UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

# COURSE SYLLABUS

## Chimica Fisica Superiore - Modulo 2

**2122-1-F5401Q027-M2**

### Obiettivi

Obiettivo del corso è di fornire agli studenti un'introduzione alla meccanica statistica e alle sue applicazioni in campo chimico.

**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

**Conoscenze e capacità di comprensione applicative acquisite**

- 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

**Autonomia di giudizio acquisita**

- 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

**Abilità comunicative**

Uso rigoroso del linguaggio naturale in ambito scientifico

**Capacità di apprendere**

Attivazione di competenze critiche nell'analisi di modelli scientifici

## 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 prevede lezioni frontali.

Il modulo sarà tenuto in lingua italiana se non saranno presenti studenti Erasmus; in inglese in caso contrario.

## 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.

Il colloquio orale del modulo di meccanica statistica 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.