

SYLLABUS DEL CORSO

Complementi di Struttura della Materia

2425-3-E2701Q061

Obiettivi

Gli obiettivi sono quelli di dare una prima introduzione alla meccanica statistica classica e quantistica e fornire della solide basi di fisica molecolare anche attraverso la teoria dei gruppi finiti.

Contenuti sintetici

Elementi di meccanica statistica classica e quantistica. Introduzione alla teoria dei gruppi con applicazioni allo studio degli stati elettronici e vibrazionali di molecole poliatomiche. Molecole: struttura elettronica, rotazionale e vibrazionale.

Programma esteso

1. Introduzione alla termodinamica statistica: (KK) capitoli 2, 3, 5, 6, 7:

Entropia, temperatura e probabilità.

Ensemble canonico e la distribuzione di Boltzmann.

Gas classico ideale.

Potenziale chimico, ensemble gran canonico.

Distribuzioni statistiche quantistiche: Fermi-Dirac e Bose-Einstein. Limite classico.

Il gas di Fermi: energia di Fermi e calore specifico.

Gas di bosoni a bassa temperatura e la condensazione di Bose-Einstein, Superfluidità nell'elio liquido.

Teorema di equipartizione e calore specifico delle molecole poliatomiche.

2. Fisica molecolare: (BJ)

Approssimazione adiabatica

Lo schema MO-LCAO e l'equazione secolare.

I metodi di Heitler-London e di Huckel

Lo ione e la molecola idrogeno

Molecole biatomiche

Molecole organiche

Proprietà vibrazionali e rotazionali delle molecole

L'interazione molecolare di van der Waals

L'approssimazione di Franck-Condon

Spettroscopie IR, UV-VIS e Raman

3. Elementi di teoria dei gruppi: (AF) capitoli 5, 8.7, 10.11-10.12:

Gruppi ed operazioni di simmetria delle molecole

Rappresentazione dei gruppi finiti, rappresentazioni irriducibili, tavola dei caratteri

Teoria dei gruppi e meccanica quantistica, applicazione agli stati elettronici delle molecole poliatomiche

Prodotto diretto di due gruppi. Regole di selezione delle transizioni ottiche in molecole poliatomiche.

Vibrazioni di molecole poliatomiche. regole di selezione IR e Raman.

Prerequisiti

I contenuti dei corsi di matematica e fisica dei primi due anni e dei corsi di Struttura della Materia

Modalità didattica

Lezioni frontali tenute in italiano. Libri di testo e materiali aggiuntivi potranno essere sia in italiano che in inglese. Tutte le lezioni sono svolte in presenza in modalità erogativa suddivise in 24 ore di lezione e 36 ore di esercitazioni.

Materiale didattico

Testi suggeriti:

(KK) C. Kittel e H. Kroemer, Termodinamica Statistica, Boringhieri (Torino 1985) or the English version, Thermal Physics (W. Freeman, 1980). (KK)

(AF) P.W. Atkins and R. S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics (5th edition), Oxford University Press (Oxford, 2011); P.W. Atkins and R. S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Meccanica Quantistica Molecolare (Zanichelli, 2000). (AF)

(BJ) B.H. Brandsen e C.J. Joachaim, Physics of Atoms and Molacules, Prentice Hall, 2003 (BJ)

Per approfondimenti:

S.J. Blundell and C. Blundell, "Concepts in Thermal Physics" (Oxford University Press, 2009)

D.C. Harris and M. D. Bertolucci, Symmetry and Spectroscopy (Dover, 1989)

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Secondo Semestre

Modalità di verifica del profitto e valutazione

L'esame si articola in una prova scritta e un colloquio orale..

La prova scritta consiste nello svolgimento di esercizi numerici riguardanti argomenti di fisica molecolare, meccanica statistica ed applicazioni della teoria dei gruppi alle proprietà elettroniche e vibrazionali delle molecole. Durante la prova scritta non è permesso l'utilizzo di libri ed appunti.

La prova orale verte sulla discussione della teoria illustrata a lezione.

La prova orale deve essere sostenuta nella stessa sessione d'esame in cui è stata sostenuta la prova scritta o in quella successiva.

Orario di ricevimento

Tutti i giorni previo appuntamento.

Sustainable Development Goals

