

**Dr. Ana Belen Muñoz-Garcia**

**"Metodi di struttura elettronica per materiali allo stato solido"**

Il corso tratterà i più moderni metodi ab initio utilizzati per la predizione delle proprietà chimico-fisiche dei materiali solidi. Le tematiche saranno nello specifico:

- (1) struttura, proprietà e funzioni dei materiali solidi;
- (2) concetti fondamentali della teoria della struttura elettronica e della teoria del funzionale della densità;
- (3) metodi numerici per descrivere le variabili elettroniche: pseudo-potenziali e set di base;
- (4) approcci periodici (super-celle) per lo studio del bulk dei materiali e delle loro proprietà di superficie.

**"Electronic structure methods for solid state materials"**

This course will cover state-of-the-art methods for predicting materials properties from first-principles. The topics will be:

- (1) solid state materials structure, properties and functions;
- (2) basics of electronic structure theory and density functional theory;
- (3) numerical methods to describe electronic variables: pseudo-potentials and basis sets;
- (4) super-cell methods to study materials bulk and surface properties.

The course will take place in September 2019. If you are interested, please contact prof. Ana B. Muñoz-Garcia ([anabelen.munozgarcia@unina.it](mailto:anabelen.munozgarcia@unina.it)).