

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

Teoria Quantistica della Materia e Tecniche Computazionali

Quantum Theory of matter and computational techniques

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	FISICA (LM-17)
Codice	8067723-8068441	Canale	Unico
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

PULCI OLIVIA

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 Fisica della Materia sono illustrate durante le lezioni frontali e pratiche al computer 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 della Fisica della Materia ed a 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 Fisica della Materia. 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 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 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 Physics of Matter 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 matter in order to evaluate their characteristics for an appropriate use in the field of Solid State Physics.

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

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

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 Funzionale Densita' (DFT) e DFT dipendente dal tempo (TDDFT) . Metodi di calcolo numerico. Teoria della risposta lineare. Il 40% del corso e' dedicato allo studio delle funzioni di Green e loro applicazioni per il calcolo di strutture a banda: Seconda quantizzazione. Funzioni di Green a $T=0$. Rappresentazione di Lehmann.
----------	--

	Equazione di Dyson. Self energia. Equazione di quasi-particella. L'approssimazione GW per la self-energia
<i>English</i>	About 10% of the lessons are dedicated to a review of basic concepts, and an in-depth of them : Born-Oppenheimer Approximation 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. Density Functional Theory (DFT) . Optical properties, excitons. Time-Dependent DFT. Methods for numerical simulations. Linear response theory. About 40% of the lessons are dedicated to the study of Green's function theory and their applications for the electronic band structure calculations: Second quantization. Green functions at $T=0$. Lehmann representation. Dyson equation. Self energy. Quasi-particle equation. GW approximation for the Self-Energy

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	Solid State Physics di Ashcroft e Mermin; Solid State Physics di Giuseppe Grosso e Giuseppe Parravicini ; Introduction to Solid State Physics by Kittel; Wooten “ Proprieta' ottiche dei solidi” Note del Docente. Fetter Walecka “Quantum Theory of Many-Particle Systems”
<i>English</i>	Solid State Physics di Ashcroft e Mermin; Solid State Physics di Giuseppe Grosso e Giuseppe Parravicini ; Introduction to Solid State Physics by Kittel; Wooten “ Proprieta' ottiche dei solidi” Teacher Notes. Fetter Walecka “Quantum Theory of Many-Particle Systems”

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 e di formulare appropriate domande al docente. Il ricorso a mezzi audiovisivi è limitato alla presentazione di argomenti specifici che necessitano illustrazione e discussione di figure e dati e alla parte relativa alle lezioni pratiche al calcolatore svolte dagli studenti.
<i>English</i>	Frontal lectures done in the classroom using the blackboard and chalk in order to give students time to reflect on the mathematical-physical derivations of the topics covered and to formulate appropriate questions to the teacher. The use of audiovisual media is limited to the presentation of specific topics that require illustration and discussion of figures and data. 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
<i>English</i>	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	L'esame consiste in una prova orale finalizzata ad accertare la conoscenza e la comprensione dei principali concetti della Fisica Teorica dello Stato Solido, con particolare riferimento ai metodi per lo studio struttura e delle proprietà fisiche dei materiali cristallini solidi, delle proprietà elettroniche ed ottiche della materia condensata. Gli studenti presenteranno anche i risultati di un loro progetto computazionale su un materiale a loro scelta o concordato con il docente. Nel corso della prova saranno valutate: la capacità di utilizzare i modelli teorici introdotti durante il corso per interpretare le proprietà strutturali, elettroniche, ottiche dei materiali cristallini;
-----------------	--

	• la capacità di collegare formalismo matematico e interpretazione fisica; • l'autonomia di giudizio nell'analisi dei fenomeni trattati; • la chiarezza espositiva e l'uso appropriato del linguaggio scientifico. • La correttezza e comprensione delle simulazioni computazionali. 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 dei materiali cristallini e dei relativi modelli teorici. Insufficiente comprensione delle tecniche computazionali e insufficiente presentazione del progetto computazionale. • 18-20: conoscenza essenziale dei contenuti dell'insegnamento; comprensione sufficiente dei principali concetti relativi alla fisica dei materiali cristallini, pur in presenza di imprecisioni espositive e limitata autonomia nell'applicazione dei modelli teorici. Limitata comprensione delle tecniche computazionali e presentazione del progetto appena sufficiente. • 21-23: conoscenza adeguata degli argomenti trattati; capacità di descrivere correttamente i principali modelli della fisica dello stato solido e di applicarli a sistemi cristallini semplici. Sufficiente presentazione del progetto computazionale. • 24-26: buona conoscenza dei contenuti dell'insegnamento e buona capacità di analisi e sintesi; uso corretto del formalismo teorico e adeguata capacità di collegare struttura cristallina e proprietà fisiche dei materiali. Discreta presentazione del progetto computazionale. • 27-29: conoscenza completa e approfondita degli argomenti; buona autonomia nell'analisi critica delle proprietà elettroniche, e ottiche, dei materiali cristallini e nell'utilizzo dei modelli teorici trattati. Buona presentazione del progetto computazionale. • 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 cristallina e proprietà fisiche dei solidi. Eccellente progetto computazionale
English	The examination consists of an oral exam aimed at assessing the knowledge and understanding of the main concepts of Theoretical Solid State Physics, with particular emphasis on the structure and physical properties of crystalline solid materials, as well as on the electronic and optical properties of condensed matter. Students will also present the results of a computational project on a material of their choice or agreed upon with the instructor. During the examination, the following aspects will be evaluated: • the ability to use the theoretical models introduced during the course to interpret the structural, electronic, and optical properties of crystalline materials; • the ability to connect mathematical formalism with physical interpretation; • independent critical judgment in the analysis of the phenomena discussed;

- clarity of presentation and appropriate use of scientific language;
- correctness and understanding of the computational simulations.

A minimum grade of 18/30 is required to pass the exam. The evaluation will be based on the following criteria:

Fail: insufficient knowledge of the fundamental topics of the course and limited ability to interpret the physical properties of crystalline materials and the related theoretical models. Insufficient understanding of computational techniques and inadequate presentation of the computational project.

18–20: essential knowledge of the course contents; sufficient understanding of the main concepts related to the physics of crystalline materials, despite some inaccuracies in presentation and limited autonomy in the application of theoretical models. Limited understanding of computational techniques and barely sufficient presentation of the project.

21–23: adequate knowledge of the topics covered; ability to correctly describe the main models of solid-state physics and apply them to simple crystalline systems. Satisfactory presentation of the computational project.

24–26: good knowledge of the course contents and good analytical and synthesis skills; correct use of theoretical formalism and adequate ability to relate crystal structure to the physical properties of materials. Fairly good presentation of the computational project.

27–29: complete and in-depth knowledge of the topics covered; good autonomy in the critical analysis of the electronic and optical properties of crystalline materials and in the use of the theoretical models discussed. Good presentation of the computational project.

30–30 cum laude: excellent mastery of the topics covered, high ability for critical and independent elaboration of the contents, rigorous presentation, and appropriate use of scientific language, with full understanding of the relationships between crystal structure and the physical properties of solids. Excellent computational project.