

99 - Insegnamento: TERMODINAMICA COMPUTAZIONALE**Settore Scientifico - Disciplinare:** FIS/03**CFU:** 8**Tipologia attività formativa:****Altro (specificare):****Obiettivi formativi:**

Introduzione alla termodinamica tramite la fisica statistica. Fornire strumenti per il calcolo dell'energia libera e quindi delle proprietà termodinamiche dei materiali mediante simulazione numerica.

Programma sintetico:

- La prima legge della termodinamica: Fisica macroscopica, concetti termici, la prima legge, problemi (4 ore)
- Seconda legge della termodinamica: La direzione dei processi naturali, microstati, il peso statistico dei macrostati, equilibrio in un sistema isolato, equilibrio in un sistema immerso in un bagno termico, distribuzione di Boltzmann, la seconda legge per variazioni infinitesime, disequaglianza di Clausius, l'energia libera di Helmholtz, potenziali termodinamici, lavoro massimo, la terza legge della termodinamica, problemi (10 ore)
- Sistemi termodinamici: Altre forme della seconda legge, motori e pompe di calore, calore specifico, gas perfetto, l'entropia, l'entropia di mescolamento (paradosso di Gibbs), funzione di partizione, limite classico, distribuzione delle velocità di Maxwell, equipartizione dell'energia, problemi (10 ore)
- Equilibrio di fase: Condizioni di equilibrio, equazione di Clausius-Clapeyron, applicazioni (dipendenza dalla pressione del punto di fusione, del punto di ebollizione, pressione di vapore), il punto critico, problemi (6 ore)
- Sistemi con numero variabile di particelle: Distribuzione di Gibbs, gas perfetto quantistico, le distribuzioni di Fermi-Dirac e Bose-Einstein, limite classico. Modello elettroni liberi, calore specifico dei metalli, condensato di Bose-Einstein, termodinamica della distribuzione di Gibbs, fluttuazioni del numero di particelle, reazioni chimiche, problemi (10 ore)
- Solidi: Approssimazione armonica, energia libera dell'oscillatore armonico, catena di oscillatori in una dimensione, relazioni di dispersione, problema tridimensionale, fononi, anarmonicità, integrazione termodinamica, metodi di simulazione numerica, Monte Carlo, dinamica molecolare, termostati. (8 ore)
- Simulazioni al computer: Calcolo delle energie libere dei solidi in approssimazione armonica, dipendenza dal volume, espansione termica, (8 ore) integrazione termodinamica e anarmonicità (tempo e risorse computazionali permettendo) (8 ore)

Esami propedeutici: Meccanica quantistica**Prerequisiti:** Nessuno**Modalità di accertamento del profitto:** Relazione scritta