

Corsi del Dottorato di Ricerca in Scienze della Materia e dei Nanomateriali

Corsi obbligatori

1. Metodi sperimentali per la determinazione di struttura e proprietà elettroniche di sistemi aggregati di bassa dimensionalità - 6CFU 48h

Referente: Alessandro Ruocco, alessandro.ruocco@uniroma3.it

Altri docenti: Carlo Mariani, Carlo Meneghini, Francesco Offi

Questo corso è suddiviso in due moduli e offre una descrizione rigorosa ma molto attenta agli aspetti di applicazione pratica della spettroscopia di assorbimento dei raggi X (X-ray Absorption Spectroscopy, XAS) e della spettroscopia di fotoemissione di elettroni in seguito a eccitazione con raggi X e radiazione ultravioletta (XPS, UPS), tecniche indispensabili per la caratterizzazione delle proprietà elettroniche, chimiche e strutturali locali dei materiali.

Progettato per studenti di dottorato nelle scienze fisiche e in ambiti interdisciplinari affini, il corso va oltre i principi fondamentali per porre l'accento su applicazioni all'avanguardia e sulla competenza critica di accesso a consorzi di ricerca internazionali e a grandi infrastrutture di ricerca, come le sorgenti di radiazione di sincrotrone. Tra gli obiettivi vi è quello di fornire gli strumenti per progettare, proporre ed eventualmente presentare progetti di ricerca presso laboratori e/o grandi infrastrutture di ricerca. Le tecniche trattate nel corso sono fondamentali per la determinazione degli stati elettronici, dei legami chimici, dello stato chimico e della coordinazione locale nei materiali, con applicazioni che spaziano sia nell'ambito delle scienze dure, dalla fisica delle nanostrutture alla catalisi avanzata e alla chimica dei materiali, sia in ambiti interdisciplinari, tra cui i beni culturali (analisi dei pigmenti), la biomedicina (metalloproteine) e le scienze ambientali (speciazione degli inquinanti).

Più nel dettaglio, verranno affrontati i seguenti argomenti:

1° Modulo) Introduzione alla spettroscopia di fotoemissione di elettroni: basi teoriche, modello a tre step, atomi e molecole, sistemi solidi a bassa dimensionalità, superfici e sistemi a bassa dimensionalità, proprietà elettroniche - fotoemissione da livelli di core e spostamenti in energia dei livelli di core - fotoemissione risolta in angolo e struttura a bande elettroniche - spettroscopia Auger e fotoemissione risonante - struttura a bande elettroniche (mediante fotoemissione risolta in angolo, ARPES) e composizione fisico-chimica di sistemi a bassa dimensionalità, micro-spettroscopia di nanostrutture 1D e 2D - applicazioni della spettroscopia di fotoemissione con raggi X duri (HAXPES) sensibile al volume del materiale e della spettroscopia di fotoemissione risolta nel tempo.

2° Modulo) Basi teoriche della spettroscopia di assorbimento dei raggi X e delle tecniche XAFS, con particolare attenzione alle applicazioni nella ricerca sulla materia condensata e nella scienza dei materiali - esempi specifici di applicazioni standard e avanzate delle tecniche di assorbimento vicino al soglia (XANES) ed estese (EXAFS) in contesti di ricerca multi- e interdisciplinari - introduzione a metodi avanzati a raggi X: spettroscopia di emissione di raggi X (XES), scattering risonante a raggi X (XRS) e dicroismo circolare magnetico in seguito ad assorbimento di raggi X (XMCD) - introduzione alle sorgenti avanzate di radiazione elettromagnetica, in particolare sincrotroni e laser a elettroni liberi: verrà presentata una selezione di grandi infrastrutture di ricerca (sincrotroni) e consorzi di ricerca (CERIC-ERIC), con enfasi sull'attuale tendenza verso ricerche con utilizzo di diverse tecniche interconnesse tra loro. Verranno analizzati set-up sperimentali specializzati, quali quelli per misure risolte in tempo, in-operando, pump-probe e per la mappatura dei campioni su scala nanometrica, e verranno introdotte le modalità di accesso a queste infrastrutture e le modalità per la stesura di un progetto di ricerca efficace.

La valutazione degli studenti è concepita per simulare la pratica scientifica reale e verrà richiesto di dimostrare sia le conoscenze tecniche sia la capacità di pianificazione di un progetto. In particolare, agli studenti sarà richiesto di redigere e discutere, tramite un breve seminario, una proposta di due pagine su un tema scientifico di loro interesse. La proposta dovrà includere un sommario, il background scientifico, un piano sperimentale dettagliato, la giustificazione della linea di luce o strumentazione scelta, i risultati attesi, l'impatto e i riferimenti bibliografici, simulando in modo realistico la sottomissione di un progetto di ricerca a una grande infrastruttura di ricerca o a un laboratorio di ricerca di alto livello. La proposta potrebbe a posteriori essere effettivamente sottomessa.

2. How to Journal Club – 3CFU 24h

Referente: Ilaria Gianani, ilaria.gianani@uniroma3.it

Il corso ha come scopo quello di fornire al dottorando le necessarie competenze per esporre in maniera chiara e intellegibile un argomento scientifico davanti ad una platea di non esperti. Le competenze sono di tipo linguistico, organizzativo, logico, grafico...e sono messe a punto e sperimentate attraverso esercizi di respirazione, preparazione di seminari e materiale audiovisivo, valutazione del lavoro altrui.

Corsi a scelta

1. Formazione in microscopia – 3 CFU 24h

Referente: Enrico Talamas-Simola, enrico.talamassimola@uniroma3.it

Cenni storici di microscopia, concetto di risoluzione ed il limite di Rayleigh, panoramica sulle tecniche di microscopia ed utilizzo nei diversi ambiti di ricerca.

Fondamenti di microscopia ottica, microscopia in riflessione, metallografia, microscopia in trasmissione, l'uso della luce polarizzata.

Principi di funzionamento della microscopia elettronica, SEM, TEM, EDX. Utilizzo del SEM: rilevazione di elettroni secondari e retrodiffusi, cattura e analisi morfometriche delle immagini.

Preparativa SEM per materiale biologico. Preparativa SEM nella scienza dei materiali.

Principi di funzionamento e componenti di un microscopio a scansione di sonda, la microscopia a forza atomica in contatto, la microscopia a forza atomica in non-contatto.

Tecniche a scansione secondarie. Risoluzione ed artefatti.

Introduzione all'analisi di immagine 2D e 3D, miglioramento della qualità delle immagini con e senza l'utilizzo di kernel, segmentazione, binarizzazione e analisi quantitativa di immagine con software open-access.

2. Nanomateriali inorganici – 3CFU 24h

Referente: Iole Venditti iole.venditti@uniroma3.it

Altra docente: Chiara Battocchio

L'obiettivo principale del corso è quello di descrivere e comprendere come le caratteristiche e le proprietà (chimico-fisiche, morfologiche e strutturali) di alcuni materiali cambiano quando la loro dimensione viene ridotta fino all'ordine dei nanometri. Verranno descritti metodi di sintesi, produzione e caratterizzazione spettroscopica di nanomateriali. Verranno illustrate le loro applicazioni emergenti. Al termine del corso lo studente avrà acquisito le competenze necessarie per la comprensione e lo studio del comportamento di materiali di bassa dimensionalità e avrà un panorama generale sui metodi di sintesi e caratterizzazione spettroscopica e sulla ricerca attiva nel campo dei nanomateriali.

Cenni di chimica-fisica riguardanti le superfici solide alla nanoscala. (1h) Metodi di sintesi: approccio bottom-up e top-down. (2h) Le nanoparticelle: morfologie e funzionalizzazione. (4h) Metodi di caratterizzazione spettroscopica: strutturale, chimica e fisica (spettroscopie Uv-vis in assorbimento ed emissione, FTIR, XPS, DLS). Cenni sulle Microscopie. (4) Proprietà innovative alla nanoscala e campi di applicazione. (1h) Si effettueranno anche varie prove sperimentali inerenti alcuni argomenti svolti a lezione. (12h)

3. Misure Avanzate – 3CFU 24h

Referente: prof. Fabio Leccese, fabio.leccese@uniroma3.it

Il corso ha lo scopo di presentare ai discenti una serie di esperienze maturate in ambito industriale (sia nella produzione che nella ricerca) nelle quali si fa uso di strumentazione avanzata di misura e di metodologie che coprono settori di conoscenze applicative difficilmente rintracciabili nella preparazione universitaria. Il corso mira a completare la formazione dello studente offrendo prospettive generalmente non coperte dai corsi standard. L'approccio del corso, seguendo le differenti problematiche inerenti le fasi del tipico ciclo di vita di un prodotto, è fortemente pratico: le lezioni tipicamente prevedranno una descrizione della problematica riscontrata in fase operativa, la presentazione della strumentazione che si sarebbe voluta usare per risolverla e l'esperienza, con uso della strumentazione in aula, per la sua risoluzione. Anche laddove le lezioni fossero più teoriche, con presentazioni più astratte di problematiche reali legate alle gestioni industriali, si mostrerà sempre come è sorta la problematica pratica all'interno del framework di lavoro e si mostreranno le metodologie, gli strumenti hardware e software, e le procedure che sono usate per la loro risoluzione.

4. L'ABC del DFT – 3CFU 24h

Referente: Paola Alippi, paola.alippi@ism.cnr.it

Altri docenti: F. Filippone, G. Mattioli

Obiettivi: Apprendimento delle basi dei metodi di simulazione da principi primi e semplici applicazioni.

Introduzione alla Teoria del Funzionale Densità, fondamenti: Equazione Schrödinger a molti corpi; teoremi fondativi della teoria del Funzionale Densità; equazioni di Kohn-Sham; potenziale di scambio e correlazione: approssimazioni di densità locale.

Introduzione alla DFT, implementazione: cella unitaria; supercella; funzioni di base localizzate e onde piane; pseudopotenziali; sistemi cristallini periodici: strutture atomiche (visualizzazione), calcolo dell'energia totale, dell'energia di coesione; test di convergenza numerica.

Muovere gli atomi, forze atomiche; teorema di Hellmann-Feymann; derivate dell'energia; ottimizzazione strutture; dinamica molecolare; configurazione di minimo dell'energia per difetto in semiconduttore (e/o per un atomo su superficie); barriere energetiche.

DFT e struttura elettronica: autovalori Kohn-Sham e bande elettroniche. Impostare e condurre una simulazione DFT, attività guidata. Scelta da definire con studenti, in base a interesse personale e fattibilità. Alcune possibilità: ottimizzazione di geometria (sistema cristallino periodico e/o molecola); stress, proprietà elastiche di un solido; bande elettroniche di alcune classi di materiali (Al, Si, grafene) o determinazione di livelli energetici di molecole; calcolo di proprietà vibrazionali; magnetismo in metalli semplici (Fe, Ni, Co).

5. Scattering di neutroni per lo studio della materia condensata - 3CFU 24h

Referente: Antonio Benedetto, antonio.benedetto@uniroma3.it

Scopo del corso è la comprensione dei principi di base della tecnica di diffusione di neutroni e delle sue molteplici applicazioni allo studio della struttura e dinamica della materia condensata.

6. Materiali avanzati – 3 CFU 24h

Referente: Gaspare Varvaro, gaspare.varvaro@ism.cnr.it

Introduzione ai materiali avanzati: molecole, clusters e nanoparticelle; materiali magnetici nanostrutturati; semiconduttori a banda larga per conversione di energia solare e rilevazione di radiazioni ionizzanti; microscopia STM: principio di funzionamento e strumentazione; isolanti topologici: un'introduzione sperimentale; grafene e relativi materiali 2D: basi, caratterizzazioni e applicazioni; materiali funzionali organici e ibridi per optoelettronica.

7. Tecniche di caratterizzazione di superfici ed interfacce – 3 CFU 24h

Referente: Luca Tortora, luca.tortora@uniroma3.it

Introduzione alla scienza delle superfici; Panoramica delle tecniche analitiche di superficie; Introduzione all'analisi con fascio di ioni; Trasferimento di energia tramite collisioni atomiche; frammentazione ionica; effetto matrice; Differenze tra spettrometria di massa di ioni secondari statica e dinamica; Strumentazione: acceleratori ionici, raggruppamento di fasci, allineamento di fasci, focalizzazione di fasci, rilevatori di ioni secondari ed elettroni secondari. Esperimenti in alta risoluzione di massa, alta risoluzione laterale, modalità a doppio raggio e profilazione di profondità. Caratterizzazione delle interfacce attraverso esperimenti di deep profiling; Identificazione chimica di materiali inorganici e organici; Analisi multivariata applicata a spettri di massa, mappe ioniche e dati di profilazione di profondità (PCA, PLS, MAF, analisi gerarchica, analisi k-medie); Introduzione alla spettroscopia vibrazionale; Interpretazione degli spettri IR; IR in modalità trasmissione e riflessione; Spettroscopia infrarossa con Riflettanza Totale Attenuata; Mappatura molecolare; spettroscopia micro-FTIR

8. Elementi di meccanica quantistica – 3CFU 24h

Referente: Matteo Rosati, matteo.rosati@uniroma3.it

Altro docente: Marco Barbieri

Il corso si propone di fornire le competenze di base in meccanica quantistica agli studenti che non l'abbiano incontrata per nulla o in maniera non adeguatamente approfondita. Queste sono tuttavia competenze necessarie per lo studio di studio della materia alla nanoscala.

Vettori, spazi di Hilbert e loro proprietà. Rappresentazione di uno stato fisico attraverso un vettore; notazione ket-bra. Principio di sovrapposizione e coerenza. Operatori lineari e loro proprietà. Rappresentazione di un'osservabile fisica come operatore lineare; autovalori, autovettori e loro significato. Elementi di probabilità. Regola di Born. Misure proiettive e loro proprietà; legame con le osservabili. Principio d'indeterminazione di Heisenberg. Stato post-misura. Evoluzione temporale ed equazione di Schrödinger. Operatori unitari e loro proprietà. Prodotto tensore e sistemi multi-partiti. Entanglement. Approfondimenti di elettromagnetismo classico: interazione di campi con dipoli. Potenziali associati all'interazione. Quanti del campo elettromagnetico: descrizione fenomenologica dei fotoni e loro proprietà. Sistemi di particelle identiche, teorema spin-statistica e statistiche di Bose-Einstein e Fermi-Dirac. L'atomo di idrogeno. Significato fisico dei numeri quantici degli autostati. Effetto Zeeman e Stark. L'atomo di elio, atomi a molti elettroni, concetto di potenziale efficace. Interazione radiazione-materia e allargamento di riga. La molecola di idrogeno. Orbitali leganti e antileganti, spettroscopia.

9. Simmetria – 3CFU 24h

Referente: prof.ssa Paola Magrone, paola.magrone@uniroma3.it

Il corso si propone di esporre la geometria come studio dell'invarianza rispetto a un gruppo di trasformazioni.

Gruppi e sottogruppi, loro definizione, ed esempi. Gruppi di simmetria dei poligoni regolari. Gruppi di simmetria della striscia (gruppi di "fregi") e del piano (gruppi di "tassellazioni") e loro classificazione. Relazioni di equivalenza e spazio quoziante del piano rispetto ad un gruppo di tassellazioni: dominio fondamentale. Chiralità in geometria, esempi in due e tre dimensioni. Gruppi di simmetria dei poliedri regolari (tetraedro, cubo, ottaedro, icosaedro, dodecaedro); dualità tra poliedri: il gruppo di simmetria di due poliedri duali è lo stesso. Fullereni e i loro duali, le cupole geodetiche, e loro classificazione (la classificazione delle cupole geodetiche è opera dei biologi molecolari Caspar e Klug, anni 60). Esempi di solidi che tassellano lo spazio.

Cenni di topologia, ovvero studio delle proprietà di un oggetto che rimangono invariate quando questo è sottoposto a deformazioni continue; formula di Eulero (invariante topologico per i solidi semplici) e sue conseguenze.

Il corso prevede una parte hands-on con il materiale Zometool: costruzione di modelli 3d di solidi platonici, fullereni, cupole geodetiche, tassellazioni dello spazio.

A conclusione, una parte seminariale illustrerà la rilevanza della simmetria in chimica, biologia, mineralogia e fisica.

10. Polimeri e nanopolimeri: sintesi, proprietà e tecniche di caratterizzazione strutturale – 3 CFU 24h

Referente: prof.ssa Daniela Tofani, daniela.tofani@uniroma3.it

Il corso si prefigge di portare alla comprensione delle proprietà e delle applicazioni dei polimeri e delle tecniche si adoperano per la loro caratterizzazione.

Programma

Parte introduttiva sulla chimica organica di base: nomenclatura, struttura molecolare, reazioni di addizione elettrofila e radicalica ai doppi legami; sostituzioni nucleofile aciliche. Classificazione dei polimeri. Relazioni struttura-proprietà. Morfologia e interazioni intermolecolari. Viscosità e tecniche di misura. Distribuzione dei pesi molecolari: peso molecolare medio numerico e ponderato e loro determinazione. Grado di polimerizzazione e di polidispersità. Cristallinità. Caratteristiche termiche. Proprietà meccaniche. Polimeri naturali, artificiali e sintetici. Reazioni di polimerizzazione: polimeri per addizione e per condensazione. Tecniche di polimerizzazione: in bulk, in soluzione, in emulsione e per sospensione. Polimeri per condensazione, resine polimeriche, polimeri per addizione, copolimeri. Polimeri stereoregolari. Catalizzatore di Ziegler Natta. Riciclo dei materiali polimerici e nascita dei polimeri biodegradabili e biocompatibili. Polimeri nanostrutturati. Tecniche di preparazione e caratterizzazione. Alcuni esempi di utilizzo dei polimeri nanostrutturati: drug delivery, polimeri conduttori, polimeri filtranti.

11. Studio della materia condensata dall'interazione luce-materia – 3CFU 24h

Referente: Michael Di Gioacchino, michael.digioacchino@uniroma3.it

Altri docenti: Antonella Privitera, Vincenzo Ardizzone, Antonio Fieramosca

Modulo di spettroscopia Raman

Parte 1: Spettroscopia Raman Teoria, Introduzione alle spettroscopie vibrazionali, Introduzione alla spettroscopia Raman, Effetto Raman: approccio classico, Effetto Raman: approccio quantistico (regole di selezione, conservazione dell'energia, Intensità Raman, etc.), Effetto Raman: accenno approccio alternativo -- diagrammi di Feynman

Parte 2: Spettroscopia Raman Applicazioni, Applicazioni biologiche: Identificazione di microplastiche in ambienti acquatici; Struttura secondaria delle proteine (microparticelle di albumina); Studio delle transizione di fase delle membrane biologiche (Liposomi e batteri *Acinetobacter baumannii*); Extracellular vesicle (colon). Applicazioni mediche: Diagnosi Tumori della tiroide su campioni istologici; Diagnosi Tumori della tiroide su campioni citologici; Aspetti metabolici del tumore della tiroide. Applicazioni scienze dei materiali e beni culturali: cenni su self-assembling e legami deboli nei nanomateriali e materiali innovativi per la protezione delle superfici dei beni culturali; identificazione dei complessi organo-metallici e dei complessi di inclusione; alcune applicazioni nella caratterizzazione dei materiali

costituenti i beni culturali e loro degrado. Applicazioni geologiche: identificazione materiali, in particolare di fasi poco cristalline; degradazione dei materiali e diversi stati di ossidazione.

Parte 3: Laboratorio e Analisi dati, Strumentazione Raman e acquisizione dei dati, Pretrattamento del dato, Analisi dati su dati di interesse

Modulo di Interazione Forte Luce-Materia

Parte 1: Interazione Forte Luce-Materia, Introduzione all'interazione luce-materia, Meccanismi fondamentali di interazione: assorbimento, emissione, diffusione, Differenza tra accoppiamento debole e forte: weak coupling vs strong coupling, Condizioni per l'osservazione dell'accoppiamento forte, Plasmon-polaritons, phonon-polariton ed exciton-polariton, Introduzione al concetto di eccitone come stato legato elettrone-lacuna, Proprietà degli eccitoni: Eccitoni di tipo Frenkel (localizzati) e di Wannier-Mott (delocalizzati). Influenza del confinamento spaziale e della ridotta dimensionalità, Introduzione alle Microcavità, Q-factor, finesse, Purcell factor e tempo di vita. Microcavità con specchi dielettrici multistrato: amplificazione del campo elettromagnetico e distribuzione spaziale. Exciton-polariton in microcavità, Dispersioni polaritoniche: Lower and Upper polariton branch. o Definizione di detuning e dei coefficienti di Hopfield.

Parte 2: Condensazione di Bose-Einstein, Introduzione al fenomeno di condensazione di Bose-Einstein. Meccanismo di formazione del condensato di polaritoni in quantum well di GaAs. Descrizione delle dinamiche spaziali dei condensati polaritonici: equazione di Gross-Pitaevskii. Coerenza spaziale e temporale di un condensato polaritonico. Superfluidità. Applicazioni dei condensati polaritonici, Dispositivi fotonici avanzati: laser a bassa soglia, Neuromorphic computing: implementazione di reti neurali di polaritoni. Condensazione a temperature ambiente, Materiali ad alta energia di legame per l'ottenimento di condensati ad alta temperatura, Semiconduttori organici, Perovskiti, Transition Metal Dichalcogenides

Parte 3: Attività in laboratorio, Schemi ottici per la rilevazione dei polaritoni, Misure di riflettività su campioni di microcavità planari. Analisi dati.