

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

Teoria dei Solidi e Modelli Molecolari

Theory of Solids and Molecular Models

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	Scienza e Tecnologia dei Materiali (LM-Sc.Mat)
Codice	8068725	Canale	Unico
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

OLIVIA PULCI

CODOCENTE

Modulo:

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 . L'obiettivo 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 proprietà strutturali ed opto-elettroniche dei materiali in termini di una descrizione quanto-meccanica microscopica. Le lezioni vertono sulla derivazione matematica ed interpretazione fisica dei principali strumenti di indagine teorica per lo studio delle proprietà strutturali, elettroniche e spettroscopiche dei materiali.
----------	---

	Applicazioni relative a materiali di corrente interesse nell'ambito della ricerca in scienza dei materiali sono illustrate durante le lezioni frontali e pratiche al calcolatore al fine di ampliare le conoscenze dello studente sullo stato dell'arte in questo settore. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE: Il corso si pone la finalità di fornire gli strumenti matematico-fisici che permettano agli studenti di comprendere articoli scientifici dedicati allo studio dei materiali ed ad interpretare, tramite la loro conoscenza, varie osservabili fisiche sperimentali di interesse nella scienza dei materiali. Lo studente dovrà esser anche in grado di individuare e comprendere il metodo teorico/computazionale adeguato alla caratterizzazione delle proprietà chimico-fisiche dei materiali di interesse ed essere in grado di interpretare discussioni di analisi e dati relativi a tali metodi. Lo studente sarà anche in grado di affrontare problemi scientifici nuovi e di leggere testi e articoli scientifici in inglese su argomenti connessi allo studio delle proprietà strutturali elettroniche ed ottiche dei materiali. AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Agli studenti viene richiesta la capacità di utilizzare le conoscenze acquisite in maniera critica, nello specifico per lo studio delle proprietà strutturali, elettroniche ed ottiche dei materiali al fine di valutarne le caratteristiche per un appropriato impiego nel campo della scienza dei materiali. ABILITÀ COMUNICATIVE: Viene prestata particolare attenzione alla capacità di utilizzare, in maniera appropriata e in un contesto concettualmente coerente e rigoroso, le conoscenze acquisite nel corso delle lezioni. La relazione finale relativa all'esercitazione al calcolatore svolta dallo studente su un materiale specifico, è prevista tramite una presentazione power-point di tipo seminario da parte dello stesso, ed ha lo scopo di esercitare e migliorare le abilità comunicative e gli skills trasversali dello studente. CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: Stimolare ed indirizzare gli studenti all'uso di testi specialistici ed articoli scientifici anche al fine di apprendere il medesimo argomento da più di una fonte, approfondendone così la comprensione e ampliando, al contempo, la capacità di analisi. Stimolare studenti all'uso dell'ambiente di calcolo Linux e alla comprensione di semplici scripts bash per la gestione del lavoro pratico relativo alle simulazioni al calcolatore.
English	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 material science 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 structural and opto-electronic properties of materials in terms of a microscopic quantum-mechanical description.

The lessons focus on the mathematical derivation and physical interpretation of the main theoretical investigation tools for the study of the structural, electronic and spectroscopic properties of materials.

Applications relating to materials of current interest in the field of material science research are illustrated during lectures and computer-based simulations in order to broaden the student's knowledge about the state of the art in this field.

APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:

The course aims to provide mathematical-physical tools that allow students to understand scientific manuscripts dedicated to the study of materials and to analyze, through their knowledge, various experimental physical observables of interest in materials science.

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, analysis, 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 in English on topics related to the study of electronic structural and optical properties of materials.

	MAKING JUDGEMENTS: Students are required to use the acquired knowledge in a critical manner, specifically to study the structural, electronic and optical properties of materials in order to evaluate their characteristics for an appropriate use in the field of materials science. 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 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: 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 final report related to the computer exercise carried out by the student on a specific material, is foreseen through a seminar-type power-point presentation and has the purpose of exercising and improving his/her communication skills and transversal skills .
--	--

PREREQUISITI

Italiano	Nozioni di fisica dei solidi (reticoli di Bravais, reticolo reciproco, struttura a bande elettronica). Nozioni di calcolo differenziale e integrale, analisi complessa. Conoscenza di base della meccanica quantistica con applicazioni ad atomi, molecole e solidi cristallini
<i>English</i>	Notions of solid state physics (Bravais lattices, reciprocal lattice, electronic band structure). Notions of differential and integral calculus, complex analysis. Basic knowledge of quantum mechanics applied to atoms, molecules and crystalline solids

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Circa il 20% delle ore di insegnamento sara' dedicato ai seguenti richiami e approfondimenti su: L'approssimazione di Born-Oppenheimer L'approssimazione adiabatica Il teorema di Hellmann-Feynman e di Epstein Richiami alla teoria delle bande nei solidi Teorema di Bloch, boundary conditions. Metodo variazionale. Metodo tight-binding e sue applicazioni in materiali a varia dimensionalità. Metodo delle Onde-Piane Ortogonalizzate Metodo degli Pseudopotenziali e dello sviluppo in onde piane della Funzione d'onda Equazione di Hartree e Hartree Fock, Teorema di Koopmans , potenziale di scambio. Gas elettronico omogeneo: Trasformata di Fourier del potenziale coulombiano; il gas elettronico omogeneo con Hartree Fock. Approssimazione di Slater, Approssimazione di Thomas Fermi . Derivate funzionali Circa il 50% delle ore di insegnamento verra' dedicato alla teoria del funzionale densita' alle sue applicazioni nel calcolo di stato fondamentale e di bande, di proprieta' ottiche, e ad esercitazioni al calcolatore: La teoria del Funzionale Densita' Teorema di Hohenberg e Kohn , Equazioni di Kohn e Sham. La Local density Approximation. Il problema della gap in DFT. Esempi di applicazioni della DFT Proprieta' ottiche. Indice di rifrazione complesso. Coefficiente di assorbimento. La Riflettività. La funzione dielettrica. Il modello di Drude e il modello di Lorentz. Relazioni di Kramers Kronig e regole di somma Regola d'oro di Fermi: Calcolo della funzione dielettrica in approssimazione di dipolo Esempi di funzione dielettrica per metalli, semiconduttori, isolanti. Densita' degli stati congiunta(JDOS) Andamento della JDOS vicino ai punti critici. Teoria della risposta lineare e TDDFT. Effetti eccitonici: modello idrogenoide di Mott-Wannier Circa il 30% e' dedicato ad Esercitazioni al calcolatore su DFT che prevedono anche una introduzione ai principali comandi in ambiente linux.
English	Approximately 20% of the course hours will be devoted to the following reviews and advanced topics: • The Born–Oppenheimer approximation

	• The adiabatic approximation • The Hellmann–Feynman and Epstein theorems • Review of band theory in solids: Bloch theorem and boundary conditions • Variational method • Tight-binding method and its applications to materials with different dimensionalities • Orthogonalized Plane Wave (OPW) method • Pseudopotential method and plane-wave expansion of the wavefunction • Hartree and Hartree–Fock equations, Koopmans’ theorem, exchange potential • Homogeneous electron gas: Fourier transform of the Coulomb potential; homogeneous electron gas within the Hartree–Fock approximation • Slater approximation, Thomas–Fermi approximation • Functional derivatives Approximately 50% of the course hours will be devoted to Density Functional Theory (DFT), its applications to ground-state, band structure and optical-property calculations, as well as computer-based exercises: • Density Functional Theory • Hohenberg–Kohn theorem and Kohn–Sham equations • Local Density Approximation (LDA) • The band-gap problem in DFT • Examples of DFT applications • Optical properties • Complex refractive index and absorption coefficient • Reflectivity and dielectric function • Drude and Lorentz models • Kramers–Kronig relations and sum rules • Fermi’s golden rule: calculation of the dielectric function within the dipole approximation • Examples of dielectric functions for metals, semiconductors, and insulators • Joint density of states (JDOS) and its behavior near critical points • Linear-response theory and Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT) • Excitonic effects: the Mott–Wannier hydrogenic model Approximately 30% of the course hours will be devoted to computer laboratory sessions on DFT, including an introduction to the main Linux commands.
--	---

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	Grosso Pastori Parravicini, “Solid State Physics” , Ashcroft-Mermin "Solid State Physics" Dispense delle lezioni fornite della docente Materiale on-line e tutorials su https://www.quantum-espresso.org/
<i>English</i>	Grosso Pastori Parravicini, “Solid State Physics” , Ashcroft-Mermin "Solid State Physics" Teacher lecture notes. <i>On-line material on https://www.quantum-espresso.org/</i>

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

☒ In presenza

☐ A distanza

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.
English	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 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 derivazioni matematico-fisiche 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 mathematical-physical derivations 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

OLTRE ALLA TITOLARE OLIVIA PULCI, 1 o 2 fra i seguenti esperti nel settore MAURIZIA PALUMMO, TOMMASO GIOVANNINI, GIANLUCA STEFANUCCI, ENRICO PERFETTO,

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano	La prova di esame è orale. Lo studente presenterà i propri risultati di uno studio computazionale delle proprietà geometriche, elettroniche e ottiche 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 numerose 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, sintesi. Buona autonomia di giudizio. 30-30L: Ottimo livello di conoscenza e comprensione degli argomenti. Notevoli capacità di analisi e di sintesi e di autonomia di giudizio. Argomentazioni espresse in modo originale.
English	The exam is oral. The student will present his own results of a computational study of the geometric, electronic and optical properties and of a material chosen in agreement with the teachers. Questions will follow on topics covered in the course. The test will be evaluated according to the following criteria: Not suitable: important deficiencies and / or inaccuracies in knowledge and understanding of the topics; limited capacity for analysis and synthesis, frequent generalizations. 18-20: just enough knowledge and understanding of topics with numerous imperfections; analytical and synthesis skills just sufficient; just sufficient autonomy of judgment. 21-23: Knowledge and understanding of routine topics; Ability to analysis and synthesis with consistent logical argument. 24-26: Fair knowledge and understanding of the topics; good analysis and synthesis skills with arguments strictly expressed. 27-29: Knowledge and understanding of complete topics; Remarkable capacity for analysis, synthesis. Good autonomy of judgment. 30-30 cum Laude: Excellent level of knowledge and understanding of the topics. Remarkable skills of analysis and synthesis and of autonomy of judgment. Arguments expressed in an original way.