



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

|   |   |                      |                  |
|---|---|----------------------|------------------|
| <b>DIPARTIMENTO</b>                                     | Fisica e Chimica - Emilio Segrè   |                      |                  |
| <b>ANNO ACCADEMICO OFFERTA</b>                          | 2020/2021   |                      |                  |
| <b>ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE</b>                       | 2020/2021   |                      |                  |
| <b>CORSO DILAUREA MAGISTRALE</b>                        | CHIMICA   |                      |                  |
| <b>INSEGNAMENTO</b>                                     | CHIMICA DELLO STATO SOLIDO E DEI MATERIALI INORGANICI   |                      |                  |
| <b>TIPO DI ATTIVITA'</b>                                | B   |                      |                  |
| <b>AMBITO</b>   | 50483-Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche   |                      |                  |
| <b>CODICE INSEGNAMENTO</b>                              | 15343   |                      |                  |
| <b>SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI</b>                 | CHIM/03   |                      |                  |
| <b>DOCENTE RESPONSABILE</b>                             | MARTORANA ANTONINO  | Professore Ordinario | Univ. di PALERMO |
| <b>ALTRI DOCENTI</b>                                    |   |                      |                  |
| <b>CFU</b>  | 6   |                      |                  |
| <b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>    | 94  |                      |                  |
| <b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA</b> | 56  |                      |                  |
| <b>PROPEDEUTICITA'</b>                                  |   |                      |                  |
| <b>MUTUAZIONI</b>                                       |   |                      |                  |
| <b>ANNO DI CORSO</b>                                    | 1   |                      |                  |
| <b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>                            | 1° semestre   |                      |                  |
| <b>MODALITA' DI FREQUENZA</b>                           | Obbligatoria  |                      |                  |
| <b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>                              | Voto in trentesimi  |                      |                  |
| <b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>             | <b>MARTORANA ANTONINO</b><br>Lunedì 15:30 17:30 studio docente viale delle Scienze, edificio 17<br>Martedì 15:30 17:30 studio docente viale delle Scienze, edificio 17<br>Mercoledì 15:30 17:30 studio docente viale delle Scienze, edificio 17<br>Giovedì 15:30 17:30 studio docente viale delle Scienze, edificio 17<br>Venerdì 15:30 17:30 studio docente viale delle Scienze, edificio 17 |                      |                  |

**DOCENTE:** Prof. ANTONINO MARTORANA

|  |  |
|--|--|
| <b>PREREQUISITI</b>                      | Conoscenze di base di Chimica, Fisica e Meccanica Quantistica. Fondamenti di Analisi Matematica.   |
| <b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b> | <p>Conoscenza e capacita' di comprensione</p> <p>Acquisizione dei concetti di base della chimica dello stato solido</p> <p>Capacita' di applicare conoscenza e comprensione</p> <p>Acquisizione degli strumenti culturali necessari ad intraprendere una attivita' di ricerca nel settore della scienza dei materiali. Comprensione della letteratura del settore. Capacita' di progettare procedure di sintesi e misure sperimentali per la determinazione delle proprieta' strutturali/funzionali di materiali inorganici</p> <p>Autonomia di giudizio</p> <p>Capacita' di valutare criticamente i risultati della letteratura scientifica.</p> <p>Abilita' comunicative</p> <p>Capacita' di comunicare in modo sintetico e appropriato le conoscenze acquisite</p> <p>Capacita' d'apprendimento</p> <p>Capacita' di autoorganizzare l'acquisizione di ulteriori conoscenze nel settore della chimica della chimica dello stato solido</p>   |
| <b>VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO</b>    | <p>La verifica finale consiste in una prova orale. L' esame-colloquio si svolge sul duplice piano di i. accertamento della conoscenza dei concetti svolti a lezione e ii. verifica della capacita' di applicare tali concetti a casi specifici. Quest'ultima verifica riguarda in particolare la capacita' di analizzare la struttura di solidi inorganici con possibili applicazioni come materiali funzionali e la capacita' di interpretarne la correlazione tra struttura elettronica e/o atomica e le proprieta' funzionali.</p> <p>La valutazione finale viene graduata prendendo in considerazione:</p> <p>a) Conoscenza di base dei concetti relativi ai principi della chimica dello stato solido e limitata capacita' di applicarli autonomamente ai casi discussi nel corso del colloquio (voto 18-21);</p> <p>b) Buona conoscenza dei concetti svolti a lezione e discreta capacita' di applicarli autonomamente ai casi proposti nel corso dell'esame (voto 22-25);</p> <p>c) Conoscenza approfondita della teoria e capacita' di applicarla ai casi proposti, anche se in modo non completamente autonomo (voto 26-28);</p> <p>d) Conoscenza approfondita della teoria e capacita' di applicarla prontamente e correttamente ai casi proposti, ottima proprieta' di espressione (voto 29-30L).</p> |
| <b>OBIETTIVI FORMATIVI</b>               | <p>Il corso costituisce una introduzione alla chimica dello stato solido. Allo studente vengono proposti i concetti di base della chimica dello stato solido, con particolare attenzione alle possibili applicazioni nel campo della scienza dei materiali. Sono quindi obiettivi formativi del corso l'acquisizione di conoscenze su:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Struttura atomica ed elettronica nei solidi, in relazione al legame chimico nei solidi.</li> <li>• Principi fondamentali che governano le proprieta' e la reattivita' nei solidi.</li> <li>• Relazioni struttura-proprietà nei solidi</li> <li>• Conoscenze specifiche su alcune importanti classi di materiali inorganici</li> </ul> <p>Al fine di un piu' efficace conseguimento degli obiettivi formativi, potranno essere invitati esperti a tenere seminari su argomenti specifici, in compresenza con il docente.</p>  |
| <b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>    | <p>L'insegnamento e' semestrale e si svolge nel primo semestre del I anno del CdL magistrale in Chimica.</p> <p>L'attivita' didattica si sviluppa attraverso lezioni frontali ed esercitazioni. Le esercitazioni hanno lo scopo di far acquisire agli studenti la capacita' di analizzare la struttura e il legame chimico nei solidi; tale analisi viene posta in relazione alle proprieta' dei materiali e quindi finalizzata alla previsione delle caratteristiche dei materiali inorganici utilizzati per specifiche applicazioni. Il coinvolgimento diretto degli studenti nelle esercitazioni mira anche all'affinamento della proprieta' di esposizione di risultati e percorsi concettuali.</p>  |
| <b>TESTI CONSIGLIATI</b>                 | <p>A. West. Solid State Chemistry and its applications, Wiley, 1990</p> <p>J. Gersten, F. Smith. The Physics and chemistry of materials, Wiley, 2001.</p> <p>C. Kittel. Introduction to solid state physics, Wiley, 1976.</p> <p>L. Smart, E. Moore. Solid state chemistry, Stanley Tormes Ltd. 1995</p> <p>U. Schubert, N. Hüsing. Synthesis of Inorganic materials, Wiley, 2000</p>  |

### PROGRAMMA

| ORE | Lezioni   |
|-----|---|
| 1   | Introduzione al corso. Correlazioni struttura proprieta' per varie tipologie di materiali inorganici.   |
| 2   | Reticoli di Bravais. Celle primitive e convenzionali. Operazioni di simmetria puntuale e traslazionale. Cristalli ideali: reticolo di Bravais+base di atomi.                            |
| 2   | Tipologie di legame chimico e loro proprieta' nei solidi. Poliedri di coordinazione di ordine 6, 8, 4. Regole di Pauling. Raggi ionici e poliedri di coordinazione. Tabelle di Shannon. |

## PROGRAMMA

| ORE | Lezioni  |
|-----|--|
| 4   | Difetti puntuali. Difetti Frenkel e Scottky. Termodinamica dei difetti di punto. Centri di colore. Interazione di difetti. Introduzione di protoni in BaZrO <sub>3</sub> e di vacanze di ossigeno in CeO <sub>2</sub> . • Difetti estesi. Edge dislocation e screw dislocation. Meccanismo di crescita di un cristallo, resistenza agli sforzi di taglio. Impacchettamento compatto. Stacking faults.                |
| 1   | Legge di Bragg. Trattazione della diffrazione di von Laue. Definizione e proprietà del reticolo reciproco. Equivalenza delle trattazioni di von Laue e di Bragg.   |
| 5   | Fononi. Analisi dei modi fononici in una fila unidimensionale di atomi. Valore medio di energia per un modo a temperatura T. Legge di dispersione. Base di atomi biatomica. Ramo ottico e acustico. Densità di modi nello spazio dei vettori d'onda. Calore specifico a volume costante. Approssimazioni di Debye e di Einstein.   |
| 2   | Diffusione. Termodinamica dei processi diffusivi. Leggi di Fick. Applicazione dei processi diffusivi alla sintesi di solidi.   |
| 4   | Elettroni quasi liberi nei metalli. Modello di Sommerfeld. Successi e insuccessi del modello di Sommerfeld: Calore specifico nei metalli, effetto Hall.  |
| 4   | Gap di energia dovuto alla presenza del potenziale periodico. Periodicità dell'energia in funzione del vettore d'onda elettronico. Bande di energia. Diagramma a bande esteso, ridotto e ripetuto. Distinzione tra conduttori, isolanti e semiconduttori.  |
| 4   | Contributo alla densità di corrente elettrica da parte di una banda completamente o parzialmente occupata. Contributo di una banda alla densità di corrente di conduzione elettronica. Elettroni e lacune. Semiconduttori intrinseci.  |
| 2   | Conduzione ionica a stato solido. Elettroliti a stato solido. Materiali per celle a combustibile. Materiali anodici e catodici. Loro proprietà in termini di: reattività nei processi di ossidoriduzione, conduzione mista ionica-elettronica, compatibilità chimica e meccanica con i materiali elettrolitici. Effetto Seebeck ed effetto Peltier. Materiali termoelettrici inorganici e ibridi inorganico-organici |
| 1   | Panoramica finale e conclusione del corso  |

| ORE | Esercitazioni  |
|-----|--|
| 5   | Strutture cristalline di elementi e di composti: strutture in impacchettamento compatto, strutture di tipo NaCl, CsCl, CaF <sub>2</sub> , CaTiO <sub>3</sub> , MgAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> . Sfalierite e wurtzite. Strutture perovskitiche. Individuazione dei poliedri di coordinazione in strutture tipo NaCl, ZnO, spinelli, spinelli inversi. Raggio ionico e fattore di tolleranza di Goldschmidt nelle strutture perovskitiche |
| 2   | Formalismo di Kroeger-Vink. Drogaggio e bilanciamento di carica. Introduzione di protoni in BaZrO <sub>3</sub> e di vacanze di ossigeno in CeO <sub>2</sub>  |
| 3   | Piani reticolari. Indici di Miller. Sfera di Ewald. Geometrie sperimentali basate sulla sfera di Ewald: caso di un monocristallo e delle polveri. Fattore di struttura.  |
| 4   | Zone di Brillouin. Spettroscopie vibrazionali nei solidi. Scattering anelastico di neutroni. Misura sperimentale di spettri fononici.  |
| 4   | Coefficiente di diffusione nei solidi ed energia di attivazione<br>Processi diffusivi nei solidi: strutture a strati e loro modifica. Materiali grafici e argille.<br>Processi diffusivi nelle pile. Meccanismo di carica e scarica di una pila.<br>Conduttori superionici   |
| 2   | Schema dell'apparato sperimentale per la misura dell'effetto Hall.   |
| 2   | Drogaggio p ed n di semiconduttori. Giunzioni p-n e applicazioni: celle fotovoltaiche, laser a semiconduttore.   |
| 2   | Architettura dei livelli elettronici in dispositivi a giunzione. Fotocatalisi. Celle di Graetzel.  |