



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## DISORDERED AND OFF-EQUILIBRIUM SYSTEMS

**SIMONE CAPACCIOLI**

Anno accademico 2022/23  
CdS MATERIALS AND NANOTECHNOLOGY  
Codice 315BB  
CFU 6

| Moduli                                 | Settore/i | Tipo    | Ore | Docente/i         |
|--|-----------|---------|-----|-------------------|
| DISORDERED AND OFF-EQUILIBRIUM SYSTEMS | FIS/03    | LEZIONI | 48  | SIMONE CAPACCIOLI |

Obiettivi di apprendimento

### *Conoscenze*

Il Corso è diviso in tre parti in cui si intende fornire conoscenze di base in:

- Descrizione ed interpretazione del disordine in liquidi, colloidi, vetri e polimeri.
- Dinamica e termodinamica degli stati di fuori equilibrio nella materia passiva e attiva.
- Tecniche sperimentali di uso corrente nello studio di struttura e dinamica di sistemi disordinati.

### *Modalità di verifica delle conoscenze*

Le conoscenze saranno verificate tramite prova orale.

### *Capacità*

Alla fine del Corso lo studente avrà acquisito capacità di comprensione e di analisi di studi sperimentali, teorici e computazionali nel campo della fisica dei sistemi disordinati e fuori equilibrio.

### *Modalità di verifica delle capacità*

Le lezioni sono svolte in modo quanto più interattivo possibile per verificare che gli studenti acquisiscano le capacità tecniche e di logica necessarie alla comprensione dei principali aspetti della fisica dei sistemi disordinati e fuori-equilibrio.

### *Comportamenti*

Sarà acquisita capacità di analisi e di schematizzazione dei principali aspetti della fisica dei sistemi disordinati e fuori-equilibrio.

### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Lezioni interattive e prova orale finale.

### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Conoscenze di base in Fisica della Materia e Fisica Statistica.

### *Indicazioni metodologiche*

Lezioni frontali, ricevimenti, utilizzo di e-mail e del sito e-learning per comunicazioni e materiale didattico addizionale.

### Programma (contenuti dell'insegnamento)

#### 1. Dall'ordine al disordine

- Ordine posizionale a lungo raggio non-periodico: quasi cristalli
- Disordine in sistemi atomici con ordine posizionale a lungo raggio (disordine cellulare)



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

- Disordine sostituzionale: impurezze interstiziali e sostituzionali, vacanze
- Disordine orientazionale: cristalli plastici (e.g. fullerene)
- Disordine in sistemi atomici senza ordine posizionale a lungo raggio (disordine topologico)
  - Elementi di base nei cristalli reali:
    - Dislocazioni e vettori di Burger,
    - Difetti interfacciali.
  - Stato liquido e solido amorfo
    - Funzioni di distribuzione a n-corpi, caso particolare di distribuzione a coppia, fattore di struttura statico
    - Liquidi atomici di sfere dure: cenni alla teoria di Percus-Yevick
- Disordine in sistemi polimerici
  - Conformazioni della catena polimerica lineare: analogia con il Random walk
  - Rigidità della catena: segmento di Kuhn
  - Distribuzione delle dimensioni della catena polimerica lineare
  - Energia libera della catena polimerica, elasticità entropica
  - Funzione di distribuzione a coppia della catena polimerica: autosimilarità

### 2. Dall'equilibrio al fuori equilibrio

- Stati metastabili sottoraffreddati e transizione vetrosa nei liquidi
  - Funzione di Van Hove e suoi momenti
  - Dinamica microscopica e collettiva: effetto gabbia e proprietà vibrazionali, rilassamento strutturale e locale, distribuzione di tempi di rilassamento, diffusione, viscoelasticità
  - Modelli elementari della transizione vetrosa:
    - Volume libero
    - Entropia configurazionale
- Cenni sulla termodinamica di non-equilibrio
  - Principio zero: temperatura fittizia dei vetri, rottura del teorema di fluttuazione-dissipazione
  - Secondo principio: uguaglianza di Jarzynski e teorema di fluttuazione di Crooks e loro test sperimentali in nanosistemi
- Dinamica della catena polimerica
  - Catena corta: modello di Rouse
  - Catena lunga: effetto degli aggrovigliamenti
    - Modello a tubo di Edwards
    - Moto di reptazione di De Gennes: argomenti di scala
- Cenni sugli stati di non-equilibrio nella materia attiva
  - Motori molecolari
  - Batteri, nuotatori, sciami: moti collettivi emergenti e transizione vetrosa

### 3. Tecniche sperimentali: struttura e dinamica di sistemi disordinati

- Scattering da sistemi disordinati: generalità
  - Sezioni d'urto di scattering, scattering coerente ed incoerente
  - Fattore di struttura statico e dinamico, scattering elastico e anelastico
  - Funzioni di correlazione spaziale, temporale e spazio-temporale
- Scattering di fotoni (raggi X e luce)
  - Sorgenti di radiazione coerente (sincrotrone), spettrometri e rivelatori
  - Struttura in sistemi disordinati: diffrazione di raggi X a largo e piccolo angolo
  - Dinamica in sistemi disordinati: scattering Brillouin e Raman, scattering anelastico di raggi X, spettroscopia di fotocorrelazione
- Scattering di neutroni
  - Sorgenti di neutroni, e rivelatori: tipici layout sperimentali.
  - Struttura in sistemi disordinati: diffrazione di neutroni a largo e piccolo angolo, confronto con i raggi X.
  - Scattering anelastico di neutroni e spettroscopia: TAS, TOF, Backscattering, Spin-Echo

#### Bibliografia e materiale didattico

##### Disordine:

K.Binder, W. Kob, *Glassy materials and disordered solids* (World Scientific, Singapore, 2005)

##### Fenomeni di non equilibrio:



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

P.G. Debenedetti, *Metastable Liquids* (Princeton University Press, Princeton, 1996),

M. Rubinstein, R.H. Colby, *Polymer Physics* (Oxford University Press, Oxford, 2003)

D.J.Evans, D.J.Searles, S.R.Williams. *Fundamentals of Classical Statistical Thermodynamics: Dissipation, Relaxation and Fluctuation Theorems* (Wiley-VCH, Weinheim, 2016)

### Tecniche di scattering:

D.S. Sivia, *Elementary Scattering Theory: For X-ray and Neutron Users* (Oxford University Press, 2011)

J. A. Nielsen and D. McMorro, *Elements of Modern X-ray Physics* (John Wiley & Sons, 2011)

B.J. Berne and E. Pecora, *Dynamic Light Scattering* (Dover, New York, 2000).

### Indicazioni per non frequentanti

Nessuna

### Modalità d'esame

Esame finale orale attraverso colloquio.

*Ultimo aggiornamento 30/08/2022 12:09*