



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

<b>DIPARTIMENTO</b>	Fisica e Chimica - Emilio Segrè
<b>ANNO ACCADEMICO OFFERTA</b>	2016/2017
<b>ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE</b>	2017/2018
<b>CORSO DILAUREA MAGISTRALE</b>	CHIMICA
<b>INSEGNAMENTO</b>	ASPETTI MICROSCOPICI DELLA MATERIA
<b>TIPO DI ATTIVITA'</b>	C
<b>AMBITO</b>	20975-Attività formative affini o integrative
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	15345
<b>SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI</b>	CHIM/02
<b>DOCENTE RESPONSABILE</b>	FLORIANO MICHELE      Professore Ordinario      Univ. di PALERMO
<b>ALTRI DOCENTI</b>	
<b>CFU</b>	6
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	94
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA</b>	56
<b>PROPEDEUTICITA'</b>	
<b>MUTUAZIONI</b>	
<b>ANNO DI CORSO</b>	2
<b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>	1° semestre
<b>MODALITA' DI FREQUENZA</b>	Obbligatoria
<b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>	Voto in trentesimi
<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	<b>FLORIANO MICHELE</b> Mercoledì 11:00 13:00 studio docente, ed. 17 viale delle Scienze

**DOCENTE:** Prof. MICHELE FLORIANO

<b>PREREQUISITI</b>	Leggi fondamentali della fisica classica e quantistica. Principi della termodinamica classica e dell'equilibrio chimico. Natura particellare della materia.
<b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b>	<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.</p> <p>5. Capacita' d'apprendimento Capacita' di approfondimento mediante la consultazione delle pubblicazioni scientifiche specifiche del settore.</p>
<b>VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO</b>	<p>Prova orale La prova orale consiste in un colloquio, volto ad accertare il possesso delle competenze e delle conoscenze disciplinari previste dal corso; 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>
<b>OBIETTIVI FORMATIVI</b>	Riportati nel Regolamento Didattico del Corso di Studio
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	Lezioni frontali + esercitazioni individuali
<b>TESTI CONSIGLIATI</b>	<p>Testi di riferimento: Peter W. Atkins and Julio De Paula, Atkins Physical Chemistry, Ed. IX, 2009, Oxford University Press 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 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 &amp; 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</p>

### PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	Introduzione al corso. Discussione di programma e contenuti. Libri di testo. Connessione fra proprieta' macroscopiche e caratteristiche microscopiche della materia
4	Stato gassoso. Proprieta' dinamiche di gas. Moti molecolari nei gas, proprieta' di trasporto per un gas ideale.
4	Deviazioni dal comportamento ideale. Fattore di compressibilita. 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 proprieta' 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 universalita. Legge degli stati corrispondenti.
4	Funzione di partizione per sistema di particelle interagenti. Integrale di configurazione. Funzioni di probabilita. 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"> <li>- calcolo di funzioni termodinamiche con approccio statistico</li> <li>- proprieta' di gas ideali e reali</li> <li>- caratteristiche della funzione di correlazione di coppia</li> <li>- dinamica molecolare: aspetti strutturali</li> <li>- dinamica molecolare: aspetti dinamici</li> <li>- metodi probabilistici</li> <li>- grafica molecolare</li> </ul>