

**-SIMULAZIONI ATOMISTICHE-**

**Docente: Prof. Giovanni Ciccotti, Esercitazioni: Dr.ssa Sara Bonella**

[English Version](#)

---

---

**EXAMS ON THE 4th OF AUGUST WILL TAKE PLACE IN  
PROF. CICCOTTI'S OFFICE STARTING AT 11:30**

- [Scheda dell'insegnamento in formato elettronico](#)
- [Obiettivi formativi](#)
- [Sillabo del corso](#)
- [Libri di Testo](#)
- [Esercizi e materiale didattico complementare](#)

### **-OBIETTIVI FORMATIVI:**

---

Il corso fornisce le nozioni fondamentali per capire e realizzare simulazioni al computer di modelli atomici, molecolari e macromolecolari di meccanica statistica nel campo dei sistemi di materia condensata. Lo studente dovrà essere in grado di risolvere problemi legati al calcolo di proprietà, per lo più classiche, meccaniche e termiche, di equilibrio, dinamiche e di non-equilibrio per modelli di interazione a due corpi additivi, a corto e lungo range. Le esercitazioni forniranno conoscenze di base per l'utilizzo pratico degli algoritmi di simulazione.

[TORNA ALL'INDICE](#)

### **-SILLABO DEL CORSO:**

---

1. Fondamento quantistico del moto nucleare classico e del comportamento di equilibrio statistico.
2. Osservabili: Proprietà meccaniche e termiche. Ensemble microcanonico e identificazioni termodinamiche.
3. Trasformata di Legendre e teoria degli ensemble per le funzioni di partizione ed i potenziali termodinamici.
4. Proprietà ideali ed in eccesso. Integrale configurazionale e probabilità ridotte. La funzione di distribuzione radiale.
5. Campi classici e campo di densità. F.d.c densità-densità e f.d.d. radiale, Il fattore di struttura.
6. Introduzione alla Dinamica molecolare ed al Monte Carlo: condizioni iniziali (numeri pseudo-aleatori da distribuzione preassegnata e gaussiani) e condizioni al bordo. Calcolo delle forze. Integrazione del moto. Calcolo delle quantità termodinamiche. Correzioni di lungo range.
7. Dinamica delle sfere dure: tempi e tavole di collisione; calcolo del risultato della collisione. Calcolo della termodinamica

8. Metodo Monte Carlo in meccanica statistica. Successioni casuali e catene di Markov. Comportamento asintotico delle catene di Markov stazionarie. Reversibilita' microscopica e algoritmo di Metropolis. Calcolo della termodinamica.
9. Introduzione ai sistemi molecolari. Problema delle scale temporali per moti inter- ed intra- molecolari. Vincoli olonomi, equazioni di evoluzione e loro integrazione: SHAKE. Gradi di liberta' e calcolo della termodinamica.
10. Ensemble con vincoli in coordinate cartesiane. Matrice metrica e restrizione dello spazio delle fasi in coordinate ed impulsi.
11. Liouvilliano e formula di Trotter. Derivazione di algoritmi con la formula di Trotter. Liouvilliano per sistemi hamiltoniani e non. Metodo di derivazione di algoritmi per sistemi con forze che dipendono dalla velocita'.
12. Meccanica statistica per sistemi non-hamiltoniani. Termostato di Nose'-Hoover e sue generalizzazioni.
13. Forze a lungo range e metodo di Ewald: contributi a lungo e corto raggio e termine di autointerazione.
14. Funzioni di correlazione dipendenti dal tempo all'equilibrio e loro proprieta'. Calcolo del coefficiente di autodiffusione e derivazione del suo comportamento asintotico lineare nel tempo in mezzi densi.
15. Introduzione ai fenomeni di nonequilibrio, relazione di Onsage-Kubo e teoria della risposta lineare. Relazione di Einstein e legge di Ohm.

### Esercitazioni

1. Funzione di distribuzione radiale come media condizionata. Comportamento qualitativo e limite per sistemi poco densi.
2. Dinamica molecolare: effetto delle condizioni periodiche al bordo sulla dinamica per una catena armonica lineare. Troncamento del potenziale e suo effetto. Calcolo delle forze e lista dei vicini.
3. Struttura di un programma di DM. Esempio di simulazione di Argon liquido e solido.
4. Metodo Monte Carlo: struttura del programma ed esempi. Applicazione al campionamento di una variabile gaussiana scalare.
5. Errore statistico nelle simulazioni MD ed MC.
6. Algoritmi di calcolo per DM con vincoli: SHAKE e RATTLE. Dinamica di Nose'-Hoover: algoritmo di integrazione delle equazioni del moto per forze che dipendono (linearmente) dalla velocita' Meccanica statistica per sistemi nonhamiltoniani: il caso di N-H.
7. Calcolo delle fluttuazioni in diversi ensemble.

[TORNA ALL&#39;INDICE](#)

### **-LIBRI DI TESTO:**

---

1. Statistical Mechanics. Theory and Practice Through Molecular Simulation, M. E. Tuckerman, Oxford University Press (OUP);
2. Understanding Molecular Simulation, D. Frenkel & B. Smit, Academic Press (AP);
3. Computer simulation of liquids, M.Allen & D.Tidesley, OUP.

### **Di utile consultazione:**

1. Theory of simple liquids, J.P.Hansen & I.R.Mac Donald, (AP);
2. Introduction to modern statistical mechanics, D.Chandler, OUP; Statistical mechanics, K.Huang, J.Wiley.

[TORNA ALL&#39;INDICE](#)

### **-ESERCIZI E MATERIALE DIDATTICO COMPLEMENTARE:**

1. [MD CODE](#)
2. [MDHarm](#)
3. [Mult.f](#)
4. [MDHarm.f](#)
5. [DrawDeriveIntegrate.c](#)
6. [mts.f](#)

7. [GaussMC.f90](#)

[TORNA ALL&#39;INDICE](#)