UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

# COURSE SYLLABUS

## Structure of Matter

**2627-3-ESM01Q013**

### Obiettivi

Il corso ha l'obiettivo di fornire agli studenti una conoscenza approfondita e sistematica della meccanica statistica, sia classica sia quantistica, nonché una solida base di fisica molecolare, integrando anche elementi di teoria dei gruppi finiti (Indicatore di Dublino 1: Conoscenza e capacità di comprensione). L'impostazione rigorosa è finalizzata allo sviluppo di una comprensione critica e consapevole dei principi teorici, e alla loro contestualizzazione all'interno del quadro più ampio della fisica della materia.

Attraverso lezioni teoriche ed esercitazioni, il corso intende potenziare la capacità dello studente di applicare in modo autonomo le conoscenze acquisite a problemi complessi in ambito molecolare e statistico, utilizzando strumenti teorici adeguati e formulando modelli matematici appropriati (Indicatore di Dublino 2: Capacità di applicare conoscenza e comprensione). L'enfasi è posta sulla capacità di astrazione, generalizzazione e trasferimento delle conoscenze, elementi fondamentali per affrontare situazioni nuove o interdisciplinari.

Infine, il corso promuove l'acquisizione di metodologie di studio autonome e strumenti concettuali che consentano allo studente di proseguire l'apprendimento in modo indipendente, anche nell'ambito della ricerca o in contesti professionali ad alta complessità teorica (Indicatore di Dublino 5: Capacità di apprendimento).

### 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. Ogni argomento teorico sarà accompagnato da un'ampia parte esercitativa, volta a rafforzare la comprensione dei concetti e a sviluppare la capacità di applicare la teoria a sistemi modello e a situazioni fisiche di interesse reale.

## 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 e (piccole) poliatomiche

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.

4. Esercizi relativi a tutti i punti precedenti.

## Prerequisiti

Per la comprensione dei contenuti di questo insegnamento è necessaria una buona conoscenza degli argomenti principali studiati nei corsi di matematica e fisica dei primi due anni ed in particolare degli elementi fondamentali di meccanica quantistica.

## Modalità didattica

Lezioni frontali tenute in italiano. Libri di testo e materiali addizionali potranno essere sia in italiano che in inglese.
Tutte le lezioni sono svolte in presenza in modalità erogativa suddivise in 56 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

Primo 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.

## Orario di ricevimento

Tutti i giorni previo appuntamento. Il ricevimento studenti è sospeso per gli studenti iscritti ad un appello d'esame a partire da una settimana prima della data dello scritto fino alla conclusione dell'appello.

## Sustainable Development Goals

ISTRUZIONE DI QUALITÁ