Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1

Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome	CONOR
Cognome	HOGAN

Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano	MODELLAZIONE DI NANOMATERIALI
Inglese	NANOSCALE MATERIALS MODELING

Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A.	2024/2025
	○ L ◉ LM ○ LM CU
CdS	Scienza e Tecnologia dei Materiali
Codice	8067836
Canale	UNICO
CFU	6
Lingua	ENG

Docente del modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Nome	
Cognome	

Denominazione modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Italiano	
Inglese	

Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Il corso si propone di fornire una formazione di base nella teoria fondamentale e nell'applicazione pratica della simulazione atomistica per lo studio dei materiali su scala nanometrica rilevante per gli obiettivi del Master Greenano, ovvero lo sviluppo di nanomateriali per la transizione verde e digitale. L'obiettivo del corso è fornire un'ampia comprensione dei principi fisici alla base della modellazione atomistica e fornire una conoscenza pratica approfondita per eseguire simulazioni realistiche di solidi e materiali a bassa dimensionalità dalle molecole ai nanofili. CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE: Lo studente apprenderà i principi fisici fondamentali alla base della teoria del funzionale della densità e della dinamica molecolare classica e imparerà come applicare queste tecniche in modo efficiente allo studio di un'ampia gamma di materiali. Lo studente imparerà come costruire e ottimizzare geometrie e calcolare una gamma di proprietà fisiche ed
Inglese	LEARNING OUTCOMES: The course aims to provide basic training in the fundamental theory and practical application of atomistic simulation for the study of nanoscale materials relevant to the goals of the Greenano Masters, i.e. the development of nanomaterials for the green and digital transition. The goal of the course is to provide a broad understanding of the physical principles behind atomistic modelling and to provide thorough practical knowledge for performing realistic simulations of solids and low dimensional materials from molecules to nanowires. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: The student will learn the fundamental physical principles behind density functional theory and classical molecular dynamics and learn how to apply these techniques in an efficient way to the study of a wide range of materials. The student will learn how to construct and optimize geometries and calculate a range of physical and electronic properties using state-of-the-art computer codes and simulation strategies.

Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Prerequisiti

Italiano	Conoscenze di fisica quantistica, fisica dello stato solido (reticolo reciproco, struttura a bande elettroniche), chimica fisica di base
Inglese	Knowledge of quantum physics, solid state physics (reciprocal lattice, electronic band structure), basic physical chemistry

Programma

Italiano	Introduzione alla scienza computazionale dei materiali. Approssimazione di Born-Oppenheimer. Dinamica molecolare classica. Metodo di Hartree e Hartree-Fock. Teoria del funzionale densità. Equazioni di Hohenberg-Kohn, Kohn-Sham. Approssimazione della densità locale. Problema della gap in DFT. Pseudopotenziali. Basis set. Teorema di Hellmann-Feynman. Interazione di van der Waals. Calcolo scientifico con Linux. Scripting. Test di convergenza. Sistemi a bassa dimensionalità.
Inglese	Introduction to computational materials science. Born-Oppenheimer approximation. Classical molecular dynamics. Hartree and Hartree-Fock method. Density functional theory. Hohenberg-Kohn, Kohn-Sham equations. Local density approximation. Band gap problem. DFT in practice. Pseudopotential method. Basis sets. Hellmann-Feynman theorem. van der Waals interaction. Scientific computation with Linux. Scripting. Convergence testing. Low dimensional systems.

Modalità di valutazione

- ☐ Prova scritta
- ☒ Prova orale
- ☐ Valutazione in itinere
- ☒ Valutazione di progetto
- ☐ Valutazione di tirocinio
- ☐ Prova pratica
- ☐ Prova di laboratorio

Descrizione delle modalità e dei criteri di verifica dell'apprendimento

Italiano	La prova di esame e´ orale. Lo studente presentera´ i propri risultati di uno studio computazionale di un materiale scelto in accordo con i docenti. Seguiranno domande su argomenti svolti nel corso. La prova sarà valutata secondo i seguenti criteri: Non idoneo: importanti carenze e/o inaccuratezza nella conoscenza e comprensione degli argomenti; limitate capacità di analisi e sintesi, frequenti generalizzazioni. 18-20: conoscenza e comprensione degli argomenti appena sufficiente con possibili imperfezioni; capacità di analisi, sintesi e autonomia di giudizio sufficienti. 21-23: Conoscenza e comprensione degli argomenti routinaria; Capacità di analisi e sintesi
Inglese	The exam is oral. The student will present his own results of a computational study of a material/topic chosen in agreement with the teachers. Questions will follow on topics covered in the course. The examination will be assessed according to the following criteria: Not suitable: important deficiencies and / or inaccuracy in knowledge and understanding of the topics; limited capacity for analysis and synthesis, frequent generalizations. 18-20: knowledge and understanding of the topics just sufficient with possible imperfections; sufficient capacity for analysis, synthesis and autonomy of judgment. 21-23: Routine knowledge and understanding of topics; Ability to correct analysis and

Testi adottati

Italiano	R. Martin Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods Materiale e tutorials on-line/wiki Articoli scientifici di riferimento nel settore
Inglese	R. Martin Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods Material and tutorials on-line/wiki Scientific articles of reference in the sector

Bibliografia di riferimento

Italiano	Articoli scientifici condivisi con gli studenti durante la lezione
Inglese	Scientific articles shared to the students during the lesson

Modalità di svolgimento

☒ Modalità in presenza
☒ Modalità a distanza

Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

Italiano	Un insieme di strategie didattiche (lezione, discussione, studio di caso, apprendimento di gruppo, problem solving, ecc.) Le lezioni pratiche saranno guidate da materiale scritto predisposto su piattaforma wiki.
Inglese	A set of teaching strategies (lectures, discussion, case study, group learning, problem solving, etc.) The practical lessons will be guided by written material prepared on a wiki platform.

Modalità di frequenza

◉ Frequenza facoltativa
○ Frequenza obbligatoria

Descrizione della modalità di frequenza

Italiano	Sebbene non obbligatoria la frequenza è vivamente consigliata per un miglior ed efficace apprendimento
Inglese	Although not mandatory, attendance is strongly recommended for better and more effective learning