UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Computational Materials Science

2425-1-FSM01Q022

Obiettivi

Obiettivo del corso è acquisire conoscenza delle tecniche teorico/computazionali fondamentali per lo studio microscopico di processi termodinamici e cinetici nei materiali, e di acquisire competenze nei seguenti ambiti:
-programmazione scientifica
-modellizzazione di materiali
-analisi dati scientifici complessi
-problem solving scientifico
-presentazione risultati scientifici

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 e Python, implementazione di un codice di dinamica molecolare, applicazione del codice di dinamica molecolare, il metodo di Monte Carlo configurazionale, implementazione di un codice di Monte Carlo configurazionale, 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, con esempi 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 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 elementare (distribuzione di Boltzmann, distribuzione canonica), a livello di Laurea Triennale in Scienza dei Materiali/Fisica, o simili. Conoscenze elementari di meccanica quantistica (dualismo onda/particella, equazione di Schrodinger, principio di esclusione di Pauli).
Conoscenze pregresse di programmazione possono aiutare ma non sono obbligatorie essendo previste alcune lezioni di azzeramento.

Modalità didattica

Il Corso è costituito da 12 lezioni da 2 ore (24 ore, 3 CFU) di didattica erogativa frontale in presenza e da ulteriori 18 esercitazioni da due ore ciascuna (36 ore, 3 CFU), anch'esse in presenza, di cui 12 di didattica erogativa e 24 di didattica interattiva.

L'intero corso viene svolto all'interno di un laboratorio informatico. Con l'eccezione delle primissime lezioni, ogni concetto introdotto viene immediatamente esemplificato e approfondito mediante simulazioni al computer. A metà del corso viene assegnato un Caso di Studio 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 secondo Caso di Studio. L'intero Corso è tenuto in lingua inglese.

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 e Frenkel.

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Primo semestre (Fine Settembre-Gennaio)

Modalità di verifica del profitto e valutazione

L'esame prevede solo una prova orale. Nello specifico:
i due Casi di Studio affrontati 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 ciascun Caso di Studio. 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

ISTRUZIONE DI QUALITÁ