

## SYLLABUS DEL CORSO

### Chimica Fisica Superiore - Modulo 2

2021-1-F5401Q027-M2

---

#### Obiettivi

---

#### Conoscenze e capacità di comprensione acquisite

- Metodologie di analisi statistica di sistemi a molte particelle
  - Procedure per il calcolo delle grandezze termodinamiche a partire da modelli microscopici di sistemi a molte particelle
  - Strumenti matematici di base per il calcolo della funzione di partizione
  - Metodologie idonee alla descrizione approssimata di sistemi interagenti classici e quantistici
- 

- Determinazione delle equazioni di stato e dei potenziali termodinamici di sistemi di interesse chimico
  - Valutazione del limite di applicabilità dell'approssimazione classica in sistemi di interesse chimico
-

- Valutazione dell'appropriatezza delle tecniche di calcolo numerico utilizzate in codici di simulazione commerciali
- Capacità di analisi critica delle procedure di costruzione assiomatica di teorie scientifiche

—  
Usò rigoroso del linguaggio naturale in ambito scientifico  
—  
—————

## **Contenuti sintetici**

Insiemi statistici e spazio delle fasi. Distribuzioni di densità degli stati. Principio di eguale probabilità a priori. Condizioni di equilibrio statistico. Teorema di Liouville. Teorema H. Insiemi microcanonici, canonici e gran-canonici. Funzione di partizione. Il gas perfetto monoatomico classico e quantistico.

## **Programma esteso**

Rappresentazione lagrangiana dell'equazione del moto. Momenti generalizzati e equazione canonica del moto. Insiemi statistici e spazio delle fasi. Distribuzioni di densità degli stati.. Principio di eguale probabilità a priori. Teorema di Liouville. Condizioni di equilibrio statistico. Insiemi microcanonici, canonici e gran-canonici. La legge di distribuzione di Maxwell-Boltzmann in un insieme microcanonico. Il principio di equipartizione. Il teorema H di Boltzmann. Applicazioni della meccanica statistica: insiemi di particelle libere; insiemi di particelle confinate; particelle in un campo di forze armonico; insiemi di particelle dotate di spin. Applicazioni a sistemi termodinamici di rilievo chimico: il gas perfetto monoatomico; miscele perfette di gas; gas non ideali. Cenni alle distribuzioni quantistiche di Bose-Einstein e di Fermi-Dirac.

## **Prerequisiti**

Termodinamica classica, calcolo di funzioni a più variabili, conoscenza elementare dei fondamenti della meccanica quantistica.

## **Modalità didattica**

L'insegnamento è ripartito in due moduli, erogati da Claudio Greco (meccanica quantistica) e da Dario Narducci (meccanica statistica). Il modulo di meccanica statistica sarà erogato ove possibile parzialmente in presenza e, per

la restante parte, in remoto in modalità sincrona (via WebEx). Tutte le lezioni saranno registrate.

## **Materiale didattico**

Narducci, Dario, *Introduzione alla meccanica statistica: un approccio assiomatico elementare*, UnicaPress, Cagliari, 2020. Disponibile gratuitamente online: <https://unicapress.unica.it/index.php/unicapress/catalog/book/978-88-3312-015-7>

Reif, Frederick, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill, 1965 e Waveland Press, 2009

## **Periodo di erogazione dell'insegnamento**

Primo anno, primo semestre

## **Modalità di verifica del profitto e valutazione**

Esame orale. Lo studente può, a sua richiesta, sostenere prove separate sui due moduli. Non sono previste prove intermedie.

Durante l'emergenza COVID l'esame verrà svolto via Webex.

Il colloquio orale è volto a verificare il livello delle conoscenze acquisite, la comprensione dei principali snodi concettuali nello sviluppo della teoria presentata durante il corso ed il corretto uso del linguaggio da parte dell'esaminando/a.

## **Orario di ricevimento**

Su appuntamento.

---