

# ENRICO FERMI LECTURES 2016-2017

## Tematiche di Fisica della Materia Condensata

### 1. Prologo: la fisica della materia condensata e' la fisica dei materiali dell'esperienza quotidiana.

- La grandissima varieta' delle aggregazioni macroscopiche di atomi e molecole: gas, liquidi, solidi cristallini, vetri, quasicristalli, aggregati polimerici...
- Simmetria e rottura di simmetria, transizioni di fase. L'esempio dell'acqua.
- La diffrazione dei raggi x: una sonda sperimentale della struttura molecolare.
- Correlazioni, ordine e disordine a differenti scale di lunghezza.

### 2. Proprieta' macroscopiche e proprieta' microscopiche

- Termodinamica e meccanica statistica.
- Poche delle innumerevoli variabili microscopiche sopravvivono nelle medie macroscopiche ma le variabili che non sopravvivono hanno delle conseguenze. Lavoro meccanico e calore.
- Equilibrio termodinamico. Energia ed equipartizione dell'energia.
- Boltzmann e Gibbs. Due diversi modi di descrivere l'equilibrio statistico: ergodicita' e conteggio delle probabilita'.
- Gli esperimenti numerici: una nuova metodologia della fisica resa possibile dall'avvento dei calcolatori elettronici si affianca alle metodologie tradizionali della fisica sperimentale e della fisica teorica.

### 3. La dinamica molecolare

- L'esperimento numerico di Fermi, Pasta e Ulam: e' sempre vero che l'equilibrio statistico emerge dalla dinamica microscopica come effetto delle interazioni tra le particelle nei moti microscopici?
- Ergodicita' e miscelazione statistica, moti periodici, quasi-periodici e caotici.

- La simulazione numerica dei liquidi: l'esempio dell'argon liquido e cosa impariamo dal confronto con la teoria e con gli esperimenti nel laboratorio.

#### **4. Le simulazioni col metodo Monte Carlo**

- Le probabilità degli stati microscopici, la funzione di partizione e le medie statistiche.
- Come calcolare le probabilità? Metropolis, Rosenbluth e Teller (Metropolis<sup>1</sup>, Rosenbluth<sup>2</sup>, Teller<sup>2</sup>) propongono il campionamento stocastico degli stati importanti.
- Proprietà meccaniche e proprietà termiche, energia interna e energia libera.

#### **5. Di nuovo il diagramma di fase dell'acqua**

- Equilibrio stabile e metastabile: liquidi sottoraffreddati e vetri (sistemi amorfi)
- Quanti sono i ghiacci amorfi?
- Transizioni di fase del primo e del secondo ordine. Il fenomeno della nucleazione. L'ipotesi di un secondo punto critico per le fasi metastabili dell'acqua.
- La terra di nessuno nel diagramma di fase metastabile. Simulazioni numeriche ed esperimenti con le gocce d'acqua.
- Perché l'acqua è un liquido insolito: il reticolo dei legami idrogeno.
- Perché la transizione tra il ghiaccio amorfo a bassa densità e quello ad alta densità assomiglia a una transizione del primo ordine.
- Ordine e disordine nel ghiaccio cristallino. L'entropia residua e il teorema di Nernst.

#### **6. I fenomeni critici**

- Opalescenza critica e rallentamento critico, fluttuazioni critiche, universalità, esponenti critici
- La teoria fenomenologica di Landau.
- Trasformazioni di scala e un nuovo concetto di invarianza.
- Hamiltoniana e funzione di partizione. La teoria della rinormalizzazione di Wilson.

## 7. Effetti quantistici nel diagramma di fase

- Isotopi dell'idrogeno. Acqua normale e acqua pesante
- La fisica classica non e' in grado di spiegare perche' l'acqua pesante si trasforma in ghiaccio a una temperatura che e' di quasi 4 gradi piu' alta di quella dell'acqua normale.
- La funzione di partizione quantistica e l'integrale di cammino di Feynman. Simulazioni quantistiche mediante simulazioni classiche.

## 8. Sistemi quantistici a molte particelle

- Lo stato di una particella classica e quello di una particella quantistica. La funzione d'onda.
- Il problema quantistico a molte particelle e' radicalmente piu' difficile dell'analogo problema classico.
- Particelle identiche: indistinguibilita' delle particelle quantistiche, effetti di scambio, fermioni e bosoni. Condensazione di Bose-Einstein e fenomeni quantistici macroscopici: superfluidi e superconduttori.

## 9. Gli elettroni nei materiali

- Dagli atomi ai materiali: livelli elettronici isolati negli atomi e bande di energia nei materiali. Conduttori e isolanti.
- Lo stato fondamentale degli elettroni determina l'energia coesiva, le strutture atomiche di equilibrio e, in generale, le proprieta' dei materiali.
- Le equazioni esatte che definiscono lo stato degli elettroni nei materiali sono note ma non le sappiamo risolvere, nemmeno coi piu' potenti calcolatori.
- Il metodo approssimato di Thomas-Fermi-Dirac.
- Per calcolare l'energia dello stato fondamentale degli elettroni non e' necessario conoscere la funzione d'onda, e' sufficiente conoscere la densita' degli elettroni.
- Il funzionale di densita'. Elettroni interagenti descritti da elettroni fittizi non interagenti.

## 10. La dinamica molecolare ab-initio

- Le forze molecolari e l'approssimazione di Born-Oppenheimer.
- Dinamica molecolare senza potenziali empirici: la dinamica molecolare ab-initio.
- La dinamica molecolare ab-initio permette di descrivere situazioni in cui i legami chimici si rompono e si formano in presenza di fluttuazioni termiche. La conducibilità ionica dell'acqua come esempio.

## **11. Materiali sotto estrema pressione**

- Le pressioni nel mantello terrestre e all'interno di pianeti e esopianeti.
- Come produrre pressioni estreme in laboratorio: la "diamond anvil cell".
- Simulazioni di materiali a pressioni estreme con la dinamica molecolare ab-initio.
- Il ghiaccio superionico e gli insoliti campi magnetici di Urano e Nettuno.
- Il solfuro di idrogeno a una pressione di 1.5 megabar e' il superconduttore a piu' alta temperatura oggi noto.
- La metallizzazione dell'idrogeno.

## **12. Spin e pseudospin**

- Lo spin dell'elettrone e la funzione d'onda di spin. La funzione d'onda di spin cambia segno con una rotazione di 360 gradi.
- Trasformazioni adiabatiche e fase di Berry.
- Pseudospin dell'elettrone nel grafene e topologia.
- Materiali topologici. Transizioni di fase topologiche
- Considerazioni su simmetria e topologia

## **13. Nuovi materiali e applicazioni tecnologiche**

- La progettazione di nuovi materiali: il ruolo di fisica e chimica.
- La progettazione/sintesi di materiali al computer: il ruolo dell'intelligenza artificiale.
- Le grandi basi di dati e il genoma dei materiali.
- Correlazioni e causalità.