

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

MODELLIZZAZIONE DI NANOMATERIALI

Nanoscale Materials Modeling

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI (LM-Sc.Mat) EMJM GREENANO
Codice	8068706	Canale	Unico
CFU	6	Lingua	Inglese

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

CONOR DAVID HOGAN

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 elettroniche utilizzando software e strategie di simulazione all'avanguardia. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE Il corso mira a fornire competenze computazionali ad ampio raggio nella scienza dei materiali per consentire agli studenti di analizzare e caratterizzare sistemi reali su scala nanometrica e utilizzarli per interpretare osservazioni sperimentali da altri moduli del corso Greenano. Lo studente dovrà inoltre essere in grado di individuare e comprendere il metodo teorico/computazionale idoneo alla caratterizzazione delle proprietà chimico-fisiche del materiale di interesse e saper comprendere e analizzare discussioni e dati derivati da tali metodi. Lo studente sarà inoltre in grado di affrontare nuovi problemi scientifici e di leggere testi e articoli scientifici su argomenti relativi allo studio delle proprietà strutturali ed elettroniche dei nanomateriali. AUTONOMIA DI GIUDIZIO Gli studenti devono dimostrare la capacità di interpretare i risultati dei loro calcoli in modo indipendente e critico e giudicare come questi risultati
----------	--

	possano essere utili o applicabili per la progettazione di nuovi materiali per la transizione verde e digitale. ABILITÀ COMUNICATIVE Particolare attenzione è posta alla capacità di utilizzare le conoscenze acquisite durante le lezioni in modo appropriato e in un contesto concettualmente coerente e rigoroso. Lo studente dovrà dimostrare la capacità di presentare la propria attività di ricerca o di revisione ad un pubblico di specialisti e non specialisti. La relazione finale, relativa alle simulazioni al computer effettuate dallo studente su uno specifico materiale, è prevista attraverso una presentazione power-point di tipo seminariale da parte dello stesso, ed ha lo scopo di esercitare e migliorare le capacità comunicative e le competenze trasversali dello studente. CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO Capacità di utilizzare banche dati, LLM, e risorse bibliografiche e scientifiche per estrarre le informazioni e le idee più adatte allo sviluppo di qualsiasi progetto di studio e di ricerca. Capacità di individuare metodi teorico-computazionali idonei allo studio di materiali alla nanoscala.
English	LEARNING OBJECTIVES 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 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. APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING The course aims to provide wide ranging computational skills in materials science to allow students to analyse and characterize real nanoscale systems and use them to interpret experimental observations from other modules in the Greenano course. The student must also be able to identify and understand the theoretical / computational method suitable for the characterization of the chemical-physical properties of the material

	of interest and to be able to understand and analyse discussions and data derived by these methods. The student will also be able to tackle new scientific problems and to read scientific texts and articles on topics related to the study of structural and electronic properties of nanomaterials. MAKING JUDGEMENTS Students must demonstrate the ability to interpret the results of their calculations in an independent and critical manner and judge how these results can be useful or applicable for designing new materials for the green and digital transition. COMMUNICATION SKILLS Particular attention is paid to the ability to use the knowledge acquired during the lessons appropriately and in a conceptually coherent and rigorous context. The student should demonstrate the ability to present one's own research or review activity to an audience of specialists and non-specialists. The final report related to the computer simulations carried out by the student on a specific material, is foreseen through a seminar-type power-point presentation by the same, and has the purpose of exercising and improving communication skills and transversal skills of the student. LEARNING SKILLS Ability to use databases, LLMs, and bibliographic and scientific resources to extract information and ideas best suited to develop any study and research project. Ability to identify theoretical-computational methods suitable for the study of particular nanoscale materials.
--	---

PREREQUISITI

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

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Calcolo scientifico con Linux (8 ore) L'ambiente Unix. Scripting. Analisi di data. Il calcolo in parallelo. Teoria fondamentale (16 ore) Introduzione alla scienza computazionale dei materiali. Approssimazione di Born-Oppenheimer. 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. Proprietà elettroniche ed ottiche dei materiali. Modellizzazione teorica e simulazioni atomistiche (36 ore) Introduzione alla scienza computazionale dei materiali. Pseudopotenziali. Basis set. Teorema di Hellmann-Feynman. Interazione di van der Waals. Test di convergenza. Sistemi a bassa dimensionalità. Ottimizzazione delle geometrie. Caratterizzazione dei materiali: DOS, PDOS, strutture delle bande, energie di formazione e assorbimento, STM. L'uso di risorse e data-base on-line e LLM. Saranno presentati esempi e simulazioni relativi a silicio, grafene, molecole organiche, Xenon, MoS₂ bulk, superficie di Al(001), assorbimento di ossigeno. Progetto pratico.
English	Scientific calculation with Linux (8 hours) The Unix environment. Scripting. Data analysis. Parallel computation. Fundamental theory (16 hours) The Born-Oppenheimer approximation. The Hartree and Hartree-Fock methods. Density functional theory. The equations of Hohenberg-Kohn and Kohn-Sham. Local density approximation. The gap problem in DFT. Electronic and optical properties of materials.

	Theoretical modeling and atomistic simulations (36 ore) Introduction to computational material science. Pseudopotentials. Basis sets. The Hellmann-Feynman theorem. The van der Waals interaction. Convergence tests. Low dimensional systems. Geometry optimization. Characterization of materials: DOS, PDOS, band structures, formation and adsorption energies, STM. Use of online resources and databases and LLMs. Practical examples include silicon, graphene, organic molecules, Xenon, bulk MoS₂, the Al(001) surface, oxygen adsorption. Practical project.
--	--

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods Grosso e Pastori Parravicini, Solid State Physics Hung, Nugraha e Saito, Quantum-Espresso course for solid-state physics Slides fornite dal docente Materiale e tutorials on-line/wiki Tutto il materiale è reperibile dagli studenti sul canale teams dell'insegnamento
English	R. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods Grosso and Pastori Parravicini, Solid State Physics Hung, Nugraha and Saito, Quantum-Espresso course for solid-state physics Slides provided in class Materials and tutorials on-line/wiki All the material is accessible by the students via the Teams channel for the class.

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

☒ In presenza ☐ A distanza

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.
English	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 obbligatoria ☒ frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

Italiano	La frequenza regolare del corso non è obbligatoria ma è molto consigliata al fine di facilitare l'apprendimento delle nozioni avanzate trattate nel corso. Le lezioni sono svolte nelle aule del dipartimento
English	The regular attendance of the course is not mandatory but it is highly recommended in order to facilitate the learning of the advanced topics dealt within the course. Lessons are held in the classrooms of the department

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

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

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE VALUTATRICE

Conor David Hogan e uno fra Olivia Pulci, Maurizia Palummo

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano	L'esame consiste in una prova orale finalizzata ad accertare la conoscenza e la comprensione dei principali concetti relativi alla fisica e alla chimica dei materiali nanostrutturati, con particolare riferimento alle proprietà strutturali, elettroniche, chimiche, ed ottiche e ai metodi teorici di modellizzazione. Nel corso della prova finale saranno valutate: • la comprensione dei principi fondamentali alla base della DFT e la struttura elettronica; • la capacità di utilizzare i modelli teorici introdotti durante il corso per interpretare le proprietà fisiche dei materiali nanostrutturati; • la capacità di collegare formalismo teorico, simulazioni atomistiche e interpretazione fisica dei fenomeni studiati; • l'autonomia di giudizio nell'analisi delle proprietà dei materiali e dei risultati teorici e sperimentali; • la chiarezza espositiva e l'uso appropriato del linguaggio scientifico. Nell'ambito della parte teorica dell'insegnamento, gli studenti faranno un progetto individuale dedicato allo studio di uno specifico materiale rilevante ai temi del Master GREENANO. Il progetto prevederà l'esecuzione e l'analisi di simulazioni teoriche relative alle proprietà del materiale studiato. I risultati ottenuti dovranno essere discussi mediante una presentazione orale supportata da slides in formato PowerPoint, finalizzata a valutare la capacità dello studente di analizzare criticamente i risultati, interpretarne il significato fisico-chimico e comunicarli in modo chiaro ed efficace. Per il superamento dell'esame è richiesto un voto non inferiore a 18/30. La valutazione sarà effettuata secondo i seguenti criteri: • Non idoneo: conoscenza insufficiente degli argomenti fondamentali dell'insegnamento e limitata capacità di interpretazione delle proprietà fisiche e chimiche dei materiali nanostrutturati e dei relativi modelli teorici.
----------	---

	• 18-20: conoscenza essenziale dei contenuti dell'insegnamento; comprensione sufficiente delle principali proprietà dei materiali nanostrutturati e dei metodi teorici di base, pur in presenza di imprecisioni espositive e limitata autonomia nell'applicazione dei concetti trattati. • 21-23: conoscenza adeguata degli argomenti trattati; capacità di descrivere correttamente i metodi di simulazione e le tecniche di caratterizzazione introdotte durante il corso. • 24-26: buona conoscenza dei contenuti dell'insegnamento e buona capacità di analisi e sintesi; uso corretto del formalismo teorico e adeguata capacità di caratterizzare proprietà strutturali, elettroniche, e ottiche dei materiali nanostrutturati. • 27-29: conoscenza completa e approfondita degli argomenti; buona autonomia nell'analisi critica delle proprietà fisiche dei materiali nanostrutturati e nell'interpretazione di risultati teorici e sperimentali. • 30-30 e lode: eccellente padronanza degli argomenti trattati, elevata capacità di rielaborazione critica e autonoma dei contenuti, esposizione rigorosa e utilizzo appropriato del linguaggio scientifico, con piena comprensione delle relazioni tra struttura e proprietà fisiche dei materiali nanostrutturati.
English	The exam consists of an oral test aimed at assessing the knowledge and understanding of the main concepts related to the physics and chemistry of nanoscale materials, with particular reference to their structural, electronic, chemical, and optical properties, as well as theoretical modeling methods. During the final examination, the following will be assessed: • understanding of the fundamental physical principles behind DFT and electronic structure theory; • the ability to use the theoretical models introduced during the course to interpret the physical properties of nanoscale materials; • the ability to connect theoretical formalism, atomistic simulations, and physical interpretation of the studied phenomena; • independent judgment in analyzing material properties and theoretical and experimental results; • clarity of exposition and appropriate use of scientific language. Within the theoretical part of the course, students will also carry out an individual project focused on the study of a specific nanoscale material. The project will involve performing and analyzing theoretical simulations related to the properties of the studied material. The obtained results must be discussed in an oral presentation supported by PowerPoint slides, aimed at evaluating the student's ability to critically analyze results, interpret their physical and chemical meaning, and communicate them clearly and effectively. To pass the exam, a minimum grade of 18/30 is required. The evaluation will be carried out according to the following criteria: • Not sufficient (non-idoneo): insufficient knowledge of the fundamental topics of the course and limited ability to interpret the physical and chemical properties of nanoscale materials and the corresponding theoretical and experimental models.

- | | |
|--|---|
| | <ul style="list-style-type: none"> • 18–20: basic knowledge of the course contents; sufficient understanding of the main properties of nanoscale materials and of basic theoretical methods, although with presentation inaccuracies and limited autonomy in applying the concepts. • 21–23: adequate knowledge of the topics covered; ability to correctly describe the simulation methods and characterization techniques introduced during the course. • 24–26: good knowledge of the course content and good analytical skills; correct use of theoretical formalism and adequate understanding of structural, electronic, chemical, and optical properties of nanoscale materials. • 27–29: comprehensive and in-depth knowledge of the topics; good autonomy in critically analyzing the physical properties of nanoscale materials, interpreting theoretical and experimental results. • 30–30 with honors (cum laude): excellent mastery of the topics, high ability for critical and independent elaboration of content, rigorous exposition, and appropriate use of scientific language, with full understanding of the relationships between structure and physical properties of nanoscale materials. |
|--|---|