

Programma di “**Materiali inorganici: struttura e proprietà**” (8 CFU)
Corso di Laurea Magistrale in “**Scienze Chimiche**”
Curriculum **Chimica dei Materiali e Nanotecnologie**
a.a. 2019/2020
Prof. Guglielmo Guido Condorelli

Teoria (6 CFU) ed Attività di Laboratorio (2 CFU)

Descrizione delle strutture cristalline

Generalità sui cristalli. Reticoli cristallini e set di base. Vettore di traslazione. Cella unitaria e parametri reticolari. I 5 reticoli bidimensionali. Reticoli tridimensionali: i 7 sistemi cristallini ed i reticoli di Bravais.

Simmetria. Elementi di simmetria di punto e gruppi puntuali. Notazione di Schönflies e notazione cristallografica di Hermann-Mauguin. I gruppi puntuali di interesse cristallografico. Elementi di simmetria traslazionale e gruppi spaziali. I gruppi spaziali Bravaisiani e non. Unità asimmetrica, motivo di ripetizione e struttura cristallografica.

Direzioni e piani reticolari. Indici di Miller. Reticolo reciproco.

Principali strutture dei materiali

Introduzione alla classificazione dei solidi: oltre reticoli di Bravais e set di base. Impaccamenti compatti e non compatti. Poliedri di coordinazione e sistemi interstiziali in impaccamenti di sfere. Fattori che influenzano la struttura.

Solidi metallici. Strutture esagonale e cubica compatte. Struttura cubica a corpo centrato. Principali strutture di metalli e leghe.

Solidi ceramici. Strutture tipiche: Cloruro di sodio, cloruro di cesio, ioduro di cadmio, fluorite, AsNi, solfuri di Zinco, rutilo e perovskiti, Spinelli. Determinazione dei gruppi spaziali delle strutture principali.

Strutture cristalline di grafite e diamante.

Metodi di sintesi di materiali:

Sintesi Solido - solido. Metodo ceramico. Generalità. Fattori che influenzano la velocità di reazione. Nucleazione e crescita. Modello di Wagner. Metodi di mescolamento. Coprecipitazione. Metodo del precursore. *Riduzione carbotermica e Sintesi combustive.*

Sintesi Liquido-solido. Reazioni di precipitazione. Precipitazione da soluzione acquosa. Sintesi di nano strutture. Metodi sol-gel. Formazione di ossidi amorfi. Preparazione di zeoliti. Precipitazione da fusi. Metodo dei flussi. Metodi idrotermali e solvotermali. *Crescita di cristalli singoli.* Crescita da soluzione. Metodo da gel. Crescita da fusi: Metodo Czochralski, Bridgman-Stockbarger. Fusione a Zone. Fusione a fiamma (Verneuil). **Reazioni gas-solido.** Trasporto da fase vapore. Purificazione di metalli.

Modifica di strutture esistenti. Intercalazione. Reazioni di intercalazione della grafite e del TiS_2 . Funzionalizzazione post-sintesi.

Deposizioni fisiche di film. Evaporazione e sputtering

Proprietà e applicazioni

Materiali magnetici: Generalità sulle proprietà magnetiche. Diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo ed antiferromagnetismo. Effetto della temperatura: legge di Curie-Weiss. Meccanismi per l'ordine ferro e antiferro magnetico. Materiali magnetici. Metalli e ossidi di metalli di transizione. Ferriti e manganiti. Magneti molecolari e nanomagneti.

Materiali per applicazioni ottiche. Generalità sulle proprietà ottiche. Materiali luminescenti e fosfori. Laser a rubino, Nd:YAG. e GaAs. LED.

Metalli e leghe: Leghe. Leghe dell'acciaio. Elasticità e superelasticità Leghe superelastiche ed a memoria di forma.

Materiali a struttura aperta. Materiali porosi: Zeoliti e Metal-Organic Framework (MOF). Materiali a strati: composti di intercalazione, elettroliti solidi e materiali per batterie a ioni litio

LABORATORIO

1) Sintesi di materiali ceramici mediante coprecipitazione e reazione allo stato solido. Sintesi di CaMnO_3 isolante paramagnetico, $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$ conduttore paramagnetico e $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ conduttore ferromagnetico. Caratterizzazione XRD dei materiali preparati.

2) Sintesi da soluzione. Sintesi di nanoparticelle magnetiche di Fe_3O_4 e separazione magnetica dall'ambiente di reazione. Caratterizzazione XRD.

3) Modifica di superficie. Funzionalizzazione di nanoparticelle di Fe_3O_4 con acidi fosfonici. Caratterizzazione FTIR.

4) Sintesi da soluzione di Metal-Organic Framework. Sintesi dello ZIF-8

5) Caratterizzazione FTIR di Si monocristallino. Determinazione quantitativa dell'ossigeno interstiziale nel Si(100) CZ.

6) Preparazione di film mediante Sputtering. Sputtering mediante plasma DC di strati di Au.

Testi di riferimento

- 1) A. R. West “*Basic Solid-State Chemistry and its Applications*” Wiley, 2012
- 2) C. Hammond “Introduzione alla cristallografia” Zanichelli, 1994
- 3) D. E. Sands “Introduction to Crystallography” Dover Publication 1993