



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PADOVA

**SCUOLA DI SCIENZE**

**Bollettino Notiziario**

Anno Accademico 2015/2016

**Laurea magistrale in Scienza dei Materiali  
(Ord. 2015)**

---

## Curriculum: Corsi comuni

---

### CHIMICA FISICA DEI MATERIALI

---

(Titolare: Prof. RENATO BOZIO)

**Periodo:** I anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

**Prerequisiti :**

*E' necessaria una buona preparazione in chimica fisica, fisica quantistica, fisica dello stato solido.*

**Conoscenze e abilita' da acquisire :**

*Il corso si prefigge di fornire una ampia e approfondita trattazione delle correlazioni fra le proprietÃ strutturali e microscopiche dei materiali e le loro proprietÃ macroscopiche (ottiche, elettriche, magnetiche, ecc.).*

**Attivita' di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

*L'attivita' principale si svolge in forma di lezioni d'aula. Viene sollecitata la partecipazione attiva degli studenti riservando tempo a domande e risposte e deviando, di tanto in tanto, dal percorso programmato per introdurre riferimenti a temi attuali e ad attivita' di ricerca applicativa.*

**Contenuti :**

1. Natura tensoriale delle proprietÃ fisiche dei cristalli.
2. ProprietÃ dielettriche ed ottiche degli isolanti.
  - 2.a Transizioni di fase. Teoria di Landau
3. Diamagnetismo e paramagnetismo.
4. Ferromagnetismo, ferrimagnetismo e antiferromagnetismo.
5. ProprietÃ ottiche di metalli e semiconduttori.
  - 5.a Funzione dielettrica di Lindhard
  - 5.b Schermaggio dielettrico nei metalli
  - 5.c Costante dielettrica nei semiconduttori
  - 5.d Transizioni intrabanda e ottica di plasma
  - 5.e Transizioni interbanda e funzione densita' degli stati congiunta
  - 5.f Eccitoni di Wannier
6. Interazioni elettrone-fonone. Polaroni. Transizione di Peierls.
7. Forze intermolecolari.
  - 7.a Natura e classificazione delle f.i.. Trattamenti perturbativi.
  - 7.b Riconoscimento molecolare e autoassemblaggio
8. Fotofisica e fotochimica molecolare
9. Fotofisica e fotochimica degli stati aggregati, eccitoni di Frenkel.
  - 9.a Processi non radiativi: Processi di trasferimento di energia,
  - 9.b Trasferimento elettronico intra- ed intermolecolare.
10. Elementi di elettronica molecolare.

**Modalita' di esame :**

*Esame orale finale*

**Criteri di valutazione :**

*Lo studente dovrebbe dimostrare una comprensione dei principi generali e una capacitÃ di utilizzarli per la descrizione di specifici materiali e particolari fenomeni.*

*Coerentemente con la natura interdisciplinare della laurea magistrale in Scienza dei Materiali, dovrebbe, in qualche misura, mostrare una capacitÃ di muoversi tra fisica e chimica e riconoscere sia alcune basi comuni che differenze fittizie o puramente semantiche.*

**Testi di riferimento :**

*Gert Strobl, Condensed Matter Physics: Crystals, Liquids, Liquid Crystals, and Polymers. Berlin: Springer-Verlag, Berlin, 2004*

*Jacob Israelachvili, Intermolecular and Surface Forces, second or later edition. London: Academic Press, 1991*

*J.F. Nye, Physical Properties of Crystals. : Oxford University Press, 1964*

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

*Vengono caricate sulla piattaforma Doodle, accessibile agli studenti per il download di file, le raccolte di diapositive utilizzate durante le lezioni per supportarle con materiale iconografico. I testi sono redatti in inglese.*

---

### FISICA E TECNOLOGIA DEI SEMICONDUTTORI

---

(Titolare: Prof. DAVIDE DE SALVADOR)

**Periodo:** I anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Tipologie didattiche:** 48A+24E; 8,00 CFU

**Prerequisiti :**

Conoscenza di base della fisica quantistica e dello stato solido.

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Conoscenze: principi fisici alla base del comportamento dei materiali semiconduttori. L'obiettivo del corso Ã" fornire i concetti di base che permettano allo studente di comprendere il principio di funzionamento di un semplice dispositivo a semiconduttore. Dopo una prima parte in cui vengono introdotti i principi fisici, verranno descritti i principali dispositivi e alcuni processi fisici che servono a fabbricarli. Lo studente alla fine del corso dovrebbe avere l'abilitÃ" di prevedere quale struttura a bande assume un semplice sistema che contenga metalli, isolanti e semiconduttori drogati e di comprendere la spiegazione di come tale struttura si comporta in presenza di sollecitazioni esterne (campi, illuminazione....).

**AttivitÃ" di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Lezione frontale con esposizione delle teorie di base e dei principi di funzionamento dei dispositivi. Esempi di approfondimento che permettano di applicare le teorie esposte e di quantificare gli ordini di grandezza dei parametri fisici coinvolti. Richiamo alle attivitÃ" di laboratorio parallelamente svolte nel corso di metodi fisici di caratterizzazione dei materiali e loro connessione con la teoria.

**Contenuti :**

Richiamo della struttura cristallina dei principali semiconduttori. Semiconduttori elementari, composti e leghe.

Richiamo di concetti di base (teorema di Bloch, massa efficace, concetto di buca).

Origine e specificitÃ" della struttura a bande dei semiconduttori. Metodo tight binding per il calcolo approssimato delle bande in un semiconduttore a struttura diamante e nel grafene. Le bande reali (esempi GaAs, Si, Ge, AlGaAs).

Il metodo della funzione involuppo per il calcolo degli stati quantistici provenienti da potenziali aperiodici.

Il meccanismo di drogaggio. I portatori in un semiconduttore omogeneo in funzione di drogaggio e temperatura (semic. non degeneri, intrinseco, ionizzato, non ionizzato, in saturazione). La compensazione da livello profondo.

Il semiconduttore non omogeneo all'equilibrio. Il caso della giunzione p-n.

Trasporto di carica nei semiconduttori. Equazione di drift-diffusione. Fenomeni di scattering intrabanda e mobilitÃ" in un semiconduttore.

I meccanismi di generazione e ricombinazione in un semiconduttore.

L'equazione di continuitÃ". Il caso della giunzione p-n fuori equilibrio: polarizzazione e illuminazione.

Le eterogiunzioni le giunzioni metallo/semiconduttore, metallo/ossido/semiconduttore.

Il confinamento quantistico nei semiconduttori, quantum well, quantum wire, quantum dot.

LED, LED basati su GAN, fotodetector. Celle fotovoltaiche. Diverse architetture e materiali per il fotovoltaico. Efficienza. Meccanismi di perdita di efficienza. Celle a film sottile.

Tecnologie produttive. Transistor bipolare e FET. Struttura MOS.

Tecniche per il drogaggio. Impianto ionico. Diffusione e difetti.

Isolanti, ossidazione termica.

Legge di Moore e riscaldamento. Problematiche e nuovi materiali.

**ModalitÃ" di esame :**

Esame orale. Durante il semestre sarÃ" possibile (a discrezione dello studente) sostenere una verifica intermedia orale sulla prima parte del corso riguardante i principi fisici e sostenere alla fine una seconda parte riguardante i dispositivi e i processi.

**Criteri di valutazione :**

Verranno valutate:

- la capacitÃ" di esporre una o piÃ¹ delle teorie di base che spiegano il comportamento fisico dei semiconduttori.

- la comprensione del principio di funzionamento di uno o piÃ¹ dispositivi a semiconduttore spiegati nel corso.

- la capacitÃ" di comprendere la struttura a bande e il comportamento elettrico di una semplice struttura contenente semiconduttori drogati, metalli e isolanti.

**Testi di riferimento :**

Sapoval, Physics of semiconductors. : Springer Verlag,

Singh, Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures. : Cambridge,

Meyer, Electronic thin film science for Electrical Engineers and Materials Scientists. : Macmillan Publishing Company,

## FONDAMENTI DI NANOSCIENZA

(Titolare: Prof. GIOVANNI MATTEI)

**Periodo:** I anno, 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Tipologie didattiche:** 56A+12L; 8,00 CFU

**Prerequisiti :**

Fisica Quantistica, Fisica dello Stato Solido

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Il corso si prefigge i seguenti obiettivi formativi:

- Fornire le basi per la comprensione delle proprietÃ" chimiche e fisiche dei materiali nanodimensionali che sono alla base delle loro potenziali applicazioni nel campo delle nanotecnologie.

- Presentare alcune tecniche di sintesi e caratterizzazione di nanostrutture confinate (nanocluster) con applicazioni nanotecnologiche in fotonica, in plasmonica e nel magnetismo.

**AttivitÃ" di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Il corso prevede lezioni frontali tenute dal Prof. G. Granozzi, dal Prof. M. Meneghetti (Modulo A) e dal Prof. G. Mattei (Modulo B).

Il Modulo B prevede esercitazioni di laboratorio come applicazione dei contenuti visti a lezione (sintesi, caratterizzazione ottica e simulazione con la teoria di Mie di nanoparticelle metalliche in soluzione e loro caratterizzazione con microscopia elettronica).

**Contenuti :**

Modulo A (4 CFU)

- *Panoramica sui metodi di preparazione delle nanostrutture (sia top-down che bottom-up, con particolare enfasi sulle seconde). Aspetti strutturali ed energetici delle nanostrutture e metodi per la loro stabilizzazione. Difetti nei materiali nanodimensionali. Solidi a porosità controllata. Forme delle nanoparticelle: aspetti termodinamici e cinetici. Nanoparticelle core-shell. Autoassemblaggio ed autoorganizzazione. Metodo colloidale. Effetto templante. Preparazione di nanoparticelle, nanowires, nanotubes, films ultrasottili. Self-assembled Monolayers. Films di Langmuir e Langmuir-Blodgett. Interfacce coerenti, semi-coerenti, epitassiali e pseudomorfe. Metodi per crescita di films ultrasottili: CVD, MBE, PVD, ALE e PLD.*

- *Richiamo delle equazioni fondamentali per la descrizione della dinamica di elettroni e fotoni. Proprietà della materia che consentono il confinamento di elettroni e fotoni. Densità degli stati per sistemi confinati in una, due o tre dimensioni. Proprietà di nanostrutture di carbonio a bassa dimensionalità: grafene e nanotubi. Descrizione tight binding delle loro proprietà di conduzione, ottiche (assorbimento ed emissione) e di scattering Raman (Kataura plots). Modelli per il confinamento elettronico in quantum dots nel regime di debole e forte confinamento. Confinamento di elettroni in nano particelle metalliche e proprietà plasmoniche. Condizione di Froehlich e proprietà ottiche a campo prossimo e lontano. Effetto SERS con nano strutture plasmoniche. Cenni al confinamento di fotoni in cristalli fotonici.*

Modulo B (4 CFU)

- *Classificazione, caratteristiche e proprietà generali dei materiali nanostrutturati: confinamento quantico e proprietà elettroniche. Equazioni di taglia.*

*Proprietà termodinamiche di nanostrutture: effetto di taglia termodinamico, nucleazione (equazione di Gibbs-Thomson) e crescita di nanostrutture (regimi di aggregazione limitata dalla diffusione e Ostwald ripening)*

*Nanostrutture in matrice solida: impianto ionico per la sintesi e la modifica di nanostrutture metalliche. Verifica dei regimi di nucleazione e crescita.*

*Proprietà ottiche di nanostrutture: (i) proprietà plasmoniche di nanostrutture metalliche (Teoria di Mie e sue estensioni); (ii) confinamento quantico e fotoluminescenza in semiconductor quantum dots.*

*Proprietà magnetiche di nanostrutture: super-paramagnetismo*

*Tecniche di caratterizzazione di nanostrutture: la microscopia elettronica in trasmissione (TEM) e in scansione (SEM).*

\*\*\* MUTUAZIONE \*\*\*

Fondamenti di NanoFisica – “Laurea Magistrale in Fisica (6 CFU)

*Il Modulo B del presente corso viene mutuato da parte del corso di 'Fondamenti di NanoFisica' della LM in Fisica. Per tale corso sono previsti 2 CFU addizionali con i seguenti contenuti:*

- *Richiamo delle equazioni fondamentali per la descrizione della dinamica di elettroni e fotoni;*

- *Confinamento di elettroni e fotoni in sistemi nanostrutturati:*

*(i) Confinamento di fotoni in cristalli fotonici;*

*(ii) Confinamento di elettroni in nanoparticelle metalliche;*

*(iii) Confinamento di elettroni in quantum dots.*

*Sono inoltre previste delle attività pratiche: (i) sintesi di nanoparticelle sferiche di Au in soluzione; (ii) misura del loro spettro di trasmittanza UV-VIS; (iii) simulazione degli spettri misurati tramite la teoria di Mie; (iv) caratterizzazione tramite microscopia elettronica.*

**Modalità di esame :**

*Prova Scritta*

**Criteri di valutazione :**

*La valutazione della preparazione si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti e sulla capacità di fare collegamenti fra diversi argomenti.*

*Si valuteranno anche le relazioni scritte presentate sulla parte di esercitazione pratica.*

**Testi di riferimento :**

*R. Kelsall, I. Hamley, M. Geoghegan, Nanoscale Science and Technology. : J.Wiley& Sons, 2005*

*G. Cao, Nanostructures and Nanomaterials. : Imperial College Press, 2004*

*S. Maier, Plasmonics, fundamentals and applications. : Springer, 2007*

*C. Bohren, D. Huffman, Absorption and scattering of light by small particles. : Wiley-Interscience, 2004*

*P. Prasad, Nanophotonics. : Wiley-Interscience, 2004*

*D. Williams, C. Carter, Transmission Electron Microscopy. : Plenum Press, 1996*

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

*Verranno fornite dispense da parte dei Docenti. Gli argomenti e i contenuti trattati potranno essere approfonditi e/o integrati sui testi indicati nella sezione 'Testi di Riferimento'.*

## LABORATORIO DI PREPARAZIONE E CARATTERIZZAZIONE DEI MATERIALI 2

(Titolare: Prof. DANILO PEDRON)

**Periodo:** I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 8A+10E+96L; 10,00 CFU

**Prerequisiti :**

*Conoscenze acquisite nei Corsi della Laurea Triennale, in particolare: Chimica Organica I, Chimica Organica II per Scienza dei Materiali e Chimica Fisica II.*

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Competenze riguardanti la preparazione di materiali innovativi e la loro caratterizzazione, attraverso l'uso prevalente di tecniche spettroscopiche.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Lezioni d'aula e in laboratorio volte ad introdurre lo studente alle attività del corso. Attività di laboratorio svolte autonomamente dagli studenti.

**Contenuti :**

Durante il corso verranno condotte esperienze di chimica organica e di chimica "fisica, volte alla preparazione di materiali innovativi e alla loro caratterizzazione, attraverso l'uso prevalente di tecniche spettroscopiche.

Durante il laboratorio di sintesi organica saranno preparate, purificate e caratterizzate diverse molecole che rivestono interesse in applicazioni legate a materiali innovativi, quali: fulleropirrolidine; metalloporfirine, nanoparticelle, molecole precursori per organogel; per la purificazione di tali molecole si utilizzeranno tecniche di estrazione e separazione per cromatografia; la caratterizzazione sarà basata su tecniche quali spettrometria NMR, spettrometria di massa, spettroscopie IR e UV.

La parte di caratterizzazione chimico-fisica prevede esperimenti di Spettroscopia di assorbimento ed emissione nell'UV-Vis. Tecniche FT-IR-Vis per lo studio delle proprietà ottiche lineari di materiali e film sottili: riflettanza totale attenuata (ATR) e riflettanza speculare. Spettroscopia micro-Raman e Raman SERS. Caratterizzazione delle proprietà di assorbimento non lineare di materiali molecolari con misure di z-scan ed input-output.

**Modalità di esame :**

Valutazione relazioni di laboratorio, orale/scritto.

**Criteri di valutazione :**

La votazione si baserà sulla valutazione delle relazioni di laboratorio e su un esame orale/scritto.

**Testi di riferimento :**

J. Clayden, N. Greeves and S.G. Warren, Organic Chemistry. Oxford: Oxford University Press, 2012

R.M. Silverstein et al., Spectrometric Identification of Organic Compounds. Chichester: Wiley, 2014

P.W. Atkins and R.S. Fridman, Molecular Quantum Mechanics. Oxford: Oxford University Press, 2011

H. Kuzmany, Solid State Spectroscopy. Heidelberg: Springer, 2009

M. Fox, Optical Properties of Solids. Oxford: Oxford University Press, 2010

R.W. Boyd, Nonlinear Optics. Amsterdam: Elsevier Academic Press, 2008

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

Dispense di lezione e articoli di letteratura indicati dai Docenti.

## MATERIALI INORGANICI FUNZIONALI

(Titolare: Prof.ssa ANTONELLA GLISENTI)

**Periodo:** 1 anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

**Prerequisiti :**

Conoscenze generali di chimica inorganica

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

capacità previsionale relativamente alle principali proprietà chimiche dei materiali inorganici

capacità di progettare nuovi materiali, nuove procedure di sintesi, o trattamenti al fine di ottenere materiali dalle proprietà chimiche e fisiche richieste

capacità di studiare ed approfondire i principali problemi legati agli aspetti funzionali di materiali inorganici e dei dispositivi da essi derivati

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Lezioni frontali

**Contenuti :**

Il corso si propone di approfondire alcuni aspetti legati a materiali inorganici rilevanti da un punto di vista applicativo e funzionale.

L'approccio metodologico sarà improntato al tentativo di mettere in relazione gli aspetti funzionali con le caratteristiche chimiche, fisiche, strutturali, morfologiche del materiale da un lato e le specificità tecnologiche ed applicative dall'altro. Nell'ampia casistica di possibili materiali e dispositivi saranno presi in considerazione principalmente quelli più promettenti nell'ottica di uno sviluppo sostenibile.

In particolare saranno considerati:

if,, Materiali a base ossidica utilizzabili in celle a combustibile ad ossido solido. In funzione di tale applicazione saranno approfonditi sia gli aspetti legati alla sintesi ed alle proprietà significative caratteristiche chimiche e fisiche (reattività, conducibilità, stabilità, permeabilità) che le problematiche legate al settore delle celle a combustibile. In particolare le specificità di sistemi ossidici saranno discusse in relazione al loro impiego nel settore anodico, catodico ed elettrolitico.

if,, Reazioni sostenibili per la produzione di combustibili alternativi ai combustibili fossili.

if,, L'anidride carbonica: da inquinante a risorsa.

if,, Energia dal sole: dai pannelli solari alla fotocatalisi.

if,, Materiali intercalati per lo stoccaggio, il trasporto ed il risparmio di energia.

if,, Siti attivi nelle reazioni di ossidoriduzione: la funzionalizzazione di materiali catalitici.

In tutti i casi i materiali verranno indagati nei diversi stadi che portano dalla sintesi alla realizzazione del dispositivo. A tal fine saranno richiamati, ogniqualvolta necessario, gli aspetti generali legati alle proprietà chimiche e strutturali, onde favorire il consolidarsi di un approccio costruttivo e progettuale allo studio dei materiali.

**Modalità di esame :**

Esame Orale

**Criteri di valutazione :**

verrà valutata la capacità critica e di affrontare e studiare un problema considerandone i diversi aspetti e le molteplici sfaccettature

verrà valutata la capacità di collegare la conoscenza chimica di base alle risposte funzionali ed alla progettazione dei materiali

**Testi di riferimento :**

CONTENUTO NON PRESENTE

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

Indicazioni bibliografiche fornite dal docente in funzione degli argomenti affrontati

## MATERIALI ORGANICI FUNZIONALI

(Titolare: Prof. MICHELE MAGGINI)

**Periodo:** I anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Tipologie didattiche:** 40A+10E; 6,00 CFU

**Prerequisiti :**

Corsi di chimica di base della laurea triennale

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Il corso di Materiali Organici Funzionali ha l'obiettivo di fornire allo studente le conoscenze di base per comprendere e progettare la sintesi e la funzionalizzazione di strutture molecolari organiche per la scienza dei materiali. In particolare saranno affrontate le principali funzionalizzazioni delle strutture a base di carbonio (grafite, fullerene, nanotubi di carbonio, grafene) e le sintesi di polimeri e oligomeri semiconduttori organici attraverso reazioni di condensazione e di formazione di legami carbonio-carbonio metallo catalizzate.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Il corso prevede lezioni frontali ed esercitazioni in aula. Le lezioni saranno svolte utilizzando la lavagna e attraverso l'impiego di slides per la schematizzazione dei contenuti e la discussione dei concetti che richiedono la rappresentazione di strutture molecolari complesse. Saranno inoltre svolti esercizi in aula a gruppi con correzione alla lavagna.

**Contenuti :**

Nanostrutture di carbonio

• Principi generali di reattività

• Funzionalizzazione dei fullereni

• Funzionalizzazione dei nanotubi di carbonio e del grafene

Polimeri semiconduttori

• Sintesi di omopolimeri e copolimeri semiconduttori

• Bandgap engineering di polimeri semiconduttori

• Strutture molecolari per OLED che emettono luce bianca o luce blu

• Celle solari polimeriche

**Modalità di esame :**

Esame orale

**Criteri di valutazione :**

La valutazione della preparazione dello studente si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti, sull'acquisizione dei concetti proposti e sulla capacità di applicarli alla sintesi di polimeri e oligomeri semiconduttori e alla funzionalizzazione di nanostrutture di carbonio.

**Testi di riferimento :**

, . . . ,

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

Saranno rese disponibili agli studenti le slides prima del corso.

## MATERIALI PER L'ENERGETICA

(Titolare: Prof. VITO DI NOTO)

**Periodo:** I anno, 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Il corso copre le principali famiglie di dispositivi per la conversione elettrochimica e lo stoccaggio di energia, incluse le batterie primarie e secondarie, celle a combustibile, celle fotovoltaiche e batterie di flusso redox. I fondamenti dei processi elettrochimici che avvengono agli elettrodi saranno discussi, con una dettagliata analisi delle interazioni tra la termodinamica, cinetica ed elettrochimica dei diversi fenomeni. Le principali proprietà degli elettroliti saranno studiate, con particolare riferimento alla conducibilità e al meccanismo di trasferimento di carica. In questo corso di metterò in evidenza le principali caratteristiche fisico-chimiche e l'applicabilità dei vari sistemi. Il corso si completa con la discussione delle principali famiglie di: (a) celle a combustibile, comprese PEMFC, PAFC, MCFC e SOFC, (b) batterie redox flusso, quali i sistemi convenzionali e ibridi, e (c) le cellule fotovoltaiche.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Lezioni frontali

**Contenuti :**

Parte I. Batterie primarie e secondarie: materiali, metodi e dispositivi

• Elettroliti solidi: sintesi e proprietà .

• Materiali elettrodi convenzionali ed innovativi: sintesi e proprietà .

• Tecniche di caratterizzazione strutturale e morfologica.

• Tecniche di caratterizzazione elettrochimica ed elettrica ex situ ed in situ .

• Dispositivi e figure di merito.

• Batterie primarie: materiali, realizzazione di dispositivi e processi elettrochimici.

• Batterie secondarie: materiali, realizzazione di dispositivi e processi elettrochimici.

## Parte II. Celle a combustibile ed elettrolizzatori

â€¢ Celle a combustibile: tipologie e caratteristiche.

â€¢ Elettrolizzatori: tipologie e caratteristiche.

â€¢ Dispositivi e figure di merito.

1. Elettroliti.
2. Elettrocatalizzatori.
3. Metodi di caratterizzazione strutturale e morfologica dei materiali.
4. Metodi di caratterizzazione elettrochimica ed elettrica â€¢ ed â€¢ in situâ€¢.
5. Assemblaggi membrana-elettrodo (MEA).
6. Celle singole e stacks.

## Parte III. Supercapacitori: materiali, metodi e dispositivi

â€¢ Elettroliti: sintesi e propriet .

â€¢ Materiali elettrodi convenzionali ed innovativi: sintesi e propriet .

â€¢ Tecniche di caratterizzazione elettrochimica ed elettrica â€¢ ed â€¢ in situâ€¢.

â€¢ Dispositivi e figure di merito.

### Modalita' di esame :

Orale

### Testi di riferimento :

D. Berndt, Maintenance-free batteries. : A handbook of battery technology, 2

J. Larminie, A. Dicks, Fuel Cell Systems Explained. Chichester (UK): J. Wiley, 2

### Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di Lezione

## MATERIALI SUPERCONDUTTORI

(Titolare: da definire)

**Periodo:** I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

### Prerequisiti :

Fisica dello Stato Solido

### Conoscenze e abilit  da acquisire :

Lo scopo del corso   quello di fornire agli studenti un quadro generale della fenomenologia dei materiali superconduttori e le teorie che la governano.

### Contenuti :

ELEMENTI DI TEORIA DELLA SUPERCONDUTTIVITA':

La conduzione elettrica nei metalli normali. Fenomenologia dei materiali superconduttori. Il modello a due fluidi. L'elettrodinamica di London. Elettrodinamica superconduttiva nello spazio di Fourier. Superconduttori di secondo tipo.

Termodinamica della transizione superconduttiva. La condensazione di Bose. Teoria microscopica della superconduttivit . Lo stato fondamentale superconduttivo. Eccitazioni di quasiparticella. L'approccio idrodinamico alla superconduttivit .

### MATERIALI SUPERCONDUTTORI

La superconduttivit  nei metalli di transizione e le regole empiriche di Matthias. Composti B1 ed A15. L'alta TC ed il diboruro di magnesio. Superconduttivit  in radiofrequenza.

### APPLICAZIONI INDUSTRIALI DELLA SUPERCONDUTTIVITA'

Magneti superconduttori, cuscinetti superconduttori, motori superconduttori. Cavit  in radiofrequenza. Rivelatori di particelle.

### Modalita' di esame :

Orale

### Criteri di valutazione :

La valutazione della preparazione degli studenti si baser  sulla comprensione degli argomenti svolti, l'acquisizione dei concetti e delle metodologie proposte e sulla capacit  di applicarli in modo autonomo.

### Testi di riferimento :

Lynton, E.A, Superconductivity. London: Chapman and Hall, 1969

Newhouse, V.L., Applied Superconductivity. New York: Academic Press, 1975

Vonsovskii, S.V., Izyumov, Yu.A., Kurmaev. E.Z., Superconductivity of Transition Metals, their Alloys and Compounds. Berlin: Springer-Verlag, 1982

R.G. Sharma, Superconductivity: Basics and Applications to Magnets. : ,

## METODI COMPUTAZIONALI IN SCIENZA DEI MATERIALI

(Titolare: Prof. FRANCESCO ANCILOTTO)

**Periodo:** I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

### Prerequisiti :

Fisica quantistica e dello stato solido, chimica fisica. Non sono richieste conoscenze di programmazione.

### Conoscenze e abilit  da acquisire :

Il corso si propone di fornire agli studenti le basi per la comprensione dei metodi computazionali usati nell'ambito della scienza dei materiali. Questo permetterà allo studente:

- di comprendere come i metodi computazionali possano essere usati per capire e predire il comportamento dei materiali e la relazione tra le loro proprietà e la struttura microscopica;
- di riconoscere le tecniche numeriche adatte per le diverse scale spaziali e temporali;
- di valutare le assunzioni e delle approssimazioni che stanno alla base delle diverse tecniche di calcolo.

Alla fine del corso lo studente sarà in grado di giudicare in maniera critica potenzialità e limiti dei metodi computazionali usati per lo studio dei materiali e di valutare la qualità delle simulazioni riportate in letteratura. Inoltre avrà raggiunto una maggiore comprensione della base molecolare del comportamento fisico. Infine avrà acquisito le nozioni di base per l'impiego di alcuni comuni pacchetti di calcolo.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Il corso verrà tenuto dal prof. Francesco Ancilotto e dalla prof. Alberta Ferrarini.

Il corso prevede lezioni d'aula ed esercitazioni al computer.

**Contenuti :**

Richiami di termodinamica e meccanica statistica classica.

Simulazioni di Dinamica Molecolare classica; integrazione numerica delle equazioni di Newton.

Metodi Monte-Carlo; algoritmo di Metropolis. Simulazioni in diversi ensemble statistici.

Aspetti comuni dei metodi di simulazione: condizioni iniziali e condizioni al contorno; calcolo delle interazioni tra particelle.

Calcolo di grandezze termodinamiche e di proprietà di trasporto.

Interazioni intermolecolari; campi di forze (force fields); modelli atomistici e 'coarse grained'.

Metodi variazionali per la soluzione di equazioni di Schrodinger.

Teoria di Hartree e Hartree-Fock.

Elementi di Teoria del Funzionale Densità (DFT).

Simulazioni "da principi primi".

I diversi metodi verranno discussi in relazione ad applicazioni a problemi di interesse per la scienza dei materiali (cristalli, superfici, soft matter, materiali nanostrutturati).

Il corso è integrato da esercitazioni al computer.

Nelle esercitazioni lo studente effettuerà semplici simulazioni usando pacchetti di calcolo impegnativi nell'ambito dello studio dei materiali, e imparerà a interpretare e a presentare i risultati.

**Modalità di esame :**

Esame orale in cui lo studente discuterà un elaborato scritto, nel quale vengono riportati i risultati di semplici simulazioni numeriche.

**Criteri di valutazione :**

Comprensione dei principali concetti che stanno alla base di metodi per la simulazione numerica di proprietà della materia condensata.

Capacità di interpretare e presentare i risultati di simulazioni fatte al computer.

**Testi di riferimento :**

M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*. Oxford: Oxford University Press, 1987

D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulations*, 2nd edition. San Diego: Academic Press, 2002

R. LeSar, *Introduction to Computational Materials Science*. Cambridge: Cambridge University Press, 2013

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

Materiale didattico verrà fornito dai docenti.

## METODI FISICI DI CARATTERIZZAZIONE DEI MATERIALI E LABORATORIO

(Titolare: Prof. ALBERTO CARNERA)

**Periodo:** 1 anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 40A+12E+48L; 10,00 CFU

**Prerequisiti :**

Il contenuto del corso presuppone che lo studente sia in possesso di solide competenze di fisica classica, di fisica quantistica e nozioni di base di fisica dello stato solido.

Questa preparazione è fornita dagli insegnamenti del corso di Laurea in Scienza dei Materiali e del corso di Laurea in Fisica.

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Lo studente imparerà a utilizzare varie interazioni della radiazione con la materia allo scopo di ottenere informazioni sulla composizione, sulla struttura cristallina e sulla distribuzione in sia in profondità che laterale delle specie chimiche presenti.

Alla fine del corso lo studente padroneggerà alcuni esempi di base di metodi spettroscopici e di microscopia utilizzati nello studio dei materiali e sarà in grado di discuterne criticamente i risultati.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Lezioni frontali e sessioni di misura presso i laboratori del Dipartimento di Fisica e Astronomia.

**Contenuti :**

Principi di base dell'interazione radiazione-materia.

La sezione dell'urto

L'interazione coulombiana a due corpi ione-nucleo e la Spettrometria di Rutherford Backscattering.

La perdita di energia degli ioni nella materia.



La rivelazione di specie leggere:  $\lambda$  analisi con reazioni nucleari e la spettroscopia dei nuclei di rinculo.  
La spettrometria di massa di ioni secondari: il fenomeno dello sputtering, gli spettrometri di massa,  $\lambda$  quantificazione dei risultati.  
La diffrazione a raggi X ad alta risoluzione da materiali cristallini.  
La teoria cinematica e la teoria dinamica.  
Monocromatizzazione e collimazione dei raggi X.  
 $\lambda$  intensità diffratta nello spazio reciproco.  
La riflettività dei raggi X e le informazioni che se ne traggono.

**Modalita' di esame :**

Esame orale

**Criteri di valutazione :**

Si valuterà la capacità dello studente di comprendere e discutere criticamente le basi fisiche ed i possibili utilizzi di metodi fisici di analisi dei materiali.

**Testi di riferimento :**

L.C Feldman and J.W.Mayer, *Fundamentals of Surface and Thin Film Analysis*. New York: North-Holland, 1986

P.F. Fewster, *X-ray Scattering from Semiconductors*. London: Imperial College Press, 2003

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

A supporto dei testi consigliati saranno disponibili in rete le slides utilizzate nel corso delle lezioni.

## NANOFABBRICAZIONE

(Titolare: Prof. FILIPPO ROMANATO)

**Periodo:** I anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

**Prerequisiti :**

corsi del terzo anno di scienza dei materiali

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Conoscenze sulle principali tecniche litografiche, sui processi e sulle metodologie di nanofabbricazione.

Abilità nel correlare fenomeni e proprietà di materiali e di tecniche per l'ottenimento e lo sviluppo di tecnologie di nanofabbricazione.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

il corso prevede sia lezioni in aula sia visite presso le facilities alcune camere pulite di nanofabbricazione per partecipare a dimostrazioni pratiche di tecniche di processo

**Contenuti :**

Molti degli impressionanti progressi tecnici e scientifici degli ultime due decenni è basato sulla capacità di controllare i singoli fenomeni chimico-fisici a livello di pochi nanometri cioè alla scala di dimensioni alla quale avviene la maggior parte dei fenomeni naturali. Questo controllo è stato ottenuto sviluppando sistemi e processi di micro e nano fabbricazione per la realizzazione di dispositivi (anche denominati lab-on-chip) in grado di scambiare segnali (rivelazione e attuazione) con sistemi delle dimensioni di pochi micrometri coniando, di fatto, la definizione di nanotecnologia.

Il corso discuterà il processo di miniaturizzazione e il processo di riduzione di scala di molti fenomeni naturali che contraddistinguono il funzionamento dei nanodispositivi. Verranno presentati le principali tecnologie di nanofabbricazione e verranno presentati esempi di applicazione per la realizzazione di dispositivi ed esperimenti di nanoscienza. Dopo una generale distinzione tra processi top-down e bottom-up, verranno illustrate le tecnologie di litografia (UV, elettronica, X-ray, ionica, imprinting, interferenziale etc), processi di deposito (plasma assisted, in fase vapore o chimica, sol-gel etc.) e di sottrazione in fase gassosa (reactive ion etching, milling) o liquida (etching chimici). Verrà rivista la tecnologia di fabbricazione di dispositivi elettronici su base silicio.

Il corso si orienta a studenti in vista della tesi di laurea per la ampia correlazione tra fenomeni fisici, chimici, bio-chimici che i processi di nanofabbricazione richiedono in vista della realizzazione di nanostrutture e nanodispositivi. Vengono trattati tematiche di apertura verso le ricerche di nanoscienze e nanotecnologie industriali.

Il corso viene completato da delle visite in laboratorio di nanofabbricazione a Padova presso il laboratorio LaNN e a Trieste presso i laboratori di nanofabbricazione del CNR presso il sincrotrone Elettra. Durante queste visite si avranno dimostrazioni pratiche dei processi litografici trattati durante il corso in aula.

Syllabus: Nanofabbricazione :

Programma

Nanofabbricazione: concetti generali

Tipi di litografie: Top down e Bottom-up

Mask "mask less", litografia parallele seriali

Tipi di processi sottrattivi

Sviluppo di processi

Il ruolo della nanofabbricazione nei processi produttivi

$\lambda$  approccio metodologico della nanofabbricazione: tematica interdisciplinare.

Litografie e tipi di dispositivi

Ottiche diffrattive,

Microfluidica,

Dispositivi elettronici, lab-on chip, etc.

Litografie 2D e 3D

Risoluzioni vs throughput

Litografie tridimensioni  
Combinazioni di litografie

FIB  
Resist less  
Mask less lithography  
Primo tipo di litografia  
Resist  
Introduzione ai resist: proprietà  $\text{\textcircled{TM}}$  litografiche e di processo  
tipi di resist

Processi sui resist

Spinning  
Baking  
Dose and development  
Contrast, resolution,  
Lithographic sensibility  
Photochemical Quantum efficiency  
Plasma etching resistance  
Electron beam lithography  
Electron sources  
Vector scan  
Beam blanking  
Interaction with electron beam  
Energy dependence  
Proximity effects  $\text{\textcircled{TM}}$  dose correlation  
Resolution limit  
Exposure time  
Stitching  
Overlay  
Single level- multi levels  
Examples

Generalità  $\text{\textcircled{TM}}$  sulle tecniche litografiche parallele  
Replica di pattern  
Maschere  
Stampi

Litografia UV  
Litografia UV di prossimità  $\text{\textcircled{TM}}$   
Litografia UV campo lontano

Litografia ottica  
Principi generali  
Diffrazione

Lithografia interferenziale  
Principio dell'  $\text{\textcircled{TM}}$  interferenza  
Modalità  $\text{\textcircled{TM}}$   
Proprietà  $\text{\textcircled{TM}}$   
Litografia X-ray  
LTX di prossimità  $\text{\textcircled{TM}}$   
Litografia X-ray campo lontano  
Deep X-ray  
Next generation Deep EUV  
Alignment and exposure  
Several step processes  
Nanoimprinting

**Modalità di esame :**

Approfondimento di una tematica, preparazione di una presentazione, discussione scritta.

Esame orale, presentazione dell'elaborato e verifica dell'apprendimento dei principali concetti di nano litografia.

**Criteri di valutazione :**

La valutazione della preparazione si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti e sulla capacità di fare collegamenti fra diversi argomenti. Si valuteranno anche le relazioni scritte presentate sulla parte di esercitazione.

**Testi di riferimento :**

CONTENUTO NON PRESENTE

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

vengono dispensate le presentazioni d'aula e capitoli di libri o articoli sulle specifiche tecniche litografiche.

---

## OTTICA E FISICA DEI LASER

(Titolare: da definire)

**Periodo:**

I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

**Prerequisiti :**

Concetti appresi nei corsi di Matematica, Fisica 1 e Fisica 2.

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Il corso si propone di fornire gli elementi di base per la comprensione dei fenomeni fisici che sono alla base dell'ottica classica e del funzionamento dei laser e delle loro applicazioni scientifiche.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Il corso si sviluppa in lezioni in aula durante le quali si affronteranno gli argomenti teorici e lo svolgimento di esercizi e problemi.

**Contenuti :**

Richiami di ottica classica:

propagazione delle onde elettromagnetiche nel vuoto e nella materia, polarizzazione della luce, birifrangenza, interferenza, diffrazione, ottica geometrica e notazione matriciale, principali strumenti ottici.

Laser:

idea laser e proprietà dei fasci emessi, assorbimento, emissione spontanea ed emissione stimolata guadagno e inversione di popolazione, risonatori ottici e schemi di pompaggio, proprietà di un fascio laser in continua, laser impulsati: Q-switching e mode-locking, esempi di importanti sistemi laser: laser gas e laser a stato solido.

**Modalità di esame :**

Scritto comprendente degli esercizi da risolvere e un tema da svolgere su un argomento specifico.

**Criteri di valutazione :**

Verrà valutata la capacità di risolvere quantitativamente alcuni problemi di ottica e di funzionamento di un laser e la capacità di sviluppare criticamente un discorso su uno degli argomenti trattati a lezione.

**Testi di riferimento :**

C. A. Bennett, *Principles of Physical Optics*. : Wiley, 2008

I. R. Kenyon, *The light fantastic. A Modern Introduction to Classical and Quantum Optics*. : Oxford Press, 2008

G. R. Fowles, *Introduction to Modern Optics*. : Dover Publications, 1989

E. Hecht, *Optics*. : Addison Wesley, 2002

O. Svelto, *Principles of Lasers*. : Plenum Press, 2010

M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*. : Cambridge University Press, 1999

B.E.A. Saleh and M.C. Teich, *Fundamentals of Photonics*. : Wiley Inc, 2007

## STRUTTURA E DINAMICA DELLE SUPERFICI

(Titolare: Prof. MAURO SAMBI)

**Periodo:** 1 anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00 CFU

**Prerequisiti :**

Corsi della Laurea in Scienza dei Materiali, con particolare riferimento ai contenuti dei corsi di Fisica 2, Chimica Fisica 2, Chimica Inorganica e dello Stato Solido, Struttura dei Solidi, Fisica dello Stato Solido.

**Conoscenze e abilità da acquisire :**

Il corso fornisce le basi per una comprensione del ruolo delle superfici nel determinare le proprietà dei materiali e delle nanostrutture, con particolare riferimento alla produzione di aggregati funzionali supportati su superfici inorganiche. Saranno introdotte le necessarie nozioni di chimica e struttura delle superfici e verranno considerati i fattori termodinamici e cinetici che possono favorire od ostacolare l'auto-organizzazione atomica e molecolare di superficie. Si considereranno quindi le principali classi di strutture bidimensionali self-assembled supportate, i relativi metodi di preparazione e le principali tecniche di caratterizzazione morfologica, strutturale, elettronica e funzionale degli aggregati. Verranno approfondite le tecniche di caratterizzazione strutturale di superficie che fanno uso di luce di sincrotrone.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :**

Didattica frontale.

**Contenuti :**

Introduzione alla chimica delle superfici, necessità dell'ultra-alto vuoto. Energia libera di superficie (gamma), tensione superficiale. Modalità di crescita epitassiale. Cristalli: reticoli di Bravais, celle unitarie, indici di Miller. Anisotropia di gamma nei solidi cristallini. Metodo di Wulff per la determinazione della forma di equilibrio dei cristalli. Minimizzazione di gamma: rilassamento, ricostruzione, faceting. Superfici terminate bulk di elementi e composti: dipolo superficiale e autocompensazione. Superfici vicinali. Superstrutture: notazione di Wood e notazione matriciale. Strutture semplici, di coincidenza, incommensurate. Pattern di Moiré.

STM - principi e modalità di utilizzo: misure ad altezza e a corrente costante. Determinazione della funzione lavoro locale, spettroscopia di tunneling a scansione (STS). Current Imaging Tunneling Spectroscopy (CITS). Tecniche di nanomanipolazione. STM in soluzione ed elettrochimico. AFM.

Cinetica di superficie: eventi microscopici di diffusione. Teoria della nucleazione di campo medio. Crescita dendritica alle basse temperature. Crescita frattale, crescita a isole compatte. Limite termodinamico di Wulff. Riduzione della dispersione dimensionale con Ostwald ripening. Crescita su substrati anisotropi: step decoration di superfici vicinali. Quantum wires su superfici fcc(110), quantum dots su ricostruzioni. Quantum dots su network di dislocazioni. Strati templanti di ossidi per la crescita di nanocluster metallici.

*Superreticoli 3D di quantum dots di semiconduttori.*

*Diffrazione di elettroni a bassa energia (LEED). Approccio cinematico. Dall'immagine LEED alla periodicità nello spazio reale alla conversione delle matrici. Presenza di domini. Diffrazione di elettroni ad alta energia a incidenza radente (RHEED).*

*Fisisorbimento e chemisorbimento. Trattazione pseudo-omogenea: isoterme. Isotherma di Langmuir per il chemisorbimento non dissociativo, dissociativo, competitivo. Isotherme BET, di Temkin, BLK, Freundlich, Fowler-Guggenheim, Hill-De Boer. Desorbimento: equazione di Polanyi-Wigner. Desorbimento termico programmato (TPD). Interpretazione degli spettri TPD.*

*Introduzione al self-assembly organico. Metodi di deposizione. Interazioni overlayer-substrato e inter-overlayer. Interazione O-S forte. Interazioni di VdW overlayer-substrato. Network supramolecolari vs network covalenti. Strutture supramolecolari di superficie a ponti a idrogeno. Networks nanoporosi. Network supramolecolari basati sulla coordinazione di metalli.*

*Luce di sincrotrone. Produzione: LINAC, booster, anello di accumulazione. Parametri caratterizzanti della sorgente. Brillanza spettrale. Proprietà della radiazione da magneti curvanti: ampiezza spettrale, collimazione. Proprietà della radiazione da insertion device: ondulatori e wigglers. Dall'anello di accumulazione alla camera sperimentale - la beamline: specchi e monocromatori.*

*Fotoemissione ed emissione Auger. Analisi qualitative e quantitative. Il Chemical Shift. ARXPS. Applicazioni della luce di sincrotrone. Alta risoluzione energetica, temporale e spaziale (spettromicroscopia fotoelettronica). Variabilità dell'energia del fotone. Dipendenza delle sezioni d'urto di fotoemissione dall'energia del fotone. Uso dei minimi di Cooper. Diffrazione fotoelettronica angle scanned e energy scanned. Chemical shift photoelectron diffraction. Olografia fotoelettronica.*

*Cenni sull'assorbimento di raggi X: modalità di esecuzione dell'esperimento: assorbimento, fluorescenza, elettroni secondari. Cenni sull'assorbimento di raggi X: XANES, EXAFS, NEXAFS. Cenni al dicroismo magnetico lineare e circolare di raggi X.*

**Modalità di esame :**

*Prova orale.*

**Criteri di valutazione :**

*Criteri di valutazione della prova orale sono la capacità di esposizione di un argomento a scelta, il rigore quantitativo nelle dimostrazioni, il grado di approfondimento degli argomenti, la capacità di istituire nessi tra argomenti diversi trattati nel corso.*

**Testi di riferimento :**

*G. Somorjai, Y. Li, Introduction to Surface Chemistry & Catalysis. : John Wiley & Sons, 2010*

*K. Kolasinski, Surface Science. : John Wiley & Sons, 2012*

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio :**

*Appunti e presentazioni powerpoint di lezione, articoli e review indicati dal docente.*

<http://www.chimica.unipd.it/mauro.sambi/pubblica/didattica.html>