

Fisica Computazionale 2003-04

Calendario delle lezioni

- 27 aprile** a) introduzione al corso (0.5h).
b) richiami di dinamica hamiltoniana: spazio delle fasi, sistemi integrabili e non integrabili, teorema di Liouville, equazione di Liouville, teorema di ricorrenza di Poincaré. Reversibilità microscopica e irreversibilità macroscopica. Teoremi ergodici (1.5h).
- 28 aprile** a) Gerarchia BBGKY ed esempi notevoli di sue chiusure (0.5h)
b) Richiami di meccanica statistica classica: ensemble microcanonico e derivazione della termodinamica (0.5h)
c) Teorema di equipartizione generalizzato: energia cinetica media e viriale. Potenziali termodinamici e trasformate di Legendre. Ensemble canonico. (1h)
- 29 aprile** Laboratorio numerico:
oscillatore armonico e potenziale a doppia buca unidimensionale - integrazione delle equazioni del moto tramite l'algoritmo di Verlet (2h).
- 4 maggio** a) Ensembles gran-canonico.
b) Funzioni di distribuzioni ridotte di equilibrio. Funzione di correlazione di coppia. Energia interna e pressione per potenziali a due corpi. Equazione di compressibilità. Fluttuazioni di densità e correlazione di coppia (2h).
- 5 maggio** a) Fattore di struttura, sua relazione alla funzione di correlazione di coppia e sua importanza sperimentale. Equazione di compressibilità (0.5h).
b) Gas non ideali e coefficienti del viriale (0.5h).
c) Dinamica molecolare: condizioni al bordo e condizioni iniziali, calcolo dell'energia e delle forze per potenziali di coppia a corto range (1h).
- 6 maggio** a) Formulazione Louvilliana degli integratori e integratori simplettici: l'algoritmo velocity-Verlet (1h).
Laboratorio numerico:
semplice programma di dinamica molecolare per il fluido Lennard-Jones (1h)
- 11 maggio** a) Introduzione alla Dinamica Molecolare estesa: ensemble NVT e NPT (1h).
b) Proprietà dinamiche e funzioni di correlazione dinamiche (1h).
- 12 maggio** Laboratorio numerico:
semplice programma di dinamica molecolare per il fluido Lennard-Jones (4h).
- 13 maggio** Laboratorio numerico:
calcolo delle funzioni di correlazione temporale con la Dinamica Molecolare (2h).
- 18 maggio** a) Funzione di Van-Hove e fattore di struttura dinamico (0.5h).
b) Fenomeni di non equilibrio e teoria della risposta lineare (1h).
c) Teorema di fluttuazione e dissipazione e formule di Green-Kubo per i coefficienti di trasporto (0.5h).

- 19 maggio** Laboratorio numerico:
Dinamica Molecolare a NVT: studio del fluido LJ e transizione liquido-solido (4h).
- 20 maggio** a) Metodi di campionamento, metodo Monte Carlo diretto e campionamento di importanza (1h)
b) Processi di Markov: metodo Monte Carlo di Metropolis (1h).
- 25 maggio** a) Metodo variazionale per l'equazione di Schrödinger (richiami).
b) Soluzione del problema agli autovalori generalizzato.
c) Soluzione variazionale per la buca di potenziale infinita 1D (2h).
- 26 maggio** Laboratorio numerico:
Soluzione variazionale per l'atomo di idrogeno (4h).
- 27 maggio** a) Metodo di Hartree-Fock. Autoconsistenza. Laboratorio numerico:
Struttura di un codice HF. Stato fondamentale dell'atomo di elio (2h).
- 3 giugno** a) Metodo di Hartree-Fock: autoconsistenza e scambio. Teorema di Koopman.
b) Restricted e Unrestricted Hartree-Fock. (2h)
- 4 giugno** a) Funzioni di base: orbitali Slater-type e Gaussian-type. Elementi di matrice dell'operatore di Fock per orbitali GTO-1s.
b) Cenni sul metodo CI (2h).
- 8 giugno** a) Teoria del Funzionale Densità: teoremi di Hohenberg-Kohn e Kohn-Sham. (2h)
- 8 giugno** a) Funzionale di scambio e correlazione e legame con la funzione di correlazione di coppia elettrone-elettrone. b) Approssimazione di densità locale (2h).
- 9 giugno** Laboratorio di calcolo:
programma DFT per l'atomo di elio (4h).
- 15 giugno** a) Soluzione dell'eq. di Schrödinger in solidi periodici: teorema di Bloch. Metodo tight-binding (esempio esplicito).
b) Metodo Augmented Plane Wave e metodo dello pseudopotenziale (2h).
- 15 giugno** a) Teorema di Hellmann-Feynman e Dinamica Molecolare Ab-initio.
b) Il metodo Car-Parrinello: invarianti adiabatici e Lagrangiana fittizia (2h).
- 16 giugno** Laboratorio numerico: Dinamica Molecolare Ab-initio per la molecola di idrogeno:
ricerca dinamica dello stato elettronico di minima energia (4h).
- 17 giugno** Laboratorio numerico: Dinamica Molecolare Ab-initio per la molecola di idrogeno:
dinamica nucleare di Car-Parrinello (2h).