

Principali informazioni sull'insegnamento	
Titolo insegnamento	CHIMICA FISICA DEI MATERIALI
Corso di studio	SCIENZA DEI MATERIALI
Crediti formativi	11 di cui 8 lezioni frontali e 3 di laboratorio
Denominazione inglese	CHEMICAL PHYSICS OF MATERIALS (with LABORATORY)
Obbligo di frequenza	SI
Lingua di erogazione	ITALIANO

Docente responsabile	Giuseppe Colafemmina Gerardo Palazzo	giuseppe.colafemmina@uniba.it gerardo.palazzo@uniba.it
-----------------------------	---	--

Dettaglio crediti formativi	Ambito disciplinare	SSD	Crediti
	Caratterizzante	CHIM/02	11

Modalità di erogazione	Periodo di erogazione	Anno di corso	Modalità di erogazione
	1° semestre	3°	Lezioni frontali (48h) Laboratorio (45h)

Organizzazione della didattica	Ore totali	Ore di corso	Ore di studio individuale
	275	93	182

Calendario	Inizio attività didattiche	Fine attività didattiche
	26.09.2016	23.12.2016

Syllabus	
Prerequisiti	Chimica generale, Termodinamica ed elementi di Meccanica quantistica
Risultati di apprendimento previsti (declinare rispetto ai Descrittori di Dublino) (si raccomanda che siano coerenti con i risultati di apprendimento del CdS, riportati nei quadri A4a, A4b e A4c della SUA, compreso i risultati di apprendimento trasversali)	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> comprensione della termodinamica di processi superficiali, colloidali e nanoparticelle, soluzioni polimeriche e transizioni di stato. Principi di reologia e light scattering e conoscenza dei concetti di base della meccanica quantistica • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</i> capacità di effettuare autonomamente semplici esperimenti e di elaborare i dati sperimentali di spettroscopia molecolare, stabilità colloidale e sistemi a base di tensioattivi • <i>Autonomia di giudizio</i> Corretta strategia da utilizzare in laboratorio per ottenere il risultato cercato utilizzando la strumentazione più appropriata presente in laboratorio. • <i>Abilità comunicative</i> <ul style="list-style-type: none"> - Proprietà di linguaggio nell'uso della lingua italiana scritta e orale sia nella presentazione dei risultati che nell'esposizione degli stessi; - abilità informatiche in rapporto alla elaborazione e presentazione di un semplice set di dati; - capacità di espressione nella presentazione e divulgazione delle proprie conoscenze con linguaggio scientifico appropriato; - capacità di lavorare in gruppo in modo da ottimizzare i tempi e ottenere un risultato efficace in laboratorio.

	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Capacità di apprendere</i> <ul style="list-style-type: none"> - Capacità di elaborare e presentare i dati sperimentali.
Contenuti in breve	Conoscenza delle basi teoriche delle comuni spettroscopie e loro utilizzo nei laboratori scientifici. comprensione della termodinamica di processi superficiali, colloidali e nanoparticelle, soluzioni polimeriche e transizioni di stato. Principi di reologia e light scattering
Programma Preventivo in dettaglio	<p>Aspetti Generali Richiami storici e spettro elettromagnetico. Emissione e assorbimento di una radiazione, teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo. Legge di Lambert-Beer e Momento di transizione dipolare. Larghezza di riga. Trasformata Fourier - Aspetti generali con esempi di spettroscopie a Trasformata Fourier (NMR e IR). Principio di Born-Oppenheimer: Separazione dei moti nucleari da quelli elettronici Spettroscopia Rotazionale – Livelli energetici rotazionali, regole di selezione e degenerazione dei livelli; distorsione centrifuga e spettro di un rotatore lineare. Spettroscopia Vibrazionale – Spettri roto-vibrazionali, regole di selezione e misura delle costanti rotazionale, distorsione centrifuga e vibrazionale. Misura delle lunghezze di legame. Molecole poliatomiche: introduzione delle coordinate normali Spettroscopia molecolare– Metodo LCAO orbitali molecolari per le molecole biatomiche, transizioni vibroniche. Principio di Franck-Condon, Sorte degli stati eccitati. Stati di tripletto e di singoletto. Illustrazione a blocchi di spettrofotometri e spettrofluorimetri; funzionamento dei loro componenti. Spettroscopia NMR Aspetti generali, Modello vettoriale, Magnetizzazione di bulk, impulso rf, rotating frame, spettro, chemical shift. Fourier Transform e data processing. Strumentazione NMR. Interazioni nucleari - chemical shift, dipole-dipole, accoppiamento scalare e quadrupolare Stato Solido NMR: Aspetti generali - Tecniche essenziali: MAS , Cross-Polarisation e tecniche di disaccoppiamento. Tensione superficiale e fenomeni di superficie Origine molecolare della tensione superficiale e definizione operativa. Bagnabilità e Relazione di Young. Lavoro di adesione e lavoro di coesione; coefficiente di spandimento. Condensazione capillare. Superfici curve: equazione di Young-Laplace. Capillarità. Effetto della curvatura sulla nucleazione: dipendenza dalla temperatura. Sottoraffreddamento, sovraebollizione, dipendenza di $T_{fusione}$ dalle R; crioconservazione e sinterizzazione. Sintesi di nanoparticelle colloidali: top-down e bottom-up. Modello di nucleazione e crescita di nonocristalli colloidali mediante approccio bottom-up. Considerazioni energetiche, definizione di dimensione critica, sovraturazione critica. Crescita sotto controllo diffusivo e sotto controllo di reazione. Ostwald Ripening e regime di focalizzazione. Adsorbimento: Isoterma di adsorbimento di Gibbs. Tensioattivi, classificazione e detergenza. Adsorbimento e modello di Gibbs. Eccesso superficiale: definizione. Isoterma di adsorbimento di Gibbs; tensione superficiale al variare della concentrazione di un</p>

sale, di un tensioattivo, di un composto organico polare. Monolayer di Gibbs. Isoterma di Langmuir. Monolayer di Langmuir.

Diffusione: Equazione della diffusione. Eq. Stokes-Einstein. Coefficiente di permeabilità. Random walk. Light scattering statico e dinamico. Misura del coefficiente di diffusione mediante Dynamic Light Scattering (con esercitazione)

Tensioattivi

Termodinamica dei processi di autoassociazione. Effetto dei tensioattivi sulla tensione superficiale (con esercitazione). Forma degli aggregati e parametro di impaccamento del tensioattivo (con esercitazione). Cristalli liquidi liotropici: diagrammi di stato tensioattivo-acqua. Copolimeri a blocchi. Interfasi fluide: introduzione alle Microemulsioni

Stabilità colloidale: Interazioni attrattive di Van der Waals, costante di Hamaker, interazioni dovute a superfici cariche, teoria DLVO, cinetiche di aggregazione (con esercitazione). Interazioni non-DLVO (cemento)

Transizioni di stato discontinue e continue

Definizioni ed esempi (fusione, lacune di miscibilità e evaporazione lontano e vicino al punto critico). Parametro d'ordine. Transizioni di stato continua ferromagnetico-paramagnetico. Cristalli liquidi termotropici: nematici, smetici e colestanici. Transizione discontinua liquido isotropo/nematico, definizione e misura del parametro d'ordine. Modelli mean field delle transizioni di stato: Modello di Bragg-Williams per le lacune di miscibilità. Modello di Maier Saupe per la transizione isotropo/nematico. Trattamento generale delle transizioni di stato intorno al p.to critico; funzionale di Landau

Soluzioni polimeriche

Polimeri: Dimensioni del random coil: definizione e misura. Conformazione di polimeri reali: persistence length. Soluzioni Polimeriche: teoria di Flory-Huggins: Impostazione: lattice model con numero di coordinazione $Z=2$, entropia configurazionale. diagrammi di stato: lacune di miscibilità asimmetriche per sistemi polimero/solvente; polimeri diversi sono immiscibili tra loro; Diagrammi di stato di copolimeri a blocchi. Pot chimico solvente: bontà del solvente. Effetto dei polimeri sulla stabilità colloidale. Leggi di scala: Come scala la viscosità con il peso molecolare (Mark-Houwink). Come scala la concentrazione di transizione al regime semidiluito (C^*) con il peso molecolare

Reologia: Risposta viscosa (legge di Newton) e risposta elastica (legge di Hook). Materiali plastici e pseudo plastici. Fluidi viscoelastici, Elemento di Maxwell. Spettroscopia reologica: principio di misura, significato di G' e G'' e del tempo caratteristico. Andamenti caratteristici per soluzioni di polimeri non ramificati e gel cross-linked.

Teoria della reptazione per soluzioni polimeriche

Dipendenza del tempo di reptazione dal peso molecolare

Termodinamica dell'elasticità degli elastomeri

	<p style="text-align: center;">Esperienze di Laboratorio</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Analisi degli spettri IR in fase gas di molecole biatomiche CO e HCl per la misura delle costanti roto-vibrazionali relativa alle due molecole in un potenziale anarmonico. 2) Analisi quantitativa di un campione incognito di bromobenzene tramite retta di taratura, 3) Determinazione di lunghezze medie di legami coniugati in dieni e coloranti. Misura della transizione 0-0' tramite misure di fluorescenza. 4) Misura della costante acida del 2-naftolo nello stato fondamentale e in quello eccitato tramite misure di spettroscopia Uv-Vis e fluorescenza. 5) Misure di cmc e area per testa polare di un tensioattivo da misure di tensione superficiale. 6) Determinazione del raggio idrodinamico di micelle da misure di dynamic light scattering (DLS). 7) Monitoraggio delle transizioni di forma delle micelle con uso combinato di DLS e viscosimetria. 8) Cinetiche di aggregazione di soluzioni colloidali
Testi di riferimento	<p>SPECTRA OF ATOMS AND MOLECULES – P. F. Bernath 2nd ed. Oxford (2005)</p> <p>MODERN SPECTROSCOPY- J. Michael Hollas 4th Ed. – Wiley (2004)</p> <p>SOLID STATE NMR BASIC PRINCIPLES AND PRACTICE – D C Apperley, R K Harris, P Hodgkinson – Momentum Press (2012)</p> <p>Colloidal Foundations of Nanoscience, Eds. D. Berti, G. Palazzo, Elsevier, Amsterdam, 2014, pp.33-46;</p> <p>Evans, F.; Wennestrom, H. In <i>The Colloidal Domain: Where Physics, Chemistry, Biology, and Technology Meet</i>, 2nd ed.; Wiley-VCH, 1999</p> <p>Robert Piazza, <i>La Materia dei Sogni</i>, Springer, 2010.</p>
Note ai testi di riferimento	Solo alcuni capitoli e solo alcune sezioni
Metodi didattici	Lezioni frontali con slides, lavori di gruppo all'interno delle esperienze di laboratorio.
Metodi di valutazione	Valutazione report di laboratorio (40%), Esame orale (60%), Incentivazione rapidità (+ 2/30); Esoneri senza preavviso durante il corso.
Criteri di valutazione (per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo studente conosca o sia in grado di fare e a quale livello al fine di dimostrare che un risultato di apprendimento è stato raggiunto e a quale livello)	<p>Conoscenza dei principi alla base della spettroscopia;</p> <p>Conoscenza delle equazioni fondamentali che descrivono gli stati energetici e spettroscopici, le regole di selezioni in modo da interpretare i differenti spettri;</p> <p>Conoscenza della comune attrezzatura chimica di un laboratorio e imparare ad utilizzare procedure semplici in uso un laboratorio chimico;</p> <p>Stima degli errori di una misura e rappresentare graficamente i dati sperimentali in maniera appropriata;</p> <p>saper scrivere un report di laboratorio;</p> <p>saper presentare in maniera efficace in forma scritta e orale i risultati di un esperimento.</p>

