

# **TIROCINIO-ULTERIORI ATTIVITA'**

## **TEORIA QUANTISTICA DEI MATERIALI COMPUTAZIONALE**

**Responsabile: Prof. G. Cappellini**

Il tirocinio ha durata di 1 CFU pari a 8 h frontali con orario da concordare con gli studenti. In questo periodo lo studente, seguito dal docente, familiarizzerà con un codice di calcolo per il calcolo delle proprietà elettroniche di stato fondamentale e di eccitazione di sistemi molecolari di differente composizione e caratteristiche.

Durante lo stage lo studente imparerà le caratteristiche principali di un codice di calcolo basato sulla teoria del funzionale densità (DFT), come si prepara un file di input e come si segue e si controlla una simulazione.

I risultati prodotti verranno comparati con quelli presenti in letteratura sia teorici che sperimentali. Allo studente verrà proposto di effettuare alcune simulazioni con caratteristiche differenti: e.g. modifica della base di sviluppo delle funzioni d'onda, modifica dei criteri di convergenza, modifica dei funzionali utilizzati per il calcolo dello stato fondamentale, calcolo delle proprietà di quasi-particella e della proprietà ottiche.

Lo studente dovrà elaborare una relazione sull'attività svolta, che presenterà oralmente durante il colloquio conclusivo.

Al termine dello stage il docente rilascerà un attestato sull'avvenuta attività di laboratorio computazionale.