UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

SYLLABUS DEL CORSO

Termodinamica Statistica Computazionale dei Solidi

2223-1-F1701Q083

Obiettivi

Obiettivo del corso è fornire agli studenti alcuni strumenti teorico/computazionali fondamentali per lo studio microscopico di processi termodinamici e cinetici nei solidi.

Contenuti sintetici

Ripasso di concetti base di meccanica statistica classica, approssimazione adiabatica, trattazione classica del moto nucleare, dinamica molecolare classica e ab initio, potenziali interatomici, programmazione scientifica in Matlab, implementazione di un codice di dinamica molecolare in Matlab, applicazione del codice di dinamica molecolare, il metodo di Monte Carlo configurazionale, implementazione di un codice di Monte Carlo configurazionale in Matlab, kinetic Monte Carlo, transition state theory.

Programma esteso

Ripasso di concetti base di meccanica statistica classica: ensemble canonico e microcanonico. Medie temporali e medie nell'ensemble microcanonico: il teorema ergodico. Equivalenza dei diversi ensembles nel limite termodinamico.

Approssimazione adiabatica: scale temporali nucleari ed elettroniche e loro separazione. Hamiltoniana elettronica.

Trattazione classica del moto nucleare: hamiltoniana nucleare, approssimazione classica del moto, potenziale interatomico.

Dinamica molecolare ab initio vs dinamica molecolare classica: assegnazione di un potenziale empirico. Limiti della

descrizione puramente classica.

Potenziali classici a coppie e a molti corpi. Il concetto di packing fraction cristallina e connessione con la scelta del potenziale appropriato.

Il potenziale di Lennard Jones. Dipendenza delle proprietà fisiche del sistema dal raggio di cutoff. Introduzione di un cutoff nel potenziale di Lennard-Jones.

Elementi base di programmazione scientifica in Matlab. Costruzione di un codice per il calcolo dell'energia di un cristallo descritto dal potenziale di Lennard-Jones. Calcolo dei vicini.

Algoritmi per l'integrazione delle equazioni del moto: configurational e velocity Verlet. Assegnazione delle velocità iniziali, ottimizzazione del tempo di integrazione.

Calcolo delle forze all'interno di un codice di dinamica molecolare e sua implementazione in Matlab.

Costruzione di un codice completo di dinamica molecolare classica basato sui potenziali di Lennard-Jones.

Esercitazione di dinamica molecolare utilizzando il codice di cui sopra ed includendo migliorie quali: (a) soppressione del momento del centro di massa (b) rescaling delle velocità iniziali (c) possibilità di considerare condizioni periodiche al contorno.

Il problema delle scale temporali; configurazioni di equilibrio tramite Monte Carlo configurazionale alla Metropolis. Implementazione in Matlab di un codice Monte Carlo alla Metropolis.

Esercitazione di Monte Carlo configurazionale utilizzando il codice di cui sopra.

Argomenti avanzati: (a) controllo della temperatura nelle simulazioni di dinamica molecolare tramite termostati e/o velocity rescaling (b) cicli termici in dinamica molecolare (c) linear scaling in dinamica molecolare (d) eventi rari: transition state theory e kinetic Monte Carlo.

Prerequisiti

Nozioni base di meccanica classica e meccanica quantistica. Conoscenza della distribuzione di Boltzmann.

Modalità didattica

L'intero corso viene svolto all'interno di un laboratorio informatico nel rispetto della normativa Covid e prevedendo lo streaming in diretta delle lezioni. Con l'eccezione delle primissime lezioni ogni concetto introdotto viene immediatamente esemplificato e approfondito mediante simulazioni al computer. A metà del corso viene assegnata una prima esercitazione che gli studenti sono chiamati a svolgere nel laboratorio utilizzando il primo codice (dinamica molecolare) da loro scritto. Segue poi una seconda serie di lezioni con applicazioni al computer che porta alla scrittura di un secondo codice (Monte Carlo) da utilizzare per una seconda esercitazione.

Materiale didattico

Tutte le lezioni, tenute dal docente nel laboratorio informatico, sono corredate da apposite slides scritte e rese disponibili sulla piattaforma e-learning. Pur non seguendo uno specifico testo, la gran parte dei contenuti può essere trovata sul libro "Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications" di Smit & Frenkel.

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Primo semestre (Ottobre-Gennaio)

Modalità di verifica del profitto e valutazione

I due problemi (esercitazioni) assegnati durante il Corso e svolti dagli studenti nel laboratorio informatico costituiscono l'argomento della prima parte dell'esame finale. E' richiesto che gli studenti espongano oralmente i risultati ottenuti con l'ausilio di una serie di slides adatte ad una presentazione di dieci minuti per ciascuna esercitazione. Il docente valuta la chiarezza delle slides e la selezione di argomenti presentati, e interroga lo studente sui contenuti. Valuta quindi la preparazione complessiva sugli argomenti del Corso, ed esprime una votazione finale.

.

Orario di ricevimento

Tutti i giorni ma previo appuntamento da fissare via email almeno due giorni prima.

Sustainable Development Goals

IMPRESE, INNOVAZIONE E INFRASTRUTTURE