

*Alcune brevi note di orientamento
per possibili stage e tesi di laurea*

Fisica teorica e computazionale della materia

- Fisica della materia
- Il metodo computazionale (*fatti ed equivoci*)
- Linee di ricerca @ Cagliari
- Offerte di stage (*internati*)
- Offerte di tesi di laurea (*L.T.*)

A cura di L. Colombo - Ca, 1.3.07

10^{+10} m

unita'
astronomica

... l'infinitamente grande

... l'infinitamente tanto
che ci sta in mezzo

fisica della materia

10^{-15} m

dimensioni
nucleo

... l'infinitamente piccolo

✓ **la fisica della vita**

- *meccanismi molecolari in sistemi biologici*
- *relazione struttura-funzione in bio-molecole*
- *interazione tra bio-molecola e farmaco*

✓ **la fisica della “materia ordinaria”**

- *proprietà dei materiali*
- *energia (fotovoltaico, celle a combustibile)*
- *geo-materiali*

✓ **la fisica degli “stati speciali”**

- *superconduttività*
- *condensazione di Bose-Einstein*
- *effetto Hall quantistico*

✓ **la fisica delle nano-tecnologie**

- *bio-/nano-/opto-elettronica*
- *nano-meccanica (NEMS)*
- *fotonica*

✓ **la fisica della complessità**

- *ensemble complessi (meccanica statistica)*
- *caos*

La Fisica della Materia nel contesto scientifico generale

National Science Foundation (NSF)

<http://www.nsf.gov>

Directorate for

Mathematical and Physical Sciences

- Charting the evolution of the Universe from the Big Bang to habitable planets and beyond
- Understanding the fundamental nature of space, time, matter, and energy
- Creating the molecules and materials that will transform the 21st century
- Developing tools for discovery and innovation throughout science and engineering
- Understanding how microscopic processes enable and shape the complex behavior of the living world
- Discovering mathematical structures and promoting new connections between mathematics and the sciences
- Conducting basic research that provides the foundation for our national health, prosperity, and security

Rilevanza della Fisica della Materia

Premi Nobel per la fisica 1986-2006

Negli ultimi 20 anni il premio e' andato

- il 14% delle volte all'astrofisica
- il 29% delle volte alla fisica nucleare/alte energie
- **il 57% alla fisica della materia**

<http://nobelprize.org>

... alcuni esempi ...

2003: "for pioneering contributions to the **theory of superconductors and superfluids**

2001: "for the achievement of **Bose-Einstein condensation** in dilute gases of alkali atoms, and for early fundamental studies of the properties of the condensates"

2000: "for developing **semiconductor heterostructures** used in high-speed- and opto-electronics"

1998: "for their discovery of a **new form of quantum fluid** with fractionally charged excitations"

1991: "for discovering that methods developed for studying **order phenomena in simple systems** can be generalized to more complex forms of matter"

1987: "for their important **break-through in the discovery of superconductivity** in ceramic materials"

Il metodo computazionale - ... *i fatti* ... -

- ✓ Paradigmi classici di investigazione: esperimento + teoria
- ✓ Paradigma computazionale:
 - “misura” una teoria (*validandola, falsificandola o estendendola*)
 - “misura” fenomeni a livello dei costituenti elementari del sistema (*elettroni & nuclei, atomi, molecole, ...*)

Cosa rende possibile la fisica computazionale della materia ?

- ✓ Lo sviluppo di **teorie calcolabili** (fisica teorica)
 - **teoria del funzionale densita' (*)** - *soluzione da primi principi dell'eq. Schroedinger per un insieme interagente di nuclei ed elettroni*
 - **dinamica molecolare** - *soluzione delle equazioni del moto di un ensemble di particelle interagenti*
- ✓ Lo sviluppo di **metodi numerici efficienti** (matematica applicata)
 - **algoritmi a bassa complessita'** - *ovvero meglio esser furbi che forti*
 - **calcolo distribuito** - *ovvero $N(>1)$ CPU pensano meglio di una*
- ✓ La disponibilita' di **piattaforme di calcolo ad alte prestazioni**
 - **progetto CyberSar** (vedi: <http://www.cybersar.com>)
 - **collaborazione con CASPUR** (cfr. <http://www.caspur.it>)

(*) Premio Nobel per la Chimica 1998: "for his development of the density-functional theory"

Il metodo computazionale - ... *alcuni equivoci da evitare* ... -

- ✓ Chi fa fisica computazionale della materia **non e' esentato dal sapere** (bene!) **la fisica**
- ✓ Chi usa il computer come strumento di indagine **non e' esentato dal sapere la fisica teorica** e **dal nutrire interesse per il fenomeno** (esperimento).
- ✓ La fisica computazionale della materia **non e' l'analisi di *data-base***
- ✓ Per fare fisica computazionale della materia qui a Cagliari **non e' necessario (*all'inizio*) saper usare il computer**

Linee di ricerca @ Cagliari in fisica computazionale della materia

<http://www.slacs.it>

- **Materiali e processi innovativi per la spintronica ed elettronica alla nanoscala**
- **Proprieta' ottiche e di stato eccitato di materiali**
- **Nuovi materiali superconduttori**
- **Comportamento alla nanoscala di materiali complessi**
- **Meccanismi molecolari in sistemi biologici**
- **Reti complessi e sistemi caotici**

Offerta di *stages* (internati) in fisica computazionale della materia

- Nell'ambito delle attività di ricerca del *Sardinian Laboratory for Computational materials Science (SLACS)* dell'Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN-CNR) è **possibile svolgere l'internato (*stage*) previsto per il terzo anno del ciclo di studi.**
- Chi fosse interessato è invitato a contattare il Docente (vedi prossima pagina) con **sufficiente anticipo rispetto all'inizio del periodo di internato.**
- Si consiglia di iniziare l'internato **solo quando mancano pochi esami** al completamento del proprio piano di studi (indicativamente, non più di un paio...).
- Le attività comprendono tra l'altro:
 - corsi teorico-pratici di **introduzione alle simulazioni atomistiche** (*dinamica molecolare e metodo Monte Carlo*)
 - uso di programmi per il **calcolo da primi principi** della struttura elettronica, delle proprietà ottiche e delle proprietà di stato eccitato
 - **svolgimento di esercizi propedeutici ad argomenti di ricerca**

Chi posso contattare ?

nome.cognome@dsf.unica.it

Fabio BERNARDINI ()*

Giancarlo CAPPELLINI ()*

Francesco CASULA ()*

Matteo CECCARELLI ()*

Luciano COLOMBO ()*

Teresa DE PASCALE ()*

Alessio FILIPPETTI

Vincenzo FIORENTINI

Sandro MASSIDDA ()*

Franco MELONI

Gianni MULA

Paolo RUGGERONE ()*

() Questo Docente non e' incardinato
al corso di Laurea in Fisica*