

## SYLLABUS DEL CORSO

### Chimica Fisica Superiore

2324-1-F5401Q027

---

#### Obiettivi

##### Modulo 1 - Chimica Quantistica

Fornire agli studenti gli elementi teorici della chimica quantistica e introdurre i principali metodi per il calcolo di struttura e proprietà molecolari.

Le informazioni dettagliate sono fornite nel [Syllabus del Modulo 1](#)

##### Modulo 2 - Meccanica Statistica

Fornire agli studenti un'introduzione alla meccanica statistica e alle sue applicazioni in campo chimico. Le informazioni dettagliate sono fornite nel [Syllabus del Modulo 2](#)

#### Contenuti sintetici

Modulo 1:

Fondamenti della meccanica quantistica; teoria perturbativa e metodo variazionale; atomi polielettronici; struttura elettronica molecolare.

Modulo 2:

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

## Modulo 1:

Richiami e approfondimenti sull'approccio ondulatorio della meccanica quantistica;  
Metodi della meccanica quantistica: calcolo variazionale e metodo perturbativo per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger per sistemi polielettronici  
Spin elettronico e antisimmetria.  
Atomi polielettronici.  
Struttura elettronica molecolare: approssimazione di Born-Oppenheimer; teoria degli orbitali molecolari. Approccio Hartree-Fock-Roothan a sistemi molecolari. Esempi di calcolo della struttura elettronica molecolare.

## Modulo 2:

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

Conoscenze di base di matematica e fisica. 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).

Entrambi i moduli prevedono lezioni frontali e saranno tenuti in lingua italiana se non saranno presenti studenti Erasmus; in inglese in caso contrario

## Materiale didattico

### Modulo 1:

Trasparenze illustrate dal docente a lezione  
I.N. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall.

### Modulo 2:

Narducci, Dario, Introduzione alla meccanica statistica: un approccio assiomatico elementare, UnicaPress, Cagliari, 2020. Disponibile gratuitamente online.

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. Il colloquio orale è volto a verificare il livello delle conoscenze acquisite, la comprensione dell'approccio concettuale nello sviluppo della teoria presentata durante il corso ed il corretto uso del linguaggio da parte dell'esaminando/a. Non sono previste prove intermedie. Lo studente può, a sua richiesta, sostenere prove separate sui due moduli.

Il voto finale dell'insegnamento "Chimica Fisica Superiore" è la media dei voti acquisiti nei 2 moduli.

## **Orario di ricevimento**

Su appuntamento.

## **Sustainable Development Goals**

---