



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## MULTI-SCALE MODELLING IN MATERIALS DESIGN

### GIACOMO MELANI

Anno accademico

2023/24

CdS

MATERIALS AND  
NANOTECHNOLOGY

Codice

1052I

CFU

6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
MULTI-SCALE MODELLING IN MATERIALS DESIGN	ING-IND/22	LEZIONI	48	SAMUELE GIANNINI GIACOMO MELANI

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Il corso passerà in rassegna gli approcci computazionali fondamentali di modeling dei materiali nel quadro di un paradigma gerarchico multiscala: metodi dei principi primi, dinamica molecolare classica e reattiva, metodi "coarse-grained" e metodi del continuo. Verrà delineata la teoria di base alla base di ciascun approccio con un breve riepilogo dei principali codici (open source) disponibili per ciascun metodo computazionale descritto. Passando in rassegna gli ultimi progressi nella letteratura scientifica, verrà mostrato come la modellizzazione computazionale multiscala stia acquisendo un ruolo fondamentale nel campo della scienza computazionale dei materiali e come venga utilizzata per comprendere e progettare nuove strutture e nuovi materiali seguendo un approccio "bottom" -up" dalla risoluzione su scala atomistica a quella reale. Nella prospettiva di applicare la modellazione multiscala allo studio e alla progettazione di materiali per applicazioni tecnologiche con peculiari proprietà di risposta, l'attenzione del corso sarà posta sulle relazioni struttura/proprietà di base applicate a una varietà di materiali sia inorganici (nano-compositi) e materiali di origine biologica.

##### *Modalità di verifica delle conoscenze*

- I "lavori di gruppo" verranno utilizzati per monitorare i progressi accademici. Gli incarichi potranno essere assegnati a singoli studenti o a gruppi a seconda del numero totale di studenti frequentanti il corso. Agli studenti verrà chiesto di presentare alla classe gli strumenti ed i risultati di un articolo di letteratura nel campo della modellazione computazionale dei materiali. Questo compito avrà un'importanza fondamentale nella valutazione finale degli studenti.
- Verranno programmati laboratori computazionali per verificare le competenze degli studenti nella gestione di codici numerici volti a simulare strutture e relazioni struttura/proprietà di sistemi molecolari e semplici modelli di materiali.

##### *Capacità*

Al termine del corso lo studente:

- sarà in grado di valutare una possibile strategia di modellazione di un materiale rilevante per il proprio lavoro scegliendo l'approccio più adatto in un quadro gerarchico multiscala.
- sarà in grado di comprendere l'attività di modeling descritta in un articolo di letteratura potenzialmente rilevante per il suo lavoro
- sarà in grado di stabilire un dialogo fruttuoso con uno scienziato o un ingegnere che opera nel campo della scienza computazionale dei materiali per stabilire il possibile valore del modeling nello sviluppo di un materiale potenzialmente rilevante nella sua attività.

##### *Modalità di verifica delle capacità*

- Capacità di reperire informazioni utili in letteratura riguardanti lo stato dell'arte in un campo di proprio interesse
- Capacità di individuare la strategia di modeling più idonea di un dato sistema/materiale sulla base delle informazioni raccolte in letteratura e nella collaborazione con un gruppo di ricerca sperimentale

##### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Conoscenze avanzate di fisica, chimica e matematica.

In particolare, sarà richiesta la conoscenza dei principi di base della meccanica quantistica e della termodinamica statica.



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### Indicazioni metodologiche

Lezioni frontali + Lavori di gruppo + Laboratori computazionali.

### Bibliografia e materiale didattico

"Molecular modelling: principles and applications", Andrew R. Leach, Pearson.

"Biomateriomics", Steven W. Cranford, Markus J. Buehler, Springer.

Articoli scientifici distribuiti dal docente durante il corso.

### Modalità d'esame

L'esame consisterà in una prova orale.

*Ultimo aggiornamento 23/10/2023 10:42*