TERMODINAMICA STATISTICA E MECCANICA STATISTICA

TERMODINAMICA STATISTICA (3 crediti)

1. RICHIAMI DI TERMODINAMICA CLASSICA

- 1.1 Sistemi termodinamici e trasformazioni termodinamiche.
- 1.2 Primo principio della termodinamica.
- 1.3 Funzioni di stato: energia interna, entalpia, funzione di Helmoltz, funzione di Gibbs.
- 1.4 Trasmissione del calore e legge di Fourier: esempi di applicazioni a problemi reali.
- 1.5 Seconda legge della termodinamica.
- 1.6 Entropia ed irreversibilità; espansione dell' universo.
- 1.7 Potenziali termodinamici e potenziale chimico.
- 1.8 Sistemi chiusi e sistemi aperti. Equilibrio termodinamico.
- 1.9 Equazioni di Maxwell.
- 1.10 Transizioni di fase. Equazione di Clausius-Clapeyron.
- 1.11 Terza legge della termodinamica ed evidenze sperimentali.

2. Cenni di teoria delle probabilità.

- 2.1 Teoremi fondamentali.
- 2.2 Leggi e funzioni di distribuzione.
- 2.3 Variabili aleatorie, valor medio, dispersione.

3. FONDAMENTI DI TERMODINAMICA Statistica

- 3.1 Distribuzione di Maxwell-Boltzmann delle velocità di un gas ideale in equilibrio termodinamico.
- 3.2 Teorema dell'equipartizione dell'energia.
- 3.3 Interazione termica e meccanica tra sistemi con molte particelle.
- 3.4 Temperatura; equilibrio termico.
- 3.5 Distribuzioni canoniche, microcanoniche, gran canoniche.
- 3.6 Entropia ed informazione
- 3.7 Interpretazione statistica dell'energia interna, della funzione di Helmoltz e della funzione di Gibbs.
- 3.8 Formulazione statistica della prima legge della termodinamica.
- 3.9 Applicazioni statistiche: energia media di un gas ideale, energia media di una molecola biatomica, energia media dell'oscillatore armonico.
- 3.10 Calore molare dei solidi. Legge di Dulong e Petit. Legge di Einstein e legge di Debye.
- 3.11 Cenni sulle proprietà magnetiche della materia.
- 3.12 Termodinamica della radiazione.
- 3.13 Legge di Stefan-Boltzmann.
- 3.14 Gas reali e loro equazione di stato di un gas reale.
- 3.15 Teorema del viriale, coefficienti del viriale.

MECCANICA STATISTICA (2 crediti)

4. Statistica dei sistemi di particelle

- 4.1 Spazio delle fasi: spazio-m, spazio-G.
- 4.2 Teorema H di Boltzmann e sua interpretazione probabilistica.
- 4.3 Equazione del trasporto di Boltzmann e sue applicazioni: libero cammino medio, tempo di collisione, viscosità, conducibilità termica, diffusione. conducibilità elettrica.
- 4.4 "Ensembles" classici: stazionari, microcanonici, canonici, gran canonici.
- 4.5 Ipotesi ergodica.
- 4.6 Teorema di Liouville.
- 4.7 Equilibrio e fluttuazioni.
- 4.8 Teorema H ed evoluzione verso l'equilibrio.
- 4.9 Funzione di partizione.
- 4.10 Statistiche quantistiche. Distribuzione di Bose-Einstein. Distribuzione di Planck. Distribuzione di Fermi-Dirac: distribuzione degli elettroni in un cristallo. Contributo degli elettroni al calore molare.
- 4.10 Sistemi quantizzati: particella in una scatola; quantizzazione dell'oscillatore armonico.
- 4.11 Numero di stati. Microstati e macrostati.
- 4.12 Stati accessibili di un sistema e postulati statistici.

5. APPLICAZIONI

- 5.1 Modello armonico di un cristallo.
- 5.2 Modi normali di vibrazione; approssimazione di Einstein, modello di Debye.
- 5.3 Teoria degli elettroni liberi in un cristallo.
- 5.4 Difetti puntiformi in leghe diluite; vacanze ed interstiziali.
- 5.5 Diffusione.
- 5.6 Cenni sulle proprietà magnetiche della materia.

6. METODI PER LO STUDIO DELLE PROPRIETA DI LIQUIDI E DI SOLIDI

- 6.1 Campionamento dello spazio delle fasi: integrazione secondo il metodo Montecarlo e Metropolis.
- 6.2 Simulazione di liquidi molecolari.
- 6.3 Fondamenti di dinamica molecolare.
- 6.4 Esempi ed applicazioni dei metodi alle differenze finite per lo studio delle proprietà termodinamiche e delle proprietà di trasporto.