

Corso di Dottorato in Fisica A.A. 2020-21

Tematica: Introduction to the atomistic simulations of hybrid materials

(corso di dottorato in Fisica)

Docente: Alessandro Mattoni – mattoni@iom.cnr.it

Modalità: articolato in 4 lezioni teorico/pratiche di due ore con il docente + coordinamento a scadenza periodica ed attività di studio individuale/gruppo. Il modulo si conclude con un incontro di verifica (discussione + relazione su un argomento concordato).

Argomenti: Modelli di forze interatomiche nei materiali ibridi; introduzione alla dinamica molecolare; introduzione al calcolo delle proprietà termodinamiche e vibrazionali; applicazioni a sistemi di interesse tecnologico.

(PhD Course in Physics)

Teacher: Alessandro Mattoni - mattoni@iom.cnr.it

Course: 4 modular lessons including theoretical introductions and tutorials; developed through periodic deadlines and individual/group activities; final test in the form of a seminar/report on a topic agreed with the Teacher.

Topics: interatomic forces in hybrid materials; an introduction to molecular dynamics; structure, phonons and thermodynamics; applications to technological relevant systems