

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2014/2015
CORSO DI LAUREA	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Fisica III con laboratorio
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzanti (mod 1) / Affini (mod 2)
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline Inorganiche Chimico Fisiche (mod 1) Attività formative affini o integrative (mod 2)
CODICE INSEGNAMENTO	13737
ARTICOLAZIONE IN MODULI	Modulo 1: Chimica Fisica III Modulo 2: Laboratorio di Chimica Fisica III
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1 - Chimica Fisica III)	Michele Antonio Floriano Professore Ordinario Università degli Studi di Palermo
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 2 – Laboratorio di Chimica Fisica III)	Delia Francesca Chillura Martino Professore Associato Università degli Studi di Palermo
CFU)	8 (mod 1) + 6 (mod 2)
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	210
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	140
PROPEDEUTICITÀ	Chimica Fisica II
ANNO DI CORSO	Terzo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula D Ed 17 Dipartimenti Chimici
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali e esercitazioni di laboratorio
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Valutazione relazioni laboratorio + Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	II Semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Come calendario pubblicato
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Da concordare con lo studente michele.floriano@unipa.it marialiria.turcoliveri@unipa.it

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 CORSO

Il modulo 1 del corso si propone di creare una forte base di MQ che possa essere applicata in altri corsi teorici e in corsi di esercitazioni.

Il modulo 2 del corso si propone di applicare le conoscenze acquisite nel modulo 1 mediante esperienze di meccanica quantistica, spettroscopia e di termodinamica.

MODULO	CHIMICA FISICA III
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.
6	Deviazioni dal comportamento ideale. Fattore di compressibilità. Equazione di van der Waals. Interazioni intermolecolari e forze di dispersione.
12	Concetti fondamentali di termodinamica statistica. Postulati. La funzione di partizione per sistema di particelle non interagenti. Connessioni con le funzioni termodinamiche macroscopiche.
6	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.
10	Funzione di partizione per sistema di particelle interagenti. Integrale di configurazione. Funzioni di probabilità. Funzione di correlazione di coppia.
6	Metodi sperimentali per la determinazione della funzione di correlazione di coppia. Scattering di radiazione. Funzione di struttura e sua trasformata di Fourier. Esempi pratici.
8	Metodi computazionali. Tecniche di simulazione. Principi fondamentali. Metodi deterministici (dinamica molecolare e metodi stocastici -Monte Carlo). Confronto fra i due metodi.
6	Concetti fondamentali riguardanti fenomeni lontani dall'equilibrio. Fenomeni caotici e dipendenza dalle condizioni iniziali. Mappa logistica
Testi Consigliati	<p>Testi di riferimento: Peter W. Atkins and Julio De Paula, <i>Atkins' Physical Chemistry</i>, Ed. IX 2009 Oxford University Press, ISBN 978-0-19-954337-3 Peter W. Atkins, Julio De Paula, <i>Chimica Fisica</i>, V edizione (realizzata sulla IX edizione originale), Zanichelli, 2012. ISBN 9788808261380 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</p>

	Press, Oxford, 1987
--	---------------------

MODULO 2	LABORATORIO DI CHIMICA FISICA III
ORE	ESERCITAZIONI DI LABORATORIO
16	Introduzione e Finalità del corso. Presentazione del calendario. Modalità di stesura delle relazioni di laboratorio. Richiami sulle norme di sicurezza da rispettare in laboratorio. Illustrazione delle esperienze e descrizione delle apparecchiature scientifiche.
60	
	Processi termodinamici e interazioni intermolecolari attraverso metodologie Langmuir-Blodgett
	Spettroscopia di assorbimento e reazioni chimiche
	Bande vibroniche attraverso spettroscopie di emissione e di assorbimento: determinazione di proprietà molecolari
	Simulazioni quantomeccaniche: pacchetto d'onde; pacchetto d'onde in movimento; principio di Heisenberg; particella in una scatola (monodimensionale e bidimensionale); oscillatore armonico; effetto tunnel.
	Determinazione di parametri nano-strutturali attraverso spettroscopia di diffusione della luce
TESTI CONSIGLIATI	<ul style="list-style-type: none"> - Peter W. Atkins, Julio De Paula. CHIMICA FISICA. Zanichelli quarta edizione 2004. - Peter W. Atkins – “Chimica Fisica” – Zanichelli - D.A. McQuarrie, J. D. Simon – “Chimica Fisica, un approccio molecolare” - Appunti e materiale fornito dal docente