



Società Chimica Italiana
Congresso Congiunto delle
Sezioni Sicilia e Calabria 2019

Palermo · 1 - 2 marzo 2019

ATTI DEL CONGRESSO

Dipartimenti
STEBICEF · DIFC

Viale delle Scienze · Edificio 17
Università degli Studi di Palermo



PALERMO
UNIVERSITY
PRESS

*Società Chimica Italiana
Congresso Congiunto delle Sezioni Sicilia e Calabria 2019
Palermo, 1-2 marzo 2019*

Comitato Scientifico

Pietro Argurio, Anna Barattucci, Paola Cardiano, Delia Chillura Martino, Giosuè Costa, Francesca D'Anna, Cosimo Gianluca Fortuna, Emilia Furia, Massimiliano Gaeta, Chiara Gangemi, Ottavia Giuffrè, Giuseppa Ida Grasso, Annamaria Martorana, Patrizia Mazzei, Giuseppe Musumarra, Antonio Palumbo Piccionello, Nino Russo, Maria Zappalà

Comitato Organizzatore

Francesca D'Anna (Presidente), Delia Chillura Martino, Annamaria Martorana, Paola Marzullo, Antonio Palumbo Piccionello, Carla Rizzo

Email: scisicilia.unipa@gmail.com

Editorial composition and graphic: Palermo University Press
Copyright: University of Palermo
ISBN (print): 978-88-5509-002-5
ISBN (online): 978-88-5509-004-9

Un modello realistico per visualizzazioni in didattica

ANTONELLA DI VINCENZO,^A MICHELE A. FLORIANO,^A

^a *Dipt. STEBICEF, Università di Palermo, Viale delle Scienze Ed. 17, 90123, Palermo*

e-mail antonella.divincenzo@unipa.it

Nella didattica chimica le visualizzazioni di fenomeni a livello atomico/molecolare sono un ausilio indispensabile nella razionalizzazione di fenomeni macroscopici utili a prevenire possibili misconcetti. Esistono infatti numerosi esempi di animazioni molecolari di fenomeni e processi di interesse chimico ma, quasi sempre, il comportamento dinamico non è basato su leggi fisiche realistiche. Attualmente, comunque gli strumenti di calcolo comunemente accessibili e la disponibilità di pacchetti software efficienti per simulazioni molecolari online hanno reso praticabile l'uso di modelli realistici anche a scopo didattico.

In questo lavoro è stato messo a punto un modello 2D per la simulazione del fenomeno di nucleazione e crescita di nanoparticelle basato sul metodo della Dinamica Molecolare (MD) che utilizza l'ambiente generale di simulazione disponibile su una piattaforma ad libero accesso.¹ In particolare, il modello consente di illustrare che, durante il processo di crescita di nanoparticelle, il rapporto superficie/volume diminuisce e ciò giustifica l'elevata attività catalitica delle nanoparticelle rispetto al materiale bulk.

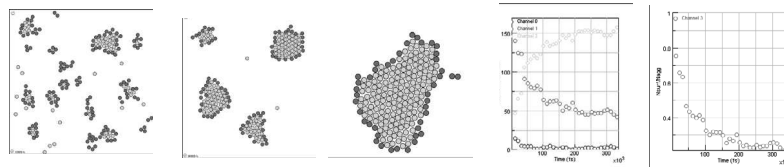


Figura 1. Processo di crescita di nanoparticelle. Sono riportati rispettivamente il numero di particelle libere (nero), superficiali (rosso) e aggregate (verde) ed il rapporto fra le ultime due quantità (fucsia).

Durante la simulazione vengono visualizzate immagini simili a quelle di Figura 1 che riporta un esempio a $T=300\text{K}$ per 200 particelle con diametro $\sigma=1.4\text{\AA}$, massa= 40g/mol , interagenti mediante un potenziale di Lennard-Jones con $\epsilon=0.1\text{eV}$. Si può notare che il rapporto superficie/volume diminuisce rapidamente per raggiungere un valore costante quando si è formato un aggregato unico. È possibile modificare tutti i parametri della simulazione in modo da studiarne l'effetto.

Bibliografia

¹ <http://mw.concord.org/modeler/>