

Principali informazioni sull'insegnamento	
Titolo insegnamento	CHIMICA FISICA DEI MATERIALI – MOD A
Corso di studio	SCIENZA DEI MATERIALI
Crediti formativi	6
Denominazione inglese	CHEMICAL PHYSICS OF MATERIALS (with LABORATORY)
Obbligo di frequenza	SI
Lingua di erogazione	ITALIANO

Docente responsabile	Giuseppe Colafemmina	gisueppe.colafemmina@uniba.it
-----------------------------	----------------------	-------------------------------

Dettaglio crediti formativi	Ambito disciplinare	SSD	Crediti
	Caratterizzante	CHIM/02	6

Modalità di erogazione	Periodo di erogazione	Anno di corso	Modalità di erogazione
	I° semestre	3°	Lezioni frontali (32h) Laboratorio (30h)

Organizzazione della didattica	Ore totali	Ore di corso	Ore di studio individuale
	150	62	88

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> conoscenza degli aspetti di base di chimica generale con qualche riferimento alla termodinamica 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 in spettroscopia • <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. Tale capacità potrà poi essere esportata negli ambienti lavorativi futuri. • <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.
Programma in dettaglio	<p>Aspetti Generali</p> <p>Richiami a: Corpo nero e suo spettro, Leggi di Wien, Stefan-Boltzmann e Rayleigh-Jeans, Effetto fotoelettrico, Legge di Plank e spettro elettromagnetico.</p> <p>Emissione e assorbimento di una radiazione, coefficienti di Einstein e loro calcolo tramite l'applicazione della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo. Legge di Lambert-Beer e Momento di transizione dipolare. Dipendenza della larghezza di riga dai fenomeni fisici connessi.</p> <p>Trasformata Fourier - Aspetti generali con esempi di calcolo di trasformate Fourier di alcune funzioni utili in spettroscopia; esempi di spettroscopie a Trasformata Fourier (NMR e IR).</p> <p>Principio di Born-Oppenheimer: Separazione dei moti nucleari da quelli elettronici</p> <p>Spettroscopia Rotazionale –Classificazione delle molecole in base ai momenti d'inerzia principali. Livelli energetici rotazionali, regole di selezione e degenerazione dei livelli; distorsione centrifuga e spettro di un rotatore lineare.</p> <p>Spettroscopia Vibrazionale – Potenziale armonico e anarmonico di Morse. Livelli energetici del vibratore biatomico; costante di anarmonicità e regole di selezione; Spettri roto-vibrazionali e misura delle costanti rotazionale, distorsione centrifuga e vibrazionale. Misura delle lunghezze di legame. Molecole poliatomiche ; introduzione delle coordinate normali e esempi di spettri reali</p> <p>Illustrazione a blocchi di spettrofotometri IR e FTIR nelle loro parti essenziali.</p> <p>Spettroscopia molecolare– Metodo LCAO orbitali molecolari per le molecole biatomiche, orbitali HOMO-LUMO; transizioni vibroniche, progressioni e sequenze. Principio di Franck-Condon, Intensità di una banda e fattori Franck-Condon. Sorte degli stati eccitati: processi radiativi e aradiativi; fluorescenza e fosforescenza; Stati di tripletto e di singoletto.</p> <p>Illustrazione a blocchi di spettrofotometri e spettrofluorimetri; funzionamento dei loro componenti.</p> <p>Spettroscopia NMR</p> <p>Aspetti generali : Atomi, nuclei, momenti angolari, stati di spin, precessione e frequenza di Larmor.</p> <p>Modello vettoriale – Magnetizzazione di bulk, impulso rf, rotating</p>

	<p>frame, spettro, chemical shift. Fourier Trasform e data processing. Strumentazione NMR.</p> <p>Interazioni nucleari - chemical shift, dipole-dipole, accoppiamento scalare e quadrupolare</p> <p>Cenni di rilassamento di spin rilassamento longitudinale, trasversale</p> <p>Stato Solido NMR: Aspetti generali - Tecniche essenziali: MAS , Cross-Polarisation e tecniche di disaccoppiamento.</p> <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 bromo-benzene 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.
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>
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>
Altro	