

## **Corso seminariale**

### ***Fisica computazionale (ingenua) della materia***

V. Fiorentini

Corso seminariale per la laurea triennale e magistrale

Destinatari: triennale e magistrale (dal II semestre del III anno triennale in poi).

Modalità di esame: relazione scritta e orale su assignment individuale

Programma del corso:

Introduzione minimale ai concetti della fisica dello stato solido necessari alle applicazioni computazionali. Approssimazione periodica e di quasiparticella; sviluppo su basi semplici. Sommario dei diversi approcci al calcolo dello spettro elettronico e quantità derivate. Approfondimento sui metodi da principi primi: elementi di DFT e schema teorico / pratico di un calcolo standard. Casistica di applicazioni. Installazione e uso di un codice open source. Applicazioni (da definire) p.es. a proprietà geometriche ed elastiche; difetti e superfici; transizioni sotto pressione; proprietà ottiche, dielettriche, termiche; ordine magnetico e dipolare.