

Consegna 5 relazioni (una per coppia) :

Possibilmente (verrà premiata la puntualità; comunque prima dell'esame orale) :

- le *prime 2* entro il 9 novembre 2009;
- le *seconde 3* entro il 14 dicembre 2009 .

N.B. : l'esame finale (colloquio orale sulle relazioni) è comunque individuale !

Struttura relazioni :

- breve introduzione teorica sul **problema fisico** trattato e sull'**algoritmo** numerico utilizzato;
- risultati ottenuti, eventualmente corredati da **tabelle e grafici**, opportunamente **commentati**;
- listati dei programmi utilizzati, mettendo in evidenza le parti **modificate** o **sviluppate**.

Informazioni esame :

- è necessario isciversi all'esame, e consegnare tutte le relazioni (in formato cartaceo) con congruo anticipo (almeno alcuni giorni prima);
- l'esame orale consiste in un colloquio sulle relazioni presentate, con approfondimento sia di aspetti di programmazione sia riguardanti l'applicazione degli algoritmi a sistemi fisici;

N.B. : l'esame è comunque individuale, dunque ognuno è responsabile di ogni parte delle relazioni !

Date appelli :

- *18 dicembre 2009* (ore 9, aula B)
- *8 gennaio 2010* (ore 15, aula B)
- *5 luglio 2010* (ore 9, aula C)
- *26 luglio 2010* (ore 9, aula F)
- *23 settembre 2010* (ore 9, aula O)

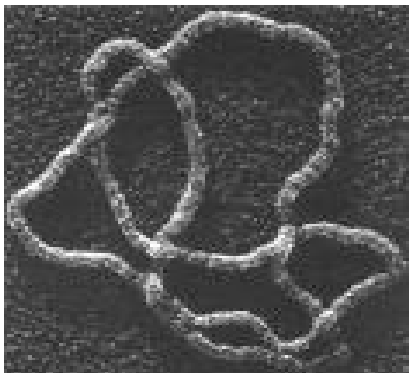
Theory of Condensed Matter

AB INITIO SIMULATIONS FOR
AN ATOMIC-LEVEL DESCRIPTION
OF CONDENSED MATTER.

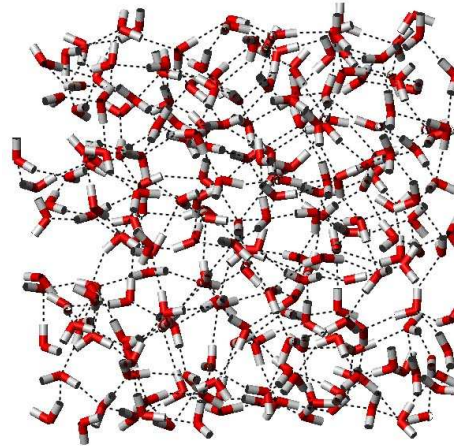


$\approx 1 \text{ nm}$

STATISTICAL MECHANICS OF
COMPLEX SYSTEMS



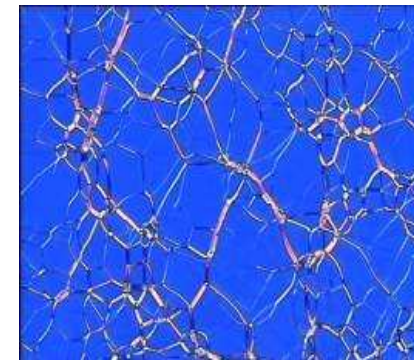
$\approx 1 \mu m$



$\approx 10 \text{ nm}$

CLASSICAL MOLECULAR
DYNAMICS AND MONTE
CARLO SIMULATIONS OF
REALISTIC SYSTEMS
AND PROCESSES

LATTICE BOLTZMANN (MESOSCOPIC)
DYNAMICS OF COMPLEX FLUIDS



$\approx 100 \mu m$

Importance of the
structural properties
(topology, geometry)

Theory of Condensed Matter

**AB INITIO SIMULATIONS FOR
AN ATOMIC-LEVEL DESCRIPTION
OF CONDENSED MATTER.**

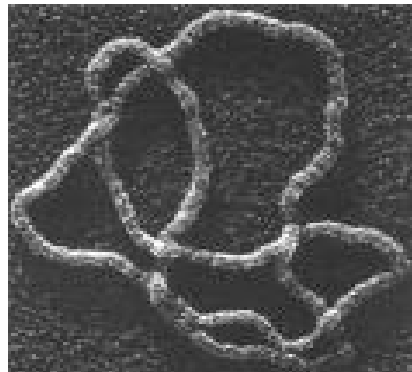


C₂ H₂ molecule
on the Si(111)
Surface.

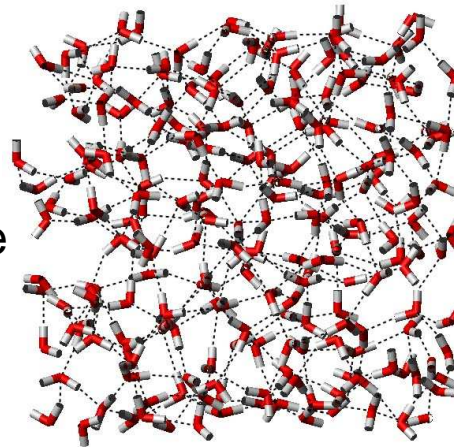
$\approx 1 \text{ nm}$

**STATISTICAL MECHANICS OF
COMPLEX SYSTEMS**

Electron
micrograph
of a knotted
circular DNA.



$\approx 1 \mu m$



$\approx 10 \text{ nm}$

**CLASSICAL MOLECULAR
DYNAMICS AND MONTE
CARLO SIMULATIONS OF
REALISTIC SYSTEMS
AND PROCESSES**

Hydrogen bond network
in liquid water.

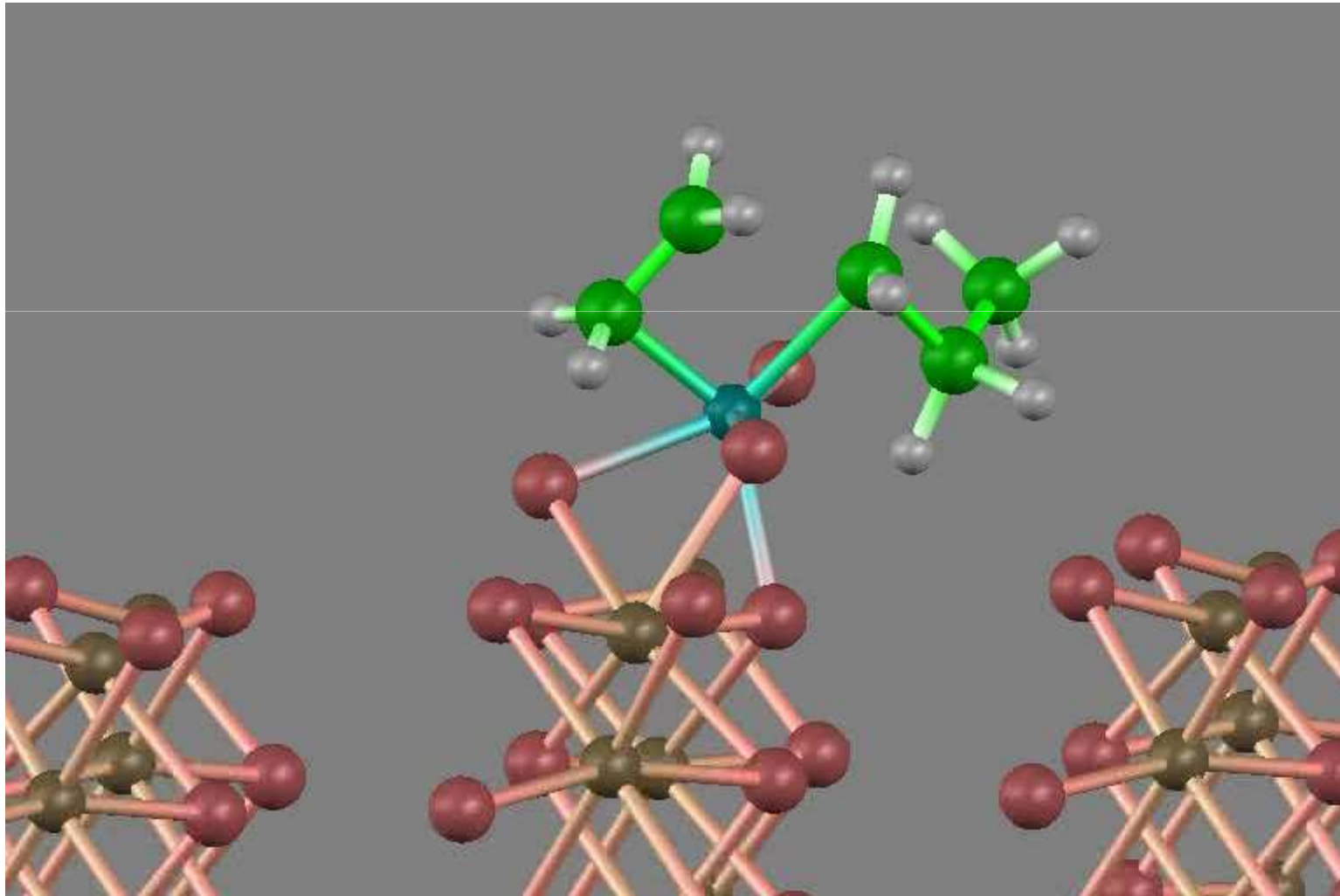
**LATTICE BOLTZMANN (MESOSCOPIC)
DYNAMICS OF COMPLEX FLUIDS**

Network of defects
In a cholesteric
liquid crystal with
Colloidal particles.

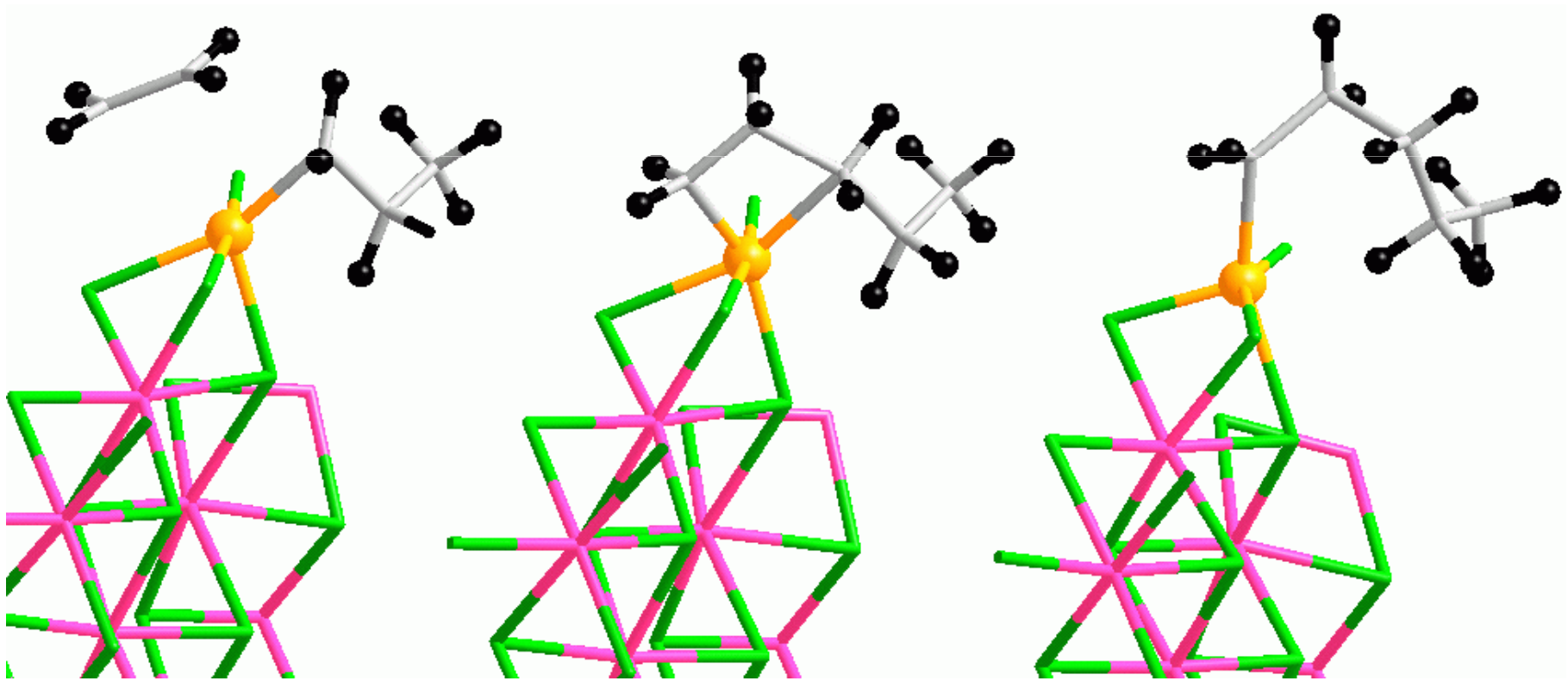


$\approx 100 \mu m$

Con l'aiuto delle **simulazioni al computer** possiamo “vedere” (**virtualmente**) non solo la struttura, ma anche **come si forma una catena** di molecole:



Le molecole sono “catturate” una ad una da un altro atomo (**giallo, Ti**) chiamato **catalizzatore** e si attaccano l’una all’altra



La Dinamica Molecolare per l'acqua

l'acqua nella fase **liquida**, a *temperatura ambiente*, campione di 216 molecole (*Enrico Roncato, Tesi di Laurea 2004*):

