

FACOLTÀ	Scienze MM. FF. NN.
ANNO ACCADEMICO	2014-15
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Aspetti microscopici della materia
TIPO DI ATTIVITÀ	Affine
AMBITO DISCIPLINARE	Attività formative affini o integrative
CODICE INSEGNAMENTO	15345
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)	Michele Floriano P.O. Università di Palermo
CFU	4.2
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	56
PROPEDEUTICITÀ	
ANNO DI CORSO	2
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Dipartimento STEBICEF – aula da definire
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali + esercitazioni individuali
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	L-V ore 10-11
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Lunedì 11-13

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

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.

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.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di valutare le implicazioni legate ad un approccio modellistico.

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.

Capacità d'apprendimento

Capacità di approfondimento mediante la consultazione delle pubblicazioni scientifiche specifiche del settore.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

Riportati nel Regolamento Didattico del Corso di Studio

MODULO	DENOMINAZIONE DEL MODULO
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Introduzione al corso. Discussione di programma e contenuti. Libri di testo. Connessione fra proprietà macroscopiche 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.
24	<p>Esercitazioni (individuali e di gruppo) di laboratorio computazionale. Possibili temi:</p> <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
TESTI CONSIGLIATI	<p>Testi di riferimento: Peter W. Atkins and Julio De Paula, <i>Atkins Physical Chemistry</i>, Ed. VII 2002 Oxford University Press Peter W. Atkins, <i>Chimica Fisica</i>, IV edizione, Zanichelli, 2004 R.L. Rowley, <i>Statistical Mechanics for Thermophysical Property Calculations</i>, PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1994</p> <p>Testi di consultazione: D.A. McQuarrie, <i>Statistical Mechanics</i>, Harper & Row, 1976 T.L. Hill, <i>An Introduction to Statistical Thermodynamics</i>, Dover Publ., NY, 1986 D. Frenkel and B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications</i>, Academic Press, 1996 M.P. Allen and D.J. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Clarendon Press, Oxford, 1987</p>