

Statistical mechanics

Emanuele Coccia

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche

- ecoccia@units.it
- edificio C11, quarto piano, stanza 453/454
- appuntamento: lunedì 15h-17h
- Registratevi su Moodle

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia
- Equilibrio chimico

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia
- Equilibrio chimico
- Vibrazioni nei solidi: modelli di Einstein e Debye

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia
- Equilibrio chimico
- Vibrazioni nei solidi: modelli di Einstein e Debye
- Terzo principio della termodinamica

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia
- Equilibrio chimico
- Vibrazioni nei solidi: modelli di Einstein e Debye
- Terzo principio della termodinamica
- Gas reale: coefficienti viriali, correzioni per la non-idealità

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia
- Equilibrio chimico
- Vibrazioni nei solidi: modelli di Einstein e Debye
- Terzo principio della termodinamica
- Gas reale: coefficienti viriali, correzioni per la non-idealità
- Liquidi

Programma del corso

- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia
- Equilibrio chimico
- Vibrazioni nei solidi: modelli di Einstein e Debye
- Terzo principio della termodinamica
- Gas reale: coefficienti viriali, correzioni per la non-idealità
- Liquidi
- Metodi computazionali: dinamica molecolare, Monte Carlo

Programma del corso

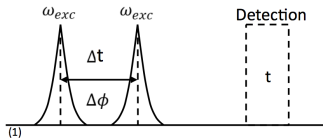
- Significato della meccanica statistica e concetti di termodinamica
- Distribuzione di Boltzmann
- Funzione di partizione: canonica (Z), microcanonica, grancanonica (sistema a due livelli)
- Statistica di Boltzmann, gas ideale
- Z traslazionale, vibrazionale, rotazionale ed elettronica
- Teorema di equipartizione dell'energia
- Equilibrio chimico
- Vibrazioni nei solidi: modelli di Einstein e Debye
- Terzo principio della termodinamica
- Gas reale: coefficienti viriali, correzioni per la non-idealità
- Liquidi
- Metodi computazionali: dinamica molecolare, Monte Carlo
- Gas ideali quantistici: statistica di Fermi-Dirac e Bose-Einstein

- Appunti presi a lezione
- *Statistical mechanics: A concise introduction for chemists*, Benjamin Widom, Cambridge
- Note caricate su Moodle

- Esame orale: conoscenza degli argomenti, capacità di ragionamento, capacità d'esposizione
- Esame condotto nel mio studio (due appelli invernali, due appelli estivi, un appello a settembre)

Simulazione di spettroscopie ultraveloci risolte nel tempo: il ruolo della coerenza quantistica in molecole, clusters metallici e nanostrutture

Collaborazione con l'Università di Padova

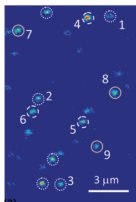


Ultrafast Spectroscopy

→ Ultrashort pulses to interrogate system dynamics
Femtosecond timescale processes

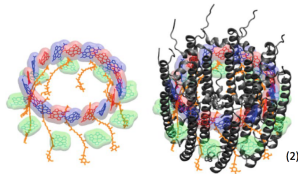
Coherence

→ Superposition of quantum states



Single Molecules

→ High spatial resolution
Prevent intrinsic inhomogeneity of molecules

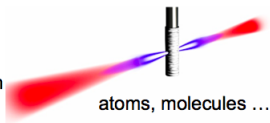


Simulazione di risposte ottiche **non-lineari** in
campi elettrici intensi: spettroscopia
high-harmonic generation su molecole
Collaborazione con l'Università Sorbona di Parigi

HHG is a nonlinear optical process

Laser source:

$\omega_L = 800 \text{ nm}$
 $10^{14}\text{-}10^{15} \text{ W/cm}^2$
linear polarization

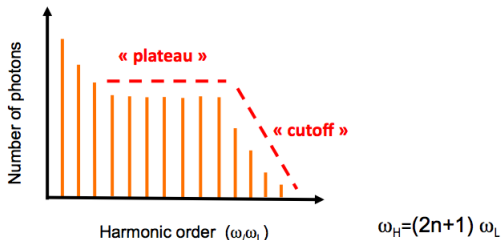


- Energy: *XUV/Soft-X rays*
- Temporal resolution: *attosecond pulses*

P. M. Paul et al. Nature **414**, 509 (2001)

Harmonic spectrum

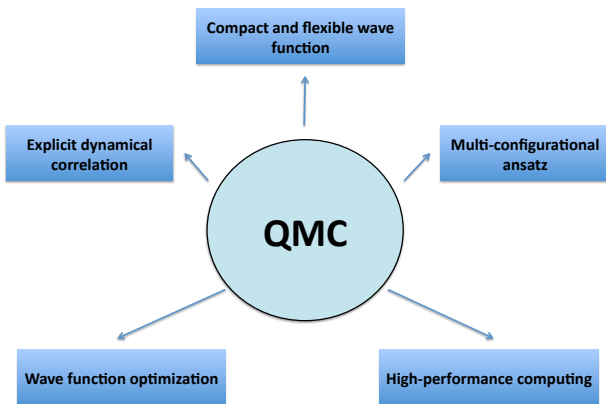
LASER output



McPherson et al.
JOSA B **4**, 595 (1987)

Applicazione di metodi **quantum Monte Carlo** al calcolo delle proprietà di stato elettronico fondamentale ed eccitato di molecole

Collaborazione con l'Università Sorbona di Parigi



- **Pros:** Accurato, parallelo, $N_{\text{el}}^3 - N_{\text{el}}^4$
- **Cons:** prefattore, errore, no “black-box”