Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1

Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome	OLIVIA
Cognome	PULCI

Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano	TEORIA QUANTISTICA DELLA MATERIA E TECNICHE COMPUTAZIONALI
Inglese	QUANTUM THEORY OF MATTER COMPUTATIONAL TECHNIQUES

Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A. 2025/2026 ○ L ◉ LM ○ LM CU

CdS	FISICA (LM-17)
Codice	8067723
Canale	UNICO
CFU	6
Lingua	ITA

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 è volto a completare la formazione di base nel campo della fisica quantistica applicata allo studio delle proprietà microscopiche e macroscopiche dei materiali . Lobbiettivo del corso è quello di fornire le principali conoscenze su metodi teorico/computazionali per lo studio delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche dei materiali. Principali obiettivi formativi sono la comprensione di metodi quanto-meccanici semi-empirici e da primi-principi, quali la teoria del Funzionale Densità (DFT), la teoria del Funzionale densità dipendente dal tempo e la teoria delle Funzioni di Green. Ulteriore obiettivo è l' apprendimento e l'uso in modo autonomo di uno dei principali codici di calcolo DFT (quantum-espresso) correntemente in uso nell' ambito della ricerca in scienza dei materiali tramite lo svolgimento di esercitazioni pratiche da parte dello studente CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE: Il corso intende fornire allo studente gli strumenti di base necessari per comprendere le
Inglese	LEARNING OUTCOMES: The course is aimed at completing basic training in the field of quantum physics applied to the study of microscopic and macroscopic properties of materials. The goal of the course is to provide the main knowledge on theoretical / computational methods for the study of the structural, electronic and optical properties of materials. The main educational objectives are the understanding of quantum-mechanical semi-empirical and first-principles methods, such as the Density Functional Theory (DFT), the time-dependent Functional density theory and the Green Function theory. Another objective is the learning and autonomous use of one of the main DFT (quantum-express) calculation codes currently in use in the field of research in Solid State Physics through the performance of practical exercises by the student. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: The course aims to provide the student with the basic tools needed to understand the

Prerequisiti

Italiano	Nozioni di calcolo differenziale ed integrale, analisi complessa. Approfondita conoscenza di meccanica quantistica con applicazioni a atomi, molecole e solidi cristallini
Inglese	Notions of differential and integral calculus, of complex analysis. Good knowledge of quantum mechanics applied to atoms, molecules and crystalline solids

Programma

Italiano	Il 10% del corso e' dedicato ad un ripasso di concetti di base ed approfondimento di concetti: Approssimazione di Born-Oppenheimer Equazioni di Hartree, Hartree Fock. Lo scambio del jellium Il 50% corso e' dedicato allo studio della Teoria del Funzionale Densita' e al suo uso reale per il calcolo di proprieta' di stato fondamentale ed di stato eccitato della materia: Sistemi a molti elettroni Teoria delle bande nei solidi Proprietà ottiche eccitoni Teoria del
Inglese	About 10% of the lessons are dedicated to a review of basic concepts, and an in-depth of them : Born-Oppenheimer Aprroximation Hartree, Hartree Fock equations Exact exchange in jellium About 50% of the lessons are dedicated to the study of Density Functional Theory and at its applications for the calculation of ground state and excited state properties of matter: Many-electron systems Electronic band theory in solids Optical properties excitons

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 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 corrette con argomentazione logica coerente. 24-26: Discreta conoscenza e comprensione degli argomenti; buone capacità di analisi e sintesi con argomentazioni espresse in modo rigoroso. 27-29: Conoscenza e comprensione degli argomenti completa; notevoli capacità di analisi
Inglese	The examination will be evaluated according to the following criteria: Ineligible: imajor deficencies and/or inaccuracy in knowledge and understanding of topics; limited analytical and synthesis skills, frequent generalizations. 18-20: knowledge and understanding of topics only sufficient with possible imperfections; analytical skills, synthesis and judgment autonomy just sufficient. 21-23: knowledge and understanding of topics at a basic level; Correct analysis and synthesis skills with consistent logical reasoning. 24-26: Fair knowledge and understanding of the topics; good analytical and synthesis skills with rigorous arguments. 27-29: Ccomplete knowledge and understanding of the topics; remarkable ability of

Testi adottati

Italiano	Fetter Walecka "Quantum Theory of Many-Particle Systems", Grosso -Pastori Pallavicini, "Solid State Physics"
Inglese	Fetter Walecka "Quantum Theory of Many-Particle Systems", Grosso -Pastori Pallavicini, "Solid State Physics"

Bibliografia di riferimento

Italiano	R. Mattuck A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem Ashcroft-Mermin, "Solid State Physics"
Inglese	R. Mattuck A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem Ashcroft-Mermin, "Solid State Physics"

Modalità di svolgimento

☒ Modalità in presenza
☐ Modalità a distanza

Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

Italiano	Didattica frontale condotta in aula mediante uso della lavagna e del gesso in modo da dare il tempo agli studenti di riflettere sulle derivazioni matematico-fisiche degli argomenti trattati Il ricorso a mezzi audiovisivi è limitato alla presentazione di argomenti specifici e alla parte relativa alle lezioni pratiche al calcolatore svolte dagli studenti.
Inglese	Frontal lectures in the classroom using the blackboard and chalk to give students time to reflect on the mathematical-physical derivations of the topics covered. The use of audiovisual media is limited to the presentation of specific topics and to the part relating to the practical computer lessons carried out by the students.

Modalità di frequenza

◉ Frequenza facoltativa
○ Frequenza obbligatoria

Descrizione della modalità di frequenza

Italiano	La frequenza regolare del corso non è obbligatoria ma è molto consigliata al fine di facilitare l'apprendimento delle derivazioni matematico-fisiche trattate nel corso, e dell'uso di codici.
Inglese	The regular attendance of the course is not mandatory but it is highly recommended in order to facilitate the learning of the mathematical-physical derivations dealt with in the course, and of the computer codes.