

PROGRAMMA DEL CORSO

TEORIA DEI SISTEMI A MOLTI CORPI - A.A. 2016-2017

PROF. G.C. ROSSI

1) ELEMENTI DI MECCANICA STATISTICA

La nozione di ensemble. L'ensemble micro-canonical. Il gas ideale classico. Il teorema di equipartizione dell'energia. L'ensemble canonico. Equivalenza tra ensembles. L'ensemble gran-canonical. La Meccanica Statistica Quantistica. Il metodo della Massima Entropia.

2) LA DINAMICA MOLECOLARE CLASSICA

Discretizzazione delle equazioni di Hamilton–Jacobi. Operatore di evoluzione temporale di Liouville. Leap-frog. La dinamica molecolare come trasformazione canonica. Multiple-Time-Step.

3) L'INTEGRALE FUNZIONALE

L'integrale funzionale in Meccanica Quantistica. Il nucleo di evoluzione per la particella libera. Il nucleo di evoluzione per l'oscillatore armonico. Teoria delle perturbazioni. Rotazione di Wick e corrispondenza fra Meccanica Quantistica e Meccanica Statistica. Funzioni di Green e funzionali generatori. Approssimazione semi-classica e azione effettiva.

4) METODI STOCASTICI PER IL CALCOLO DELLA FUNZIONE DI PARTIZIONE

Importance sampling e il metodo Monte Carlo. Catene di Markov, bilancio dettagliato, algoritmo di Metropolis. Monte Carlo ibrido. Moto Browniano, equazione di Langevin, equazione di Fokker–Planck. Soluzione asintotica dell'equazione di Fokker–Planck.

5) QUANTUM MONTE CARLO

6) SISTEMI FERMIONICI IN FISICA DELLA MATERIA

L'approssimazione di Born–Oppenheimer. Il modello di Thomas–Fermi. L'approssimazione di Hartree–Fock. La teoria del funzionale densità. Il metodo di Car–Parrinello.