



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI FEDERICO II
SCUOLA POLITECNICA E DELLE SCIENZE DI BASE

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE

CORSO DI LAUREA MAGISTRALE
IN SCIENZE E TECNOLOGIE DELLA
CHIMICA INDUSTRIALE

Classe delle Laurea Magistrali in Scienze e Tecnologie della Chimica Industriale,
Classe N. LM-71

PERCORSO FORMATIVO

ANNO ACCADEMICO 2017/2018

Napoli, giugno 2017

Articolazione degli Insegnamenti Anno Acc. 2017/2018

Insegnamento o attività formativa	Mod.	CFU	SSD	Tip.	Ambiti Disciplinari
I Anno - I Semestre					
Complementi di Chimica Inorganica		6	CHIM/03	2	2.2
Analisi e Sintesi Organica		6	CHIM/06	2	2.4
Impianti Chimici		8	ING-IND/25	2	2.3
Chimica Industriale I		10	CHIM/04	2	2.3
I Anno - II Semestre					
Chimica Industriale II	I	5	CHIM/04	2	2.3
	II	5			
Chimica Fisica Industriale		6	CHIM/02	4	
Corso curricolare I		6	CHIM/04/05 ING-IND/25	2	2.3
Corso a scelta ^(a)		6		3	
II Anno - I Semestre					
Corso curricolare II		6	CHIM/04/05 ING-IND/25	2	2.3
Corso curricolare III		6	CHIM/01 CHIM/04/05	2, 4	2.1, 2.3
Corso curricolare IV o Corso a scelta ^(a)		6		3	
Ulteriori conoscenze e tirocinio		6		6	
II Anno - II Semestre					
Corso curricolare IV o Corso a scelta ^(a)		6	CHIM/03 CHIM/04/05	2, 4	2.2, 2.3
Attività per la preparazione dell'elaborato della laurea magistrale		31		5	
Esame di laurea magistrale		1		5	

- (a) Per quanto riguarda i 2 Insegnamenti da 6 CFU a libera scelta, gli Studenti, presentando il loro piano di studi entro il 1° Semestre del 1° Anno, con la scelta del curriculum, potranno anche scegliere gli Insegnamenti a libera scelta tra tutti quelli attivati presso l'Università degli Studi di Napoli Federico II per i quali non hanno già ricevuto CFU nella Laurea di primo livello. Resta stabilito che per ogni esame sostenuto positivamente verranno riconosciuti non più di 6 CFU. Per arricchire le competenze dell'indirizzo prescelto, la Commissione Didattica di Chimica Industriale propone gli Insegnamenti riportati nella Tabella "Insegnamenti a scelta consigliati". Gli studenti che scelgono il Curriculum Formulazioni Industriali scelgono anche il Corso Curricolare IV tra:
Metodi di Caratterizzazione dei Materiali Polimerici (I semestre)
Qualità, Sicurezza e Tutela Brevettuale nell'Industria Chimica (II semestre)

Insegnamenti Curricolari

Curriculum	Prodotti e Processi e Tutela Ambientale			
Insegnamento o attività formativa	CFU	SSD	Tip. (*)	Ambiti Disciplinari (*)
I Anno – II Semestre				
Tecnologie Avanzate nei Processi Chimici Industriali	6	CHIM/04	2	2.3
II Anno – I Semestre				
Processi e Impianti di Trattamento Reflui	6	ING-IND/25	2	2.3
Metodi Analitici per il Controllo di Qualità e di Processo	6	CHIM/01	4	2.1
II Anno – II Semestre				
Qualità, Sicurezza e Tutela Brevettuale nell'Industria Chimica	6	CHIM/04 ING-IND/25	2	2.3

Curriculum	Scienza dei Polimeri			
Insegnamento o attività formativa	CFU	SSD		
I Anno – II Semestre				
Chimica e Tecnologia dei Polimeri	6	CHIM/04/05	2	2.3
II Anno – I Semestre				
Proprietà e Struttura dei Polimeri	6	CHIM/04/05	2	2.3
Metodi di Caratterizzazione dei Materiali Polimerici	6	CHIM/04/05	2	2.3
II Anno – II Semestre				
Chimica dei Materiali Avanzati	6	CHIM/03	4	2.2

Curriculum	Formulazioni Industriali			
Insegnamento o attività formativa	CFU	SSD		
I Anno – II Semestre				
Chimica Fisica delle Formulazioni	6	CHIM/02	2	2.3
II Anno – I Semestre				
Formulazioni Industriali	6	CHIM/04	2	2.3
Formulazioni Polimeriche	6	CHIM/04/05	2	2.3
Metodi di Caratterizzazione dei Materiali Polimerici oppure un Corso a Scelta	6	CHIM/04/05	2,3	2.3
II Anno – II Semestre				
Qualità, Sicurezza e Tutela Brevettuale nell'Industria Chimica oppure un Corso a Scelta	6	CHIM/04 ING-IND/25	2,3	2.3

Insegnamenti a scelta consigliati

Insegnamento o attività formativa	CFU	SSD	Tip. (*)
I Semestre			
Chimica Fisica dei Materiali	6	CHIM/02	3
Morfologia dei Polimeri ^(a)	6	CHIM/04	3
II Semestre			
Processi di Termoconversione dei Solidi Finalizzati alla Produzione di Energia	6	ING-IND/25	3
Reologia ^(b)	6	ING/IND 24	3
Catalisi di Polimerizzazione Ziegler –Natta e Metallocenica	6	CHIM/04	3
Biopesticidi per l'agricoltura	6	CHIM/06	3
Polimeri per applicazioni biomediche	6	CHIM/03/04/05	3
Scienza e Tecnologia dei Materiali ^(a)	6	CHIM/04	3
Chimica Fisica dei Colloidi e delle Interfasi ^(c)	6	CHIM/02	3
Chimica dei Composti Metallorganici ^(c)	6	CHIM/03	3
Chimica e Tecnologia della Catalisi ^(c)	6	CHIM/03	3

(a) Mutuato dal Corso di Studi in Chimica Industriale

(b) Mutuato dal Corso di Laurea in Ingegneria dei Materiali

(c) Mutuato dal Corso di Studi in Scienze Chimiche.

(*) **Legenda delle tipologie delle attività formative ai sensi del D.M. 270/04**

Attività formativa	1	2	3	4	5	6	7
Rif. D.M. 270/04	Art.10 comma 1, a)	Art.10 comma 1, b)	Art.10 comma 5, a)	Art.10 comma 5, b)	Art.10 comma 5, c)	Art.10 comma 5, d)	Art.10 comma 5, e)
	Base	Caratterizzanti	A scelta	Affini o Integrativi	Prova Finale	Ulteriori Conoscenze	Stage o Tirocini

(**) **Legenda degli ambiti disciplinari**

Ambiti disciplinari	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	2.4
rif. DCL	Discipline Matematiche, informatiche e fisiche	Discipline Chimiche	Discipline chimiche analitiche e ambientali	Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche	Discipline chimiche industriali e tecnologiche	Discipline chimiche organiche e biochimiche

SCHEDE DEGLI INSEGNAMENTI

Insegnamento N.1: Complementi di Chimica Inorganica

Modulo: Unico			
Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/03			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: L'insegnamento si propone di illustrare criticamente gli aspetti di Chimica Inorganica rilevanti per la chimica dei materiali e la catalisi industriale nel campo della "chimica fine". In particolare saranno trattati la simmetria molecolare con elementi di teoria di gruppi, e il legame chimico, struttura e reattività dei composti di coordinazione e organometallici, con esempi di applicazioni in processi catalitici di interesse industriale.</p> <p>Programma del corso:</p> <p>1° parte: Simmetria, struttura e legame chimico.</p> <p>Geometria Molecolare e Simmetria. Elementi di simmetria e gruppi puntuali. Assegnazione di una molecola ad un gruppo puntuale. <i>Elementi di teoria dei gruppi:</i> Operazioni di simmetria e rappresentazioni matriciali. Rappresentazioni irriducibili e tavole dei caratteri. Combinazioni di orbitali atomici adattate alla simmetria (SALC). Costruzione di uno schema di orbitali molecolari dalle SALC. <i>Spettri vibrazionali:</i> Modi normali di vibrazione. Riconoscimento di stereoisomeri da spettri IR. Simmetria e numero di bande negli spettri IR. 16 ore</p> <p>2° parte: Struttura e reattività dei composti di coordinazione.</p> <p>Leganti e complessi. Numeri di coordinazione, geometrie e fattori che li determinano. Principali classi di leganti. Isomeria e chiralità in composti di coordinazione. <i>Legame chimico nei complessi:</i> Teoria del campo legante e orbitali molecolari. Donatori σ. Donatori ed accettori π. Effetti sulle separazioni fra le energie degli orbitali d e sulla stabilità dei complessi. Altri effetti sterici ed elettronici sulla struttura e stabilità dei complessi. Relazioni "hard-soft". <i>Reazioni di scambio di leganti:</i> Inerzia e labilità. Meccanismi di scambio di leganti. Composti organometallici: conto degli elettroni di valenza. Stato di ossidazione formale e regola dei 18 elettroni. 6 ore.</p> <p>Classi di reazioni e classi di composti in chimica organometallica. Doppio scambio e trans-metallazione. <i>Metallo alchili e Idruro-complessi:</i> Preparazione e reazioni. Addizione ossidativa ed eliminazione riduttiva. <i>Metallo carbonili:</i> Preparazione. Spettri infrarossi e loro utilizzo nella caratterizzazione dei carbonili. Reazioni: sostituzione, riduzione, addizione nucleofila, inserzione ed eliminazione. <i>Complessi olefinici:</i> Struttura e legame chimico. Reazioni di inserzione e di attacco nucleofilo. <i>Complessi allilici:</i> Struttura e legame chimico. Reazioni di attacco nucleofilo. <i>Complessi ciclopentadienilici:</i> Struttura e legame chimico. <i>Complessi carbenici:</i> preparazione e reazioni. 16 ore</p> <p>Composti di coordinazione in catalisi omogenea. <i>Reazioni catalitiche di alcheni:</i> Idrogenazione. Isomerizzazione e oligomerizzazione. Idroformilazione. Idrocianazione. Ossidazione. Metatesi. Coupling vari. Epossidazione e diidrossilazione. Ciclopropanazione. Meccanismi e varianti enantioselettive delle reazioni suddette. 8 ore.</p> <p>Testi consigliati: Shriver, Atkins: Inorganic Chemistry, 5° ed. inglese o italiana. R. L. Carter, Molecular symmetry and group theory, Wiley 1998. R. H. Crabtree, The organometallic chemistry of transition metals, Wiley 2005.</p>			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: E' previsto un esame orale.			

Insegnamento N.2: Analisi e Sintesi Organica

Modulo: Unico			
Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/06			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
	Altro (specificare):		
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Il corso si propone di fornire agli studenti a) i metodi avanzati NMR e spettrometria di massa per definire la struttura dei composti organici b) la conoscenza delle più importanti sintesi organiche di interesse industriale			
Programma del corso: a) spettroscopia NMR: tecniche mono e bidimensionali tecniche multimpulse avanzate b) le tecniche di spettrometria Soft Matter: MALDI e elettrospray c) l'uso di NMR, IR, spettroscopia UV e spettrometria di massa per definire la struttura dei composti organici. Soluzione di problemi di determinazione strutturale. d) Principali sintesi organiche di interesse industriale			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova orale			

Insegnamento N.3: Impianti Chimici

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: ING-IND/25			CFU: 8
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratori:
	Altro (specificare):		
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Fornire gli approfondimenti necessari per la qualificazione professionale specialistica su sistemi reattori chimici, operazioni non isotermiche, condizioni di flusso non ideali, processi catalitici eterogenei e processi eterogenei non catalitici.			
Programma: Sistemi costituiti da più reattori continui: reattori tubolari ideali in serie e/o parallelo; reattori a mescolamento di eguali dimensioni in serie; reattori a mescolamento di differenti dimensioni in serie; reattori di tipo diverso in serie. Reattori tubolari con riciclo. Progetto di reattori per reazioni multiple: schemi in parallelo, in serie e in serie-parallelo con reazioni irreversibili e di equilibrio. Effetto della temperatura su sistemi di reazioni singole irreversibili e di equilibrio, sia endotermiche che esotermiche. Progressione ottimale di temperatura per sistemi di reazioni singole reversibili esotermiche ed operazione a stadi adiabatici con raffreddamento intermedio. Reattori adiabatici ed autotermici. Reattori non isoterme. Effetto della temperatura su sistemi di reazioni multiple. Ottimizzazione della distribuzione dei prodotti per sistemi in parallelo, in serie e in serie-parallelo. Moto dei fluidi non ideale nei reattori chimici. Funzioni di distribuzione delle età e dei tempi di permanenza in un sistema in flusso. Sollecitazioni a scalino e ad impulso in un sistema in flusso. Caratterizzazione di un sistema in flusso reale come reattore chimico dalla sola funzione di distribuzione dei tempi di permanenza: flussi a segregazione e cinetiche lineari. Modelli di flusso. Modello a dispersione assiale per reattori tubolari reali. Modelli di flusso a più parametri: applicazione al caso dei reattori a mescolamento reali. Adsorbimento fisico e chimico e criteri di distinzione. Energetica dell'adsorbimento. Isotherme di adsorbimento. Caratterizzazione dei solidi porosi. Distribuzione porosimetrica. Metodo BET per la determinazione dell'area superficiale specifica. Stadi elementari e cinetica dei processi catalitici eterogenei. Fattore di efficienza di un catalizzatore. Reattori catalitici a letto fisso. Trasporto di calore in letti a riempimento. Bilancio di materia in reattori catalitici eterogenei non isoterme. Processi eterogenei non catalitici. Cinetica di reazioni solido-gas di differente tipologia. Modello dello "shrinking core" e modello a grani.			
Fonti bibliografiche Appunti dalle lezioni. O. Levenspiel, <i>Chemical Reaction Engineering</i> , Ed. Wiley/Casa Editrice Ambrosiana. J.M. Smith, <i>Chemical Engineering Kinetics</i> , Ed. McGraw-Hill.			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale.			

Insegnamento N.4: Chimica Industriale I

Modulo: unico		
Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/04		CFU: 10
Ore di studio per ogni ora di lezione: 2	Esercitazione:1	Laboratorio:
	Altro (specificare): 64 ore di lezione + 24 ore esercitazioni	
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: In questo modulo verrà sviluppata la conoscenza degli studenti sui processi di maggiore importanza della Chimica Organica Industriale affrontando prima di tutto i processi legati alla raffinazione del petrolio e successivamente verranno descritti i processi della petrolchimica. Si descriveranno quindi i principali processi per la produzione degli intermedi e i principi della Chimica Fine. Durante il corso saranno svolte esercitazioni sullo sviluppo di processi industriali partendo dall'analisi di case history.</p> <p>Programma del corso: Parte 1: Il petrolio e la sua raffinazione Parte 2: La petrolchimica di base. Parte 3: L'industria degli intermedi. Parte 4: La Chimica Fine Parte 5: Carburanti e Prodotti da Materie Prime Rinnovabili Parte 6: Sviluppo di Processo e Costi di Impianto Parte 7: Case History (Esercitazioni)</p> <p>Testi consigliati: Dispense del corso.</p>		
Propedeuticità: Nessuna		
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale		

Insegnamento N.5: Chimica Industriale II (2 Moduli)

Modulo I: Chimica Industriale II			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04/05			CFU: 5
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare): 48ore di lezione			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Acquisizione delle nozioni fondamentali sui processi di produzione e sulle proprietà di materiali inorganici metallici e ceramici e confronto con le proprietà di materiali polimerici.</p> <p>Programma del corso: Introduzione alla scienza dei materiali. Materiali metallici, ceramici e polimerici. Lo stato solido di materiali: lo stato amorfo, cristallino e semicristallino. Strutture cristalline di materiali metallici. Lo stato solido di polimeri e proprietà dello stato amorfo vetroso e gommoso. Requisiti per la cristallizzazione di polimeri e strutture cristalline di polimeri. Difetti e disordine nei solidi cristallini. Dislocazioni. Mesofasi solide, cristalli liquidi e nanostrutture. Diffrazione dei raggi X di materiali. Interpretazione di spettri di diffrazioni dei raggi X di materiali in polvere, cristalli singoli e fibre. Microscopia elettronica nello studio dei materiali. Proprietà meccaniche di materiali metallici, ceramici e polimerici. Tests meccanici: curve sforzo-deformazione, prove di impatto, fatica e durezza. Viscoelasticità di polimeri. Proprietà meccaniche di elastomeri. Meccanismi molecolari delle deformazioni di materiali. Solidificazione e cristallizzazione di materiali. Equilibri di fase. Diagrammi di stato: leghe binarie, curve di raffreddamento, eutettico, trasformazioni eutetoidica, monotettica, peritettica e peritettoidica. Diagrammi di stato ternari. Microstrutture, Proprietà e Lavorazione di Materiali Metallici. Diagramma ferro-carbonio. Acciai, Ghise, Martensite e acciai inossidabili. Materiali ceramici tradizionali e avanzati. Calce, gesso e cemento. Cemento armato e calcestruzzo. Materiali compositi. Esercizi su diagrammi di fase e curve temperatura-trasformazione-tempo, sul diagramma di stato ferro-carbonio e su acciai legati. Brevetti Industriali, Normative internazionali per la caratterizzazione tecnologica di materiali.</p> <p>Testi consigliati per i due moduli: W. F. Smith “<i>Scienza e tecnologia dei materiali</i>” McGraw-Hill Libri Italia srl –1995 L. H. Van Vlack “<i>Elements of Material Science and Engineering</i>” Addison-Wesley Publishing Company 1989. Anthony R. West “Solid state Chemistry and its Applications” John Wiley & Sons. Dispense scritte dal Prof. Claudio De Rosa. <i>Brevetti Industriali</i>: fotocopie di appunti dalla Prof. Auriemma. B. A. Amernick, "Patent law for the nonlawyer", Van Nostran Reinhold Company Inc. (1986). Banca dati: esp@cenet per una ricerca rapida di brevetti dal sito WEB “it.espacenet.com”. Annual book of ASTM standards" (1988) e sito WEB www.ASTM.org.</p>			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova orale finale. Eventuali prove scritte in itinere e finale.			

Modulo II : Laboratorio di Chimica Industriale II			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04/05			CFU: 5
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione:	Laboratorio:1
Altro (specificare): 8 ore di lezione e 36 ore di laboratorio			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Tecniche di caratterizzazione di materiali inorganici metallici e ceramici e confronto con i materiali polimerici. Esercitazioni numeriche e analisi dei dati per lo studio delle relazioni tra proprietà misurate in laboratorio e organizzazione strutturale degli atomi e/o molecole.</p> <p>Programma del corso Fondamenti dello scattering elastico della radiazione elettromagnetica da parte della materia al basso ed alto angolo; elementi di cristallografia in relazione alla scienza dei materiali; metodi di analisi delle proprietà meccaniche e viscoelastiche dei materiali; tecniche principali di analisi termica e di microscopia (ottica ed elettronica) per la determinazione delle proprietà termiche e la morfologia dei materiali.</p> <p>Esercitazioni di laboratorio su relazioni proprietà-struttura di materiali.</p> <p>1- Prove meccaniche su materiali: Curve sforzo-deformazione di differenti materiali. Determinazione dell' isteresi meccanica di elastomeri. Curve di rilassamento dello sforzo (stress-relaxation) a deformazione costante. Curve della variazione della deformazione nel tempo, mantenendo lo sforzo costante (creep).</p> <p>2- Calorimetria differenziale a scansione (DSC): Differenze e analogie nel comportamento all'analisi termica di composti a bassa ed ad alta massa molecolare Determinazione di diagrammi di fase per via calorimetrica. Studio del polimorfismo di materiali.</p> <p>3- Diffrazione dei raggi X ad alto angolo: Determinazione di alcuni parametri strutturali di alcuni metalli e di alcuni polimeri. Uso delle tecniche diffrattometriche per polveri e fibre.</p> <p>4- Diffrazione dei raggi X al basso angolo (SAXS): Analisi di sistemi porosi (es. gel di silice) attraverso tecniche SAXS. Analisi di nanoparticelle metalliche in sospensioni colloidali diluite Studio della morfologia di materiali nanostrutturati: copolimeri a blocchi; Determinazione del tipo di nanostruttura e delle periodicità.</p> <p>5- Microscopia a forza atomica AFM: Analisi AFM topografica e di fase di superfici nano strutturate. Analisi AFM di superfici libere di materiali porosi.</p> <p>Esercitazioni numeriche: Reticoli cristallini. Piani di Bragg, direzioni reticolari, calcoli di distanze ed angoli di legame da coordinate frazionarie. Analisi SAXS di nano strutture Estrapolazione dei dati SAXS nei limit Porod e Guinier Scattering da parte di oggetti isolati vs. oggetti interferenti. Determinazione dell' area specifica all' interfaccia in sistemi bifasici e porosi.</p>			
Propedeuticità:			

Insegnamento N.6: Chimica Fisica Industriale

Modulo: unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/02			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione: 1	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Il corso si propone di sviluppare negli studenti la capacità di analizzare il comportamento dei sistemi reali, chiusi e/o aperti, nei termini delle loro proprietà termodinamiche. Il corso comprende un ampio numero di esercitazioni numeriche, molte delle quali riguardano problematiche comuni della chimica industriale, che consentono agli studenti di verificare le capacità acquisite mediante lo studio degli argomenti teorici esposti.</p> <p>Programma del corso:</p> <p>La termodinamica dei sistemi reali. Le proprietà delle sostanze pure. Comportamento PVT di una sostanza pura. Trasformazioni di fase delle sostanze pure. Equazione di Clapeyron. Tensioni di vapore e calori latenti. Proprietà dei sistemi bifase. Dilatazione volumetrica. Capacità termiche dei solidi e dei liquidi. Capacità termiche dei gas. Valutazione delle proprietà termodinamiche per i sistemi PVT. Diagrammi termodinamici e tabelle per sistemi PVT. Il fattore di compressibilità. Equazione del viriale. Equazioni di stato empiriche. Principio degli stati corrispondenti.</p> <p>Termodinamica dei sistemi aperti. Equazioni di conservazione dell'energia per sistemi chiusi. Equazioni dell'energia per sistemi aperti in regime stazionario. Formulazione generale dell'equazione dell'energia. Applicazione del secondo principio ai sistemi aperti. Equazioni di bilancio dell'energia meccanica. L'ugello adiabatico. Le turbine ad azione ed a reazione.</p> <p>I gas reali. Energia interna, entalpia, entropia ed energia di Gibbs di un gas reale. Il problema della divergenza e definizione di fugacità. Metodi sperimentali per la valutazione della fugacità. Relazione tra le capacità termiche di un gas reale. Miscele di gas reali.</p> <p>Le soluzioni reali. Relazioni fondamentali delle funzioni eccesso. Attività e coefficienti di attività. Applicazioni dell'equazione di Gibbs-Duhem. Le soluzioni regolari. I metodi interpolativi dei coefficienti di attività: equazioni di Margules e di van Laar. L'espansione di Wohl per l'energia di Gibbs eccesso. L'equazioni di Wilson. I metodi NRTL ed UNIQUAC. Descrizione di sistemi con separazione di fase. I metodi predittivi dei coefficienti di attività: il metodo UNIFAC.</p> <p>Testi consigliati: M. M. Abbott, H. C. van Ness. Termodinamica. ETAS J. G. Kirkwood, I. Oppenheim. Chemical Thermodynamics. McGraw-Hill J. M. Parusnitz, R. N. Lichtenthaler, E. Gomes de Azevedo. Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria, Prentice-Hall</p>			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale scritta ed orale.			

Curriculum Didattico: Prodotti, Processi e Tutela Ambientale

Insegnamento Curricolare N.1-PPTA: Tecnologie Avanzate nei Processi Chimici Industriali

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM 04			CFU: 6 (3LF+3EN)
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: In questo corso verrà insegnato allo studente come impostare l'attività di laboratorio e di calcolo per acquisire i dati necessari in vista del passaggio di scala a impianto pilota o industriale, concentrando l'attenzione, in particolare, su aspetti reattoristici, modalità di separazione e trattamento degli effluenti .			
Programma del corso:			
1) Utilizzo di software per la modellazione matematica di processi chimici industriali			
2) Analisi, identificazione e discriminazione di modelli; determinazione parametri e relativi intervalli di confidenza.			
3) Determinazione dei parametri cinetici in un reattore batch con cinetica complessa (impiego di metodi di regressione non lineare).			
4) Studio di reazioni in presenza di ripartizione di fase			
4.1 – Reattori gas-liquido			
4.2 – Reattori liquido-liquido			
5) Studio di reazioni in presenza di fenomeni di trasferimento di calore e di materia.			
5.1 – Reattori gas-liquido			
5.2 – Reattori gas-solido			
5.3 – Reattori gas-liquido-solido			
6) Esercitazioni per l'apprendimento dell'uso di simulatori di processo			
Testi consigliati:			
Dispense delle lezioni, slides del docente. Tutto il materiale è disponibile sul sito del docente in formato pdf.			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Esame orale con discussione della relazione su un tema assegnato.			

Insegnamento Curricolare N.2-PPTA: Processi e Impianti di Trattamento Reflui

Modulo: Unico			
Settore Scientifico Disciplinare: ING-IND/25 (Impianti Chimici)			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Tramite questo Insegnamento, gli Studenti potranno: 1) apprendere le principali tecniche di depolverazione di correnti gassose generate in processi chimici industriali, approfondendo anche gli aspetti quantitativi e progettuali; 2) estendere la loro conoscenza dei principali processi di rimozione di composti gassosi da correnti gassose, con particolare riferimento ad aspetti fenomenologici e progettuali; 3) apprendere i concetti basilari riguardanti l'evoluzione dinamica ed il controllo di processi chimici; 4) sviluppare una sensibilità di base in merito ai principali parametri che guidano l'analisi economica di un processo chimico.</p> <p>Programma del corso: I. <u>Particolato in refluì gassosi</u>. Considerazioni generali. Coefficiente di drag e bilanci di forze. Individuazione della velocità terminale di caduta al variare dei regimi operativi (Stokes, intermedio, Newton). Distribuzioni granulometriche. Efficienze di depolverazione. Applicazioni numeriche. II. <u>Separatori a gravità</u>. Considerazioni generali ed equazioni di progetto. Tempi caratteristici per le fasi solida e gassosa. Calcolo dell'efficienza di depolverazione. Calcolo del diametro critico. Applicazioni numeriche. III. <u>Cicloni</u>. Considerazioni generali ed equazioni di progetto. Fluidodinamica del sistema. Equazione di Rosin et al. per il calcolo del diametro di cut. Calcolo dell'efficienza di depolverazione. Applicazioni numeriche. IV. <u>Depolveratori ad umido</u>. Considerazioni generali ed equazioni di progetto. Cattura per meccanismi inerziali e Browniani. Torri a pioggia. Depolveratori Venturi. Equazione di Nukiyama-Tanasawa per il calcolo del diametro delle gocce. Equazione di Johnstone et al. per il calcolo dell'efficienza di depolverazione. Applicazioni numeriche. V. <u>Precipitatori elettrostatici</u>. Considerazioni generali ed equazioni di progetto. Effetto Corona. Resistività particellare. Equazione per il calcolo della velocità di migrazione elettrostatica. Equazione di Deutsch-Anderson per il calcolo dell'efficienza di depolverazione. Applicazioni numeriche. VI. <u>Filtri a manica</u>. Considerazioni generali e di progetto. Rapporto aria-tessuto. Scelta del materiale filtrante. VII. <u>Assorbimento con reazione chimica</u>. Considerazioni generali e richiami all'assorbimento fisico. Tempi caratteristici di reazione e diffusione, numero di Hatta, regimi operativi cinetico e diffusivo. Fattore di esaltazione. Reazioni estremamente veloci. Reazioni veloci. Equazioni di progetto per torri in controcorrente e sistemi agitati. Applicazioni numeriche. VIII. <u>Adsorbimento</u>. Considerazioni generali. Profili spazio-temporali di concentrazione. Curve di breakthrough. Equazioni di bilancio, di trasporto e di progetto. Applicazioni numeriche IX. <u>Conversione termica e catalitica</u>. Considerazioni generali. Post-combustione di composti organici volatili. Processi in assenza e presenza di letti catalitici. X. <u>Evoluzione dinamica di processi chimici</u>. Considerazioni generali. Equazioni di bilancio. Variabili deviate. Trasformate di Laplace per la risoluzione di equazioni differenziali lineari. Trasformate di Laplace per funzioni d'interesse. Risposta di sistemi non controllati per forzanti a gradino, ad impulso ed esponenziali decrescenti. XI. <u>Controllo feed-back di processi chimici</u>. Considerazioni generali. Responsi open-loop e closed-loop. Funzioni di trasferimento. Controllori proporzionali, proporzionali integrali e proporzionali integrali derivativi. Risposta di sistemi controllati per forzanti a gradino. XII. <u>Analisi economica di processi chimici</u>. Considerazioni generali. Investimenti, legge dell'economia di scala, tasso di ammortamento, ammortamento, ricavi, costi, profitto lordo, tasse, profitto netto. Legge di attualizzazione del denaro. Strategia sinking fund per la scelta del tasso di ammortamento. Venture profit. Fattore di rischio. Costi specifici, profitto lordo e produttività critica per processi chimici.</p> <p>Fonti bibliografiche: Appunti dalle lezioni e lezioni su piattaforma web-learning "federic@" (www.federica.unina.it/smf). DW Green, RH Perry. <i>Perry's Chemical Engineers' Handbook</i>, Ed. McGraw-Hill. O Levenspiel. <i>Chemical Reaction Engineering</i>, Ed. Wiley. WL McCabe, JC Smith, P Harriott. <i>Unit Operations of Chemical Engineering</i>, Ed. McGraw-Hill. G Stephanopoulos. <i>Chemical Process Control</i>, Ed. Pearson/Prentice-Hall. L Theodore. <i>Air Pollution Control Equipment Calculations</i>, Ed. Wiley.</p>			
Propedeuticità: Nessuna.			
Modalità di accertamento del profitto: Prova orale.			

Insegnamento Curricolare N.3-PPTA: Qualità, Sicurezza e Tutela Brevettuale nell'Industria Chimica

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM 04			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Obiettivo del corso è di fornire una panoramica delle attuali norme di certificazione della qualità e dei criteri di controllo statistico della qualità industriale. Una seconda parte del corso riguarda le problematiche della sicurezza industriale e del rischio chimico, anche in funzione delle più recenti normative in materia. La parte finale del corso mira a fornire informazioni circa la tutela della proprietà intellettuale in ambito chimico industriale e circa le possibilità di effettuare ricerche brevettuali.</p>			
<p>Programma del corso:</p> <p>1 Qualità</p> <ul style="list-style-type: none">Cenni storiciIntroduzione al sistema qualitàConcetti di baseStruttura delle normeComponenti e tools per il sistema qualitàControllo statistico dei processi produttivi <p>2 La sicurezza nell'industria chimica</p> <ul style="list-style-type: none">Rischio e pericoloValutazione del rischio chimicoSchede di sicurezza, frasi di rischio e pericoloSistema REACHReazioni Run-awayValutazione del rischio nell'industria di processoEsempi applicativi <p>3 Brevetti</p> <ul style="list-style-type: none">GeneralitàL'iter brevettuale in Italia e nel mondoStruttura di un brevettoEsempi di brevetti di argomento chimicoRicerca brevettuale via Web			
<p>Material didattico:</p> <p>Dispense del docente, monografie, pubblicazioni scientifiche, software</p>			
<p>Testi</p> <p>Crowl D.A., Louvar J.F., Chemical Process Safety. Fundamental with applications, Prentice Hall, New Jersey, 1990.</p> <p>Lees F.P., Loss prevention in the process industries, Butterworth-Heinemann, London, 1996.</p> <p>Jorg Steinbach, Safety Assessment for Chemical Processes, John Wiley & Sons, 11/lug/2008</p>			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale			

Insegnamento Curricolare N.4-PPTA: Metodi Analitici per il Controllo di Qualità e di Processo

Modulo: Unico			
Settore Scientifico Disciplinare: CHIM/01			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Il corso si propone di approfondire tecniche analitiche avanzate per l'analisi di materiali, il monitoraggio ambientale ed il controllo degli ambienti di lavoro. Inoltre si intende presentare le applicazioni delle metodiche analitiche per il controllo della qualità di prodotti industriali e dei processi.			
Programma. Metodi radiochimici. Analisi per Attivazione Neutronica, Analisi per diluizione isotopica. Metodi radiometrici.. Spettrometria alfa. Spettrometria beta. Spettrometria gamma. Misura del Radon. Spettroscopie atomiche per l'analisi isotopica e di superfici. Spettroscopia elettronica (ESCA) e Spettroscopia Auger. Microscopia elettronica a scansione e microsonda elettronica. Spettrometrie di massa per l'analisi isotopica. Analisi con fasci ionici (IBA). Spettroscopi molecolari per l'analisi di superfici. Spettroscopia di riflettanza. Spettroscopia Raman.. Spettroscopia per immagini. Controllo di processo: sensori e biosensori. Fibre ottiche e guide d'onda planari. Spettroscopia con onda evanescente ed in risonanza di plasmoni (SPR). Sensori ottici. Biosensori. Sensori basati su misure elettrochimiche. Metodi immunochimici. Controllo di processo: analisi in flusso. Analisi per iniezione in flusso (FIA). Analisi in flusso sequenziale(SIA). Metodi di separazione nell'Analisi Strumentale. Cromatografia Fast. Cromatografia GC×GC. Ultra HPLC e nano HPLC. GC-ICP-MS. TGA-GC-IR e TGA-GC-MS. Reazioni di derivatizzazione in GC. Reazioni di derivatizzazione in HPLC. Metodi di separazione con campi elettrici. Tecniche di preparazione del campione per l'analisi. Estrazione con solvente. Estrazione di componenti volatili. Estrazione in fase solida. Microestrazione in fase solida. Estrazione con fluidi supercritici. Qualità ambientale: controllo di miscele gassose. Analisi dell'atmosfera. Analisi dei flussi convogliati. Analisi degli ambienti di lavoro. Qualità ambientale: controllo di acque e suoli. Campionamento delle acque e dei suoli. Analisi degli inquinanti inorganici delle acque e dei suoli. Analisi degli inquinanti organici delle acque e dei suoli.			
Materiale didattico. Dispense del docente.			
Testi. Kellner, Mermet, Otto, Widmer, Chimica Analitica, Edizione 2003, EdiSES Napoli; K.H. Koch, <i>Process Analytical Chemistry</i> , Springer; K. Bakeev, <i>Process Analytical Technology</i> , Backwell Publishing.			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova orale			

Curriculum Didattico: Scienza dei Polimeri

Insegnamento Curricolare N.1-SP: Chimica e Tecnologia dei Polimeri

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04-05			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: In questo corso saranno esaminati i principali polimeri di interesse industriale e nuove classi di materiali polimerici “ad alto valore aggiunto”, illustrando per ognuno di essi le tecnologie di produzione, le proprietà chimiche e fisiche, le tecnologie di trasformazione e le applicazioni. Oltre l’elenco dei polimeri riportati di seguito, saranno brevemente trattati anche i materiali compositi e i problemi ambientali legati alla produzione, al riciclo e allo smaltimento dei rifiuti di materiali polimerici. Per ogni classe di polimeri vengono fornite informazioni sui processi di produzione, sulle metodiche sintetiche utilizzate e sugli aspetti economici (costi e quantità prodotte).</p> <p>Programma del corso: POLIETILENE: cenni storici. Vari tipi di polietilene: LDPE, HDPE, LLDPE. Cenni ai diversi meccanismi di ottenimento e ai processi di produzione industriale. Polietilene. Struttura molecolare e morfologia. Proprietà generali e relazione proprietà-struttura per i vari tipi di polietilene. Impieghi dei vari tipi di polietilene e tecnologie di preparazione dei manufatti. Film. Extrusion Coating. Blow molding. Injection molding. Pipe. Wire and cable insulation. Ultra High modulus PE fibers. Copolimeri dell’etilene: tipi, modi di preparazione, proprietà e impieghi. Polietilene chimicamente modificati: cross-linked PE. Aspetti ambientali relativi alla produzione, allo smaltimento e al riciclo. POLIPROPILENE: cenni storici. Cenni ai processi industriali di produzione. Ragioni per l’eccezionale crescita della produzione di PP. Struttura del polipropilene: catalizzatori e stereoregolarità della catena, cristallizzazione, polimorfismo e morfologia. Proprietà dell’omopolimero. Copolimerizzazione: copolimeri random e copolimeri ad alto impatto. Proprietà dei copolimeri. Rifinitura del prodotto: additivi, compounding. Impieghi dei vari tipi di polipropilene e tecnologie di preparazione dei manufatti: Injection molding. Structural foamed moldings. Blow molding. Film. Fibre e Flat Yarns. Fogli e lastre. Tubi estrusi. Aspetti ambientali. Riciclo. Pirolisi. Combustione. POLI(1-BUTENE): produzione. Cenni ai processi industriali di produzione. Struttura, proprietà fisiche e applicazioni. Polimorfismo e problemi connessi. Proprietà e relazioni proprietà-struttura. Tipi di lavorazione e applicazioni (tubi, film). POLIISOBUTENE: cenni ai processi industriali di produzione. Vari tipi di polimero prodotti con diverso peso molecolare. Struttura, proprietà fisiche e applicazioni dei vari tipi di poliisobutene. Gomma isobutile. POLI(4-METIL-1-PENTENE): produzione. Cenni ai processi industriali di produzione. Struttura, proprietà fisiche e applicazioni: Proprietà ottiche. Stabilità e resistenza chimica. Proprietà meccaniche. Tecniche di lavorazione. Impieghi. POLISTIRENE e COPOLIMERI dello STIRENE: cenni storici. Vari tipi di polistirene: polistirene puro (PS), polistirene ad alto impatto (HIPS), copolimeri dello stirene. PS e HIPS: cenni ai processi di produzione industriale. Proprietà. Relazioni proprietà-struttura. Ragioni della loro affermazione come polimeri di massa. Schiume di polistirene: ottenimento e proprietà. Impieghi dei vari tipi di polistirene e tecnologie di preparazione dei manufatti: Injection molding, estrusione e termoformatura. Riciclo e aspetti ambientali. Copolimeri termoplastici dello stirene (SAN e ABS): trattati a parte. Copolimeri elastomerici dello stirene: gomma SBR. Copolimeri a blocco stirene-butadiene come termoelastomeri. Cenni sulla preparazione. Proprietà e impieghi. COPOLIMERI STIRENE-ACRILONITRILE (SAN): produzione. Composizione. Proprietà. Impieghi. Relazione proprietà struttura. Effetti della presenza dell’acrilonitrile. POLIMERI ACRILONITRILE-BUTADIENE-STIRENE (ABS): definizione e struttura. Preparazione. Reticolazione della fase gommosa. Additivi. Morfologia del materiale finale. Impieghi e tecnologie di preparazione dei manufatti. Caratterizzazione. dei manufatti. Relazioni proprietà struttura. Riciclo. Miscele con ABS. POLIVINILCLORURO (PVC): cenni storici. Ragioni per l’eccezionale crescita della produzione del PVC. Richiami sui vari processi per la polimerizzazione a catena. Processo in sospensione. Processo in emulsione. Processo in massa. Resistenza chimica del PVC. Morfologia. Versatilità. Tipi di PVC prodotti e loro caratteristiche. Additivi. Plasticizzanti. Impieghi dei vari tipi di PVC e loro tecnologie di lavorazione. Relazioni proprietà-struttura. Tossicologia e problemi di salute ambientale relativi alla produzione e allo smaltimento del PVC. POLIMETILMETACRILATO (PMMA): produzione. Proprietà. Relazioni proprietà struttura. Impieghi e tecnologie di lavorazione del PMMA. POLIAMMIDI (PA): caratteristiche generali delle poliammidi. Nylons. Cenni storici. Monomeri, sintesi e nomenclatura. Masse molecolari. Problemi relativi. PA 66 (NYLON 66). Cenni ai processi industriali di produzione. PA 6 (NYLON 6). Cenni ai processi industriali di produzione. Proprietà chimiche e fisiche dei Nylon 66 e 6. Assorbimento di acqua. Relazioni proprietà-struttura. Additivi e modifiche. Impieghi e tecnologie di lavorazione. POLIESTERI: caratteristiche generali dei poliesteri. Polietilentereftalato (PET) e polibutilentereftalato (PBT). Sintesi di PET e PBT. Cenni ai processi industriali di produzione del PET. Processo da DMT e processo da AT. Analisi del prodotto ottenuto. Co-componenti e additivi. Proprietà chimiche e fisiche di PET e PBT e loro confronto. Relazione fra proprietà e struttura. Impieghi e tecnologie di lavorazione del PET e del PBT. Riciclo del PET. POLICARBONATI: Caratteristiche generali dei policarbonati. Policarbonato del BisFenolo A (BFA-PC). Produzione e proprietà chimiche e fisiche del BFA-PC. Additivi. Eccezionali proprietà di questo termoplastico. Relazioni proprietà-struttura. Impieghi e tecnologie di lavorazione del BFA-PC. Riciclo. POLIMERI TERMOINDURENTI: resine fenoliche, resine amminiche, PU (poliuretani), UP (poliesteri insaturi), EP (resine epossidiche). POLIMERI FLUORURATI: caratteristiche generali dei polimeri fluorurati. Politetrafluoroetilene. Produzione. Tipi di PTFE prodotti (granuli, polveri fini, dispersione acquosa). Proprietà eccezionali del PTFE. Relazione fra proprietà e struttura. Impieghi e tecnologie di lavorazione del PTFE. POLIMERI CONDUTTORI POLIMERI PER ALTE TEMPERATURE Testi di riferimento: Dispense delle lezioni; Encyclopedia of Polymer Science and Technology vol. 1, 10, 11.; Macromolecole “Scienza e Tecnologia”, AIM, Pacini Editore - Pisa vol. 1.; Edward S. Wilks “Industrial polymers handbook” Wiley-VCH (2001) – Vol. 1-3</p>			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale scritta e/o orale			

Insegnamento Curricolare N.2-SP: Proprietà e Struttura dei Polimeri

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04-05			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Si intende fornire agli studenti gli strumenti teorici e metodologici per lo studio delle relazioni tra proprietà e struttura dei materiali polimeri in fase condensata (principalmente per sistemi semicristallini) prendendo in esame sia l'influenza della struttura delle catene polimeriche (costituzione e configurazione) sia quella della morfologia risultante dalla storia termo-meccanica a cui il materiale viene sottoposto.</p> <p>Programma del corso: Aspetti generali delle Proprietà dei polimeri: Proprietà che dipendono dalla catena singola e proprietà che dipendono dalle interazioni tra catene. Stato cristallino e stato amorfo o fuso polimerico. Catena singola: funzione di correlazione tra distanze di segmenti della catena e lunghezza di persistenza. Catena Ideale e Funzione di Debye. vs. Catena espansa. Esponenti critici e dimensioni frattali della catena ideale e quella espansa. Catena ideale e fuso polimerico. Modello RIS ed entropia di fusione dei polimeri. Catena espansa. Blob termico e cross over: da rigid rod -a- Catena ideale - a - coil espanso. Soluzioni diluite e semidiluite: Ruolo delle interazioni. Pressione osmotica e secondo coefficiente del viriale (interazioni a due corpi). Zimm Plot: determinazione del raggio di girazione, della massa molecolare media pesata e del secondo coefficiente del viriale. Sistemi concentrati e distanza di correlazione caratteristica per lo schermo delle interazioni di volume escluso tra segmenti di catena per effetto della presenza di altre catene in sistemi entangled. Concetto di screening length secondo Sam Edwards. Variazione della screening length con la concentrazione e cross-over dalla catena espansa alla catena ideale all' aumentare della concentrazione: Ipotesi di Flory delle dimensioni del coil nei fusi polimerici. Aspetti cinetici della separazione di fase in soluzioni polimeriche e in blends polimeriche. Stadi iniziali della decomposizione spinodale. Fluttuazione termiche vs. fluttuazioni della concentrazione. Temperatura critica e aumento delle fluttuazioni di concentrazione. La decomposizione spinodale come transizione di fase del secondo ordine termodinamico. Teoria di Cahn, Hilliard, and Cook e derivazione dello scattering critico secondo de Gennes e Binder. Random Phase Approximation. Distanza di correlazione delle fluttuazioni di concentrazione e divergenza di detta distanza al punto critico. Binodale e decomposizione binodale. Ultimi stadi della separazione di fase e self similarità morfologica su diverse scale di lunghezza nell' approccio dello stato di equilibrio con separazione macroscopica delle fasi. Lo stato cristallino. Differenza fra molecole piccole e polimeri. Prerequisiti per la cristallizzabilità dei polimeri. Polimeri regolari e stereoregolari. Come cristallizza un polimero. Stato semicristallino e grado di cristallinità di un materiale polimerico. Grado di cristallinità. Determinazione del grado di cristallinità per via densitometrica, dilatometrica e calorimetrica. Accenni ad altri metodi alternativi di tipo spettroscopico. Differenze e limiti dei vari metodi. Cristallizzazione dei polimeri - Cristallizzazione dal fuso. Aspetti termodinamici e aspetti cinetici. Estrapolazione Gibbs-Thomson. Velocità di cristallizzazione e sua dipendenza dalla temperatura. Cristallinità assoluta e cristallinità apparente. Cristallizzazione primaria e cristallizzazione secondaria. Nucleazione primaria omogenea ed eterogenea. Equazione di Avrami e suoi limiti. Parametri coinvolti nella nucleazione primaria omogenea: molecole piccole e nucleo sferico; polimeri e nucleo a forma di parallelepipedo. Nucleazione secondaria ed accrescimento di cristalli singoli di polimero in regime I. Teoria di Hoffman e Lauritzen, miti e fatti. Accordo fra previsione della teoria e osservazioni sperimentali. Metodo di Strobl e metodo di Hoffmann-Weeks per l' estropolazione della temperatura termodinamica di fusione. Trattamenti termici e temperature di fusione. - Fenomeni di ricottura. Comportamento termico di un materiale polimerico semicristallino. Analisi DSC di un campione polimerico al variare della velocità di riscaldamento: discussione dei possibili comportamenti. Influenza dei possibili fenomeni di ricristallizzazione e di surriscaldamento sull'aspetto del diagramma osservato. Temperatura di fusione termodinamica di un cristallo perfetto di polimero e sua determinazione.</p> <p><i>Morfologia del cristallo singolo.</i> Ottenimento di cristalli singoli da soluzioni diluite con la tecnica dell'autonucleazione. Osservazione della forma e delle dimensioni dei cristalli mediante microscopia elettronica per trasmissione (TEM). Diffrazione elettronica di cristalli singoli. "Chain folding" e modelli ipotizzati. Misurazione delle dimensioni dei cristalli mediante diffrazione dei raggi X al basso angolo. Effetti della temperatura di cristallizzazione sulle dimensioni dei cristalli. Valutazione del grado di cristallinità lineare dei cristalli dal loro spessore e dallo spessore delle porzioni amorfe ad essi associati. <i>Morfologia sferulitica.</i> Condizioni di ottenimento. Osservazioni al microscopio ottico e loro interpretazione. Osservazioni al microscopio elettronico a scansione (SEM). Organizzazione delle lamelle nello sferulita durante le varie fasi di accrescimento. Dimensioni degli sferuliti e delle lamelle che lo costituiscono. Influenza della temperatura di cristallizzazione. Spettro ai raggi X di un campione polimerico sferulitico e sua utilizzazione per determinare il grado di cristallinità e le dimensioni dei cristalli. <i>Morfologia fibrosa.</i> Nuclei lineari e Cristalli a catena estesa. "Shish-kebabs". Effetto dello sciear sulla cinetica di cristallizzazione.</p> <p>TESTI CONSIGLIATI 1) Strobl, G. <i>The Physics of Polymers</i> Springer; 2007; AIM - "Macromolecole, Scienza e Tecnologia" - Pacini Editore - Pisa Vol. I e Vol. II (1983) con particolare riferimento ai seguenti capitoli: Vol. I - Cap. I-1.3. Analisi conformazionale - I-2.2. Diffrattometria dei raggi X. Vol. II - Cap. V-1. Lo stato cristallino (Lo stesso argomento è trattato anche nel capitolo 8 di una più recente versione in un unico volume del testo dell'AIM dal titolo "Fondamenti di Scienza dei Polimeri" uscito alla fine del 1998, sempre a cura della Pacini Editore). 2) "Polymers, Liquid Crystals, and Low-Dimensional Solids" Edited by N.March and M.Tosi - Plenum Press - 1984 A.Keller : Capitoli 1-5 (morfologia e cristallizzazione) 3) Per la parte "Morfologia" D. C. Bassett, <i>Principles of Polymer Morphology</i>, Cambridge University Press, Cambridge, 1981.</p>			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale scritta e/o orale			

Insegnamento Curricolare N.3-SP: Chimica dei Materiali Avanzati

Modulo: Unico			
Settore Scientifico Disciplinare: CHIM 03			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Verranno illustrati gli aspetti sintetici, strutturali, chimico-fisici e le potenziali applicazioni di alcune classi di materiali avanzati con particolare riguardo a quelli per applicazioni in elettronica e fotonica.</p> <p>Richiami di Meccanica Quantistica. Equazione di Schroedinger dipendente e indipendente dal tempo; particella libera; numero d'onda; particella nella scatola: caso unidimensionale con dimostrazione; scatola cubica (s.d.); effetto tunnel; statistica di Boltzmann e di Fermi-Dirac. Simmetria dei cristalli. Reticoli di Bravais. Reticolo diretto. Serie di Fourier. Reticolo reciproco.</p> <p>Teoria dei metalli. Modello di Sommerfeld dell'elettrone libero; livello di Fermi; elettrone in un potenziale periodico; teorema di Bloch; modello di Kronig e Penney; bande di energia; approssimazione del legame forte e del legame debole; zone di Brillouin; massa effettiva; densità degli stati; superconduttività.</p> <p>Semiconduttori inorganici. Modello a bande dei semiconduttori; conduzione con elettroni e buche; semiconduttori intrinseci ed estrinseci; legge di azione di massa; semiconduttori estrinseci; drogaggio; livello di Fermi nei semiconduttori; dipendenza della conduttività dalla temperatura: regime estrinseco, regime di esaurimento, regime intrinseco; mobilità dei portatori di carica: scattering da fononi e da impurezze; generazione e ricombinazione dei portatori di carica, vita media e lunghezza di diffusione; elementi del IV gruppo; composti intermetallici III-V; altri composti inorganici semiconduttori; metodi per la preparazione dei cristalli. Dispositivi a semiconduttore: teoria della giunzione <i>p-n</i>. Rettificatori, fotocellule, celle fotovoltaiche, transistor.</p> <p>Conducibilità elettrica in materiali organici. Il meccanismo di hopping. Effetti intracatena e intercatena. Meccanismo di generazione dei portatori di carica.</p> <p>Polimeri conduttori. Generalità; classi principali; drogaggio dei polimeri conduttori; conducibilità; spettri di assorbimento; solubilità; proprietà elettrochimiche; preparazione elettrochimica dei polimeri conduttori; preparazione elettrochimica di polipirrolo, polianilina e politiofene; poliacetilene e derivati; proprietà di base dei polimeri coniugati; livelli elettronici; proprietà ottiche; effetto delle catene laterali.</p> <p>Derivati solubili del poli(tiofene). Sintesi di poli(3-alciltiofeni); regioregolarità dei poli(3-alciltiofeni); sintesi col metodo della ossidazione chimica; sintesi col metodo di metatesi di Grignard e McCullough; sintesi col metodo di Rieke; sintesi con reazioni di accoppiamento di Suzuki e Stille; sintesi di politiofeni con catene laterali coniugate; sintesi di poli(3-alcossitiofeni).</p> <p>Poli(fenileni-vinilene) e derivati. Sintesi col metodo precursore di Wessling; sintesi col metodo di Gilch; sintesi con reazione di accoppiamento di Heck; sintesi con metodo di Wittig; sintesi per condensazione di Knoevenagel; sintesi di poli(fenilenietileni); metodo catalitico Pd(0); metatesi di alchini.</p> <p>Semiconduttori organici. Transistor organici a effetto di campo (OFET); dispositivi e caratteristiche; requisiti molecolari; struttura cristallina; morfologia dei film; aceni e oligofenileni; molecole basate sul tiofene; sistemi aromatici bidimensionali.</p> <p>Materiali con proprietà ottiche nonlineari del secondo ordine. Generalità; nonlinearietà nei materiali e nelle molecole; metodi sperimentali per la misura delle nonlinearietà molecolari; ottimizzazione delle nonlinearietà molecolari; materiali con proprietà nonlineari quadratiche; polimeri con attività NLO quadratica; sistemi guest-host; polimeri side-chain; polimeri main-chain; sistemi cross-linked e vetri organici; sistemi dendrimerici.</p> <p>Cristalli Liquidi. Ordine orientazionale e posizionale nei cristalli liquidi; fase nematica; parametro d'ordine; fasi smettiche A e C; cristalli liquidi chinali; fasi colesteriche e smettiche C*; caratteristiche chimico-strutturali dei cristalli liquidi; molecole rod-loke; metodi sperimentali per il riconoscimento di fasi liquido cristalline: calorimetria differenziale a scansione, microscopia in luce polarizzata, diffrazione dei raggi X; caratteristiche ottiche dei cristalli liquidi: birifrangenza; orientamento dei cristalli liquidi per effetto elettrico, magnetico, meccanico; cella a cristallo liquido in configurazione twisted; display a cristalli liquidi.</p>			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova orale			

Insegnamento Curricolare N.4-SP: Metodi di Caratterizzazione dei Materiali Polimerici

Modulo: Unico			
Settore Scientifico Disciplinare: CHIM 04-05			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare): 48 ore di lezione			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Acquisizione dei principali metodi per la caratterizzazione strutturale e delle proprietà chimico-fisiche dei polimeri.			
Contenuti: Principi generali e esempi di utilizzo di alcune tecniche per la caratterizzazione dei materiali polimerici quali: diffrazione dei raggi X, spettroscopia FTIR e RAMAN, spettroscopia ^{13}C NMR in soluzione e allo stato solido, microscopia ottica, tecniche di determinazione di massa e dimensione di macromolecole.			
Programma analitico del corso: Diffrazione dei raggi X: breve richiamo di alcuni principi generali. Orientazioni preferenziali nei polimeri: orientazione della fase cristallina e della fase amorfa. Nomenclatura dei vari tipi di orientazione molecolare della fase cristallina e riconoscimento di esse attraverso la diffrazione dei raggi X. Figure polari: ottenimento e interpretazione delle figure polari, esempi di figure polari di fibre e film di polimeri con diverso grado e tipo di orientazione. Grado di orientazione della fase cristallina e determinazione del parametro d'ordine di Hermans. Spettroscopia FTIR e RAMAN: breve richiamo di alcuni principi generali. Spettri vibrazionali di polimeri: regole di selezione, informazioni deducibili dagli spettri vibrazionali di polimeri, esempi di spettri FTIR e RAMAN di alcuni polimeri. Tecniche sperimentali per l'acquisizione degli spettri vibrazionali. Analisi delle orientazioni preferenziali di fibre e film di polimeri mediante spettroscopia FTIR. Spettroscopia NMR: richiamo di alcuni principi generali. Spettroscopia ^{13}C NMR di polimeri, effetto γ -gauche, regole di Grant e Paul, informazioni ottenibili dagli spettri ^{13}C NMR di polimeri. Spettroscopia ^{13}C NMR allo stato solido: effetti di impacchettamento, interpretazione di spettri ^{13}C NMR di polimeri allo stato solido. Tecniche sperimentali: Disaccoppiamento dipolare, magic angle spinning (MAS) e Cross Polarization (CP). Microscopia ottica: principi generali. Microscopia ottica in luce polarizzata: analisi delle orientazioni preferenziali di polimeri. Grado di orientazione della fase amorfa mediante misure di birifrangenza. Masse molecolari di polimeri: definizioni delle masse molecolari medie e funzioni di distribuzione delle masse molecolari. Tecniche di determinazione di massa, dimensioni e forma di macromolecole: Metodi basati sulle proprietà colligative: osmometria. Analisi dei gruppi terminali. Volumi idrodinamici: viscosimetria. Metodi basati sulla diffusione di radiazione: light scattering, Zimm plot, diffrazione dei raggi X e dei neutroni al basso angolo (SAXS e SANS), spettrometria di massa, diffusione dinamica di macromolecole in soluzione. Tecniche di determinazione delle curve di distribuzione dei pesi molecolari di polimeri: cromatografia per permeazione su gel (GPC).			
Testi consigliati: Dispense del docente. L.E. Alexander "X-Ray Diffraction Methods in Polymer Science" R.E. Krieger Publishing Co., Huntington, N.Y. B. Blümich "Essential NMR" Springer Ed. 2005. E.A. Tonelli and J.L. White "NMR Spectroscopy of Polymers" Physical Properties of Polymers Handbook Springer Ed. 2007 Chapter 20, p. 359. R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle "Spectrometric Identification of Organic Compound" John Wiley & Sons Ed. 2005. AIM "Fondamenti di Scienza dei Polimeri" Pacini Editore.			
Propedeuticità: Nessuna.			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale.			

Curriculum Didattico: Formulazioni Industriali

Insegnamento Curricolare N.1-FI: Chimica fisica delle formulazioni

Modulo: <i>Unico</i>			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/02			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Il corso si pone l'obiettivo di fornire allo studente competenze nella progettazione, preparazione e caratterizzazione termodinamica, dinamica e spettroscopica di formulati colloidali di interesse industriale. Inizialmente si ricapitolano ed approfondiscono le competenze termodinamiche di base; vengono quindi introdotti i principi della termodinamica dei colloidi e delle interfasi. Nell'ultima parte del corso si presentano alcune formulazioni industriali scelte come esempio. Parallelamente, vengono illustrati i principali metodi di caratterizzazione chimico-fisica di sistemi colloidali, con particolare riguardo a quelli basati sullo <i>scattering</i> di radiazioni e sulla spettroscopia di risonanza magnetica			
Programma del corso: Richiami dei concetti di termodinamica: funzioni termodinamiche ausiliari, grandezze parziali molari, potenziale chimico. Soluzioni ideali, atermiche, regolari e non ideali. Stabilità termodinamica dei sistemi. Fenomeni interfasali, la tensione superficiale. Natura delle forze intermolecolari: volume escluso, interazioni elettrostatiche, forze disperdenti. Sistemi anfifilici: tipologia, proprietà chimico-fisiche e strutturali. <i>Self-assembly</i> . Isoterma di Gibbs. Termodinamica della micellizzazione. La concentrazione critica micellare (CMC), metodi di misura, effetti della temperatura e degli elettroliti sulla CMC. Parametro di impacchettamento. Krafft point e cloud point. Mesofasi liquido-cristalline. Diagrammi di fase di sistemi anfifilici. Emulsioni e microemulsioni. Bilancio idrofilico-idrofobico (HLB). Stabilità dei sistemi colloidali: teoria DLVO. Temperatura di inversione di fase (PIT). Curvatura e rigidità delle superfici. Comportamento di fase. Colloidi liofili, liofobi e di associazione. Principali agenti disperdenti. Preparazione e proprietà cinetiche, reologiche, ottiche, elettriche. Proprietà di trasporto nei sistemi polifasici. Progettazione, preparazione e caratterizzazione di formulazioni colloidali di interesse industriale ed individuazione dei parametri chimico-fisici che ne determinano le prestazioni. Tecniche di <i>scattering</i> : <i>light scattering</i> statico e dinamico, <i>small angle neutron scattering</i> . Tecniche spettroscopiche impiegate nella caratterizzazione strutturale di sistemi aggregati; risonanza magnetica nucleare, risonanza di spin elettronico e loro applicazioni.			
Propedeuticità: nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale			

Insegnamento Curricolare N.2-FI: Industria delle Formulazioni

Modulo:			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM04			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:	Esercitazione:	Laboratorio:
	Altro (specificare):		
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Il Corso si pone come obiettivo iniziale quello di inquadrare nel panorama nazionale ed internazionale i diversi settori dell'industria delle formulazioni. Saranno affrontati i temi generali legati alla formulazione (Progettazione dei formulati e tecniche di R&D, processi industriali per la formulazione) che verranno successivamente applicati a casi specifici scelti come esempio.			
Programma del corso: L'Industria delle Formulazioni: settori, mercati, aziende. Progettazione della Formulazione: Individuazione dei fattori da considerare prima della sperimentazione (Stakeholders, dati di mercato, criteri di performance, restrizioni regolamentari); Principi di Design of Experiment (DOE). Analisi dei risultati. Metodi Predittivi. Ingredienti funzionali per la formulazione: disperdenti, emulsionanti, antimicrobici, leganti, fluidificanti, etc. Processi industriali per la formulazione: granulazione, essiccamento, emulsioni, dispersioni, sospensioni, movimentazione di liquidi ad alta viscosità, cristallizzazione, confezionamento. L'industria delle Vernici e degli Inchiostri. L'industria degli Adesivi.			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova Finale Orale			

Insegnamento Curricolare N.3-FI: Formulazioni Polimeriche

Modulo:			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM04			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Il corso si propone di fornire allo studente le competenze necessarie ad affrontare problematiche industriali connesse alla formulazione di polimeri e loro miscele, per l'ottenimento di manufatti con proprietà mirate, secondo diverse tecnologie di produzione. In particolare saranno illustrati i recenti progressi raggiunti nella tecnologia della miscelazione di polimeri e sulla tipologia e ruolo degli additivi in formulazioni a base polimerica, in applicazioni che riguardano materiali con elevata resistenza all' impatto, all' abrasione, alla frattura, coating di superfici e materiali per usi speciali.			
Programma del corso: * Polimeri semicristallini e amorfi * Agenti Nucleanti e Polimorfismo, Acceleratori del processo di cristallizzazione, chiarificanti, * Miscelazioni polimeriche per l' ottenimento di materiali ad elevate resistenza meccanica e alla frattura. Formulazioni a base polimerica con rinforzo gommoso, ad elevata resistenza all' impatto e loro comportamento in prove di fatica. Miscele polimeriche rinforzate. * Classificazione degli additivi polimerici, metodi di miscelazione, principi, azioni e tossicità: Plasticizzanti, Fillers, modificazione e miglioramento delle superfici, coloranti, Pigmenti e coloranti organici, Sbiancanti ottici organici ed inorganici, Additivi con proprietà antimicrobiche, Ritardanti di fiamma e meccanismi d'azione, Lubrificanti, Additivi antistatici, Additivi antiscivolo, Additivi antiappannanti, Additivi Antiblocking, Degradazione idrolitica, e stabilizzanti rispetto alla de-idroclorurazione. Stabilizzanti in generale (Scavengers di acidi, Composti stagno-alchilici, Deattivatori/attivatori metallici, Degradazione ossidativa, Autossidazione, Inibitori dell' autossidazione, Stabilizzanti UV, Agenti di Blowing, Compatibilizzanti, * Formulazioni a base di compositi a matrice polimerica.			
Lecture consigliate Donald R. Paul, Clive B. Bucknall: Polymer Blends: Formulation and Performance, Two-Volume Set; ISBN: 978-0-471-24825-5. Wiley: 2000 Johannes Karl Fink A Concise Introduction to Additives for Thermoplastic Polymers. ISBN: 978-0-470-60955-2 Wiley: 2010			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova Finale Orale			

Insegnamento Curricolare N.4-FI: A scelta uno degli Insegnamenti N.4 dei Curricula 1 e 2

Insegnamenti Opzionali consigliati

Insegnamento: Strategie di Intervento per la Riduzione dell'Impatto Ambientale dei Processi Chimici

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: ING-IND/25			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Lo scopo del Corso è quello di analizzare le possibili cause di impatto ambientale dei processi chimici e quale può essere il ruolo di un operatore di cultura chimica nel contrastarle e minimizzarne gli effetti.			
Programma del corso: Emissioni e rifiuti inquinanti delle attività produttive. Principali categorie di emissioni e rifiuti e loro provenienza. Gerarchia e articolazione degli interventi volti alla riduzione dell'impatto ambientale dei processi produttivi. Principi e obiettivi di "Green Chemistry". Metodo dei contributi di gruppo per la valutazione delle proprietà chimico-fisiche ambientalmente rilevanti. Stima della persistenza dei prodotti chimici nell'ambiente. Stima della biodegradabilità globale. Processi e prodotti chimici più sicuri: metodo combinatoriale per la selezione di vie di sintesi maggiormente eco-compatibili. Fattori di eco-compatibilità nello sviluppo dei processi chimici. Valutazione del ciclo di vita (LCA). Recupero di materia ed energia dai rifiuti, sia pericolosi che non pericolosi. Processi depurativi di effluenti gassosi: assorbimento, adsorbimento, catalisi ambientale, riduzione delle emissioni di ossidi di zolfo e di azoto, abbattimento di polveri. Effluenti liquidi industriali: caratterizzazione, fattori di inquinamento e analiti. Processi depurativi di effluenti liquidi industriali: coagulazione, flocculazione, precipitazione chimica, sedimentazione, flottazione, filtrazione, separazione per mezzo di membrane, adsorbimento, scambio ionico, reazioni di ossido-riduzione. Depurazione di effluenti liquidi urbani. Gestione dei rifiuti solidi: elementi funzionali della generazione, della raccolta, dell'immagazzinamento, del trasporto, dei trattamenti e dello smaltimento finale. Trattamenti di tipo inorganico per la stabilizzazione dei rifiuti solidi: processi a base cementizia, con miscele calce-pozzolana, di autocementazione, di vetrificazione. Trattamenti di tipo organico per la stabilizzazione dei rifiuti solidi: inglobamento in matrice termoplastica, in matrice polimerica reticolata e incapsulamento. Valutazione dell'efficienza dei processi di stabilizzazione dei rifiuti solidi: test di rilascio e loro classificazione in rapporto alle caratteristiche e in rapporto alle finalità. Criteri di ammissibilità dei rifiuti in discarica.			
Fonti bibliografiche Appunti dalle lezioni. D.T. Allen, D.R. Shonnard, <i>Green Engineering</i> , Prentice Hall PTR. J.R. Conner, <i>Chemical Fixation and Solidification of Hazardous Wastes</i> , Van Nostrand Reinhold.			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale			

Insegnamento: Processi di Termoconversione dei Solidi Finalizzati alla Produzione di Energia

Modulo: Unico			
Settore Scientifico Disciplinare: ING-IND/25 (Impianti Chimici)			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
<p>Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Tramite questo Insegnamento, gli Studenti potranno apprendere: 1) con particolare riferimento ad aspetti impiantistici e quantitativi, le principali fenomenologie chimico-fisiche in gioco nei processi di combustione e gassificazione di combustibili solidi tradizionali ed alternativi; 2) le tecnologie chimiche più attuali miranti alla rimozione di gas acidi (SO₂, CO₂) presenti in fumi di combustione/gassificazione; 3) le principali possibilità di reimpiego dei residui solidi generati in processi di combustione/gassificazione.</p>			
<p>Programma del corso: I. <u>Generalità su carbone e biomasse</u>. Considerazioni generali. Analisi tecniche ed elementari. Potere calorifico. Classificazioni. Diagramma di van Krevelen. Deumidificazione e devolatilizzazione. Modelli di devolatilizzazione. II. <u>Processi reattivi del char: aspetti cinetici e diffusivi</u>. Modello Shrinking Core. Regime diffusivo esterno. Regime diffusivo interno. Regime cinetico. Modello Shrinking Particle. Regime cinetico. Regime diffusivo esterno. Combinazione di resistenze. Fattore di efficienza e modulo di Thiele per solidi porosi reagenti. III. <u>Processi reattivi del char: aspetti reattoristici</u>. Equazioni di progetto per solido alimentato in reattori a flusso segregato o miscelato. IV. <u>Combustione</u>. Cinetiche di combustione. Aria teorica e fumi di combustione. Effetti dell'eccesso d'aria. V. <u>Desolfurazione in situ in combustori a letto fluidizzato</u>. Reattori CFBC. Processi di desolfurazione in situ. Modello a grani. Fenomeni di comminuzione delle particelle di sorbente: frammentazione primaria e secondaria, attrition. Interrelazioni comminuzione/processi reattivi. Bilanci di popolazione su particelle di sorbente. VI. <u>Metodi innovativi per la mitigazione dell'impatto da CO₂</u>. Generalità sul Carbon Capture and Storage. Combustione oxyfuel. Combustione Chemical Looping con l'ausilio di carrier di ossigeno a base di metalli. Processo Calcium Looping con l'ausilio di sorbenti calcarei. VII. <u>Gassificazione</u>. Considerazioni generali. Reazioni chimiche e condizioni operative. Gassificatori a flusso trascinato. Cicli combinati. Applicazione dei processi oxyfuel e di looping ad impianti di gassificazione. Modellazione di un gassificatore a flusso trascinato autotermico. Stadi di devolatilizzazione e combustione. Calcolo dei profili spaziali relativi alle specie d'interesse. VIII. <u>Riutilizzo delle ceneri</u>. Applicazioni come materiali adsorbenti: generalità, aspetti termodinamici e cinetico-diffusivi, approccio canonico e frattale, processi di attivazione. Applicazioni nell'industria del cemento: riutilizzo come materiale pozzolanico e come materia prima per applicazioni ordinarie (cemento Portland) e speciali (cemento solfoalluminatico).</p>			
<p>Fonti bibliografiche: Appunti dalle lezioni e lezioni su piattaforma web-learning "federic@" (www.federica.unina.it/smf). M Balsamo, F Di Natale, A Erto, A Lancia, F Montagnaro, L Santoro. <i>Journal of Hazardous Materials</i>, 187 (2011) 371–8. M Balsamo, F Di Natale, A Erto, A Lancia, F Montagnaro, L Santoro. <i>Chemical Engineering Journal</i>, 207–208 (2012) 66–71. M Balsamo, F Montagnaro. <i>The Journal of Physical Chemistry C</i>, 119 (2015) 8781–5. J Blamey, EJ Anthony, J Wang, PS Fennell. <i>Progress in Energy and Combustion Science</i>, 36 (2010) 260–79. A Coppola, P Salatino, F Montagnaro, F Scala. <i>Fuel Processing Technology</i>, 120 (2014) 71–8. DW Green, RH Perry. <i>Perry's Chemical Engineers' Handbook 8th Edition</i>, Ed. McGraw-Hill (2007). M Hartman, RW Coughlin. <i>AIChE Journal</i>, 22 (1976) 490–8. O Levenspiel. <i>Chemical Reaction Engineering</i>, Ed. Wiley (1999). F Li, SL Fan. <i>Energy & Environmental Science</i>, 1 (2008) 248–67. P McKendry. <i>Bioresource Technology</i>, 83 (2002) 37–46. M Marroccoli, ML Pace, A Telesca, GL Valenti, F Montagnaro. <i>Combustion Science and Technology</i>, 182 (2010) 588–99. F Montagnaro, P. Salatino. <i>Combustion and Flame</i>, 157 (2010) 874–83. F Montagnaro, P Salatino, F Scala, M Urciuolo. <i>Industrial & Engineering Chemistry Research</i>, 50 (2011) 9704–11. S Niksa, GS Liu, RH Hurt. <i>Progress in Energy and Combustion Science</i>, 29 (2003) 425–77. F Scala, R Solimene, F Montagnaro. In: <i>Fluidized Bed Technology for Near-Zero Emission Combustion and Gasification</i>, Ed. Woodhead (2013) 319–87. A Telesca, D Calabrese, M Marroccoli, M Tomasulo, GL Valenti, G Duelli (Varela), F Montagnaro. <i>Fuel</i>, 118 (2014) 202–5.</p>			
Propedeuticità: Nessuna.			
Modalità di accertamento del profitto: Prova orale.			

Insegnamento: Chimica-Fisica dei Materiali

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/02		CFU: 6	
Ore di studio per ogni ora di Lezione:	2	Esercitazioni:	Laboratorio:1
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Obiettivo del corso e' di fornire agli studenti una panoramica completa dei metodi sperimentali e teorici per la descrizione delle proprietà chimico-fisiche della materia condensata, con particolare attenzione all'applicazione delle spettroscopie e dei modelli computazionali.			
Programma sintetico del corso: <ol style="list-style-type: none">1) Introduzione ai materiali solidi2) I materiali cristallini come paradigma nella scienza dei materiali3) La descrizione del legame chimico e della struttura elettronica nei cristalli4) Proprietà magnetiche di materiali solidi5) Spettroscopia vibrazionale dello stato solido6) Difetti puntuali nei solidi7) Proprietà chimico-fisiche e processi reattivi delle superfici solide Sono previste esercitazioni con l'utilizzo di strumenti computazionali per la visualizzazione ed il calcolo di proprietà strutturali ed elettroniche di solidi cristallini.			
Testi di riferimento R.H. Hoffman, Solids and surfaces, VCH Publisher, 1988 N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College Publishing, 1972			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale.			

Insegnamento : Catalisi di Polimerizzazione Ziegler-Natta e Metallocenica

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04/05			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione:	Laboratorio:1
	Altro (specificare): 36 ore di lezione e 12 ore di laboratorio		
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Studio dei processi di polimerizzazione di olefine con catalizzatori Ziegler-Natta eterogenei e con catalizzatori omogenei metallocenici e post-metallocenici. Meccanismi delle reazioni di polimerizzazione e studio delle relazioni tra struttura dei catalizzatori, microstruttura delle catene polimeriche e proprietà fisiche dei polimeri.			
Programma del corso: Questo corso si propone di fornire agli studenti della laurea specialistica una conoscenza dettagliata dei processi di polimerizzazione di alfa-olefine promossa da catalizzatori eterogenei di interesse industriale e dai nuovi catalizzatori omogenei basati su metalli dei Gruppi 4-10. Ad ognuno dei punti sotto elencati corrisponderanno 2 ore di lezione integrate con laboratorio. 1) Le reazioni di polimerizzazione mediante catalisi di coordinazione. 2) Aspetti teorici e sperimentali. 3) Polimerizzazione Ziegler-Natta. Storia della scoperta. Meccanismo della polimerizzazione del propene con tricloruro di titanio. 4) Catalizzatori Ziegler-Natta ad alta resa di ultima generazione e di utilizzo industriale. Polimerizzazione del propene con catalizzatori eterogenei e ruolo dei donori interni ed esterni. 5) Studio dell'enantioselettività nella polimerizzazione del propene promossa da catalizzatori Ziegler-Natta eterogenei. 6) Relazione tra microtassia dei polimeri e meccanismo di reazione. Proprietà e importanza del polipropilene isotattico. 7) Introduzione alla catalisi di polimerizzazione promossa da catalizzatori metallocenici. 8) Tecniche di polimerizzazione con catalizzatori metallocenici e confronto con processi Ziegler-Natta eterogenei. 9) Relazioni tra struttura del precursore catalitico e microstruttura dei polimeri ottenuti. 10) Catalisi di polimerizzazione del propene promossa da catalizzatori post-metallocenici. 11) Catalisi di polimerizzazione promossa da metalli del Gruppo 8-10. 12) Confronto tra diversi meccanismi di polimerizzazione promossa da metalli Gruppi 4-10. 13) Nuove frontiere della catalisi di coordinazione. 14) Insegnamento delle tecniche in atmosfera controllata utilizzate nella sintesi di polimeri. 15) Caratterizzazione dei polimeri ottenuti in laboratorio da processi eterogenei ed omogenei: frazionamento di polimeri per estrazione con solventi al punto di ebollizione; 16) Caratterizzazione dei polimeri mediante tecniche di diffrazione ai raggi X. 17) Caratterizzazione microstrutturale dei polimeri mediante ¹³ C NMR. 18) Cenni alle tecniche di copolimerizzazione e sintesi di copolimeri del propene con alfa-olefine.			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale scritta e/o orale e valutazione delle relazioni di laboratorio.			

Insegnamento: Teoria e applicazioni dei processi di separazione

Modulo : Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM 04			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Il corso si propone di fornire gli elementi necessari alla comprensione dei processi industriali di separazione e delle linee guida per la selezione del processo di separazione più appropriato.			
Programma del corso:			
1 - Introduzione.			
2 - Classificazione generale delle tecniche di separazione. Criteri di selezione di un processo di separazione.			
3 - Aspetti termodinamici e di equilibrio dei processi di separazione. Equilibri di fase liquido-vapore e liquido-liquido. Modelli per coefficienti di attività e fugacità. Equazioni di stato. Esempi numerici di valutazione dei coefficienti di attività.			
4 - Uso di simulatori di processo e programmi di flowsheeting per la simulazione di operazioni di separazione			
5 - Operazioni di separazione condotte in un singolo stadio. Flash isoterma. Flash adiabatico. Esempi numerici.			
6 - Separazione liquido-liquido. Esempi numerici di calcolo per operazioni a più stadi in sistemi multicomponenti.			
7 - Distillazione continua multicomponente. Distillazione azeotropica, estrattiva e reattiva. Esempi numerici di simulazione.			
8 - Distillazione batch			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Relazione scritta su un tema assegnato durante il corso e discussione			

Insegnamento: Biopesticidi per l'agricoltura

Modulo: Unico	
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/06	CFU: 6
Metodi didattici: lezioni frontali	Tipologia attività formativa: Affini o Integrative
Obiettivi formativi: Il corso intende far acquisire conoscenze sulle sostanze organiche naturali che possono essere utilizzate per l'incremento della produzione, per la difesa e la conservazione del patrimonio agricolo e l'impatto che esse possono avere sull'ambiente. Inoltre si intende fornire allo studente conoscenze sulla correlazione struttura-attività biologica delle sostanze organiche naturali bioattive prodotte da microrganismi e da piante finalizzate alla modulazione della loro attività e specificità. Lo scale-up di promettenti erbicidi, fungicidi, insetticidi e battericidi, sarà illustrato per il trasferimento della loro produzione e formulazione a livello industriale.	
Programma sintetico Il corso tratterà brevemente delle più importanti classi di composti naturali (polichetidi, terpeni e steroidi, fenilpropanoidi) studiandone la chimica e la correlazione struttura-attività. Lo studio riguarderà i metaboliti microbici (prodotti da funghi e batteri fitopatogeni e non), come le fitotossine, i fungicidi, i battericidi, gli insetticidi e gli erbicidi ed i metaboliti secondari prodotti da piante allelopatiche con potenziale applicazione come biopesticidi. Saranno valutate le loro applicazioni: a) per la difesa delle colture agrarie dalle malattie microbiche (fitoalessine, induttori di resistenza agli stress biotici); b) per lo sviluppo di nuovi fungicidi e battericidi; c) per lo sviluppo di erbicidi da utilizzare nei metodi di lotta biologica e integrata alle piante infestanti e parassite di colture agrarie. d) per lo sviluppo di insetticidi per la lotta agli afidi e ai nematodi. Quando possibile saranno organizzate visite presso industrie internazionali specializzate nel settore con le quali sono in corso collaborazioni e accordi ufficiali. Tesi Consigliati Paul M. Dewick. Chimica, Biosintesi e Bioattività delle Sostanze Naturali . Piccin Nuova Libreria, Padova, 2009. Appunti e Reviews forniti alle lezioni.	
Propedeuticità: nessuna	
Modalità di accertamento del profitto: esame orale	

Insegnamento : Trattamenti di depurazione delle acque

Modulo: <i>Unico</i>			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM 04			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:	Laboratorio:
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Obiettivo del corso è di fornire una panoramica dettagliata sulle operazioni unitarie ricorrenti nei moderni processi di trattamento delle acque e di come queste operazioni siano impiegate nei processi industriali.			
Programma del corso: 1 – Le acque reflue: caratteristiche, tipologie, controlli 2 – Parametri fondamentali di progetto per un trattamento di acque reflue 3 – Trattamenti meccanici: grigliatura, dissabbiatura, disoleatura 4 – Altre operazioni unitarie negli impianti di trattamento: pompaggio, sedimentazione, areazione 5 – Schemi tipici di impianti di depurazione 6 – Impianti di trattamento con tecnologie di depurazione di tipo naturale 7 – Trattamenti chimici delle acque e dei fanghi 8 – Trattamenti meccanici dei fanghi 9 – Trattamenti biologici dei fanghi, digestori			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale			

Insegnamento: Cristallografia dei polimeri

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04/05		CFU: 6 (4LF + 2 LAB/ES)	
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione: 1	Laboratorio:1
	Altro (specificare):		
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Studio dello stato cristallino di polimeri. Metodi di diffrazione dei raggi X e degli elettroni per lo studio della struttura cristallina di polimeri. Utilizzo della meccanica molecolare per la determinazione della conformazione e dell'impacchettamento delle catene nei cristalli di polimeri.			
Programma del corso:			
Elementi di diffrazione dei raggi X - Natura e generazione dei raggi X. Diffusione dei raggi X ad opera di elettroni. Fenomeni dell'interferenza e della diffrazione. Diffusione dei raggi X ad opera di atomi. Diffrazione da parte di un liquido o di un solido amorfo. Diffrazione dei raggi X da parte di cristalli. Cella elementare e piani reticolari <i>hkl</i> . Le condizioni di riflessione di Bragg ad opera dei piani <i>hkl</i> . Il fattore di struttura $F(hkl)$. Spazio reciproco e reticolo reciproco. Sfera di riflessione. Diffrazione da cristallo singolo e da cristallo rotante. Spettro di polveri. Effetto della dimensioni finite dei cristalli sulla diffrazione.			
Determinazione della struttura cristallina di un polimero semicristallino - Ottenimento di campioni semicristallini: cristalli singoli, polveri, fibre. Diffrazione elettronica di cristalli singoli. Diffrazione ai raggi X di sistemi policristallini: polveri e fibre. Tipi di raccolta delle immagini di diffrazione: fotografica e a contatore. Interpretazione degli spettri di diffrazione disponibili. Determinazione della periodicità (asse <i>c</i>) lungo l'asse di catena dallo spettro di fibra. Utilizzo dell'analisi conformazionale per individuare le possibili conformazioni della catene nel cristallo: principio di equivalenza e principio della minima energia interna. Meccanica molecolare e campi di forza. Lettura dello spettro di fibra e formulazione della cella elementare. Scelta del gruppo spaziale. Utilizzo della meccanica molecolare per trovare condizioni di buon impacchettamento. Calcolo dei fattori di struttura e confronto fra dati calcolati e dati osservati tramite il calcolo dell'indice di disaccordo. Cenni ai fenomeni di disordine presenti nei cristalli di polimero.			
Il corso è stato affiancato da otto esercitazioni pratiche con i seguenti contenuti			
Raccolta di uno spettro di fibra con camera cilindrica. Determinazione della densità della fibra per flottazione. Lettura dello spettro di fibra. Determinazione della periodicità lungo l'asse di fibra. Determinazione delle posizioni (x,y) dei riflessi sulla lastra e delle loro intensità relative. Determinazione della cella elementare. Scelta del gruppo spaziale. Utilizzo del programma Cerius ² per la formulazione di modelli di impacchettamento e relativo calcolo delle immagini di diffrazione per spettri di polveri e per spettri di fibra.			
Testi di riferimento:			
1) AIM - "Macromolecole, Scienza e Tecnologia" - Pacini Editore - Pisa (1983) Vol.1 Capitolo I-1.3. Analisi conformazionale (pp. 54-86) Capitolo I-2.2. Diffrattometria dei raggi X (pp. 100-117)			
2) P.Corradini - "X ray diffraction" Encyclopedia of Polymer Science and Technology - Edizione 1971 - Vol.15 - pp.79-97.			
3) M.Kakudo, Kasai "X-ray diffraction by polymers" (1972)			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale scritta e/o orale e valutazione delle relazioni di laboratorio e/o esercitazione.			

Insegnamento : Dinamica e reologia dei polimeri

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04-05			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione:	Laboratorio:1
	Altro (specificare):		
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Studio della dinamica di macromolecole in massa e in soluzione: Viscoelasticità, Modello di Rouse, Modello della catena reptante e tempi di rilassamento. Modello della catena nel tubo. Leggi di scala del tempo di rilassamento più lungo in dipendenza dalla lunghezza delle catene. Tests meccanici sulla teoria della reptation. Tecniche spettroscopiche di analisi della struttura e della dinamica di macromolecole in soluzione e in massa: NMR e tecniche di scattering.			
Programma del corso:			
<ul style="list-style-type: none">• Concetto di viscoelasticità lineare. Equazioni costitutive di base. Long time vs. short time behavior in esperimenti di stress-relaxation in seguito a step-strain; scorrimento viscoso nello stato stazionario; creep e recupero del creep; scorrimento oscillatorio. Relazione tra i parametri viscoelastici determinabili attraverso i diversi esperimenti, tramite l' utilizzo del principio di sovrapposizione e causalità. Equazioni di base per l' approccio mesoscopico e quindi molecolare allo studio della dinamica dei polimeri.• Teorema di fluttuazione e dissipazione. Dinamica di sistemi polimerici nello stato unentangled: Modello di Rouse; modello di Zimm; Viscosità intrinseca. Modi di rilassamento: Modi di Rouse; Modi di Zimm. Dipendenza dalla temperatura della dinamica di polimeri e principio di sovrapposizione. Scattering dinamico di sistemi in bulk e in soluzione. Determinazione della dinamica dei polimeri su scala locale tramite tecniche NMR.• Dinamica di sistemi polimerici nello stato entangled: Entanglements nei fusi polimerici. Reptation nei fusi polimerici: tempi di rilassamento e diffusione. Reptation in soluzioni diluite. Dinamica di una singola catena entangled. Effetto della presenza di molte catene: constraint release.• Non Newtonian melt flow: Funzioni reologiche del materiale; liquido di Lodge.			
Testi consigliati. oltre alle dispense fornite dal docente, i testi consigliati sono: M. Rubinstein, R. H. Colby, Polymer Physics, Oxford University Press. G. Strobl, The Physics of Polymers, Springer.			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Eventuali prove scritte in itinere. Prova finale scritta e/o orale. Esercitazione al calcolatore.			

Insegnamento: Polimeri per applicazioni biomediche

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/03;CHIM04/05			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione:2	Esercitazione:	Laboratorio:1
Altro (specificare):			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Fornire le conoscenze per la progettazione e la realizzazione di materiali polimerici per uso farmacologico e biomedico e delineare gli attuali campi di applicazione e le prospettive di sviluppo.			
Programma del corso: <ol style="list-style-type: none">1. Definizione di biomateriale; biocompatibilità e biofunzionalità.2. Classi di polimeri sintetici di potenziale interesse per applicazioni biomediche. Modifica delle proprietà dei polimeri mediante copolimerizzazione, variazioni strutturali o miscelazione di polimeri diversi.3. Applicazioni farmaceutiche. Studio dell'auto-organizzazione di copolimeri anfifilici in micro- e nano-strutture e loro impiego come trasportatori di farmaci. Tecniche di ottimizzazione delle cinetiche di rilascio delle molecole incapsulate. Inserimento di ligandi direzionanti per il rilascio controllato.4. Uso di materiali polimerici come protesi permanenti o temporanee e come supporti biomimetici per la riparazione guidata di tessuti danneggiati. Modifica della superficie del biomateriale mediante inserimento di frammenti peptidici per il riconoscimento cellulare.5. Esempi di progettazione, realizzazione e valutazione di nano-trasportatori di farmaci antitumorali e di supporti per la ricostruzione di tessuto osseo.			
Propedeuticità: Nessuna			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale orale.			

Insegnamento : Metodi Chimico Fisici per l'analisi di biomateriali

Modulo: 1 modulo	
Settore Scientifico - Disciplina: CHIM/02	CFU: 6
Metodi didattici: lezioni frontali, Laboratorio	Tipologia attività formativa: affini o integrative
Obiettivi formativi: Obiettivo del corso è far acquisire la comprensione di alcune procedure teoriche e sperimentali, che hanno permesso l'analisi a livello nanometrico di soluzioni e gel di macromolecole. Tra le tecniche presentate ci saranno l'EPR (risonanza di spin elettronico), MicroRaman, LS e DLS (Scattering di luce statico e dinamico) e SANS (Scattering neutronico a basso angolo). Saranno illustrati i risultati più importanti ottenuti negli ultimi anni e discussi i metodi che permettono una accurata ricostruzione di immagini (<i>imaging</i>). Esercitazioni di <i>imaging</i> . Programma sintetico: L'interazione radiazione-materia. La spettroscopia di risonanza paramagnetica elettronica (EPR): fondamenti teorici. Lo spettrometro EPR: struttura e funzionamento. Teoria ed applicazione di Raman non stimolato, Risonanza Raman e Surface Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) di soluzioni macromolecolari. Microscopia Raman applicata a materiali macromolecolari. Procedure di mapping e profili di profondità Raman. La teoria dello scattering: fondamenti teorici. Applicazione per la determinazione di parametri strutturali a livello mesoscopico di sistemi macromolecolari. Esempi di applicazione della spettroscopia EPR (spin probing e spin labelling), Raman e scattering di luce e neutronica allo studio dei materiali macromolecolari, con particolare riguardo alla caratterizzazione microstrutturale e dinamica di geli polifasici.	
Propedeuticità: nessuna	
Modalità di verifica dell'apprendimento: colloquio orale	

Insegnamento: Metodi computazionali per lo studio delle reazioni di interesse industriale

Modulo: Unico			
Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/04/05			CFU: 6
Ore di studio per ogni ora di:	Lezione: 2	Esercitazione:1	Laboratorio:
Altro (specificare): 48 ore di lezione			
Obiettivi formativi, riferiti ai descrittori di Dublino: Analisi dei metodi computazionali applicati a reazioni di interesse industriale. Reazioni di trasformazioni di aldeidi e chetoni. Reattività dei metalli di transizione nella formazione di legami C-C e C-H. Modellistica computazionale delle reazioni di polimerizzazione, epossidazione e idroformilazione. Analisi delle reazioni di metatesi. Reazioni di riduzione Meerwein-Pondorf-Verley.			
Programma del corso: Questo corso si propone di fornire agli studenti della laurea specialistica le tecniche di base dei metodi computazionali per la comprensione dei meccanismi di reazione di interesse industriale. Più dettagliatamente verranno sviluppati i seguenti argomenti: 1) Le reazioni di polimerizzazione mediante catalisi di coordinazione, aspetti teorici. 2) Tecniche computazionali, efficacia e limiti. 3) Studio dell'enantioselettività nella catalisi Ziegler-Natta. 4) Formazione di C-C bond per metalli del Gruppo 8-10. 5) Formazione di C-H bond per metalli del Gruppo 4-10. 6) Reazioni di riduzione Meerwein-Pondorf-Verley. 7) Reazioni di epossidazione e idroformilazione. 8) Reazioni di monomeri polari (e.g. metilmetacrilato).			
Propedeuticità:			
Modalità di accertamento del profitto: Prova finale scritta e/o orale e valutazione delle relazioni di laboratorio.			