



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Fisica e Chimica - Emilio Segrè
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2015/2016
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2016/2017
CORSO DILAUREA MAGISTRALE	CHIMICA
INSEGNAMENTO	ASPETTI MICROSCOPICI DELLA MATERIA
TIPO DI ATTIVITA'	C
AMBITO	20975-Attività formative affini o integrative
CODICE INSEGNAMENTO	15345
SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE	FLORIANO MICHELE Professore Ordinario Univ. di PALERMO
ALTRI DOCENTI	
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA	56
PROPEDEUTICITA'	
MUTUAZIONI	
ANNO DI CORSO	2
PERIODO DELLE LEZIONI	1° semestre
MODALITA' DI FREQUENZA	Obbligatoria
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	FLORIANO MICHELE Martedì 15:00 18:00 Via skype Per appuntamento e-mail Mercoledì 15:00 18:00 Via skype Per appuntamento e-mail Giovedì 15:00 18:00 Via skype Per appuntamento e-mail

DOCENTE: Prof. MICHELE FLORIANO

PREREQUISITI	
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	<p>1. Conoscenza e capacità di comprensione Acquisizione dei concetti fondamentali di meccanica statistica per la comprensione del legame esistente fra proprietà microscopiche e macroscopiche della materia. Capacità di utilizzare il linguaggio specifico proprio della disciplina. Capacità di costruzione di opportuni modelli teorici per lo studio di proprietà termodinamiche e strutturali anche in relazione a limitazioni di tipo computazionale.</p> <p>2. Capacità di applicare conoscenza e comprensione Capacità di riconoscere le caratteristiche essenziali e le specifiche interazioni microscopiche che consentono di interpretare e prevedere il comportamento macroscopico.</p> <p>3. Autonomia di giudizio Essere in grado di valutare le implicazioni legate ad un approccio modellistico.</p> <p>4. Abilità comunicative Capacità di esporre, anche ad un pubblico non esperto. I limiti e vantaggi di modelli interpretativi alternativi. Essere in grado di sostenere l'importanza dell'uso di modelli microscopici e di specifiche applicazioni.</p> <p>5. Capacità d'apprendimento Capacità di approfondimento mediante la consultazione delle pubblicazioni scientifiche specifiche del settore.</p>
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	Prova Orale
OBIETTIVI FORMATIVI	Riportati nel Regolamento Didattico del Corso di Studio
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali + esercitazioni individuali
TESTI CONSIGLIATI	<p>Testi di riferimento: Peter W. Atkins and Julio De Paula, Atkins Physical Chemistry, Ed. VII 2002 Oxford University Press Peter W. Atkins, Chimica Fisica, IV edizione, Zanichelli, 2004 R.L. Rowley, Statistical Mechanics for Thermophysical Property Calculations, PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1994</p> <p>Testi di consultazione: D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976 T.L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics, Dover Publ., NY, 1986 D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications, Academic Press, 1996 M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987</p>

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	Introduzione al corso. Discussione di programma e contenuti. Libri di testo. Connessione fra proprietà macroscopi e caratteristiche microscopiche della materia
4	Stato gassoso. Proprietà dinamiche di gas. Moti molecolari nei gas, proprietà di trasporto per un gas perfetto.
4	Deviazioni dal comportamento ideale. Fattore di compressibilità. Equazione di van der Waals. Interazioni intermolecolari e forze di dispersione.
3	Concetti fondamentali di termodinamica statistica. Postulati. La funzione di partizione per sistema di particelle non interagenti. Connessioni con le funzioni termodinamiche macroscopiche.
3	Lo stato liquido. Aspetti strutturali e dinamici. Concetto di struttura anche in relazione alle proprietà molecolari. Ordine e disordine. La funzione di correlazione di coppia
4	Transizioni di fase, Diagramma di fase liquido – vapore per sistemi a un componente. La regione critica e caratteristiche di universalità. Legge degli stati corrispondenti.
4	Funzione di partizione per sistema di particelle interagenti. Integrale di configurazione. Funzioni di probabilità. Funzione di correlazione di coppia
4	Metodi sperimentali per la determinazione della funzione di correlazione di coppia. Scattering di radiazione. Funzione di struttura e sua trasformata di Fourier. Esempi pratici.
4	Metodi computazionali. Tecniche di simulazione. Principi fondamentali. Metodi deterministici (dinamica molecolare e metodi stocastici (Monte Carlo). Confronto fra i due metodi.

ORE	Esercitazioni
24	Esercitazioni (individuali e di gruppo) di laboratorio computazionale. Possibili temi: <ul style="list-style-type: none"> - calcolo di funzioni termodinamiche con approccio statistico - proprietà di gas ideali e reali - caratteristiche della funzione di correlazione di coppia - dinamica molecolare: aspetti strutturali - dinamica molecolare: aspetti dinamici - metodi probabilistici - grafica molecolare

