

**Università di Pavia, Dipartimento di Fisica**

**Laurea Magistrale in Scienze Fisiche:**

**Curriculum di Fisica della Materia**

***Ricerche in Fisica della Materia Teorica***

Lucio Andreani

Giornata di orientamento, Pavia, 9 Aprile 2019

**<http://fisica.unipv.it>**

**<http://fisica.unipv.it/dida/Orientamento.htm>**

# Fisica della Materia

- Fisica dei solidi (semiconduttori, isolanti, metalli, magnetismo e superconduttività, transizioni di fase, ... )
- Nanostrutture, nanotecnologie, nanomateriali
  - "nanoscale quantum effects"
- Ottica e fotonica, spettroscopia
- Ottica quantistica, quantum information, quantum technologies
- Atomi e molecole; liquidi e “soft matter”; ...

## ***Gli enti nazionali:***

CNR (Consiglio Nazionale delle Ricerche), dal 2004 comprendente l'ex INFM (Istituto Nazionale di Fisica della Materia)

CNISM (Consorzio Naz.le Interuniversitario per le Scienze Fisiche della Materia)

IIT (Istituto Italiano di Tecnologia)

# Piano di studi del curriculum (1)

## 6 CFU di insegnamenti di laboratorio (FIS/01):

*Laboratorio di fisica quantistica*  
*Laboratorio di strumentazioni fisiche*

*M. Galli*  
*F. Marabelli*

## 6 CFU di insegnamenti di fisica teorica (FIS/02):

*Complementi di fisica teorica*  
*Elettrodinamica quantistica*  
*Meccanica statistica*  
*Metodi computazionali della fisica*  
*Termodinamica quantistica*

*B. Pasquini*  
*A. Bacchetta*  
*M. Guagnelli*  
*F. Piccinini*  
*M. Sacchi*

## 36 CFU di insegnamenti di area (FIS/03, segue)

## 12 CFU di insegnamenti di altre aree:

BIO, CHIM, FIS/05, INF, MAT, ING-IND, ING-INF, MED (controllare SSD)

## 12 CFU a scelta libera

## 48 CFU tesi di laurea magistrale

*Memento: la fisica è una  
scienza sperimentale*

# Piano di studi del curriculum (2)

## 36 CFU di insegnamenti di area (FIS/03):

*Magnetismo e superconduttività*

*P. Carretta, G. Prando*

*Fisica dello stato solido I*

*L. Andreani*

*Fisica dello stato solido II*

*L. Andreani, M. Cococcioni*

*Spettroscopia e materiali*

*M. Patrini, P. Galinetto*

*Fisica dei dispositivi elettronici a stato solido*

*V. Bellani*

*Nanostrutture quantistiche*

*D. Gerace*

*Fotonica*

*M. Liscidini*

*Fisica quantistica della computazione*

*C. Macchiavello*

*Ottica quantistica*

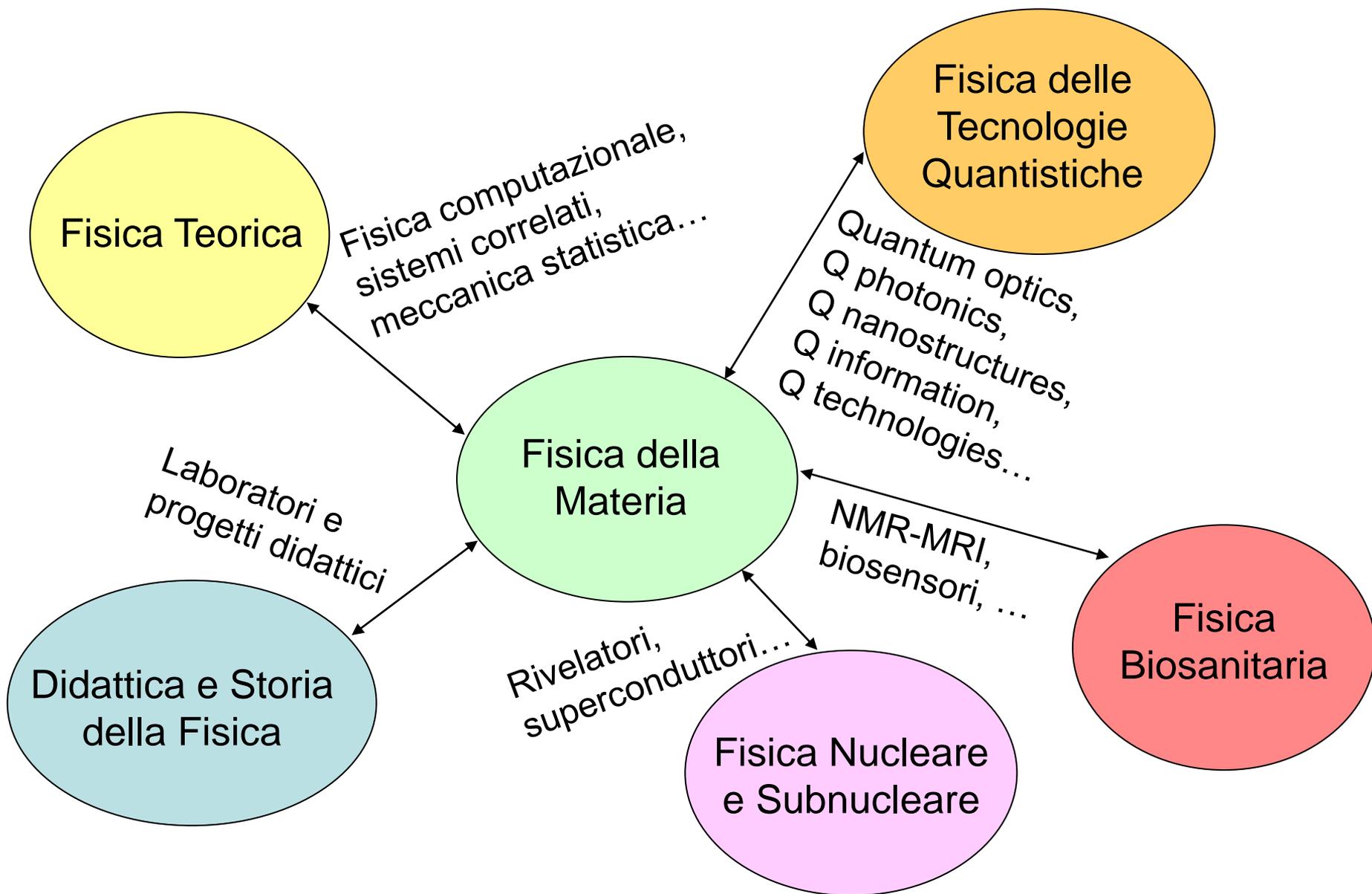
*L. Maccone*

Permette un piano di studi flessibile e personalizzabile con diversi profili:

Fisica sperimentale, fisica computazionale dei solidi, fotonica e nanostrutture, spettroscopia e materials science, quantum optics & quantum information

È possibile inserire 2 laboratori e/o 2 insegnamenti di fisica teorica sfruttando i 12 CFU a scelta libera

# I curricula della laurea magistrale



# Ricerche in Fisica computazionale, Fotonica e Nanostrutture



L.C. Andreani



M. Cococcioni



D. Gerace

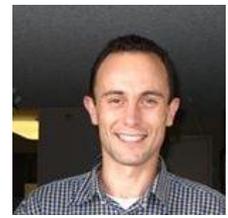


M. Liscidini

PhD/postdocs: D. Aurelio, M. Passoni, F. Tacchino, N. Bergamasco, T. Perani...

- **Fisica computazionale della materia**
- **Fotonica e nanostrutture**
- **Silicon photonics, fotovoltaico**
- **(Quantum computing, quantum tech...)**

# Modelling di materiali a principi primi (fisica computazionale ab-initio)



**Descrizione:** uso di Density-Functional Theory (DFT) con computing ad alte prestazione per risolvere il problema elettronico con effetti a molti corpi

$$H\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\Psi = E\Psi$$



## Problemi aperti:

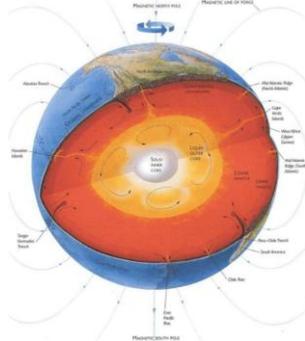
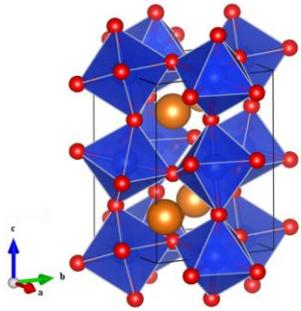
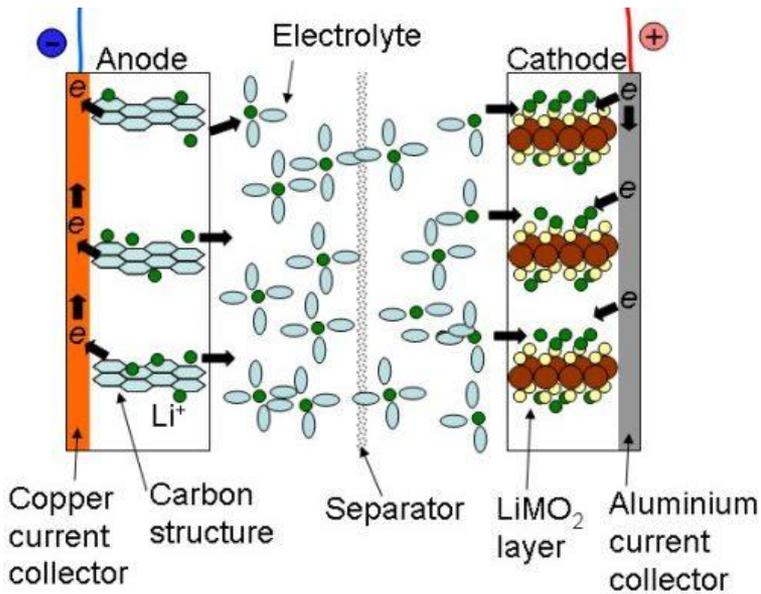
- Sviluppare o perfezionare metodi e algoritmi computazionali per migliorare l'accuratezza, l'efficienza e il potere predittivo delle simulazioni (DFT+U...)

## Obiettivi:

- Modellizzare/comprendere/prevedere le proprietà fisiche di strutture note e progettare/ottimizzare nuove strutture per specifiche applicazioni
- Sviluppare piattaforme software a livello internazionale (**Quantum Espresso**)

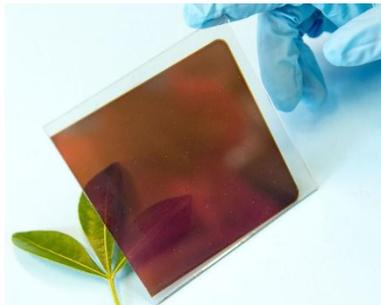
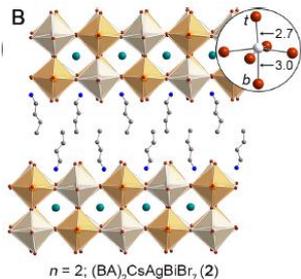
# Ab-initio modelling: progetti

Electrode materials for Li & Na rechargeable batteries  
(collaborations: chemistry departments @ UniPV,  
UniMIB; N. Marzari @ EPF-Lausanne)

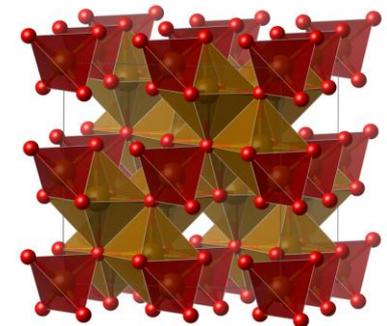


Fe-bearing minerals: thermo-elastic properties,  
(collaborations: R. M. Wentzcovitch @ Columbia, NYC)

Complex transition-metal compounds (multi-ferroics, photocatalysis,  
transparent conductive oxides...)



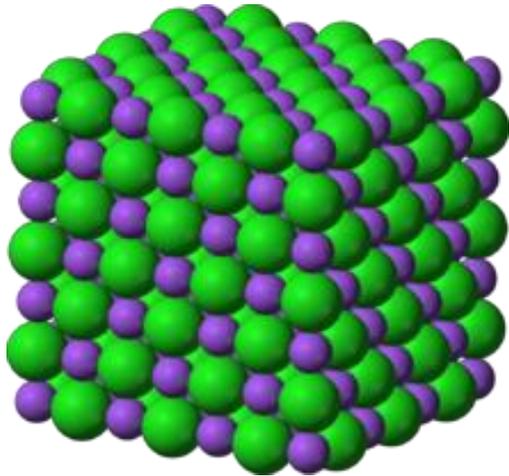
Layered organic-inorganic  
perovskites for optoelectronic  
and solar cell applications



Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>

# Solidi cristallini

Reticolo periodico per gli elettroni



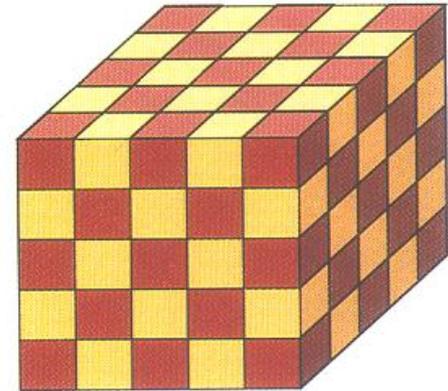
Equazione di Schrödinger

$$H\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\Psi = E\Psi$$



# Cristalli fotonici

Funzione dielettrica periodica per i fotoni



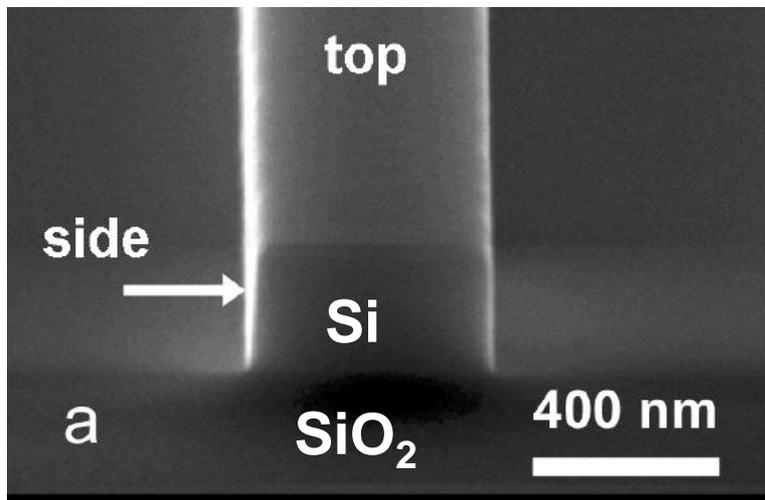
Eq.ni di Maxwell del 2° ordine per i campi armonici

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r})$$

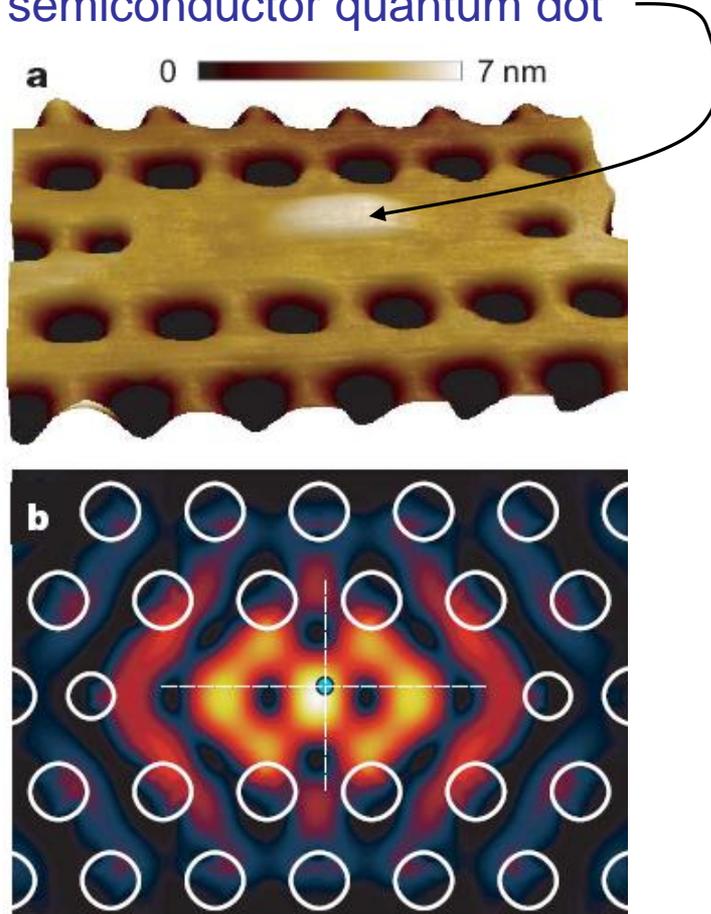
Bande fotoniche, gap di energia... Sistemi a dimensionalità ridotta per controllare la propagazione di luce, gli effetti quantistici, le nonlinearità, la radiazione interazione-materia nelle **nanostrutture (nanocavità)**

# Confinamento spaziale: ridurre la dimensionalità per i fotoni e/o per gli elettroni

Silicon wire for photonic integration



Photonic cavity with semiconductor quantum dot

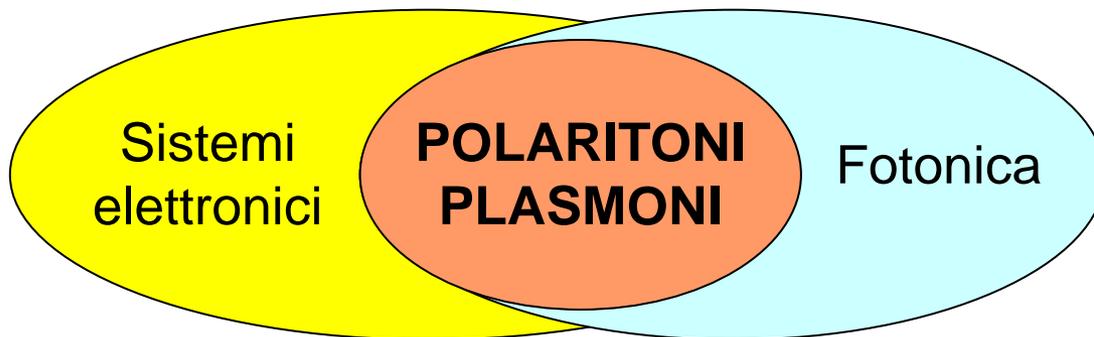
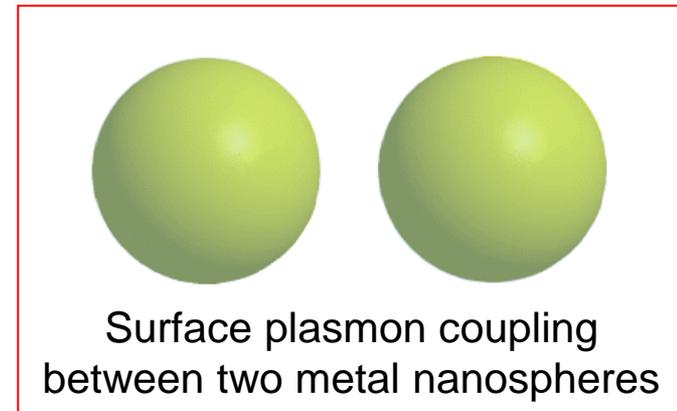


# Eccitazioni elementari (*quasiparticles*)

Le eccitazioni nei solidi sono fenomeni collettivi, che possono apparire ed essere misurate come quasiparticelle: fononi, eccitoni, polaritoni, plasmoni, magnoni... (e cariche frazionarie  $e/3 \leftrightarrow$  effetto Hall quantistico)

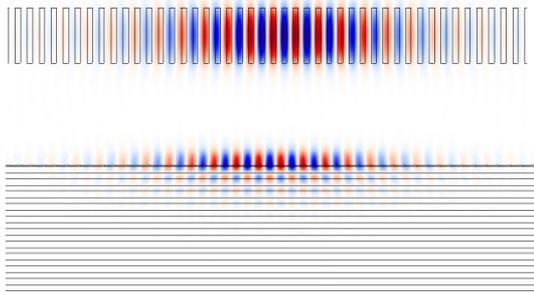
**PLASMONI:** eccitazioni collettive degli elettroni liberi in un metallo. Possono localizzarsi e formare *surface plasmons*

**POLARITONI:** modi accoppiati di polarizzazione del mezzo e campo elettromagnetico: *exciton-polaritons, surface-plasmon polaritons...*

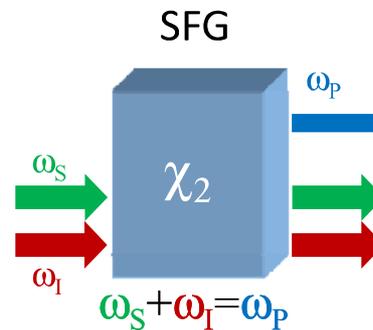


Fenomeni: condensazione di Bose-Einstein a T ambiente, controllo dell'emissione spontanea e stimolata...

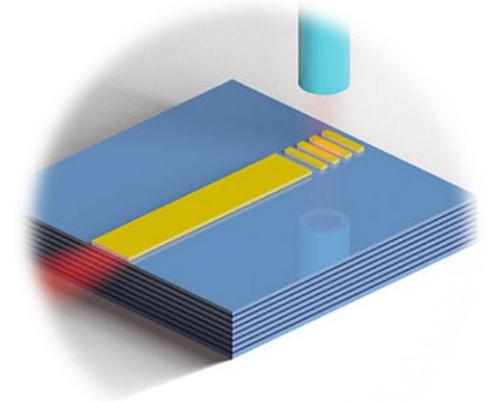
# Strutture fotoniche per il controllo dell'interazione elettrone-materia e delle nonlinearità ottiche



Light confinement  
(Bloch surface waves,  
nanocavities)



Nonlinear  
photonics



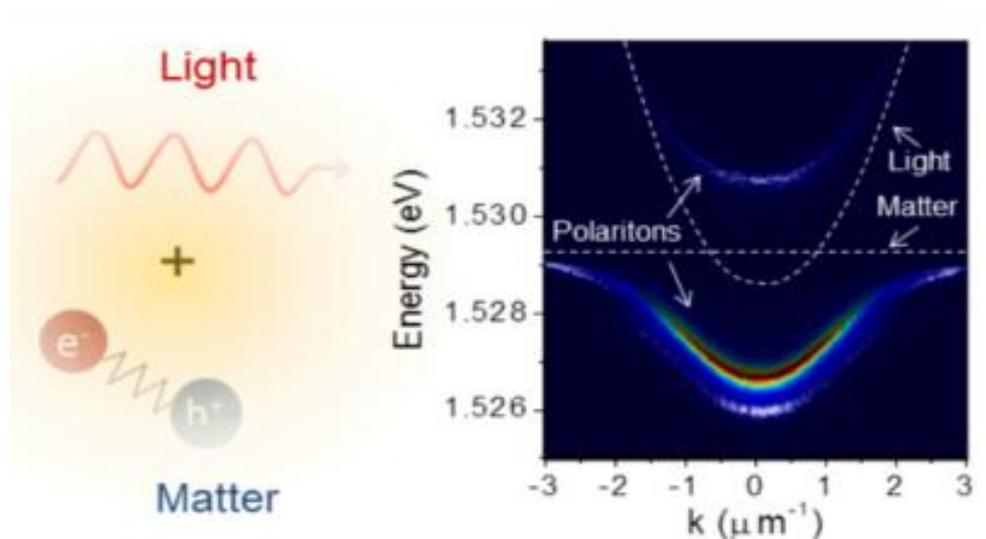
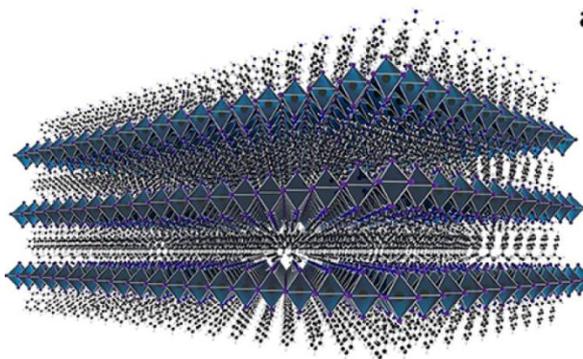
Optical sensing

[www.liscidini.com](http://www.liscidini.com)



# Interazione radiazione-materia in nanostrutture fotoniche: strong coupling e polaritoni eccitonici

**Obiettivo:** studiare gli eccitoni e i polaritoni in materiali bidimensionali e perovskiti 2D/3D per il controllo dell'interazione radiazione-materia

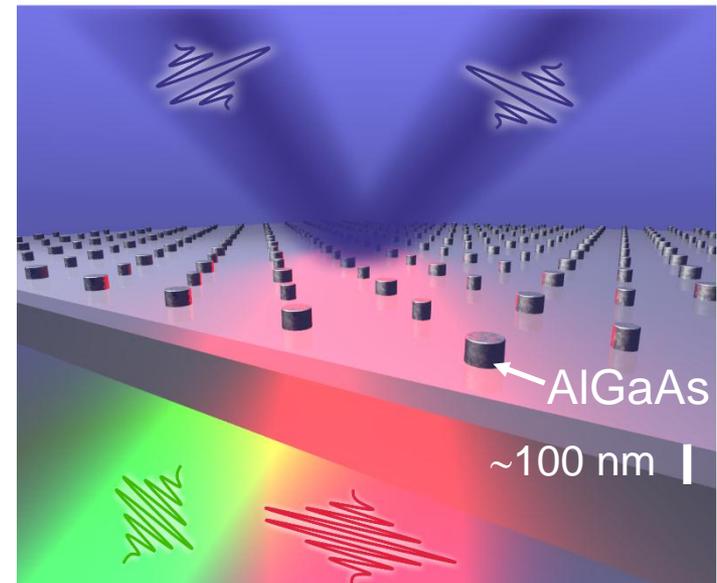


In collaborazione con CNR NANOTEC, laboratorio di Lecce (D. Sanvitto), recentemente finanziato nell'ambito del progetto PRIN INPHOPOL- Interacting Photons in Polariton Circuits (resp. Dario Gerace)



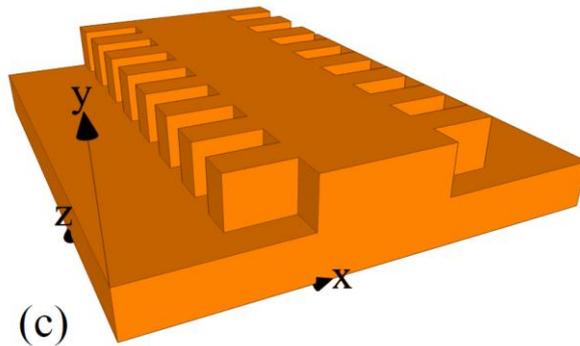
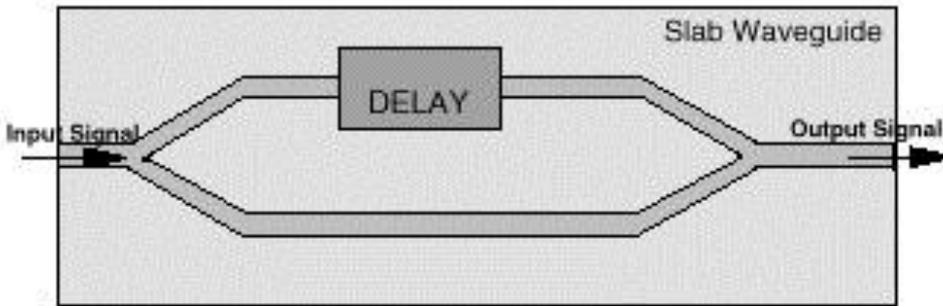
# Metasuperfici, nanoantenne, nonlinear photonics

**Obiettivi:** design e realizzazione di nanoantenne e metasuperfici dielettriche per il controllo coerente dell'emissione nonlineare alla nanoscala

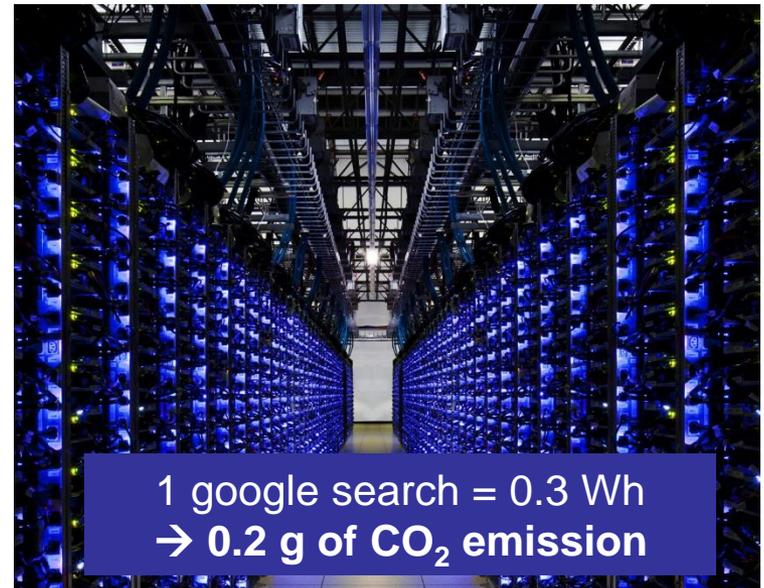


In collaborazione con Università di Brescia (C. De Angelis) e Politecnico di Milano (M. Bollani, M. Celebrano), progetto recentemente finanziato nell'ambito del progetto PRIN NOMEN (resp. Lucio Andreani)

# Silicon Photonics: slow-light electro-optical modulators



**Obiettivo:** ridurre il consumo di energia di modulatori elettro-ottici in guida d'onda di silicio tramite *slow light* in cristalli fotonici. Applicazione alla comunicazione ottica nei *data centers*



1 google search = 0.3 Wh  
→ 0.2 g of CO<sub>2</sub> emission

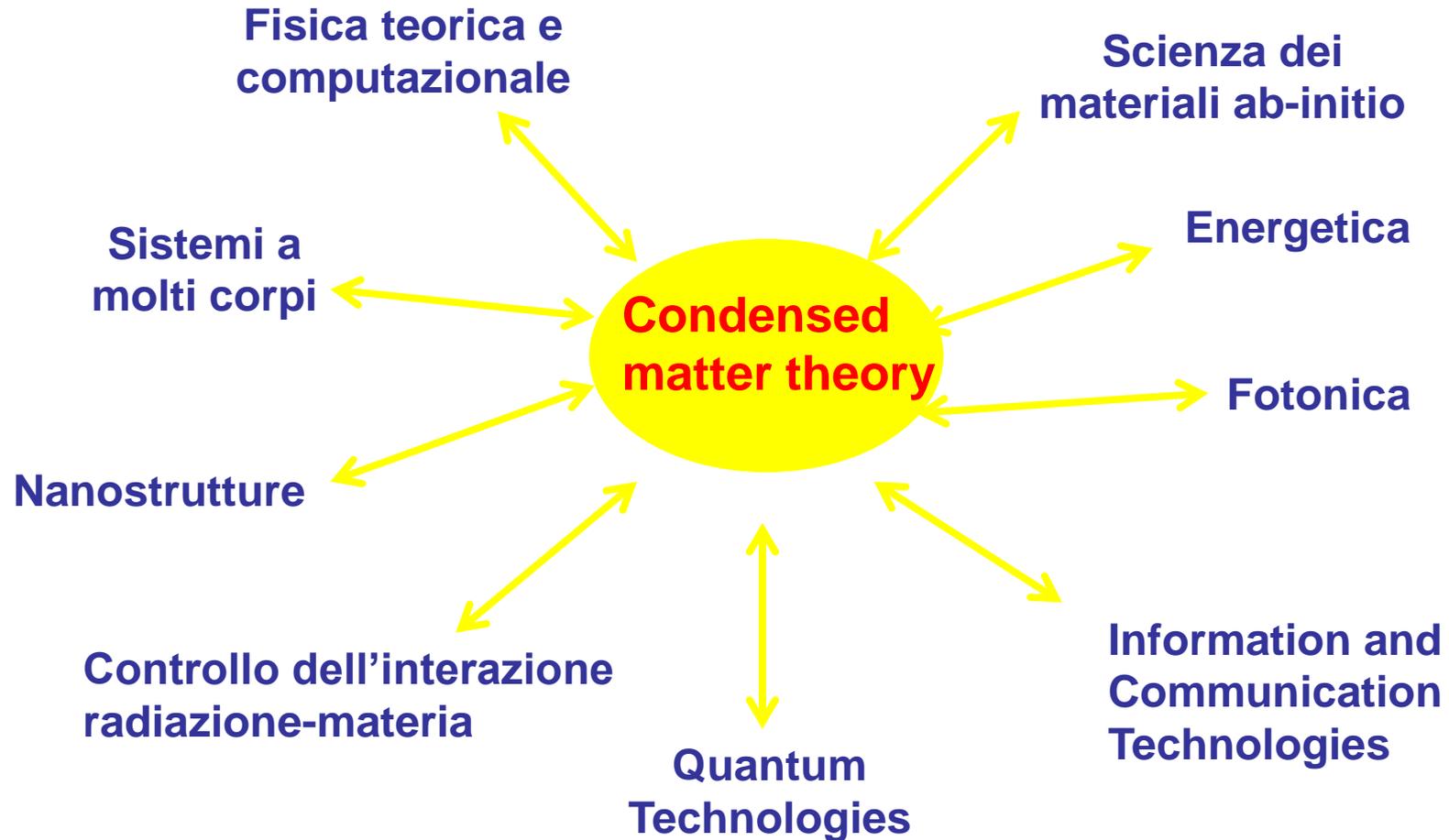
**Collaborazioni:** Cork Institute of Technology, Irlanda (W. Whelan-Curtin), ST Microelectronics, CEA-Leti...  
Progetto EU-H2020 COSMICC

# Fisica della materia teorica

RICERCA FONDAMENTALE



RICERCA APPLICATA



# Fisica Sperimentale della Materia (condensata):

proprietà dei solidi,  
fenomeni cooperativi ed eccitazioni collettive  
Nanofisica: semiconduttori, fotonica, magnetismo

## LINEE DI RICERCA PRINCIPALI:

- NMR-NQR: magnetismo, superconduttività, transizioni di fase
  - Raman/EPR: isolanti, ossidi; beni culturali
  - Spettroscopia ottica: semiconduttori, Fotonica, *Plasmonica, Metamateriali*
  - *e (ICT-, bio-) applicazioni*
-



## Permanent Staff

- Pietro Carretta
- Alessandro Lascialfari
- Manuel Mariani
- Giacomo Prando
- Marco Moscardini

## Post-docs

- Riaz Hussain

## PhD students

- Matteo Avolio
- Francesca Brero
- Efsthathios Charlaftis
- Davide Cicolari
- Lisa Rinaldi

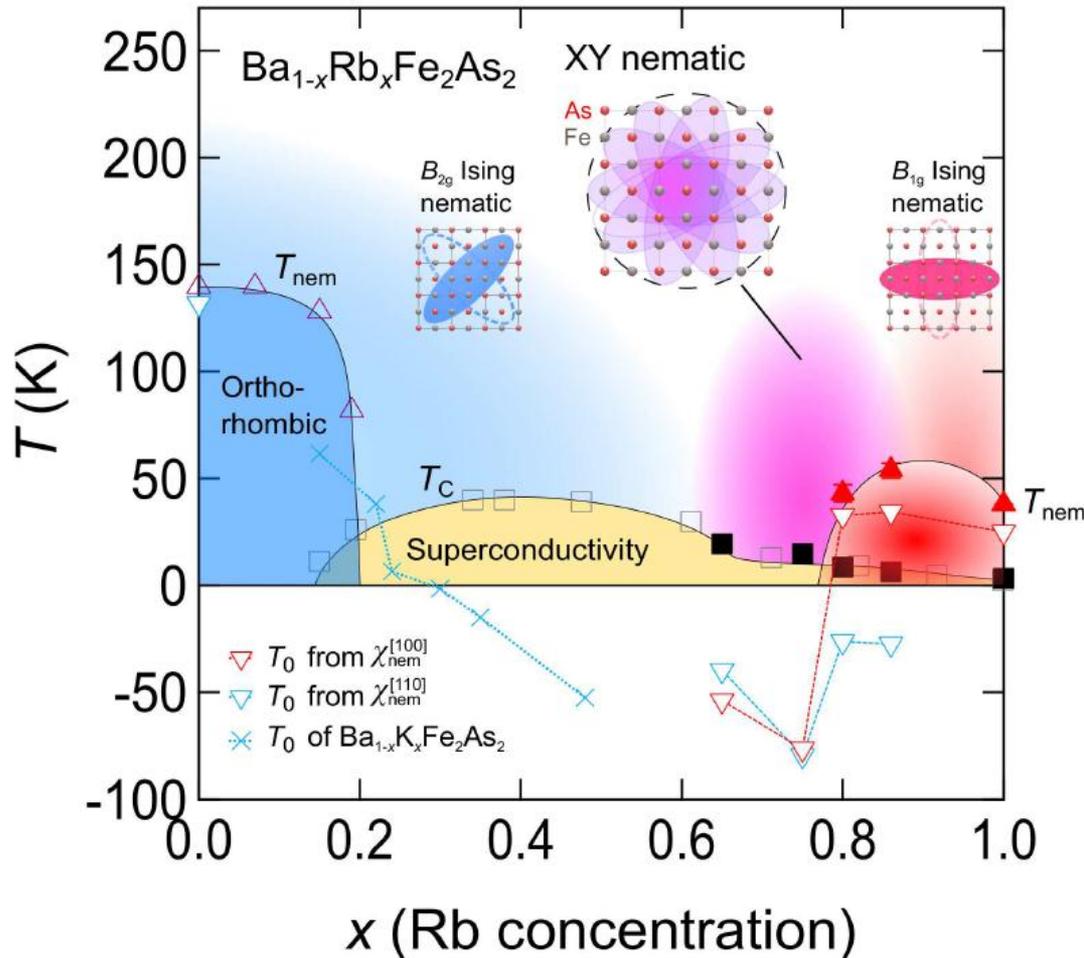
## Tecniche sperimentali

- Risonanze Magnetiche  
NMR, NQR,  $\mu$ SR, MRI, WBESR
- Magnetometria SQUID, trasporto

## Linee di Ricerca in Fisica della Materia

- **Superconduttività:** Fe-based SC, effetti di impurezze, fluttuazioni nematiche, ordine di carica, effetti orbitalmente selettivi.
- **Magnetismo:** magneti frustrati, magneti molecolari, transizioni di spin indotte otticamente, effetti di correlazione e spin-orbita.
- **Rotori molecolari**

# Diagramma di fase e proprietà microscopiche dei Superconduttori



## Ricerche sperimentali

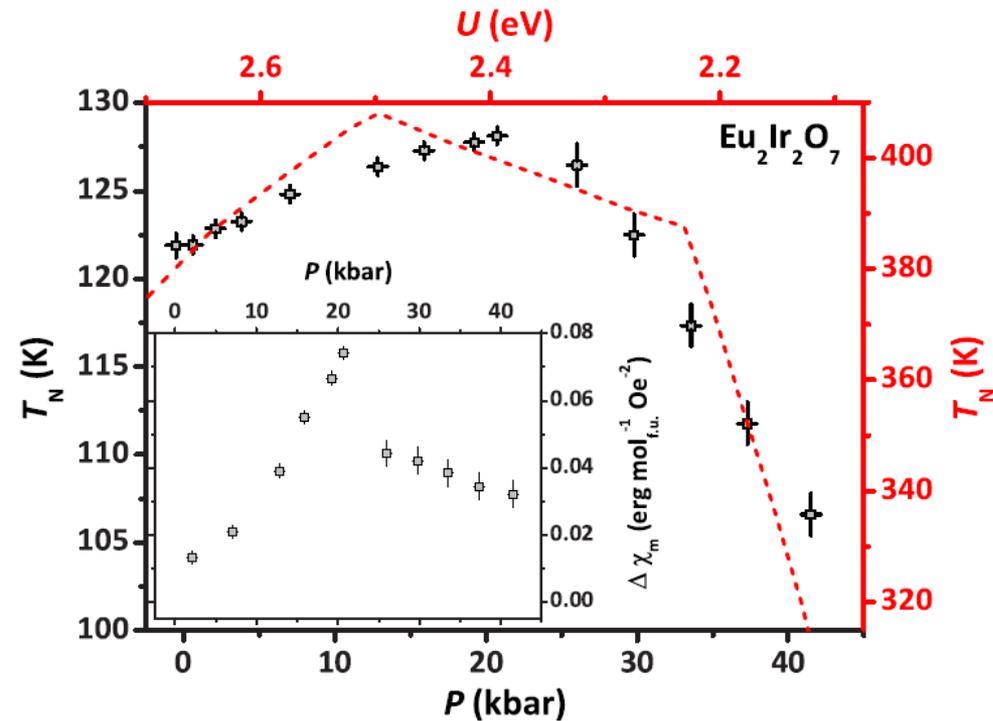
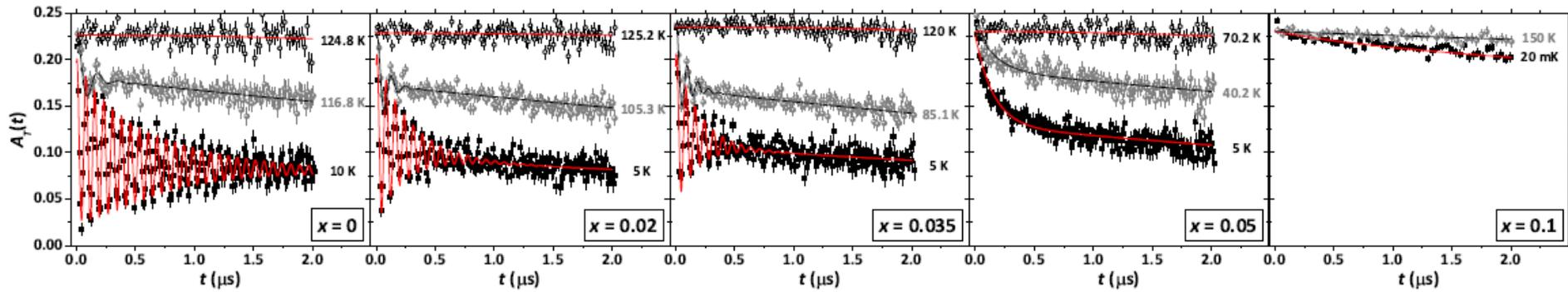
- Fasi della materia: ordine nematico di spin e elettronico.
- Transizioni di Mott orbitalmente selettive.
- Ordine di carica.
- Meccanismo della superconduttività.
- Effetti delle impurezze sulle proprietà microscopiche.

M.Moroni et al., Phys.Rev. B 96, 094523 (2017)

M.Moroni et al., Phys.Rev. B 95, 180501(R) (2017)

E.Civardi et al., Phys.Rev.Lett.117, 217001 (2016)

# Correlazioni elettroniche e spin-orbita in Iridati



**Spin-orbital Mottness:**  
 Presenza di forti correlazioni elettroniche e forte interazione spin-orbita

Implicazioni per fasi della materia topologicamente non banali (e.g. semi-metallo di Weyl)

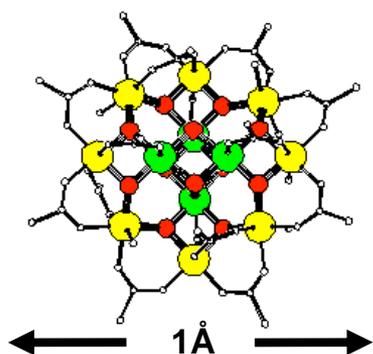
Studio locale con spettroscopia muonica della stabilità della fase magnetica vs.

- perturbazioni chimiche
- pressione idrostatica

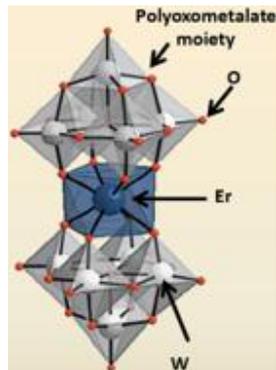
# Magnetismo Molecolare

Studio di **Nanomagneti Molecolari** a **bassa dimensionalità** (0D e 1D) per investigarne proprietà magnetiche statiche (spettri di assorbimento), dinamica di spin (tempi di rilassamento nucleare ( $T_1$ ,  $T_2$ ) e rate di rilassamento muonico ( $\lambda$ )) ed effetti quantistici (level crossing, quantum tunneling della magnetizzazione,...) in funzione di  $0.1\text{T} < H < 9\text{T}$  e  $1.5\text{K} < T < 300\text{K}$  attraverso magnetometria DC, NMR e  $\mu^+\text{SR}$ .

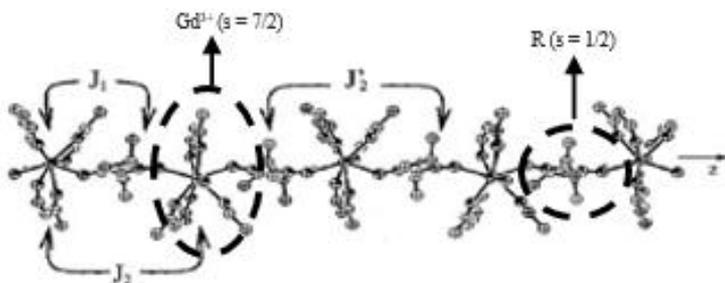
## SISTEMI STUDIATI



0D  $\text{Mn}_{12}$   
single molecule magnet



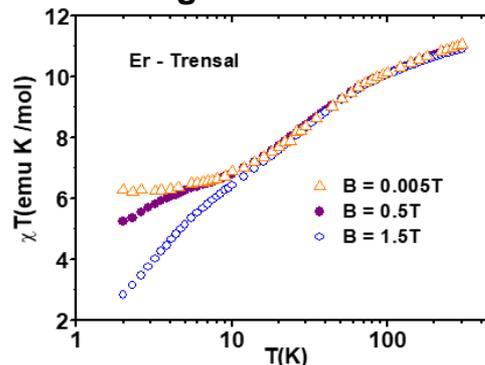
0D Er-POM  
single ion magnet



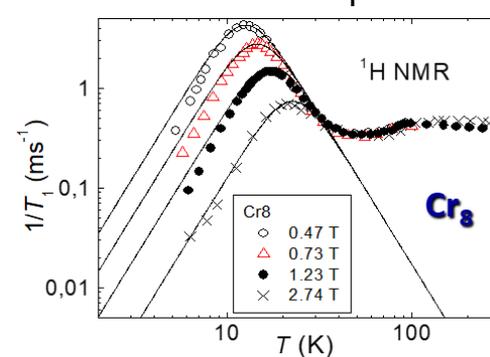
1D Gd - Radical single chain magnet

## CARATTERIZZAZIONE MAGNETICA

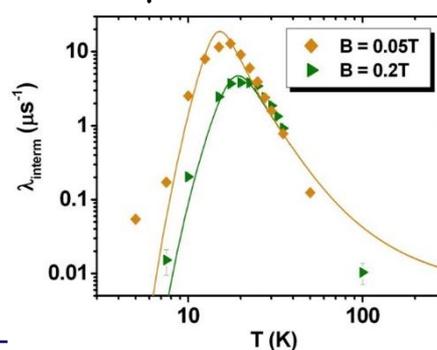
### Magnetometria DC



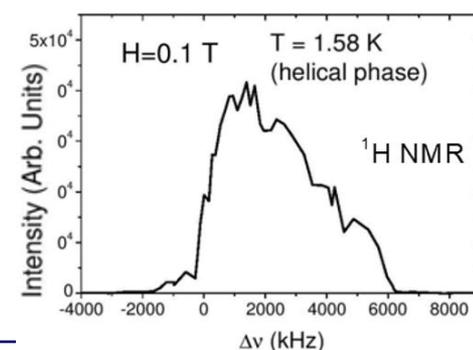
### NMR – $1/T_1$ vs T



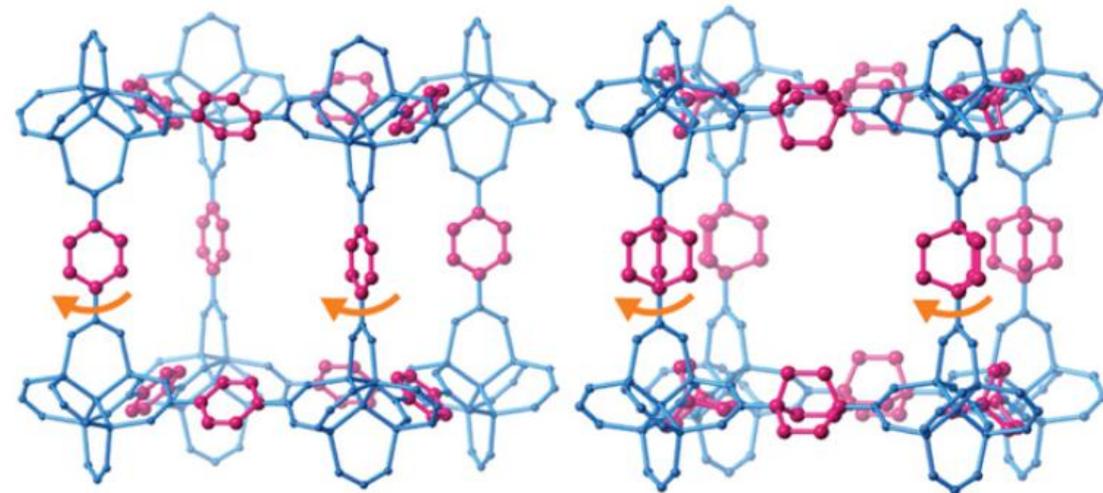
### $\mu^+\text{SR}$ – $\lambda$ vs T



### Absorption Spectra



# Rotori Molecolari

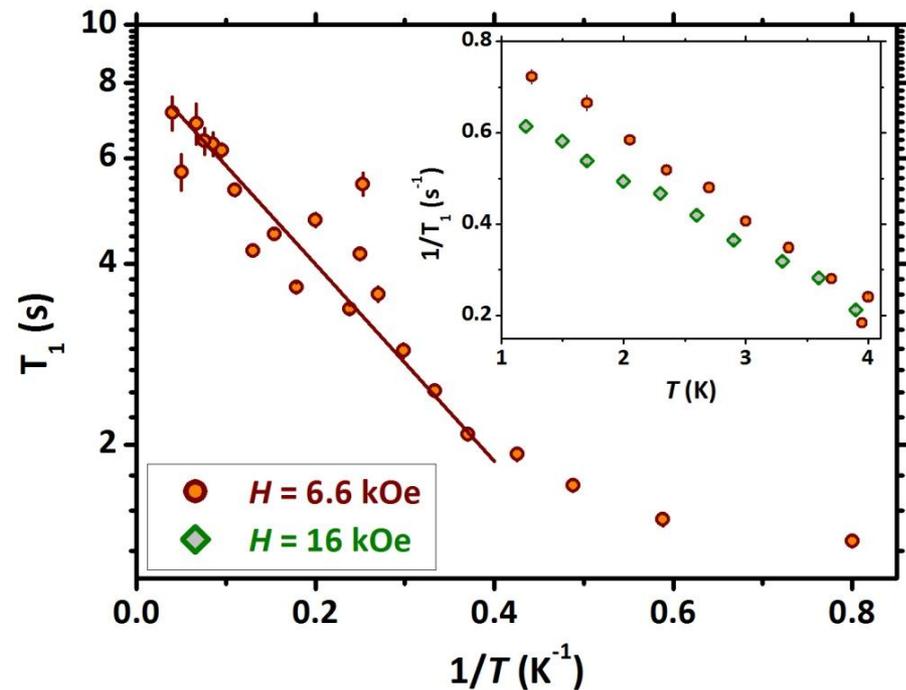


**Metal-organic frameworks:**  
strutture cristalline complesse  
con *cluster* molecolari in rotazione  
fino a temperature criogeniche

PNAS 114 13613 (2017)

Studio dei moti attraverso misure di  
risonanza magnetica nucleare:

- tempi caratteristici di rilassamento spin-reticolo  $T_1$  vs.  $T$
- effetti di *motional narrowing* su spettro





### **Permanent Staff**

- **Franco Marabelli**
- **Maddalena Patrini**
- **Vittorio Bellani**
- **Matteo Galli**
- **Davide Comoretto (UniGe)**

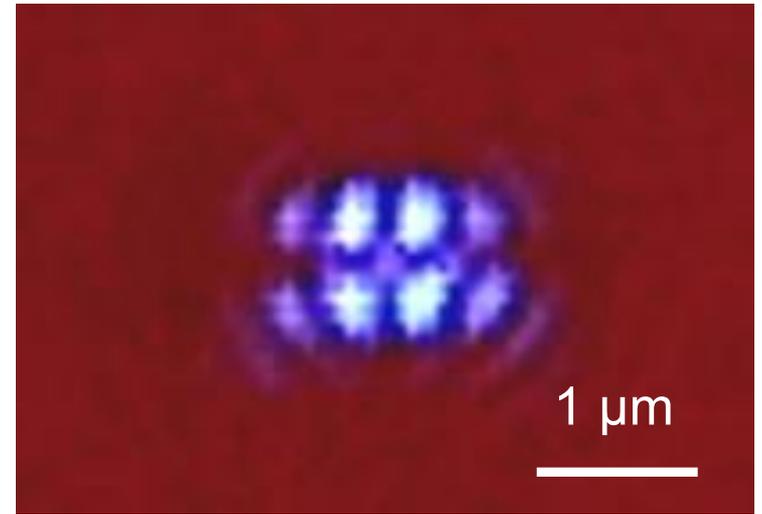
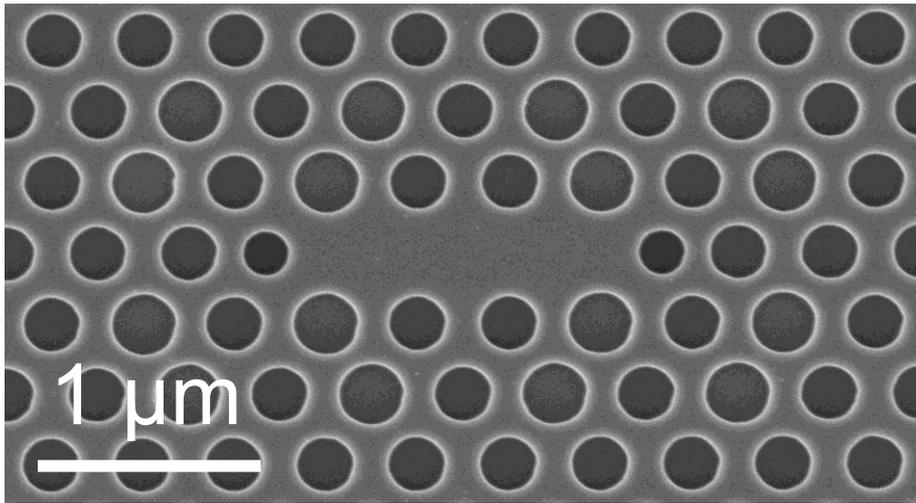
### **Tecniche sperimentali**

- **UV-VIS-NIR-MIR-FIR**
- **R & T risolta in angolo, Luce diffusa**
  - **Ellissometria spettroscopica**
  - **Assorbimento fotoindotto, FTIR**
- **Pump and probe, Photon entanglement**
- **Microscopia a forza atomica**

### **Linee di Ricerca in Fisica della Materia**

- **Fotonica integrata in Si**
- **Sistemi fotonici e plasmonici per amplificazione di campo e sensoristica**
- **Nanoparticelle, superfici nanostrutturate e Metamateriali**

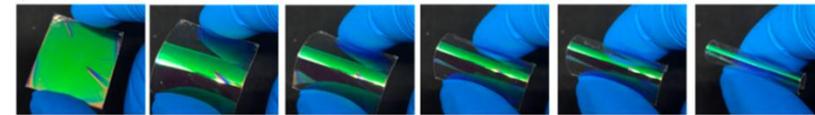
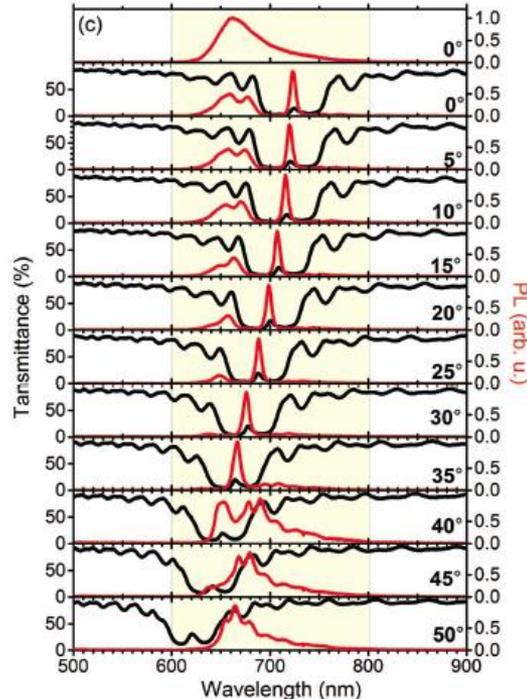
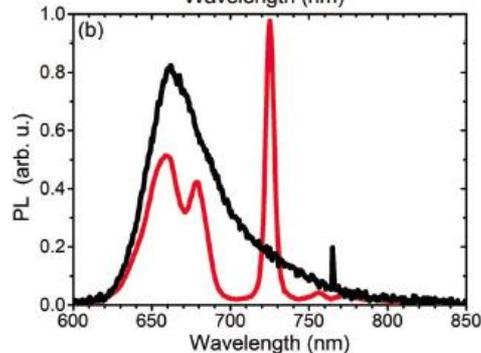
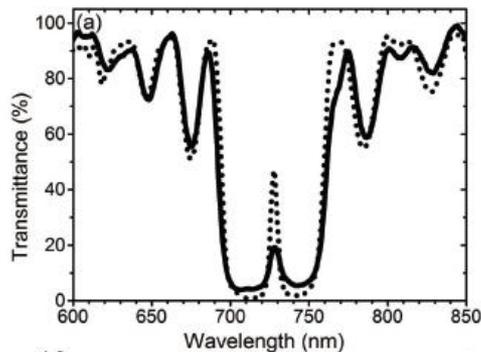
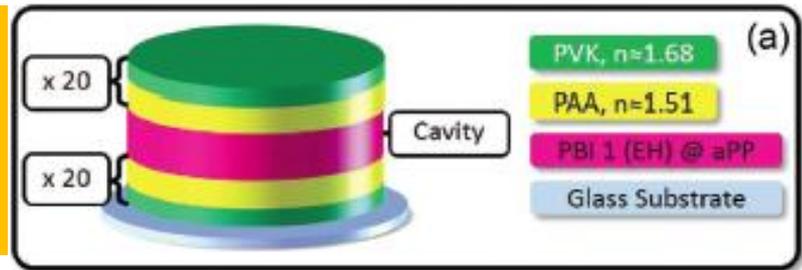
# Nonlinear photonics in photonic crystal nanocavities



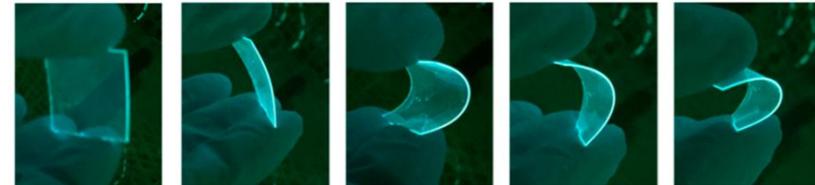
## Interazione radiazione-materia in nanocavità ad alto Q

- Generazione di armoniche a potenze ultra-basse
  - All-optical switching
  - Integrated all-optical memories
  - Silicon-based nano light sources
-

# Polimeric resonant microcavities



d)



⇒ Color-tunable light emitting devices

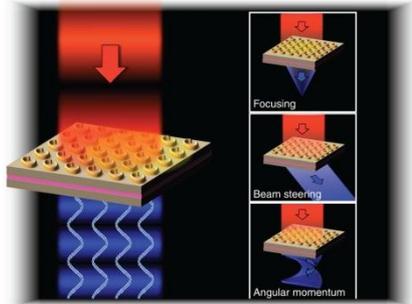
Based on a single active material

Highly flexible under mechanical bending

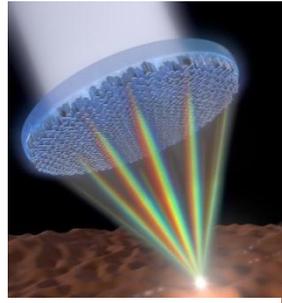
Interest for the integration of highly-emitting and easily processable supramolecular J-aggregates into polymer matrices. All-polymer processable materials are promising for the integration of solid-state active media into plastic photonic devices such as in lasing microcavity.

# Motivations: fundamentals and applicative issues

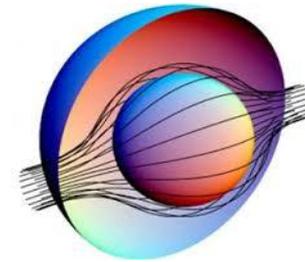
The light-matter interplay originates a multitude of effects



Beam shaping



Metalenses

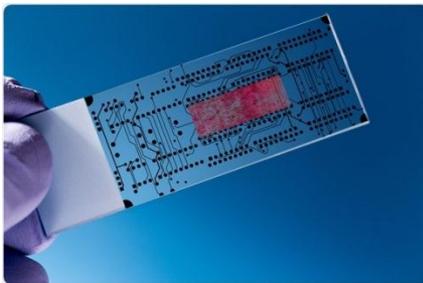


Invisibility Cloak

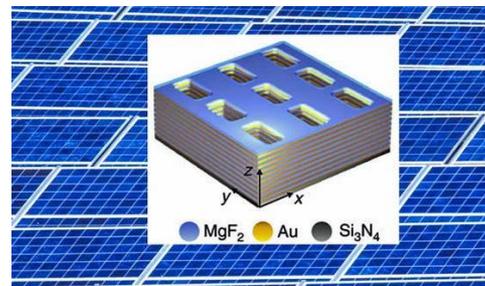


*Nature Comm.* **6**, 7667 (2015) *Nature Nanotech.* **13**, 220 (2018) *Science* 349, 1310 (2015)

Strong technological fallout



Sensing



Sustainable energy

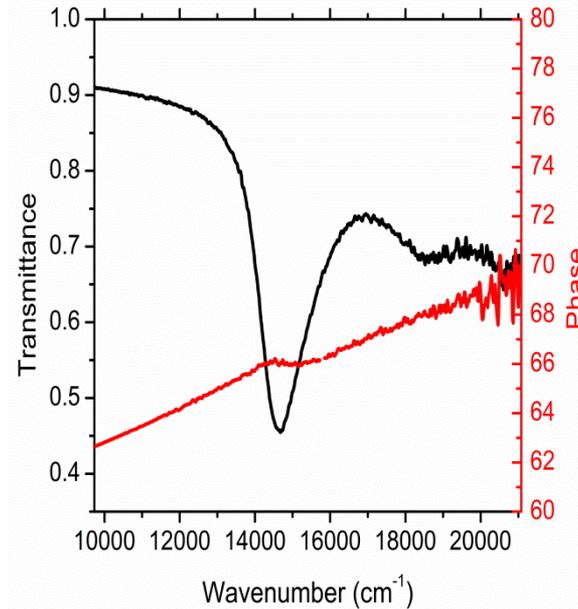
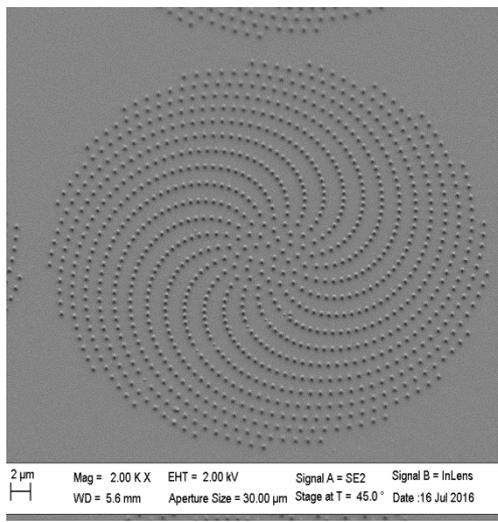
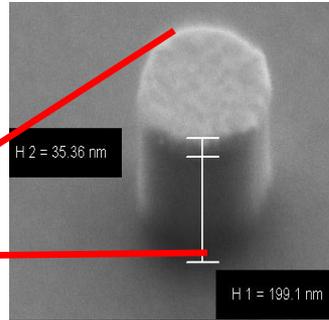
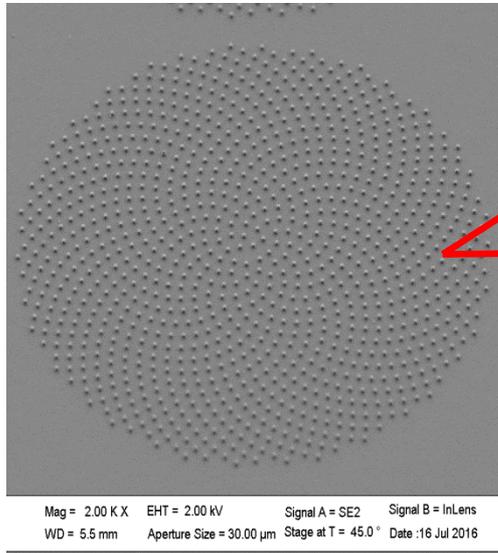


Devices

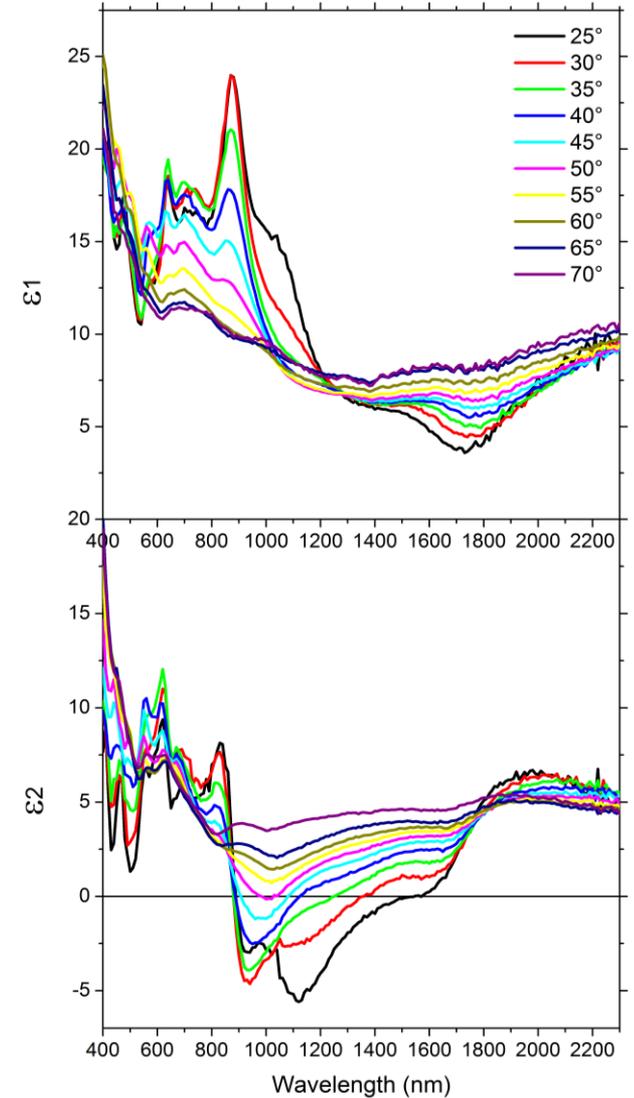
Control and enhancement of the electromagnetic field

# Hybrid plasmonic and photonic structures

## Quasi-ordered structures



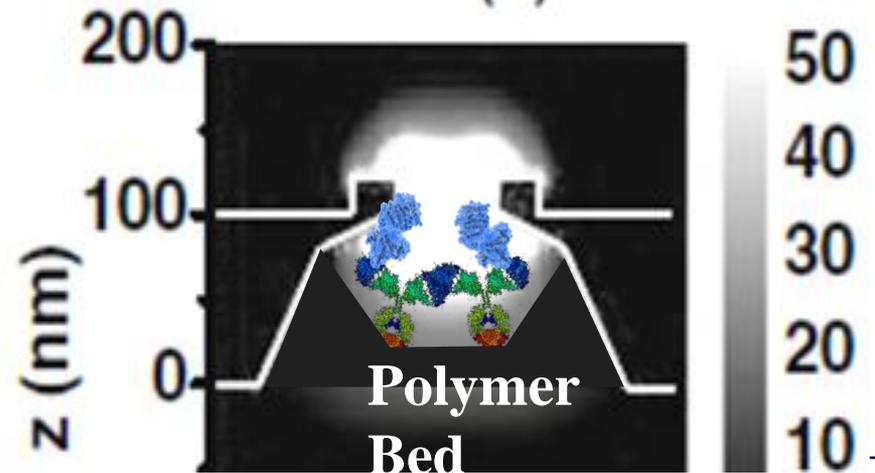
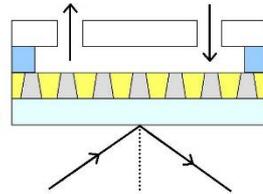
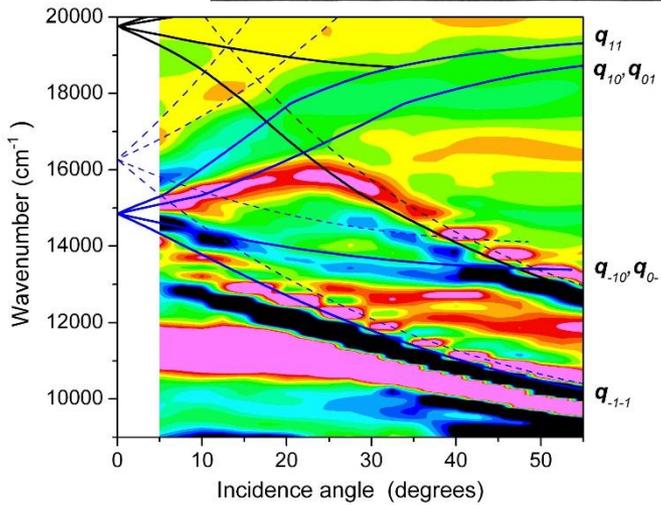
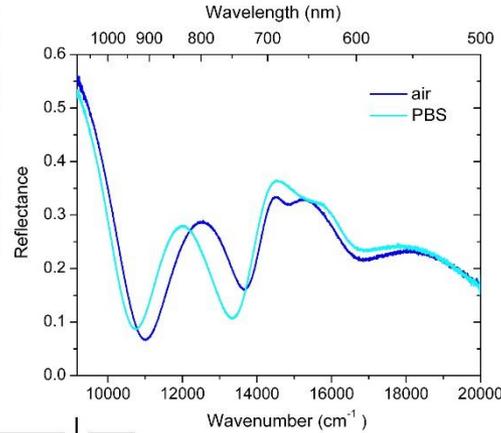
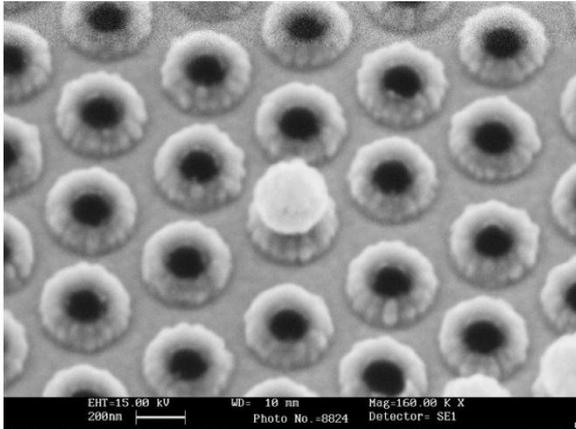
Phase effect  
Negative  $\epsilon_2$



# Plasmonic Surfaces for sensing

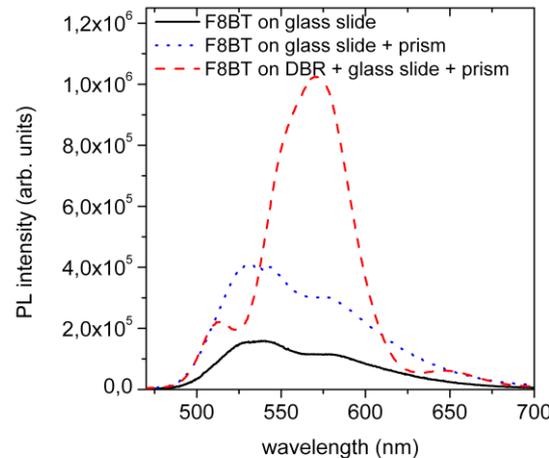
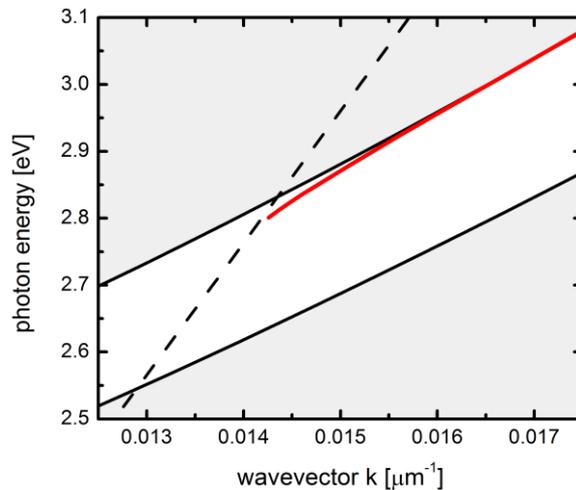
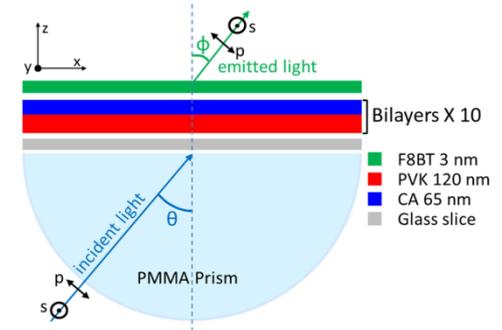
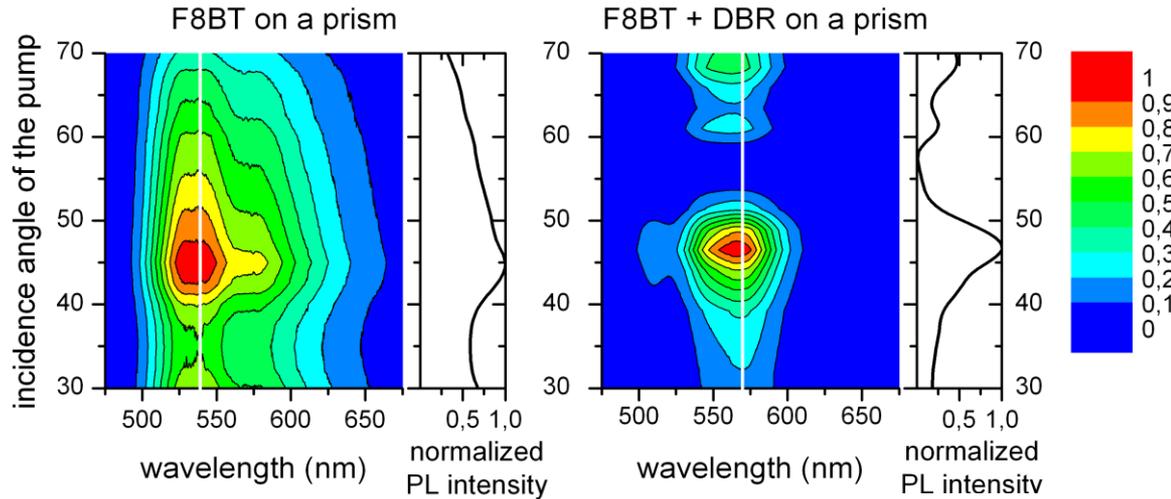


Large area Bio-sensors  
multiplexing capabilities



(Spin-off project: Plasmore s.r.l.)

# Field localization by BlochSurfaceWaves



- **Specchi di Bragg polimerici**
- **Amplificazione del campo di pompa**
- **Amplificazione del segnale PL**



## Permanent Staff

- Pietro Galinetto
- Enrico Giulotto
- Cristina Mozzati

## PhD students

- Benedetta Albini
- Tommaso Rovetta

## Tecniche sperimentali

- Micro Raman
- Raman ad alta risoluzione
- Magnetometro SQUID
- EPR (electron Paramagnetic Resonance)

## Linee di Ricerca in Fisica della Materia

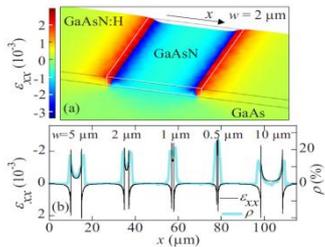
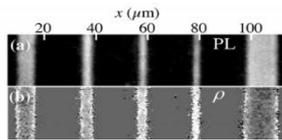
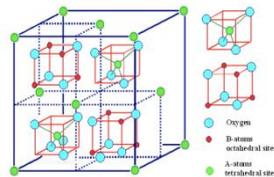
- Ossidi funzionali
- Eterostrutture GaAsN-GaAsN:H
- SERS
- Nanomedicina
- Analisi applicate a conservazione beni culturali e di interesse industriale o forense

# Laboratori RAMAN - EPR

Ossidi funzionali sia bulk sia nanostrutturati

- ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>:Ca, Sr, Al
- LiNbO<sub>3</sub>, KTaO<sub>3</sub>:Li
- TiO<sub>2</sub>
- ...

Applicazioni:  
sensoristica, fotonica  
e biomedicina



Eterostrutture di fili di  
GaAsN in GaAsN:H  
su substrato di GaAs



Analisi di materiali di interesse industriale:  
polimeri, vetri colorati, impiantistica odontoiatrica...



Sensing molecolare tramite **SERS**  
(Surface Enhanced Raman Scattering)

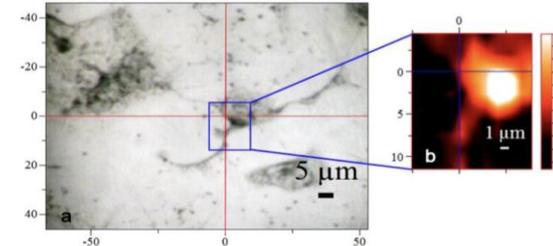
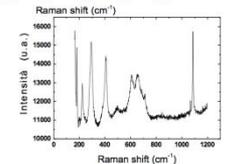
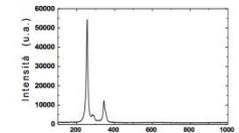


Immagine in campo chiaro di una cellula di neuroblastoma (a sinistra) in cui è avvenuta l'internalizzazione del vettore SERS (mappa in intensità del segnale SERS, a destra)

Applicazioni:  
biomedicina, food safety, scienze forensi

Reperti artistici  
di interesse  
per beni culturali



# Functional Oxides

$\text{FeNb}_{11}\text{O}_{29}$  □ possible anode material in lithium batteries suggested only in 2014

[Pinus et al., *Chem. Mater.* 2014, 26, 2203]

## Advantages:

400 mAh/g of theoretical capacity

$\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Nb}^{4+}/\text{Nb}^{5+}$  and  $\text{Nb}^{3+}/\text{Nb}^{4+}$  □ 23 electron FU higher than that of graphite.

Cell safety (High working potential of about 1.6V)

Li diffusion (open  $\text{ReO}_3$  type structure - octahedra)

## Drawback:

$\text{Li}^+$  diffusion coefficient is still low

poor electronic conductivity -

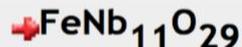
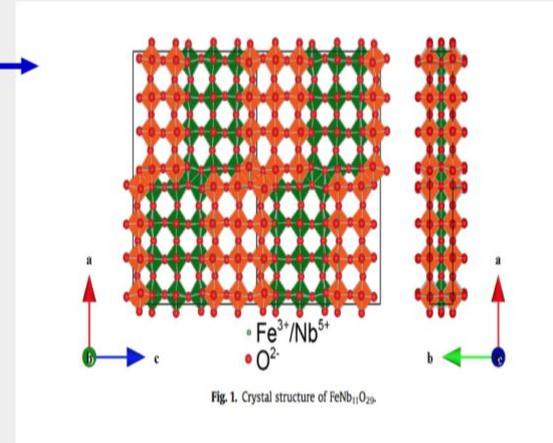
oxidation states of Fe and Nb (3+ and 5+ respectively).

## To improve electronic conductivity

carbon coating

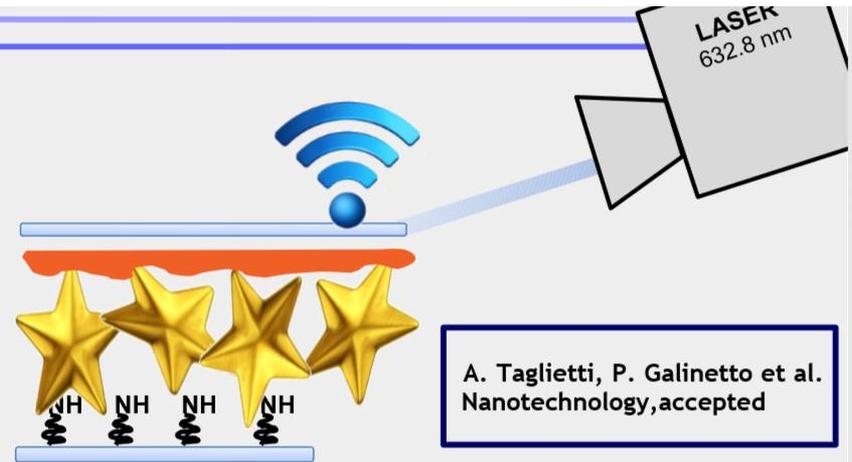
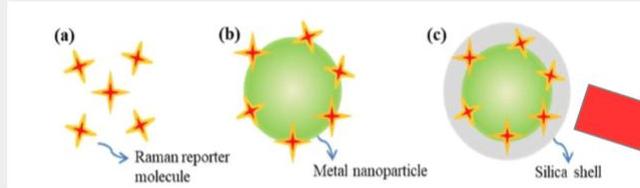
crystal structure modification by defects

doping with suitable transition elements working in the same potential window of Nb and Fe



D. Spada et al. Deepening the shear structure  $\text{FeNb}_{11}\text{O}_{29}$ : influence of polymorphism and doping on structural, spectroscopic and magnetic properties, *Dalton Transactions*, accepted DT-ART-07-2018-002896

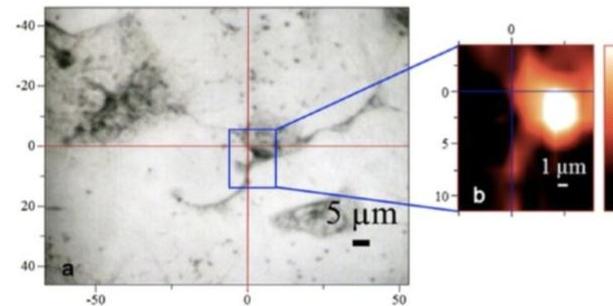
# SERS (Surface Enhanced Raman Scattering)



**Scientific Reports 7: 5259** ...Pallavicini, Patrini,  
bimodal antibacterial surfaces: Taglietti...  
i) photo-switchable activity ii) sustained biocidal release

Close collaboration with INLab - Dip. Chimica (Taglietti, Pallavicini)

**Tunable coating of gold nanostars: tailoring robust SERS labels for cell imaging,**  
Nanotechnology 2016, 1;27(26):265302.  
Bassi, Taglietti, Galinetto et al.



**Figure 6.** (a) Bright field image of SH-SY5Y cells incubated for 24 h with  $10 \mu\text{g ml}^{-1}$  of PAH@GNS/MMC/HS-PEG<sub>3000</sub>-COOH (MMC 50%) SERS label. (b) SERS image obtained mapping the area of  $14.0 \times 17.4 \mu\text{m}^2$  evidenced in the blue rectangle, using the Raman signal of MMC at  $1595 \text{ cm}^{-1}$ .

# Caratteristiche della ricerca in Fisica della Materia

- **Come in altri rami della fisica, il lavoro si sviluppa e caratterizza nell'ambito di collaborazioni nazionali ed internazionali.**
  - **Esperimento e teoria non sono mai nettamente disgiunti e, a vari gradi, richiedono di essere considerati entrambi.**
  - **Problemi di carattere fondamentale ed applicazioni non sono, in genere molto distanti.**
-

# Caratteristiche della ricerca in Fisica della Materia

**Inoltre, la scala ridotta degli esperimenti consente (e richiede):**

- **attenzione ai dettagli e intraprendenza**
  - **di affrontare e conoscere la tematica in tutti i suoi aspetti, sia di base che operative**
  - **di sviluppare competenze di progettazione, modellizzazione e realizzazione sperimentale, spaziando dalla meccanica all'informatica**
  - **di interfacciarsi, particolarmente in campo applicativo, con approcci e metodi fortemente interdisciplinari**
-