

Aspetti strutturali dei vetri

organizzazione del modulo

Giorgio F. Signorini
Università di Firenze (IT)

Corso “Materiali ceramici e vetro”
Anno Accademico 2019-20



organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri

- (a) funzione di distribuzione a coppie $g(r)$;
- (b) altri parametri strutturali.

TESTI:

- [[Varshneya\(1994\)](#)], sec 2.3: *Pair Correlation Function and Radial Correlation Function*

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
 - (a) Metodi basati su scattering/diffrazione.
 - (b) Cenni a: NMR e spettroscopia vibrazionale.
 - (c) Esempi.

TESTI:

- *[Cusack(1987)] ch. 3: Investigation of Disordered Structures, sec 3.1-3.4 (trattazione rigorosa della diffrazione)*
- *[Rao(2002)], cap. 4: Structural Techniques*

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
3. **Metodi computazionali** per lo studio della struttura dei vetri: metodi di simulazione classici

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
3. **Metodi computazionali** per lo studio della struttura dei vetri: metodi di simulazione classici
 - (a) metodi Monte Carlo (MC);
 - (b) simulazioni di Dinamica Molecolare (MD).
 - (c) Reverse Monte Carlo

TESTI:

- *[Cramer(2004)] ch. 3: Simulation of Molecular Ensembles, sec 3.1-3.5*
- *[Keen(1998)], sec. "Reverse Monte Carlo Modelling"*

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
3. **Metodi computazionali** per lo studio della struttura dei vetri: metodi di simulazione classici
4. **Modelli** strutturali dei vetri

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
3. **Metodi computazionali** per lo studio della struttura dei vetri: metodi di simulazione classici
4. **Modelli** strutturali dei vetri
 - (a) Continuous Random Network
Teorie in ambito CRN:
 - i. coordinazione media e rigidità (Phillips-Thorpe)
 - ii. *bond model*: ordine chimico
 - iii. *bond model*: vincoli di composizione
 - (b) modello a cristalliti
 - (c) Random Close Packing

TESTI:

- [Varshneya(1994)], sec 3.1: *Structural Theories of Glass Formation*; sec. 3.2: *Russian Workers' Criticism of Zachariasens' Hypothesis*; *bond models e RCP sono illustrati in ch. 5 insieme alla descrizione delle strutture a cui si applicano*
- [Zallen(1998)], sec. 2.4: *Random Close Packing*; sec. 2.5: *Continuous Random Network*
- [Micoulaut(2013)]: *lecture 3: Simple Bond Models*

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
3. **Metodi computazionali** per lo studio della struttura dei vetri: metodi di simulazione classici
4. **Modelli** strutturali dei vetri
5. **Struttura** di varie classi di vetri

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
3. **Metodi computazionali** per lo studio della struttura dei vetri: metodi di simulazione classici
4. **Modelli** strutturali dei vetri
5. **Struttura** di varie classi di vetri
 - (a) Vetri ossidi monocomponente: vetro di silice e vetro di B_2O_3 .
 - (b) Vetri ossidi con modificatori di reticolo.
 - (c) Vetri ossidi con più formatori di reticolo.
 - (d) Vetri non-ossidi: vetri a prevalente carattere covalente; vetri metallici; vetri di sali misti.

TESTI:

- [[Varshneya\(1994\)](#)], *ch. 5: Glass Composition and Structures*

organizzazione del modulo

1. **Descrizione della struttura** dei vetri
2. **Metodi sperimentali** per la determinazione della struttura nei vetri
3. **Metodi computazionali** per lo studio della struttura dei vetri: metodi di simulazione classici
4. **Modelli** strutturali dei vetri
5. **Struttura** di varie classi di vetri

Testi

N.B. il testo di Varshneya è disponibile online, parzialmente ma in ampi stralci compresi la sezione 2.3 e il capitolo 5, su [Google Books](#). Le pagine rilevanti degli altri testi sono nella sezione "ALTRO MATERIALE" sul sito di [e-learning](#) di unifi.

- [Cramer(2004)] C. J. Cramer. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd ed.* Wiley, 2004. ISBN 0-470-09182-7.
- [Cusack(1987)] N. E. Cusack. *The Physics of Structurally Disordered Matter: An Introduction.* IOP Publishing Ltd, 1987. ISBN 0-85274-591-5.
- [Keen(1998)] DA Keen. Reverse Monte Carlo refinement of disordered silica phases. In Billinge, SJL and Thorpe, MF, editor, *LOCAL STRUCTURE FROM DIFFRACTION, FUNDAMENTAL MATERIALS RESEARCH*, pages 101–119. PLENUM PRESS DIV PLENUM PUBLISHING CORP, 1998. ISBN 0-306-45827-6.
- [Micoulaut(2013)] M. Micoulaut. "Atomistic Modeling of Glass Structure and Glass Properties", 2013. URL http://www.lptl.jussieu.fr/user/mmi/IMI_lecture/.
- [Rao(2002)] K. J. Rao. *Structural Chemistry of Glasses.* Elsevier Science and Technology Books, 2002. ISBN 0080439586.
- [Varshneya(1994)] A. K. Varshneya. *Fundamentals of Inorganic Glasses.* Academic Press, 1994. ISBN 0-12-714970-8.
- [Zallen(1998)] R. Zallen. *The Physics of Amorphous Solids.* A Wiley-Interscience publication. Wiley, 1998. ISBN 9780471299417. URL <https://books.google.it/books?id=V0jr74rPdUIC>.