UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Computational Materials Science

2627-1-FSM02Q022

Obiettivi

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

Ecco la traduzione in italiano del testo fornito:

Conoscenze e comprensione
Al termine del corso lo studente conosce:

- i concetti fondamentali della termodinamica e della cinetica alla base della scienza dei materiali computazionale
- le principali tecniche computazionali per la modellazione della dinamica atomica e la differenza tra approcci classici e quantistici
- gli algoritmi chiave utilizzati per implementare le simulazioni di Dinamica Molecolare e gli approcci Monte Carlo

Capacità di applicare conoscenza e comprensione
Al termine del corso lo studente è in grado di:

- implementare codici di base per la simulazione della dinamica su scala atomica
- effettuare analisi numeriche/statistiche sui dati ed estrarre quantità di rilievo fisico
- adattare/modificare i codici di simulazione e selezionare parametri appropriati per affrontare diversi materiali o condizioni fisiche
- riconoscere l'utilizzo e l'importanza dell'analisi computazionale e delle simulazioni nella scienza dei materiali

Autonomia di giudizio
Al termine del corso lo studente è in grado di:

- scegliere l’approccio computazionale più adatto per effettuare simulazioni in base alla tipologia del problema specifico, alla scala e alle quantità da valutare
- identificare eventuali errori o limiti delle simulazioni ispezionando quantità chiave e utilizzando adeguate tecniche statistiche

Abilità comunicative
Al termine del corso lo studente sarà in grado di descrivere e spiegare oralmente, con linguaggio appropriato, gli argomenti trattati nel corso. Inoltre, lo studente imparerà a sintetizzare i risultati delle simulazioni in grafici, immagini e/o video efficaci e a presentarli tramite una presentazione con slide (vedi modalità di valutazione).

Capacità di apprendimento
Lo studente sarà in grado di applicare le conoscenze acquisite per comprendere e, se necessario, implementare in modo autonomo tecniche più avanzate inerenti ai metodi discussi nel corso o ad altri approcci computazionali affini, facendo riferimento a libri di testo o alla letteratura scientifica. Inoltre, il corso fornirà agli studenti le basi necessarie per comprendere la documentazione e i manuali d’uso dei software di simulazione esistenti per la Dinamica Molecolare e le simulazioni Monte Carlo, consentendo un utilizzo più consapevole e trasparente di tali strumenti.

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, applicazione del codice di dinamica molecolare, il metodo di Monte Carlo cinetico e configurazionale con implementazione

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 e 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. Definizione di un raggio di cutoff e dipendenza delle proprietà fisiche del sistema da esso.

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.

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

Esercitazione sulla dinamica molecolare da discutere all'esame (parte 1 su 3).

*** Kinetic Monte Carlo**
Il problema delle scale temporali; transition state theory; distribuzione dei tempi di fuga. Cenni su catene di Markov, Master equation e condizione di detailed-balance. Formulazione del metodo Kinetic Monte Carlo.

Algoritmo di Bortz-Kalos-Lebowitz ed implementazione di un codice Kinetic Monte Carlo per la descrizione dei processi di crescita cristallina.

Esercitazione sul metodo Kinetic Monte Carlo da discutere all'esame (parte 2 su 3)

*** Metropolis Monte Carlo**
Importance sampling e valutazione delle proprietà di equilibrio di un sistema mediante il metodo Monte Carlo configurazionale alla Metropolis. Implementazione di un codice Monte Carlo alla Metropolis.

Esercitazione sul metodo Monte Carlo Metropolis da discutere all'esame (parte 3 su 3).

Prerequisiti

Nozioni base di meccanica classica elementare (distribuzione di Boltzmann, distribuzione canonica) e di meccanica quantistica (dualismo onda/particella, equazione di Schrodinger, principio di esclusione di Pauli), a livello di Laurea Triennale in Scienza dei Materiali/Fisica, o simili. Conoscenze pregresse di programmazione possono aiutare ma non sono obbligatorie essendo previste alcune lezioni di azzeramento.

Modalità didattica

Il corso consiste di 30 lezioni da 2 ore, tutte svolte in presenza 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 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 dedicata ai metodi Monte Carlo con applicazioni al computer relativamente agli approcci Kinetic Monte Carlo e Metropolis Monte Carlo. Gli studenti sono quindi chiamati a svolgere un esercitazione su entrambe le metodologie implementando in modo guidato i relativi codici durante le attività in laboratorio.

Le lezioni si dividono in:

- 8 lezioni frontali da 2 ore svolte in modalità erogativa
- 18 attività di esercitazione da 2 ore costituite da una parte erogativa in cui il docente illustra i concetti su cui vengono poi coinvolti gli studenti in modalità interattiva
- 4 attività di esercitazione da 2 ore svolte in modalità interattiva

L'intero Corso è tenuto in lingua inglese, ma gli studenti possono fare domande anche in italiano.

Materiale didattico

Tutte le lezioni tenute dal docente in presenza sono corredate da apposite slides scaricabili dalla 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 l'esame inizia della valutazione dei risultati di simulazione ottenuti per le tre parti delle esercitazioni assegnate durante il Corso e svolti dagli studenti nel laboratorio informatico. A tale scopo è richiesto che gli studenti predispongano una **presentazione dei risultati mediante slides** e ne espongano oralmente il contenuto in un **tempo massimo di 15 minuti**, ovvero indicando solamente i passaggi fondamentali senza dettagli o spiegazioni non richieste. I docenti valutano 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 mediante domande aperte, ed esprime una votazione finale.

Non sono previste prove in itinere.

Orario di ricevimento

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

Sustainable Development Goals

ISTRUZIONE DI QUALITÁ