

<b>SCUOLA</b>	SCIENZE DI BASE E APPLICATE
<b>ANNO ACCADEMICO</b>	2015-16
<b>CORSO DI LAUREA MAGISTRALE</b>	Chimica
<b>INSEGNAMENTO</b>	Aspetti microscopici della materia
<b>TIPO DI ATTIVITÀ</b>	Affine
<b>AMBITO DISCIPLINARE</b>	Attività formative affini o integrative
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	15345
<b>ARTICOLAZIONE IN MODULI</b>	NO
<b>NUMERO MODULI</b>	
<b>SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI</b>	CHIM/02
<b>DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)</b>	Michele Floriano P.O. Università di Palermo
<b>CFU</b>	4.2
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	94
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE</b>	56
<b>PROPEDEUTICITÀ</b>	
<b>ANNO DI CORSO</b>	2
<b>SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI</b>	Dipartimento STEBICEF – aula da definire
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	Lezioni frontali + esercitazioni individuali
<b>MODALITÀ DI FREQUENZA</b>	Obbligatoria
<b>METODI DI VALUTAZIONE</b>	Prova Orale
<b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>	Voto in trentesimi
<b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>	Primo semester
<b>CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE</b>	L ore 10-12, G ore 9-10, V ore 11-13

<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	Martedì 11-13 o su appuntamento
<b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b>	
<b>Conoscenza e capacità di comprensione</b>	
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.	
<b>Capacità di applicare conoscenza e comprensione</b>	
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.	
<b>Abilità comunicative</b>	
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.	

<b>OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO</b> Riportati nel Regolamento Didattico del Corso di Studio
--

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