

Scuola Superiore di Catania

Corso specialistico

a.a. 2019-2020

Metodi di derivazione quanto-meccanica per simulazione di sistemi complessi

Il corso sarà incentrato su metodi avanzati di simulazione che si fondano sulla trattazione di tipo quantistico del sistema materiale in esame. Lo studio quantistico può essere finalizzato a dare risultati diretti o servire alla calibrazione accurata dei parametri fisici di modelli mesoscopici. Il corso inizierà con la formalizzazione della teoria del funzionale della densità elettronica (DFT) e delle derivazioni basate su DFT che hanno portato agli sviluppi dei metodi computazionali classificati come "da principi primi" (ab initio). Saranno introdotte le metodiche di Dinamica Molecolare (DM) basate su la soluzione diretta delle equazioni del moto Newtoniane (approssimazione di Born-Oppenheimer) per gli atomi. Si mostreranno i metodi utilizzati per la stima delle forze in DM: da quelli puramente quanto meccanici a quelli semi-empirici, che applicano potenziali calibrati per le interazioni particella-particella. Nell'ambito dei metodi calibrati che permettono la simulazione su scala spaziale mesoscopica (micrometro) e temporale macroscopica (secondo) saranno trattate: a) le metodiche Monte Carlo, basate su calcoli statistici delle osservabili del sistema in studio; e b) quelle al continuo basate sulla risoluzione numerica di sistemi equazioni differenziali (ordinarie e alle derivate parziali). Evidenzieremo le possibilità predittive, le analogie e le differenze dei metodi in specifici casi di applicazione.

Metodi di derivazione quanto-meccanica per simulazione di sistemi complessi

Il corso sarà incentrato sui metodi di simulazione avanzati che si fondano su una trattazione di tipo quantistico del sistema in esame. Lo studio quantistico può essere finalizzato a dare risultati diretti o servire alla calibrazione accurata di parametri fisici in modelli meso-scopici. Il corso inizierà con la formalizzazione della teoria del funzionale della densità (DFT) e delle derivazioni basate su DFT che hanno portato agli sviluppi dei metodi computazionali classificati come “da principi primi” (ab-initio). Saranno introdotte le metodiche di Dinamica Molecolare (DM) basate su la soluzione diretta delle equazioni del moto Newtoniane (approssimazione di Born-Oppeneimer) per gli atomi. Si mostreranno i metodi utilizzati per la stima delle forze in DM: da quelli puramente quanto meccanici a quelli semi-empirici, che applicano potenziali calibrati per le interazioni particella-particella. Nell’ambito dei metodi calibrati che permettono la simulazione su scala spaziale mesoscopica (micron) e temporale macroscopica (secondo) saranno trattate: a) le metodiche Monte Carlo, basate su calcoli statistici delle osservabili del sistema in studio; e b) quelle al continuo basate sulla risoluzione numerica di sistemi equazioni differenziali (ordinarie e alle derivate parziali). Evidenzieremo le possibilità predittive, le analogie e le differenze dei metodi in specifici casi di applicazione.

1. DFT (10h)

Il problema a molti corpi in meccanica quantistica - Fondamenti della Teoria del funzionale della densità – Teoremi di Hohenberg e Kohn – Modello di Thomas Fermi – Scambio e Correlazione (XC)- Funzionali XC approssimati: local density approximation (LDA), Local Spin Density Approximation (LSDA), Generalized Gradient Approximation (GGA). Formulazione Kohn Sham e equazioni efficaci di particella singola – Onde Piane o Orbitali - Autoconsistenza – Possibilità di un approccio numerico sistematico per i calcoli atomistici da principi primi – Full electrons or Valence electrons: Pseudo-Potenziali. Breve rassegna dei codici ab-initio disponibili per la ricerca scientifica - Problema degli stati efficaci e limiti della DFT e correzioni. Ritorno alle origini: Orbital Free DFT e implementazione in solutori di Equazioni Differenziali alle Derivate Parziali (PDE).

2. Dinamica Molecolare (6h)

Fondamenti di Dinamica Molecolare

- Equazioni del moto
- Soluzioni numeriche delle equazioni del moto, ensemble NEV
- Metodi espliciti algoritmo di Verlet
- Potenziali a due corpi: Lennard-Jones
- Potenziali a molti corpi: force field, SW, Tersoff, Tersoff like, EAM
- Insiemi statistici: NEV, NEP, NTV
- Ottimizzazione: liste di Verlet, altri algoritmi di integrazione, linked cell
- Configurazioni bloccate e algoritmi accelerati
- Implementazione e uso di codici MD

3. Monte Carlo (6h)

Introduzione

- La funzione di partizione: calcoli esatti e stime approssimate
- Analogie e distinzioni tra MC e MD

Metodi stocastici applicati all’integrazione della funzione di partizione

- Campionamento basato sulle catene di Markov
- Ipotesi ergodica e bilancio dettagliato

- Algoritmo Metropolis: esempi di modelli e di implementazione
- Ottimizzazioni

Monte Carlo Cinetico

- Markov chains e evoluzione cinetica
- Kramer Problem e Transition State Theory
- Continuous time algorithm
- Classi di probabilità per la stima degli eventi più probabili
- Quando le classi di probabilità non si possono applicare: campionamento ad albero
- Cinetica Futile e algoritmi accelerati
- Analogie e differenze tra metodi particellari e i modelli cinetici al continuo

4. Applicazioni (13h)

La nanoscala: Quando le particelle sono tutti gli atomi del sistema

- Predizioni strutturali da principi primi
- Esempi di simulazioni first-principle MD e TBMD
- Esempi di simulazioni MD dalla fisica nucleare allo stato solido
- Simulazione Monte Carlo su reticolo: Crescita di cristalli, Meccanismi di cinetica micro strutturale in processi termici, Meccanismi di erosione, Processi di manipolazione di graphene

La mesoscala: quando le particelle sono le porzioni in evoluzione del sistema

- Interazione Ione-Materia: simulazione Monte Carlo nell'approssimazione BCA
- Studio di stabilità di meso-sistemi: difetti estesi, superfici, cristalliti
- Simulazioni Monte Carlo e continue delle cinetica nei plasmi
- Metodi Monte Carlo per la simulazione di profili in evoluzione: superfici esposte a plasmi
- Modelli Monte Carlo per la simulazione di sistemi difetti-impurità a temperatura costante uniforme: applicazioni in microelettronica e in fisica nucleare
- Modelli Monte Carlo per la simulazione di sistemi difetti-impurità a temperatura rapidamente variabile e non-uniforme

La macroscale: quando le particelle sono sistemi estesi

- Simulazioni in Soft Condensed Matter
- Simulazioni Monte Carlo della cinetica cellulare in dispositivi dielettroforetici
- Simulazioni cinetiche basate su modelli al continuo