

## Tirocinio computazionale:

### *“Fisica dei nanomateriali attraverso simulazioni atomistiche di dinamica molecolare classica”*

Responsabile: Dr. C. Melis

Il tirocinio ha durata di 1 CFU pari a 8 h frontali con orario da concordare con gli studenti.

Lo scopo del tirocinio è di acquisire familiarità con il codice di dinamica molecolare classica LAMMPS. In particolare lo studente eseguirà una serie di 5 esercizi propedeutici a difficoltà crescente il cui scopo è duplice:

- i) familiarizzare con il linguaggio di scripting specifico del codice LAMMPS
- ii) introdurre alcuni concetti fondamentali nella dinamica molecolare classica (e.g la funzione di distribuzione radiale, il termostato di Nosé-Hoover, il concetto di *timestep* di simulazione).

Il sistema specifico che verrà simulato è il Silicio cristallino, per il quale sono presenti svariati dati in letteratura, premettendo quindi una rigorosa validazione dei risultati ottenuti dallo studente.

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.