UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Advanced Physical Chemistry

2526-1-F5402Q003

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

32 lezioni da 2 ore in presenza, Didattica Erogativa
L'insegnamento è ripartito in due moduli, erogati da Claudio Greco (meccanica quantistica) e da Dario Narducci (meccanica statistica).
Entrambi i moduli 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