali. CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE Lo studente acquisisce la conoscenza degli effetti dei campi esterni sugli stati elettronici dell'atomo (Zeeman, Stark), la fisica degli atomi a molti elettroni, l'approssimazione di Born-Oppenheimer e le basi della fisica molecolare. Per la parte di stato solido: verranno richiamati i concetti di reticolo cristallino diretto e reciproco, Zona di Brillouin. Verranno introdotti: teorema di Bloch e teoria delle bande, fononi, proprietà dei semiconduttori intrinseci ed estrinseci, trasporto secondo la BTE (Equazione trasporto di Boltzmann). CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE La capacità di interpretare la fenomenologia dei materiali cristallini e di inquadrarla all'interno delle conoscenze di fisica quantistica, atomica e molecolare, per comprendere le proprietà elettroniche, termiche e ottiche dei materiali cristallini. AUTONOMIA DI GIUDIZIO Lo studente, apprendendo le basi della fisica atomica e molecolare, saprà valutare la validità dei risultati di un dato sperimentale e la sua coerenza rispetto alla teoria. Imparerà inoltre a sapere autonomamente giudicare quali principi fisici sono alla base delle principali caratteristiche dei solidi (in particolare quelli cristallini). ABILITÀ COMUNICATIVE Durante l'insegnamento viene prestata particolare attenzione alla capacità di esporre in modo chiaro, rigoroso e scientificamente corretto i concetti e i modelli introdotti. Lo studente dovrà dimostrare di saper utilizzare il linguaggio
----------	--

	specialistico della fisica atomica, della fisica molecolare e della fisica dei solidi in maniera appropriata, collegando formalismo teorico e interpretazione fisica dei fenomeni osservati. CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO Tenendo conto che ogni studente ha un diverso stile di apprendimento, il corso mira a acquisire/sviluppare capacità di comprensione, di comunicazione e di applicazione di quanto appreso in contesti diversi. Capacità di proseguire nella comprensione delle proprietà quantomeccaniche della materia in modo da poter affrontare efficacemente i corsi della laurea magistrale (in caso di prosecuzione degli studi)
English	LEARNING OBJECTIVES The course provides students with the fundamental quantum knowledge required to understand the properties of materials, integrating atomic and molecular physics with solid-state physics. It constitutes the natural completion of quantum mechanics and prepares students for other characterising courses in Materials Science. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING Students acquire knowledge of the effects of external fields on the electronic states of the atom (Zeeman, Stark), the physics of many-electron atoms, the Born-Oppenheimer approximation, and the foundations of molecular physics. For the solid-state part: the concepts of direct and reciprocal crystal lattice and Brillouin zone will be reviewed. The following topics will be introduced: Bloch theorem and band theory, phonons, properties of intrinsic and extrinsic semiconductors, and transport within the BTE (Boltzmann Transport Equation) framework. APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING The ability to interpret the phenomenology of crystalline materials and place it within the framework of quantum, atomic, and molecular physics, in order to understand the electronic, thermal, and optical properties of crystalline materials. AUTONOMY OF JUDGMENT By learning the fundamentals of atomic and molecular physics, the student will be able to assess the validity of experimental results and their consistency with theory. They will also develop the ability to independently identify which physical principles underlie the main properties of solids (particularly crystalline ones). COMMUNICATION SKILLS Throughout the course, particular attention is paid to the ability to present concepts and models clearly, rigorously, and in a scientifically accurate manner. Students will be expected to demonstrate appropriate use of the specialised language of atomic, molecular,

	and solid-state physics, connecting theoretical formalism with the physical interpretation of observed phenomena. LEARNING ABILITY Acknowledging that each student has a different learning style, the course aims to develop skills in understanding, communicating, and applying knowledge across different contexts. Students will build the capacity to further explore the quantum mechanical properties of matter, enabling them to effectively tackle graduate-level courses should they continue their studies.
--	---

PREREQUISITI

Italiano	Nozioni di base di calcolo differenziale ed integrale, fisica generale, meccanica quantistica introduttiva. È necessario aver sostenuto (o almeno seguito) gli esami di Fisica e Matematica di base e quello dell'insegnamento di Introduzione Meccanica Quantistica. La conoscenza della fisica atomica di base, svolta in tale insegnamento è infatti fortemente consigliata. Inoltre lo studente deve conoscere i concetti base relativi ai materiali cristallini, reticolo diretto/reciproco avendo seguito e possibilmente sostenuto l'esame dell'insegnamento "<i>Struttura e Simmetrie dei Materiali Cristallini con Laboratorio</i>" del II anno II semestre
English	Basic notions of calculus, classical electromagnetism and introductory quantum mechanics. Basic Physics and Mathematics courses are required prerequisites. Knowledge of introductory atomic physics is strongly recommended. Familiarity with the core concepts of direct and reciprocal lattices. Therefore, students are strongly advised to have attended and, ideally, passed the second-year, second-semester exam <i>Structure and Symmetries of Crystalline Materials with Laboratory</i>.

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	FISICA ATOMICA E MOLECOLARE (~5 CFU): Atomo di idrogeno in campi esterni: campo magnetico forte, medio e debole (effetto Zeeman); campo elettrico e polarizzabilità (effetto Stark). Atomi a due elettroni: trattazione perturbativa e variazionale dello stato fondamentale; perturbativa degli stati eccitati. Atomi a molti elettroni (multipletti), Approssimazione di Campo Centrale. Fisica Molecolare: Approssimazione di Born-Oppenheimer; ione idrogeno H_2^+ (LCAO); molecola H_2 (LCAO e VB); interazione delle configurazioni (LCAO-CI) e termine ionico nell'hamiltoniano. Moto dei nuclei: vibrazioni e rotazioni. Principio di Franck-Condon. FISICA DELLO STATO SOLIDO (~4 CFU):
----------	--



Lezione introduttiva- Richiami su strutture cristalline, reticoli diretti e reciproci

Hamiltoniana elettronica in potenziale periodico (~4 ore)

Hamiltoniana di un singolo elettrone in un potenziale periodico. Teorema di Bloch: prima e seconda dimostrazione. Condizioni periodiche al contorno. Concetto di banda elettronica. (Appunti, cap. 8 di Solid State Physics). Definizione di velocità e tensore massa efficace per elettroni di Bloch. (Appunti, Appendice E di Solid State Physics oppure par. 6.2 del cap. II di Solid State Physics). Densità degli stati e punti critici. Formule per sistemi 1D, 2D e 3D. (Appunti, par. 7 del cap. II di Solid State Physics).

Teoria dell'elettrone libero e quasi-libero (~4 ore)

Teoria dell'elettrone libero (modello di Sommerfeld). Grandezze fondamentali. Introduzione del parametro adimensionale r_s . Espressione dell'energia totale in funzione di r_s . Superficie di Fermi. Calore specifico elettronico ed espansione di Sommerfeld. (Appunti, cap. 2 di Solid State Physics oppure cap. 2 di Solid State Physics). Teoria dell'elettrone quasi-libero. Condizioni di Bragg e apertura dei gap energetici. (Appunti, cap. 9 di Solid State Physics).

Metodo del legame forte (tight-binding) (~4 ore)

Ipotesi fisiche e descrizione del metodo per reticoli semplici e con base. Esempi: catena monodimensionale con atomi identici (orbitali s; s, px; s, px, py, pz), catena con due atomi diversi per cella (orbitali s), reticolo fcc (orbitali s).

Struttura a bande del grafene (solo orbitali pz). Punti di Dirac. Confronto con BN. Proprietà elettroniche dei nanotubi zig-zag e armchair. (Appunti, cap. 5 di Solid State Physics e cap. 10 di Solid State Physics).

Espansione in onde piane e pseudopotenziali (~4 ore)

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 di Solid State Physics).

Bande elettroniche nei principali solidi: gas nobili solidi, solidi ionici, covalenti, metalli semplici e metalli nobili. (Appunti, cap. VI di Solid State Physics).

Proprietà ottiche dei materiali (~2 ore)

Equazioni di Maxwell ed equazione delle onde elettromagnetiche in un mezzo. Funzione dielettrica, indice di rifrazione, conducibilità e relazione con osservabili fisiche (assorbimento, riflettività, trasmissione). Modello di Lorentz–Drude. (Appunti del corso, par. 1–2 cap. XI di Solid State Physics; par. 2.4–2.6 e 3.1–3.3 di Optical Properties of Solids). Relazioni di Kramers–Kronig.

Interazione radiazione–materia (~2 ore)

Teoria quantistica dell'interazione radiazione–materia. Regola d'oro di Fermi. Probabilità di transizione e connessione con la parte immaginaria della funzione dielettrica. Joint

	density of states (JDOS) e interpretazione degli spettri ottici. Cenni al modello idrogenoide dell'eccitone. (Appunti del corso, cap. XII di Solid State Physics). Trasporto elettrico e termico nei metalli (~ 4ore) Modello di Drude: conducibilità elettrica e cenni alla conducibilità termica. Legge di Wiedemann–Franz Effetto Hall e cenni all'effetto Hall quantistico. Equazione di Boltzmann per trasporto elettrico e termico. Approssimazione del tempo di rilassamento. Conducibilità elettrica e termica. Fenomeni termoelettrici. (Appunti, cap. 1 di Solid State Physics; sez. XI.3, XI.4.1, XI.6.1). Semiconduttori (~4 ore) Definizione, struttura a bande e proprietà. Semiconduttori intrinseci ed estrinseci. Statistica dei portatori. Legge di azione di massa. Dipendenza dal livello di Fermi e dalla concentrazione dei portatori in funzione della temperatura. Cenni alla giunzione p–n. (Appunti, cap. 28 e cap. 29 fino a pag. 600 di Solid State Physics). Dinamica reticolare nei cristalli (~4 ore) Vibrazioni reticolari in approssimazione di Born–Oppenheimer e armonica. Proprietà della matrice delle costanti di forza. Catena monodimensionale monoatomica e biatomica. Branche acustiche e ottiche. (Appunti, par. 1–2 cap. IX di Solid State Physics) Dinamica dei cristalli tridimensionali: branche acustiche e ottiche, modi longitudinali e trasversi. (Appunti, par. 3–4 cap. IX di Solid State Physics). Cenni al calcolo del calore specifico vibrazionale: modelli di Einstein e Debye. (par. 5 cap. IX di Solid State Physics).
English	ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS (~5 CFU): Hydrogen atom in external fields: strong, intermediate and weak magnetic field (Zeeman effect); electric field and polarizability (Stark effect). Two-electron atoms: perturbative and variational approach for the ground state; perturbative approach for excited states. Many-electron atoms (multiplets), Central Field Approximation. Molecular Physics: Born-Oppenheimer approximation; hydrogen ion H_2^+ (LCAO); H_2 molecule (LCAO and VB); Configuration Interaction (LCAO-CI) and ionic term in the Hamiltonian. Dynamics of nuclei: vibrations and rotations. Franck-Condon principle. SOLID STATE PHYSICS (~4 CFU): Introductory lecture introductory lecture and review of crystalline materials, direct and reciprocal lattices. Electrons in Periodic Potentials Single-electron Hamiltonian in a periodic potential. Bloch theorem: first and second proof. Periodic boundary conditions. Concept of electronic bands. (Lecture notes, Ch. 8 of Solid State Physics). Definition of velocity and effective mass tensor for Bloch electrons.

(Lecture notes, Appendix E of Solid State Physics, or Section 6.2 of Ch. II of Solid State Physics). Density of states and critical points. Formulas for 1D, 2D, and 3D systems. (Lecture notes, Section 7 of Ch. II of Solid State Physics).

Free and Nearly-Free Electron Model

Free electron theory (Sommerfeld model). Fundamental quantities. Introduction of the dimensionless parameter r_s . Expression of the total energy in terms of r_s . Fermi surface. Electronic specific heat and Sommerfeld expansion. (Lecture notes, Ch. 2 of Solid State Physics or Ch. 2 of Solid State Physics). Nearly-free electron theory. Bragg conditions and energy gaps. (Lecture notes, Ch. 9 of Solid State Physics).

Tight-Binding Method

Tight-binding method: physical assumptions and description of the method for simple lattices and lattices with a basis. Examples: one-dimensional chain with identical atoms (s orbitals; s, px; s, px, py, pz orbitals), one-dimensional chain with two different atoms per unit cell and s orbitals, fcc lattice with s orbitals. Band structure of graphene considering only pz orbitals. Dirac points. Comparison with boron nitride (BN). Electronic properties of zig-zag and armchair nanotubes. (Lecture notes, Ch. 5 of Solid State Physics and Ch. 10 of Solid State Physics).

Plane-Wave Expansion and Pseudopotentials

Plane-wave expansion: advantages and disadvantages (variational collapse problem). Orthogonalized plane waves. Pseudopotential method. (Lecture notes, Sections 3 and 4 of Ch. 5 of Solid State Physics).

Band structures of the main classes of solids: rare-gas solids, ionic solids, covalent solids, simple metals, and noble metals. (Lecture notes, Ch. VI of Solid State Physics).

Optical Properties of Materials

Optical properties of materials: Maxwell equations, electromagnetic wave equation in a medium. Dielectric function, refractive index, conductivity, and their relation to physical observables such as absorption, reflectivity, and transmission. Lorentz–Drude model. (Lecture notes, Sections 1–2 of Ch. XI of Solid State Physics; Sections 2.4–2.6 and 3.1–3.3 of Optical Properties of Solids). Kramers–Kronig relations.

Radiation–Matter Interaction

Quantum theory of radiation–matter interaction. Fermi’s golden rule. Transition probability and its connection with the imaginary part of the dielectric function. Joint density of states (JDOS). Interpretation of optical spectra in terms of the JDOS. Brief introduction to the hydrogenic model for excitons. (Lecture notes, Sections 1–2 of Ch. XII of Solid State Physics).

Electrical and Thermal Transport in Metals

Drude model: electrical conductivity and brief discussion of thermal conductivity. Wiedemann–Franz law (without derivation). Hall effect and introduction to the quantum Hall effect. Boltzmann equation for electrical and thermal transport. Relaxation-time

	approximation. Electrical and thermal conductivity. Wiedemann–Franz law. Thermoelectric phenomena. (Lecture notes, Ch. 1 of Solid State Physics; Section XI.3, XI.4.1, XI.6.1). Semiconductors Semiconductors: definition, band structure, and properties. Intrinsic and extrinsic semiconductors. Carrier statistics. Mass action law. Temperature dependence of the Fermi level and carrier concentration. Brief introduction to the p–n junction. (Lecture notes, Chs. 28 and 29 up to p. 600 of Solid State Physics). Lattice Dynamics in Crystals Concept of lattice vibrations within the Born–Oppenheimer and harmonic approximations. Properties of the force-constant matrix. One-dimensional monoatomic and diatomic chains. Acoustic and optical branches. (Lecture notes, Sections 1–2 of Ch. IX of Solid State Physics). Dynamics of a three-dimensional crystal: acoustic and optical branches, longitudinal and transverse modes. (Lecture notes, Sections 3–4 of Ch. IX of Solid State Physics). Brief introduction to the calculation of vibrational specific heat: Einstein and Debye models. (Section 5 of Ch. IX of Solid State Physics).
--	--

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	Fisica Atomica e Molecolare: - Physics of Atoms and Molecules, Bransden, Joachain - Pearson - Atomi, Molecole e Solidi: Esercizi risolti, Balzarotti, Cini, Fanfoni - Springer Italia - Meccanica quantistica molecolare, Atkins e Friedman - Zanichelli Fisica dei Solidi: - Introduction to Solid State Physics, G. Grosso e G. Pastori Parravicini - Academic Press (2000) - Solid State Physics, N.W. Ashcroft and N.D. Mermin - Note ed appunti sul canale piattaforma TEAMS
<i>English</i>	Atomic and Molecular Physics: - Physics of Atoms and Molecules, Bransden, Joachain - Pearson - Atomi, Molecole e Solidi: Esercizi risolti, Balzarotti, Cini, Fanfoni - Springer Italia - Molecular Quantum Mechanics, Atkins and Friedman - Oxford University Press Solid State Physics: - Introduction to Solid State Physics, G. Grosso e G. Pastori Parravicini - Academic Press (2000) - Solid State Physics, N.W. Ashcroft and N.D. Mermin - Teacher Notes on teams channel

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

☒ In presenza ☐ A distanza

Italiano	L'insegnamento si svolge attraverso lezioni frontali in aula (circa 36 lezioni di due ore ciascuna), con uso della lavagna. Le esercitazioni numeriche sono
-----------------	--

	parte integrante del corso e si svolgono anch'esse in aula. I test e le modalità di esame sono presentati nella prima lezione del corso. Il corso è erogato in codocenza: le lezioni di Fisica Atomica e Molecolare sono tenute da Luca Persichetti (5 CFU); le lezioni complementari di Fisica dei Solidi da Maurizia Palummo (4 CFU).
<i>English</i>	The course is implemented through frontal lectures in the classroom (approximately 30 lessons of two hours each), using blackboard. Numerical exercises are an integral part of the course and are also held in the classroom. Texts and exam requirements are presented during the first lesson. The course is co-taught: lectures on Atomic and Molecular Physics are delivered by Luca Persichetti (5 CFU); complementary Solid State Physics lectures by Maurizia Palummo (4 CFU).

MODALITÀ DI FREQUENZA

☐ frequenza obbligatoria ☒ frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

<i>Italiano</i>	La frequenza dell' insegnamento non è obbligatoria, sebbene gli studenti siano fortemente incoraggiati a frequentare con continuità le lezioni. Le lezioni sia teoriche sia di esercitazioni numeriche sono svolte in aula.
<i>English</i>	Attendance is not compulsory, although students are strongly encouraged to follow the lessons with continuity. Both theoretical and numerical exercise lessons are delivered in the classroom.

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

☐ Prova scritta ☒ Prova orale ☐ Prova di laboratorio ☐ Prova pratica
☐ Valutazione in itinere ☐ Valutazione di progetto ☐ Valutazione di tirocinio

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE VALUTATRICE

LUCA PERSICHETTI, MAURIZIA PALUMMO, 1 o 2 fra i seguenti esperti nel settore OLIVIA PULCI, TOMMASO GIOVANNINI, GIANLUCA STEFANUCCI, ENRICO PERFETTO, MASSIMO FANFONI, ANNA SGARLATA, LUCA CAMILLI

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

<i>Italiano</i>	L'esame consiste in una prova orale finalizzata ad accertare la conoscenza e la comprensione dei principali concetti della Fisica dello Stato Solido, con particolare riferimento alla struttura e alle proprietà fisiche dei materiali cristallini solidi, alla diffrazione, alla struttura elettronica vibrazionale e proprietà di trasporto ed ottiche dei cristalli e alle proprietà dei semiconduttori intrinseci ed estrinseci Nel corso della prova saranno valutate:
-----------------	--

	• la capacità di utilizzare i modelli teorici introdotti durante il corso per interpretare le proprietà strutturali, elettroniche, ottiche e vibrazionali dei materiali cristallini; • la capacità di collegare formalismo matematico e interpretazione fisica; • l'autonomia di giudizio nell'analisi dei fenomeni trattati; • la chiarezza espositiva e l'uso appropriato del linguaggio scientifico. Per il superamento dell'esame è richiesto un voto non inferiore a 18/30. La valutazione sarà effettuata secondo i seguenti criteri: • Non idoneo: conoscenza insufficiente degli argomenti fondamentali dell'insegnamento e limitata capacità di interpretazione delle proprietà fisiche dei materiali cristallini e dei relativi modelli teorici. • 18-20: conoscenza essenziale dei contenuti dell'insegnamento; comprensione sufficiente dei principali concetti relativi alla fisica dei materiali cristallini, pur in presenza di imprecisioni espositive e limitata autonomia nell'applicazione dei modelli teorici. • 21-23: conoscenza adeguata degli argomenti trattati; capacità di descrivere correttamente i principali modelli della fisica dello stato solido e di applicarli a sistemi cristallini semplici. • 24-26: buona conoscenza dei contenuti dell'insegnamento e buona capacità di analisi e sintesi; uso corretto del formalismo teorico e adeguata capacità di collegare struttura cristallina e proprietà fisiche dei materiali. • 27-29: conoscenza completa e approfondita degli argomenti; buona autonomia nell'analisi critica delle proprietà elettroniche, di trasporto, ottiche, vibrazionali dei materiali cristallini e nell'utilizzo dei modelli teorici trattati. • 30-30 e lode: eccellente padronanza degli argomenti trattati, elevata capacità di rielaborazione critica e autonoma dei contenuti, esposizione rigorosa e utilizzo appropriato del linguaggio scientifico, con piena comprensione delle relazioni tra struttura cristallina e proprietà fisiche dei solidi
English	The exam consists of an oral test aimed at assessing the knowledge and understanding of the main concepts of Solid State Physics, with particular reference to the structure and physical properties of crystalline solid materials, diffraction, electronic and vibrational structure, transport and optical properties of crystals, and the properties of intrinsic and extrinsic semiconductors. During the examination, the following will be evaluated: • the ability to use the theoretical models introduced during the course to interpret the structural, electronic, optical, and vibrational properties of crystalline materials; • the ability to connect mathematical formalism with physical interpretation; • independent judgment in the analysis of the phenomena covered; • clarity of exposition and appropriate use of scientific language. To pass the exam, a minimum grade of 18/30 is required. The evaluation will be carried out according to the following criteria: • Not passed: insufficient knowledge of the fundamental topics of the course and limited ability to interpret the physical properties of crystalline materials and the related theoretical models. • 18–20: basic knowledge of the course content; sufficient understanding of the main concepts of solid state physics, although with inaccuracies in exposition and limited autonomy in applying theoretical models. • 21–23: adequate knowledge of the topics covered; ability to correctly describe the main models of solid state physics and apply them to simple crystalline systems.

- | | |
|--|---|
| | <ul style="list-style-type: none"> • 24–26: good knowledge of the course content and good ability in analysis and synthesis; correct use of theoretical formalism and adequate ability to connect crystal structure with physical properties of materials. • 27–29: comprehensive and in-depth knowledge of the topics; good autonomy in critical analysis of electronic, transport, optical, and vibrational properties of crystalline materials and in the use of the theoretical models discussed. • 30–30 with honors: excellent mastery of the topics covered, high capacity for critical and independent re-elaboration of the content, rigorous exposition and appropriate use of scientific language, with full understanding of the relationships between crystal structure and physical properties of solids. |
|--|---|