

ANNO ACCADEMICO 2013/2014

Programma dell'insegnamento: CHIMICA FISICA SUPERIORE (modulo 1)

Docente Titolare del corso: Prof. ROBERTO TEGHIL

Corso di Laurea : Corso di laurea magistrale in Chimica

Denominazione insegnamento in lingua inglese:

ADVANCED PHYSICAL CHEMISTRY (first module)

Obiettivi formativi generali (risultati di apprendimento previsti e competenze da acquisire):

CONOSCENZA DELLA STRUTTURE E DELLE PROPRIETA' CHIMICO-FISICHE DEI SOLIDI CRISTALLINI. TEORIA DEL LEGAME CHIMICO NEI SOLIDI. CONOSCENZA DELLE PRINCIPALI TECNICHE DI INVESTIGAZIONE DELLA STRUTTURA CRISTALLINA DI UN SOLIDO, DELLE EQUAZIONI E DEI METODI ELEMENTARI PER IL CALCOLO DELLA STRUTTURA ELETTRONICA DEI SOLIDI CRISTALLINI.

Contenuti:

Strutture cristalline. Periodicità e Modelli fondamentali dei reticoli tridimensionali. Piani cristallini. Strutture cristalline semplici. Gruppi spaziali nei solidi. Diffrazione dei cristalli. Metodi sperimentali per la diffrazione. Legame nei cristalli. Gas di elettroni liberi. Distribuzione Fermi-Dirac. Bande di Energia. Equazione d'onda per un elettrone in un potenziale periodico. Teorema di Bloch. Zona di Brillouin. Soluzioni Bloch-Zona. Teoria della densità funzionale. Metodi computazionali per il calcolo della struttura elettronica di solidi cristallini.

Testi di riferimento:

CHARLES KITTEL. INTRODUZIONE ALLA FISICA DELLO STATO SOLIDO. BOLLATI BORINGHIERI. 1998
D.G.PETTIFOR. BONDING AND STRUCTURE OF MOLECULES AND SOLIDS. OXFORD SCIENCE PUBLICATIONS 1995

Propedeuticità consigliate:

NESSUNA

Esame integrato

☒ SI

☒ NO

Modalità d'esame

☐ Prova scritta

☒ Prova orale

☐ Prova scritta e orale