



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Fisica e Chimica - Emilio Segrè
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2017/2018
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2018/2019
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 Mercoledì 11:00 13:00 studio docente, ed. 17 viale delle Scienze

DOCENTE: Prof. MICHELE FLORIANO

PREREQUISITI	Leggi fondamentali della fisica classica e quantistica. Principi della termodinamica classica e dell'equilibrio chimico. Natura particellare della materia.
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	<p>1. Conoscenza e capacita' di comprensione Acquisizione dei concetti fondamentali di meccanica statistica per la comprensione del legame esistente fra proprieta' microscopiche e macroscopiche della materia. Capacita' di utilizzare il linguaggio specifico proprio della disciplina. Capacita' di costruzione di opportuni modelli teorici per lo studio di proprieta' termodinamiche e strutturali anche in relazione a limitazioni di tipo computazionale.</p> <p>2. Capacita' di applicare conoscenza e comprensione Capacita' 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. Abilita' comunicative Capacita' di esporre, anche ad un pubblico non esperto, i limiti e i vantaggi di modelli interpretativi alternativi. Essere in grado di sostenere l'importanza dell'uso di modelli microscopici e di specifiche applicazioni. Essere in grado di utilizzare idonei strumenti informatici a corredo di presentazioni specifiche.</p> <p>5. Capacita' d'apprendimento Capacita' di approfondimento mediante la consultazione delle pubblicazioni scientifiche specifiche del settore.</p>
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	<p>Prova orale La prova orale consiste in un colloquio, volto ad accertare il possesso delle competenze e delle conoscenze disciplinari previste dal corso; il colloquio segue una breve presentazione del candidato su un argomento precedentemente selezionato da una rosa proposta dal docente. La valutazione viene espressa in trentesimi. Le domande, sia aperte sia semi-strutturate e appositamente pensate per testare i risultati di apprendimento previsti, tenderanno a verificare a) le conoscenze acquisite; b) le capacita' elaborative, c) il possesso di un'adeguata capacita' espositiva.</p> <p>a) Per quanto attiene alla verifica delle conoscenze, verra' richiesta la capacita' di stabilire connessioni tra i contenuti (teorie, modelli, strumenti, ecc.) oggetto del corso.</p> <p>b) Per quanto attiene alla verifica di capacita' elaborative, saranno valutate le seguenti capacita': b1) fornire autonomi giudizi in merito ai contenuti disciplinari; b2) comprendere le applicazioni o le implicazioni degli stessi nell'ambito della disciplina.</p> <p>Il punteggio massimo si ottiene se la verifica accerta il pieno possesso dei tre seguenti aspetti: una capacita' di giudizio in grado di rappresentare aspetti emergenti e/o poco esplorati della disciplina; una spiccata capacita' di rappresentare l'impatto dei contenuti oggetto del corso all'interno della disciplina nel quale i contenuti si iscrivono.</p> <p>c) Per quanto attiene alla verifica delle capacita' espositive, si ha una valutazione minima nel caso in cui l'esaminando dimostri si' una proprieta' di linguaggio adeguata al contesto professionale di riferimento ma questa non sia sufficientemente articolata, mentre la valutazione massima potra' essere conseguita da chi dimostri piena padronanza del linguaggio settoriale.</p> <p>Per quanto riguarda il ranking della valutazione, si possono identificare i seguenti intervalli: voto 18 - 22, lo studente dimostra di avere acquisito i concetti chiave della disciplina ma ha difficolta' di connessione fra gli stessi e nell'analisi critica. voto 23 - 26, lo studente, oltre a dimostrare una buona padronanza dei contenuti richiesti, e' in grado di articolare ipotesi autonome e di approfondimento individuale. voto 27 - 30, lo studente dimostra piena padronanza dei contenuti di base e, anche mediante l'efficace presentazione di un report individuale, dimostra buone doti comunicative e di giudizio personale. In presenza del pieno raggiungimento di tutti i risultati attesi puo' essere anche conferita la lode.</p>
OBIETTIVI FORMATIVI	Obiettivo generale del Corso e' approfondire lo studio delle connessioni fra proprieta' macroscopiche della materia e la sua struttura e dinamica al livello molecolare. Viene adottato un approccio semi quantitativo mediante

	l'introduzione e l'applicazione dei metodi della meccanica statistica.
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali + esercitazioni individuali
TESTI CONSIGLIATI	<p>Testi di riferimento:</p> <p>Peter W. Atkins and Julio De Paula, Atkins' Physical Chemistry, Ed. X, 2014, Oxford University Press ISBN: 9780199697403</p> <p>Peter W. Atkins e Julio De Paula, Chimica Fisica, V edizione italiana condotta sulla IX edizione inglese a cura di Renato Lombardo, trad. di S. Cacciari, 2012, Zanichelli ISBN 9788808261380</p> <p>R.L. Rowley, Statistical Mechanics for Thermophysical Property Calculations, PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1994</p> <p>Testi di consultazione:</p> <p>D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976</p> <p>T.L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics, Dover Publ., NY, 1986</p> <p>D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications, Academic Press, 1996</p> <p>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 macroscopiche e caratteristiche microscopiche della materia
4	Stato gassoso. Proprietà dinamiche di gas. Moti molecolari nei gas, proprietà di trasporto per un gas ideale.
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	<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