

Corso di Laurea Magistrale in Fisica		Insegnamento / Course Termodinamica Computazionale/ Computational Thermodynamics		
SSD: FIS/03	CFU/Credits: 8	Anno di corso: I/II	Lezione (ore): 40	Esercitazione (ore): 24
Obiettivi formativi: Il corso avvia lo studente alla conoscenza ed all'uso di nozioni che lo mettano in grado di comprendere e finalizzare le moderne tecniche computazionali nella Fisica dei materiali. Lo studente inoltre valorizzerà le sue capacità nella simulazione numerica, effettuando alcuni esperimenti computazionali di Fisica, approfondirà la sua conoscenza dell'elaborazione statistica dei dati raccolti, ed esporrà i risultati in forma di relazione scritta, dimostrando il livello della sua autonomia di giudizio critico, della sua abilità nella comunicazione e della sua capacità di apprendere.		Training objectives: The course presents the student with an introduction to modern computational tools in the physics of materials. They will have the opportunity to carry out computer experiments, and deepen their understanding of the statistical analysis of the data produced in these experiments. Results will be gathered in a written report, in which the student will be expected to demonstrate their independence and critical judgment, communication skills, and learning ability.		
Programma sintetico (sillabo): Fisica macroscopica, concetti termici, la prima legge della termodinamica, calore specifico, la seconda legge, la direzione dei processi naturali, microstati, il peso statistico dei macrostati, l'entropia, equilibrio in un sistema isolato, equilibrio in un sistema immerso in un bagno termico, distribuzione di Boltzmann, sistemi con numero variabile di particelle, distribuzione di Gibbs, fluttuazioni dell'energia e del numero di particelle. Altre forme della seconda legge, la funzione <i>disponibilita'</i> , gas perfetto, funzione di partizione, limite classico, potenziali termodinamici, distribuzione delle velocità di Maxwell, equipartizione dell'energia. Gas perfetto quantistico, le distribuzioni di Fermi-Dirac e Bose-Einstein, limite classico. Modello elettroni liberi, calore specifico dei metalli, condensato di Bose-Einstein. 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 potenziale chimico. 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, teoria del funzionale densità, equazioni di Kohn-Sham, dinamica molecolare, termostati. Simulazioni al computer: calcolo delle energie libere dei solidi in approssimazione armonica, dipendenza dal volume, espansione termica, integrazione termodinamica e anarmonicità'.				
Contents: Macroscopic physics, thermal concepts, the first law of thermodynamics, specific heat, the second law, direction of natural processes, the statistical weight, entropy, equilibrium in an isolated system, equilibrium in a system in contact with a heat bath, Boltzmann distribution, system with variable particle numbers, Gibbs distribution, energy and particle number fluctuations. Other forms of the second law, the <i>availability</i> , perfect gas, partition function, classical limit, thermodynamic potentials, Maxwell velocity distribution, theorem of the equipartition of the energy. Quantum perfect gas, Fermi-Dirac and Bose-Einstein distributions, classical limit. Free electron model, specific heat of metals, Bose-Einstein condensate. Phase equilibrium, conditions, Clausius-Clapeyron equation, applications (dependence of melting point on pressure, vapour pressure), the chemical potential. Solids: harmonic approximation, free energy in the harmonic oscillator, chain of harmonic oscillators in one dimension, dispersion relations, three dimensional problem, phonons, anharmonicity, thermodynamic integration, methods of numerical simulation, density functional theory, Kohn-Sham equations, molecular dynamics, thermostats. Computer simulations: calculation of free energy of solids with the harmonic approximation, dependence on volume, thermal expansion, thermodynamic integration and anharmonicity.				
Esami propedeutici / Propaedeutic exams: - Meccanica quantistica / Quantum Mechanics				

Prerequisiti / Prerequisites: -

Finalità e modalità di verifica dell'apprendimento

Relazione scritta ed esame orale/Written report and oral exam.