

## COURSE SYLLABUS

### Solid State Physical Chemistry

2425-1-F5401Q067

---

#### Obiettivi

Obbiettivi fondamentali:

1. Presentare i fondamenti termodinamici del comportamento delle miscele binarie;
2. Presentare i concetti fondamentali legati alla simmetria nei cristalli;
3. Illustrare le conseguenze della presenza dei difetti nei solidi cristallini;

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

- i fondamenti termodinamici del comportamento delle miscele binarie, dalle soluzioni ideali a quelle regolari;
- i concetti fondamentali fisico/matematici legati alla simmetria nei cristalli;
- i principi fisici delle tecniche di diffrazione, in particolare riguardo l'analisi ai raggi X 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:

- leggere e interpretare diagrammi di fase binari temperatura/composizione in presenza di fasi solide e liquide;
- risolvere semplici problemi di geometria di 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:

- determinare le condizioni termodinamiche di equilibrio per la coesistenza di varie fasi;
- 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:

- spiegare le varie zone dei diagrammi di fase solido/liquido in miscele binarie;
- 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:

- comprendere qualsiasi diagramma di fase binario temperatura/composizione;
- leggere le tabelle internazionali di cristallografia comprendendone le informazioni più significative;
- interpretare alcune semplici proprietà funzionali in base alla struttura dei solidi.

## **Contenuti sintetici**

Termodinamica: miscele a più componenti: dalle soluzioni ideali ai diagrammi di fase complessi

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**

### **COMPLEMENTI DI TERMODINAMICA**

Principi di equilibrio termodinamico e regola delle fasi. Classificazione dei diagrammi di fase. Soluzioni regolari e diagrammi di fase binari di complessità varia.

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

Solidi cristallini: struttura atomica e simmetria traslazionale. Cella elementare. Reticolo diretto e reticolo reciproco e loro 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. 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.

Termodinamica di base: principi della termodinamica, diagrammi di fase a un componente, energia libera di Gibbs di miscelamento (caso dei gas perfetti).

## Modalità didattica

Il corso è così suddiviso:

20 lezioni da 2 h in modalità erogativa in presenza

3 attività di laboratorio da 4 h in modalità interattiva in presenza

## Materiale didattico

Dispense fornite dai docenti

Immirzi Tedesco "*La diffrazione nei cristalli*", [libreriauniversitaria.it](http://libreriauniversitaria.it) (capitoli 1-7, 11, 15)

Testi forniti dal docente

## Periodo di erogazione dell'insegnamento

secondo semestre

## Modalità di verifica del profitto e valutazione

Il corso prevede un esame orale costituito da un colloquio sugli argomenti svolti a lezione.

Durante il colloquio saranno svolti dei semplici esercizi che riguardano l'applicazione di:

- principi dell'equilibrio termodinamico dei sistemi a due componenti,
- principi fisici delle tecniche di diffrazione, con particolare riguardo alle tecniche legate all'analisi con raggi X,
- ruolo e gli effetti della presenza dei difetti nei solidi.

## Orario di ricevimento

su appuntamento

**Sustainable Development Goals**

---