

# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

### **COURSE SYLLABUS**

# **Physical Chemistry of Materials**

2021-2-F5401Q040

#### Obiettivi

#### Obbiettivi fondamentali:

- -) Presentare i concetti fondamentali legati alla simmetria nei cristalli;
- -) Illustrare le conseguenze della presenza dei difetti nei solidi cristallini;

Conoscenze e capacità di comprensione. Al termine del corso lo studente conosce:

- i concetti fondamentali fisico/matematici legati alla simmetria nei cristalli;
- i principi fisici delle tecniche di diffrazione, in particolare riguardo l'analisi diffrattoimetrica per la determinazione della struttura;
- le principali strutture compatte;
- le conseguenze della presenza dei difetti nei solidi;
- l'effetto dei difetti sulle proprietà funzionali dei materiali.

Conoscenze e capacità di comprensione applicate. Al termine del corso lo studente è in grado di:

- risolvere semplici problemi di geometria dello stato solido;
- risolvere semplici problemi di strutturistica in stato solido;
- classificare i difetti in base alla loro caratteristiche;

Autonomia di giudizio. Al termine del corso, lo studente è in grado di:

- scegliere le condizioni di analisi più appropriate per risolvere la struttura di sistemi cristallini;
- correlare le proprietà strutturali dei materiali con quelle funzionali.

Abilità comunicative. Al termine del corso lo studente è in grado di:

- commentare i risultati di semplici problemi di strutturistica;
- illustrare i concetti fondamentali della diffrazione dei cristalli;
- descrivere l'effetto della presenza dei difetti nei sistemi cristallini.

Capacità di apprendere. Al termine del corso lo studente è in grado di:

- leggere le tabelle internazionali di cristallografia comprendendone le informazioni più significative;
- interpretare alcune semplici proprietà funzionali in base alla struttura dei solidi.

#### Contenuti sintetici

Cristallografia: simmetrie, sistemi cristallini e gruppi spaziali. Esercizi sulla geometria cristallina

Diffrazione di raggi X: la legge di Bragg e il fattore di struttura. Esercizi sul calcolo del fattore di struttura

Difetti nei solidi

#### Programma esteso

#### STRUTTURA CRISTALLINA DEI SOLIDI IDEALI E METODI SPERIMENTALI DI DIFFRAZIONE

Solidi cristallini: struttura atomica e simmetria traslazionale. Cella elementare. Reticolo diretto e proprietà geometriche. Operazioni ed elementi di simmetria cenni di teoria dei gruppi e gruppi di simmetria puntuali. Reticoli di Bravais. Gruppi di simmetria spaziali. Diffrazione di raggi X, elettroni e neutroni da parte dei cristalli. Legge di Von Laue e legge di Bragg. Sfera di Ewald. Il reticolo reciproco. Fattore di diffusione atomico e fattore di struttura. Densità elettronica. Effetto del moto termico degli atomi. Simmetria strutturale ed estinzioni sistematiche. Cenni ai metodi sperimentali di diffrazione (metodo delle polveri). Tipi strutturali più importanti derivati dall'esagonale compatto e dal cubico compatto.

#### DIFETTI PUNTUALI ED ESTESI NEI SOLIDI

Natura dei difetti di punto (vacanze, interstiziali, coppie di Frenkel e coppie di Schottky) e termodinamica del loro processo di formazione. Mobilità ionica e conducibilità ionica nei solidi. Difetti estesi: difetti di sequenza, dislocazioni, bordi di grano. Proprietà principali delle dislocazioni.

#### **Prerequisiti**

Sono richieste conoscenze matematiche, fisiche e chimico/fisiche.

Conoscenze matematiche: algebra vettoriale e matriciale, operazione con i numeri complessi.

Conoscenze fisiche: principi di elettromagnetismo, equazioni che descrivono fenomeni di propagazione di onde.

Leggi della termodinamica

#### Modalità didattica

Il corso prevede un ciclo di lezioni frontali (5 CFU) intervallato da esercitazioni in classe (1 CFU) in cui il docente illustra gli strumenti necessari per interpretare ie risolvere i problemi.

Nel periodo di emergenza Covid-19 le lezioni si svolgeranno da remoto asincrono con eventi in videoconferenza sincrona.

#### Materiale didattico

Dispense fornite dai docenti

Immirzi Tedesco "La diffrazione nei cristalli", libreriauniversitaria.it (capitoli 1-7, 11, 15)

#### Periodo di erogazione dell'insegnamento

secondo semestre

#### Modalità di verifica del profitto e valutazione

L'insegnamento prevede un esame scritto e una verifica dell'apprendimento orale. Il superamento della prova scritta (voto >18/30) è propedeutico all'ammissione alla prova orale. L'esame scritto deve essere superato nella stessa sessione in cui si sostiene l'esame orale. Sono previste due verifiche scritte durante il ciclo di lezioni, una intermedia a metà corso e una alla fine. Chi supera positivamente le due verifiche (voto > 18/30 in entrambe) è esentato dalla prova scritta per la corrispondente sessione.

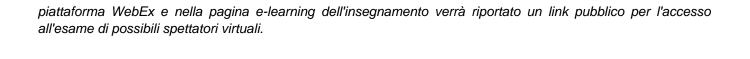
L'esame scritto consiste in:

- risoluzione di problemi di simmetria puntuale e/o spaziale,
- determinazione di parametri geometrici (distanze e angoli di legame) in stato solido,
- utilizzo della legge di Bragg e determinazione di fattori di struttura.

L'esame orale mira a verificare le conoscenze acquisite riguardo

- i principi fisici delle tecniche di diffrazione, con particolare riguardo alle tecniche legate all'analisi con raggi X,
- il ruolo e gli effetti della presenza dei difetti nei solidi.

Nel periodo di emergenza Covid-19 gli esami orali saranno solo telematici. Verranno svolti utilizzando la



## Orario di ricevimento

su appuntamento