

L’algoritmo come strumento didattico in fisica: modellizzazione dei gas ideali classici e quantistici

Ivan Guastella

UoP-PERG (University of Palermo-Physics Education Research Group)
Dipartimento di Fisica, Università di Palermo, Italy

E-mail: ivan.guastella@unipa.it

Riassunto. Viene discussa una procedura per la modellizzazione dei gas ideali quantistici. Inoltre, viene evidenziata l’importanza di supportare le incomplete rappresentazioni mentali degli studenti, in relazione ad argomenti complessi di meccanica statistica e termodinamica, con accurati modelli fisici aventi validità predittiva e fondati sull’ipotesi di possibili meccanismi di funzionamento. L’idea alla base dell’approccio proposto è quella che, in alcuni casi, anche la sola discussione dei risultati di un algoritmo o di un modello può essere sufficiente a migliorare la comprensione di un sistema fisico particolarmente complesso.

Abstract. A procedure for the modelling of ideal quantum gases is discussed. The importance of supporting students’ incomplete mental representations, about some complex arguments of statistical and thermal physics, with physically accurate models able to miming possible mechanisms of functioning and having predictive validity is also stressed. The proposed approach is mainly based on the idea that, in some cases, even a merely discussion of the results of an algorithm or of a model can provide a deeper understanding of a particularly complex physical system.

1. Introduzione

Uno degli obiettivi della meccanica statistica è quello di connettere le proprietà microscopiche della materia con il comportamento macroscopico emergente. Tuttavia, il raggiungimento di questo obiettivo implica, da parte degli studenti, la necessità di gestire un complesso formalismo matematico che di solito non è ben padroneggiato a livello di scuola secondaria superiore e spesso neppure a livello dei primi anni dei corsi universitari a indirizzo scientifico. In alcuni casi, però, l’uso di strumenti computazionali adeguatamente progettati può aiutare gli studenti a prendere coscienza di tale connessione, afferrarne l’essenza e migliorare la comprensione dei fenomeni fisici coinvolti [1].

Lo scopo principale di questo contributo è quello di fornire uno strumento didattico per affrontare lo studio delle proprietà termiche di equilibrio di sistemi di molte particelle in contatto con un bagno termico, specialmente nel caso in cui viene presa in considerazione l’indistinguibilità delle particelle identiche.

Come è ben noto, l’approssimazione classica di gas ideale svolge un ruolo di grande rilievo nell’ambito della termodinamica e della meccanica statistica. In tale approssimazione non solo si assume che le particelle siano dotate solamente di energia cinetica ma si trascurano pure gli effetti quantistici. Se si considera l’indistinguibilità quantistica delle particelle identiche allora l’approssimazione classica risulta applicabile solo nel limite delle alte temperature.

L’indistinguibilità porta a classificare tutte le particelle esistenti in bosoni e fermioni. Questi due tipi di particelle si comportano in modo molto diverso nella zona delle basse temperature e ciò è dovuto al fatto che, a differenza dei bosoni, i fermioni devono rispettare il principio di esclusione di Pauli. Come conseguenza di ciò, i bosoni obbediscono alla statistica di Bose-Einstein (BE), mentre i fermioni obbediscono alla statistica di Fermi-Dirac (FD). Alle alte temperature la probabilità che un determinato stato di singola particella sia occupato da più di una particella è così basso che le particelle possono essere considerate come se fossero di-

stinguibili. In questa situazione limite bosoni e fermioni si comportano allo stesso e, con buona approssimazione, obbediscono alla statistica di Maxwell-Boltzmann (MB).

Per facilitare il confronto quantitativo tra le proprietà termiche di questi tre distinti tipi di sistemi di particelle è utile scalare le temperature con un fattore T_0 . Per un sistema di N particelle contenute in una scatola di volume V in contatto termico con un termostato alla temperatura T , il parametro $T_0 = (N/V)^{2/3} \cdot (h^2/2\pi m k_B)$ è definito attraverso la seguente relazione

$$N/V \cdot (h^2/2\pi m k_B T)^{3/2} = (T_0/T)^{3/2} \quad (1)$$

in cui il volume occupato da una particella ad una data temperatura, dato in termini del cubo della lunghezza d'onda termica di De Broglie $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$, viene rapportato con il volume V/N effettivamente a disposizione della particella all'interno della scatola.

Un approccio puramente classico allo studio delle proprietà termiche di un gas ideale evidenzia alcuni limiti che non sempre possono essere superati in modo semplice e plausibile. Ad esempio, nel caso di molecole biatomiche, se la temperatura è inferiore ad un dato valore di soglia alcuni gradi di libertà si comportano come se fossero congelati e per essi il teorema di equipartizione dell'energia non è più valido [2]. Tuttavia, l'approssimazione classica, o più precisamente semi-classica, prevede il congelamento dei soli gradi di libertà rotazionali e vibrazionali ma non di quelli traslazionali. La semplice e incompleta rappresentazione classica rende conto dell'andamento del calore specifico di un gas ideale nella zona delle alte temperature ma non è in grado di spiegare perché esso non si annulla quando la temperatura va a zero, come previsto dal terzo principio della termodinamica. In effetti, quando la temperatura scende sotto un certo valore di riferimento, l'approssimazione classica perde progressivamente validità. Tuttavia, in questo caso, il suo fallimento non è da mettere in relazione al congelamento di un certo tipo di gradi di libertà ma piuttosto alle proprietà di simmetria imposte dalla meccanica quantistica alla funzione d'onda di un sistema costituito da molte particelle identiche. Una conseguenza sorprendente è che la temperatura del sistema non è più proporzionale all'energia cinetica. Ad esempio, gli elettroni di conduzione in un metallo (generalmente descritti in termini di un gas di fermioni non interagenti) mostrano un'energia cinetica media diversa da zero anche a temperatura nulla. Inoltre, a temperature ordinarie tale energia cinetica è circa 100 volte $k_B T$. Per contro, l'elio-4 (di solito descritto in termini di un gas di bosoni non interagenti), quando la temperatura tende a zero evidenzia un'energia cinetica media molto più piccola di $k_B T$. Entrambi questi esempi mostrano chiaramente il fallimento del teorema di equipartizione dell'energia nella regione delle basse temperature, per quanto riguarda i gradi di libertà traslazionali di un gas ideale.

In quanto segue viene proposta una modellizzazione di questi sistemi che obbediscono alle differenti statistiche. Come verrà evidenziato il modello proposto è in grado di spiegare i comportamenti macroscopici fornendo, al tempo stesso, una semplice interpretazione microscopica delle interazioni statistiche derivanti dall'indistinguibilità delle particelle identiche.

2. Un modello unificato per i gas ideali classici e quantistici

La modellazione dei gas ideali classici e quantistici in contatto con un bagno termico viene condotta nello spazio dei momenti utilizzando un metodo Monte Carlo. Invece di assumere che le particelle si muovono in una scatola, si suppone che esse eseguano un *random walk* entro l'insieme degli stati singola particella che competono a una particella confinata entro una scatola cubica di volume $V = L^3$. Ogni stato è individuato assegnandone la quantità di moto ($\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$) e l'energia ($\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m = Bk^2$), imponendo condizioni periodiche al contorno per il vettore d'onda \mathbf{k} . Inoltre, per ragioni di semplicità, si assumono unità tali che $k_B = 1$, $B = 1$ e $L = 2\pi$. Il comportamento macroscopico del sistema è modellizzato attraverso un'evoluzione stocastica dei suoi microstati, ognuno caratterizzato dall'insieme dei numeri di occupazione degli stati singola particella.

Si suppone che le particelle obbediscano a una dinamica molto semplificata, come quella rappresentata da una catena di Markov in uno spazio degli stati di dimensione finita le cui probabilità di transizione soddisfanno il principio del bilancio dettagliato [3]. Questo requisito garantisce al sistema il raggiungimento della distribuzione di equilibrio termico imponendo, per una data coppia di stati, l'uguaglianza delle probabilità di transizione diretta e inversa. In questo modo, la memoria a breve termine caratteristica di un processo di Markov garantisce l'irreversibilità macroscopica, mentre la reversibilità microscopica è assicurata dalla condizione di bilancio dettagliato.

Quanto sopra discusso costituisce il fondamento della teoria sottostante il ben noto algoritmo di Metropolis che viene ampiamente adoperato, nell'ambito di simulazioni Monte Carlo, per modellizzare il comportamento di sistemi che all'equilibrio termico seguono la statistica di MB. Partendo da un arbitrario stato iniziale, l'algoritmo di Metropolis simula la dinamica del sistema assumendo una probabilità di transizione T_{ij} , dallo stato i allo stato j , di energia rispettivamente ε_i e ε_j , correlata a quella inversa T_{ji} in accordo con la seguente condizione di bilancio dettagliato

$$T_{ij} \cdot e^{-\varepsilon_i/k_B T} = T_{ji} \cdot e^{-\varepsilon_j/k_B T} \quad (2)$$

La scelta di Metropolis per le probabilità di transizione consiste nell'assumere $T_{ij} = \min \left[1, e^{-(\varepsilon_j - \varepsilon_i)/k_B T} \right]$.

Ciò implementa una procedura di tipo *importance sampling* [4] che incrementa l'efficienza dell'algoritmo velocizzando il raggiungimento di uno stato di equilibrio stazionario. In fatti, questa particolare scelta guida il sistema verso un minimo di energia accettando sempre le transizioni che riducono l'energia del sistema. D'altro canto, le transizioni che aumentano l'energia del sistema vengono accettate solo con una probabilità data dal fattore di Boltzmann relativo alla differenza di energia tra i due stati singola particella coinvolti nella transizione. L'algoritmo di Metropolis viene implementato, utilizzando un metodo di rigetto, confrontando T_{ij} con un numero random u , uniformemente distribuito tra 0 e 1, e accettando il nuovo stato di prova solo se $u \leq T_{ij}$.

Il punto cruciale nel simulare il comportamento di un gas ideale quantistico è essenzialmente quello di variare le configurazioni del sistema senza violare il principio di indistinguibilità delle particelle identiche e in particolare il principio di esclusione di Pauli per i fermioni.

Da un punto di vista classico, le configurazioni ottenute per scambio di una data coppia di particelle sono energeticamente equivalenti ma distinguibili. Di conseguenza, esse devono essere incluse nel conteggio dei differenti microstati. Al contrario, dal punto di vista della meccanica quantistica tutte queste configurazioni costituiscono realmente lo stesso microstato e devono essere considerate una sola volta nel conteggio dei microstati distinti.

Alcuni metodi di simulazione al computer [5] prendono in considerazione l'indistinguibilità valutando il numero di modi in cui ciascun distinto microstato può essere generato permutando e scambiando tutte le possibili coppie di particelle. Tuttavia, tali metodi sono adatti per sistemi di poche particelle e non forniscono una visione particolarmente intuitiva riguardo all'evoluzione dinamica del sistema.

In questo approccio, l'indistinguibilità è implementata ordinando tutti gli stati di singola particella in ordine crescente di energia ed etichettando virtualmente le particelle identiche con un numero identificativo [6]. Stati degeneri, cioè stati aventi la stessa energia, sono disposti in ordine arbitrario. Per semplicità, le particelle nella configurazione iniziale sono ordinate per energie crescenti così che quando $i < j$ risulta sempre $\varepsilon_i \leq \varepsilon_j$. Le configurazioni vengono variate facendo muovere le particelle da uno stato ad un altro sulla base della (2) e vietando salti sopra stati già occupati nella sequenza ordinata. Così facendo, tra tutte le possibili configurazioni corrispondenti allo stesso microstato, viene campionata solo una data sequenza ordinata (indipendentemente da quale). In fatti, consentire una mossa che vari la sequenza ordinata sarebbe equivalente a considerare le particelle identiche come se fossero distinguibili.

Per fornire una migliore rappresentazione di questa pseudo-dinamica, i dettagli degli algoritmi per ciascun tipo di sistema vengono di seguito discussi separatamente.

2.1. Algoritmo per i fermioni

Per sistemi di fermioni identici, l'indistinguibilità e il principio di esclusione di Pauli vengono implementati partendo da una configurazione iniziale con non più di una particella per ciascuno stato e vietando salti su stati già occupati. Per semplicità si trascura la degenerazione di spin.

La figura 1 mostra tutte le possibili mosse Monte Carlo per il fermione identificato con il numero $n = 4$, scelto a caso nell'intero insieme dei fermioni. I nuovi stati di prova ammessi sono solo quelli in cui esso è rappresentato come un cerchio pieno, e coprono l'intervallo compreso tra lo stato che segue quello occupato dal fermione $n - 1 = 3$ e lo stato che precede quello occupato dal fermione $n + 1 = 5$. Tutti questi stati sono ugualmente possibili, ma non ugualmente favoriti da un punto di vista termodinamico. In accordo con quanto stabilito dall'algoritmo di Metropolis, le transizioni che non aumentano l'energia del sistema (quelle in cui la particella è di colore grigio chiaro) vengono sempre accettate mentre quelle che la innalzano (quelle in cui la particella è di colore grigio scuro) vengono accettate con una minore probabilità, proporzionale al fattore di Boltzmann.

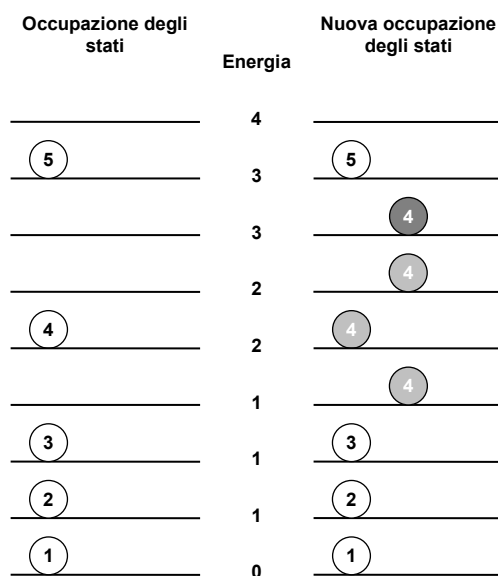


Figura 1. Possibile variazione di configurazione per un sistema di fermioni identici.

2.2. Algoritmo per i bosoni

A differenza dei fermioni, più di un bosone può occupare lo stesso stato di singola particella ma, ancora una volta, sono proibiti salti sopra stati occupati.

La figura 2 mostra tutte le possibili mosse Monte Carlo per il bosone identificato con il numero $n = 6$, scelto a caso. I nuovi stati di prova ammessi sono quelli inclusi nell'intervallo compreso tra lo stato occupato dal bosone $n - 1 = 5$ e quello occupato dal bosone $n + 1 = 7$. Ancora una volta le transizioni verso stati in cui la particella selezionata è rappresentata in grigio chiaro sono più probabili rispetto a quelle verso stati in cui essa è rappresentata in grigio scuro.

Si noti che, a differenza di quanto avviene per i fermioni, nel caso dei bosoni gli stati occupati dalla particella che precede e da quella che segue la particella selezionata sono inclusi nell'insieme dei nuovi stati di prova permessi.

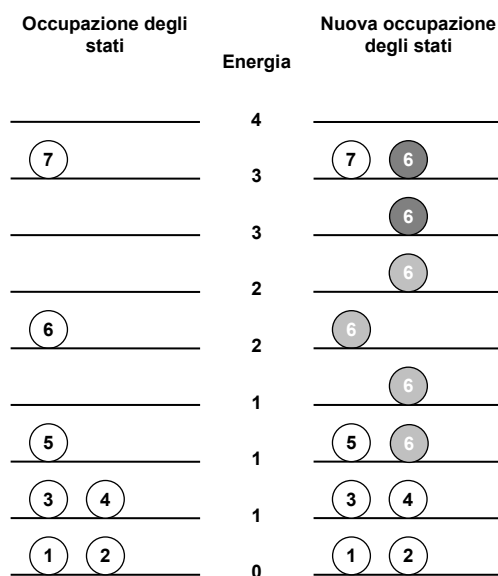


Figura 2. Possibile variazione di configurazione per un sistema di bosoni identici.

2.3. Algoritmo per particelle distinguibili

Nel caso di particelle distinguibili, non solo non ci sono limiti imposti al numero di occupazione di ogni stato, ma sono pure ammessi salti sopra stati occupati. Ciò conduce ad un rimescolamento dell’iniziale sequenza ordinata di particelle. Di conseguenza, le configurazioni di sistema che differiscono per lo scambio di una coppia di particelle identiche vengono campionate come distinte, così come realmente sono.

La figura 3 mostra tutte le possibili mosse Monte Carlo per la particella identificata con il numero $n = 6$, scelta a caso. Ogni nuovo stato è consentito, ma le transizioni verso gli stati in cui la particella selezionata è rappresentata in grigio chiaro sono più probabili rispetto a quelle verso stati in cui è in grigio scuro, e queste ultime più favorite rispetto a quella verso lo stato in cui è raffigurata in nero.

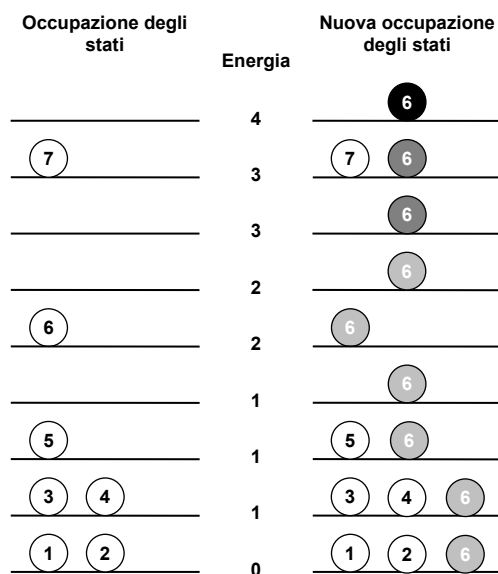


Figura 3. Possibile variazione di configurazione per un sistema di particelle distinguibili.

3. Analisi dei risultati delle simulazioni

Le simulazioni condotte attraverso un software implementato sulla base degli algoritmi sopra discussi consentono di riprodurre, in modo abbastanza soddisfacente, le principali caratteristiche macroscopiche dei sistemi descritti dai tre diversi tipi di statistica. Ai fini di questo lavoro, i risultati discussi riguardano principalmente l'andamento dell'energia media delle particelle e del calore specifico in funzione della temperatura. Vale la pena sottolineare che, a causa delle dimensioni finite dei sistemi che possono essere trattati nell'ambito di una simulazione al computer, qualunque tentativo di riprodurre le proprietà di equilibrio così come vengono riportate nei testi di meccanica statistica, dove sono dedotte nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$), è inevitabilmente destinato all'insuccesso.

La figura 4 mostra l'energia media per particella $\langle E \rangle / N$, misurata in unità di $k_B T_0$, in funzione di T/T_0 . Risulta evidente come per $T/T_0 > 1$ i tre tipi di sistema esibiscono un andamento lineare abbastanza simile e inoltre è stato verificato che essi tendono a comportarsi allo stesso modo per $T/T_0 \gg 1$, in accordo con quanto previsto dalla meccanica statistica nel limite classico in cui le particelle identiche si considerano distinguibili. Al contrario, per $T/T_0 < 1$ i sistemi del tipo BE e FD mostrano caratteristiche molto diverse rispetto all'andamento lineare mostrato dai sistemi di MB per tutti i valori di temperatura. In particolare, per $T/T_0 \ll 1$ i sistemi di BE e FD evidenziano un andamento quasi piatto anche se si stabilizzano su valori medi di energia molto diversi tra loro quando la temperatura tende a zero: per i bosoni l'energia si annulla, come per le particelle distinguibili, mentre l'energia dei fermioni tende al valore medio $3/5 N k_B T_F$, dove T_F è l'energia di Fermi.

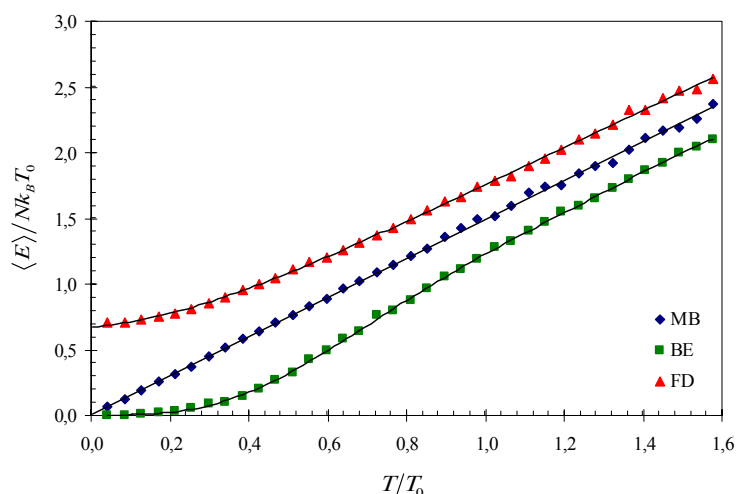


Figura 4. Energia media per particella, in unità di $k_B T_0$, in funzione di T/T_0 , per i tre tipi di statistica.

Queste caratteristiche peculiari evidenziate dai sistemi che obbediscono alle statistiche quantistiche sono la giusta risposta alle richieste del terzo principio della termodinamica nella regione delle temperature molto basse, richieste che vengono ignorate nel limite classico della statistica di MB.

In figura 4 sono riportate pure le curve che meglio raccordano i dati simulati; i dati relativi a MB sono fittati linearmente mentre quelli riferiti a FD e BE sono adattati con delle funzioni polinomiali rispettivamente di quarto e sesto grado. Queste curve di fit forniscono un semplice strumento di calcolo per valutare il calore specifico sulla base delle tre statistiche. In fatti, esse permettono di valutare analiticamente la derivata dell'energia media delle particelle rispetto alla temperatura, evitando di introdurre oscillazioni prive di significato fisico derivanti dalla differenziazione numerica. Attraverso questo metodo si ottengono andamenti per i calori specifici in funzione della temperatura più smussati anche rispetto a quelli che si possono ricavare di-

rettamente dalle fluttuazioni dell'energia, secondo la relazione $c_v = \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) / Nk_B T^2$, specie quando nelle simulazioni si utilizza un numero di particelle ragionevolmente non molto elevato.

In figura 5, per i tre tipi di statistica, sono rappresentati gli andamenti dei calori specifici ottenuti per derivazione analitica delle curve di best fit riportate in figura 4.

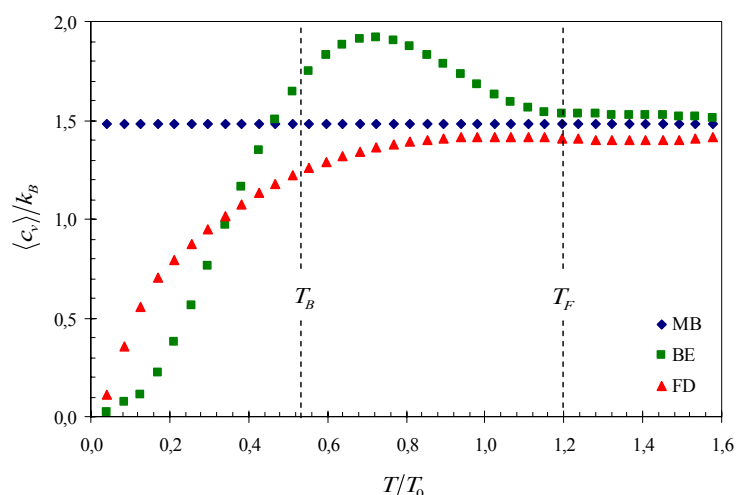


Figura 5. Calore specifico, in unità di k_B , in funzione di T/T_0 , per i tre tipi di statistica. I valori di $T_B \approx 0.53T_0$ e $T_F \approx 1.21T_0$ si riferiscono al limite termodinamico.

In essa, è riportato l'andamento del calore specifico c_v , misurato in unità di k_B , in funzione di T/T_0 , valutato sulla base dei tre tipi di statistica. Ancora una volta, per $T/T_0 > 1$, i tre tipi di sistemi di particelle esibiscono un comportamento molto simile ed è stato inoltre verificato che per ciascuno di essi la capacità termica tende al valore $3/2Nk_B$ al limite per $T/T_0 \gg 1$, in accordo con quanto previsto dalla meccanica statistica classica per i gas monoatomici e per quelli poliatomici raffreddati a temperature per cui solamente i gradi di libertà traslazionali risultano attivati. Per $T/T_0 < 1$ i sistemi del tipo BE e FD evidenziano un andamento del calore specifico molto diverso rispetto a quello esibito dai sistemi di MB che rimane costante per tutti i valori di temperatura. In particolare, quando $T/T_0 \ll 1$, in accordo con il terzo principio della termodinamica, il calore specifico per entrambi i sistemi di BE e FD tende a zero con la temperatura, anche se ciò avviene in modo molto diverso per ciascuno di loro.

Inoltre, a differenza di quanto accade per i fermioni, l'andamento del calore specifico di un gas di bosoni evidenzia un picco caratteristico di circa $c_v \approx 1.92k_B$ che si manifesta ad una ben definita temperatura di Bose $T_B \approx 0.72T_0$. Tuttavia, a causa delle dimensioni finite del sistema simulato, la forma del picco e il valore di T_B a cui esso si manifesta non coincidono esattamente con quanto previsto nel limite termodinamico.

Un altro risultato estremamente significativo è mostrato in figura 6 dove, per i tre diversi tipi di sistemi di particelle, viene rappresentato l'andamento $\langle E \rangle / Nk_B T$ dell'energia media per particella rapportata all'energia termica, in funzione di T/T_0 . Per le particelle distinguibili, che soddisfano la statistica di MB, l'energia media per particella assume il valore dell'energia termica $k_B T$ nell'intero intervallo di temperatura, in accordo con quanto previsto dal teorema di equipartizione dell'energia. Bosoni e fermioni mostrano un comportamento simile solo per $T/T_0 \gg 1$. Tuttavia, per $T/T_0 \ll 1$ l'energia media di un bosone è significativamente inferiore all'energia termica; ciò essenzialmente riflette la naturale tendenza di un gas di bosoni a condensare nello stato di minima energia quando ancora la sua temperatura è diversa da zero. Per contro, come conseguenza del principio di esclusione di Pauli, l'energia media di un fermione nella regione delle

basse temperature è significativamente superiore all'energia termica; questo fatto rispecchia la naturale tendenza di fermioni ad occupare in modo uniforme tutti gli stati con energia inferiore all'energia di Fermi.

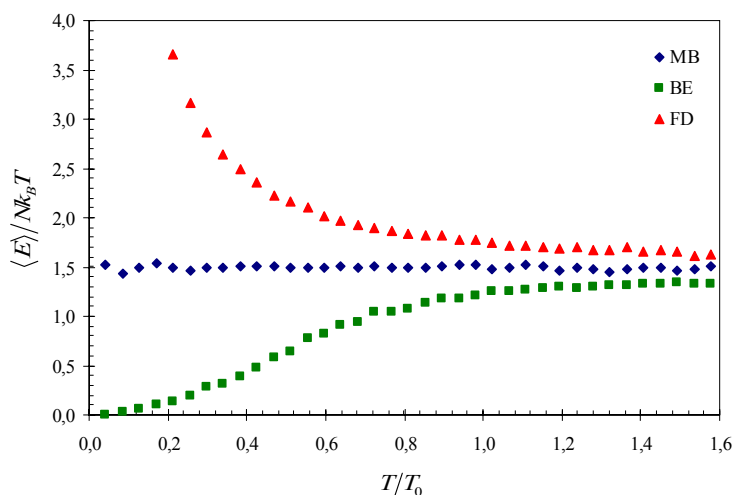


Figura 6. Rapporto tra energia media per particella e energia termica in funzione di T/T_0 , per i tre tipi di statistica.

Questi risultati, insieme con i meccanismi di funzionamento ipotizzati, forniscono una spiegazione plausibile riguardo al congelamento della maggior parte dei gradi di libertà traslazionali di un gas quantistico al tendere a zero della temperatura. Infatti, quando $T/T_0 \ll 1$ è come se le particelle fossero in gran parte congelate: solo i pochi bosoni che occupano gli stati eccitati possono contribuire all'energia termica e al calore specifico; in modo analogo solo i pochi fermioni che giacciono a ridosso del livello di Fermi possono essere influenzati dalle fluttuazioni termiche. Tutto ciò mette chiaramente in evidenza i limiti di applicabilità del teorema di equipartizione dell'energia ai gradi di libertà traslazionali di un sistema termodinamico.

4. Conclusioni

In questo contributo ci si pone il problema di connettere le proprietà macroscopiche di sistemi di molte particelle con le loro peculiari caratteristiche microscopiche. La questione viene affrontata attraverso la ricerca di un modello unificante valido sia per i gas ideali classici che per quelli quantistici.

In un gas ideale, le interazioni dinamiche tra i gradi di libertà vengono di solito trascurate. Tuttavia, quando si prende in considerazione l'indistinguibilità quantistica delle particelle identiche ci si trova in presenza di un nuovo tipo di interazione che non può essere in alcun modo ignorata. Si tratta dell'interazione di scambio che non ha analogo classico e agisce tra i gradi di libertà dinamici e quelli di spin, influenzando opportunamente le proprietà di simmetria della funzione d'onda del sistema.

Il modello discusso combina la teoria alla base dell'algoritmo di Metropolis con un metodo che implementa una sorta di interazione statistica in grado di rendere conto dell'indistinguibilità delle particelle identiche. Mediante l'uso di un codice Visual Basic è stato realizzato un software di simulazione che implementa l'algoritmo proposto. Attraverso l'interfaccia utente del programma è possibile impostare facilmente diversi parametri di sistema ed eseguire le simulazioni. I risultati delle simulazioni condotte su sistemi che obbediscono a differenti statistiche permettono di analizzare, al variare della temperatura, analogie e differenze per la medesima proprietà termodinamica.

L'obiettivo principale di questo lavoro è dunque quello di fornire un metodo che permette di facilitare la comprensione di importanti concetti di meccanica statistica, a studenti di scuola secondaria superiore o dei primi anni dei corsi universitari ad indirizzo scientifico, superando le difficoltà matematiche derivanti da un approccio tradizionale alla meccanica statistica, che molto spesso pongono dei limiti ad una profonda comprensione del contenuto fisico. Il metodo focalizza l'attenzione sull'uso di simulazioni basate su modelli

concreti di sistemi termodinamici. Insegnanti ed istruttori possono scegliere come meglio utilizzare gli algoritmi e le simulazioni nell'ambito dei loro corsi. Per esempio, essi potrebbero eseguire delle dimostrazioni interattive, utilizzando programmi di simulazione già esistenti, chiedendo agli studenti di fare previsioni e fornire spiegazioni; d'altro canto, gli studenti stessi potrebbero cimentarsi in attività di scoperta guidata in cui viene chiesto loro di utilizzare le simulazioni, modificare i parametri, spiegare i risultati e giungere a conclusioni. A un livello più alto, si potrebbe proporre agli studenti stessi l'uso di linguaggi di programmazione per costruire gli algoritmi, adoperando i modelli proposti come schemi e linee guida per la loro implementazione.

Bibliografia

- [1] Tobochnik, J., Gould, H. (2008). Teaching statistical physics by thinking about models and algorithms. *Am. J. Phys.*, **76** (4&5), 353-359.
- [2] Morse, P. M. (1965). *Thermal Physics*. New York: W A Benjamin, Inc.
- [3] Reichl, L. E. (1997). *A Modern Course in Statistical Physics*. New York: John Wiley & Sons, Inc.
- [4] Gould, H., Tobochnik, J., Christian, W. (2006). *An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems*. Reading, MA: Addison-Wesley.
- [5] Bellomonte, L., Sperandio-Mineo, R. M. (1998). Thermodynamic properties of a few-particle system: a computer based investigation. *Eur. J. Phys.* **19**, 221-230.
- [6] Gould, H., Spornick, L., Tobochnik, J. (1995). *Thermal and statistical physics simulations: the consortium for upper-level physics software*. New York: John Wiley & Sons, Inc.