

DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA
CORSO DI SEMINARI DI STRUTTURA DELLA MATERIA
A.A. 2007/2008

Si informano gli studenti del Dottorato di Ricerca in Fisica, e altri interessati, che il

Prof. Matteo Cococcioni

Dipartimento "Chemical Engineering and Material Science", University of Minnesota

nei giorni **26 e 27 Maggio 2008** terrà un

**Mini-tutorial sull'uso del codice PWscf
per calcoli di struttura elettronica**

Le lezioni teoriche si terranno dalle ore 11.00 alle ore 13.00 in Aula Dottorato e nel pomeriggio si terranno le sessioni pratiche nella sala Computer del Dipartimento di Fisica "A. Volta".

Il Sommario del mini-tutorial è il seguente:

Acquisizione dei concetti teorici e delle conoscenze tecniche basilari per effettuare calcoli di struttura elettronica su materiali di interesse.

Elementi di Density-Functional Theory verranno rivisti nell'ambito della specifica implementazione (basata sull'uso di pseudo-potenziali e onde piane) adottata nel codice PWscf.

Le sessioni pratiche saranno introduttive all'uso del PWscf ed esploreranno alcune delle prerogative basilari di questo strumento di calcolo. Tra queste, particolare attenzione verrà rivolta al calcolo dell'energia elettronica totale di un sistema, alla sua ottimizzazione strutturale, al calcolo della struttura a bande, della densità degli stati e delle proprietà vibrazionali.

Il Titolare del corso
Prof. A. Rigamonti