



UNIVERSITÀ DI PISA

CHIMICA FISICA MOLECOLARE

CLAUDIO AMOVILLI

Anno accademico 2017/18
CdS FISICA
Codice 244CC
CFU 9

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHIMICA FISICA MOLECOLARE	CHIM/02	LEZIONI	54	CLAUDIO AMOVILLI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Lo studente che completerà con successo il corso sarà in grado di progettare, attraverso le metodologie più adatte, lo studio teorico della struttura elettronica di una molecola o di un aggregato molecolare. Lo studente sarà anche in grado di potere usare alcuni codici di calcolo fra i più usati per questo scopo. Lo studente avrà acquisito una buona conoscenza delle tecniche più avanzate per lo studio della correlazione elettronica nelle molecole.

Modalità di verifica delle conoscenze

Anche se non sono previste esplicite verifiche in itinere, il grado di apprendimento dello studente sarà considerata nelle prove pratiche in laboratorio informatico.

Capacità

Al termine del corso:

lo studente saprà utilizzare alcuni software specifici per la trattazione computazionale di strutture cristalline;

lo studente sarà in grado di discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso.

Modalità di verifica delle capacità

Durante le sessioni di laboratorio saranno svolti piccoli progetti e/o esercizi numerici per comprendere l'utilizzo del software specifico.

Comportamenti

Lo studente potrà acquisire e/o sviluppare sensibilità alle problematiche computazionali nello studio di sistemi molecolari anche complessi.

Modalità di verifica dei comportamenti

Durante le sessioni di laboratorio saranno valutati il grado di accuratezza e precisione delle attività svolte.

Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Conoscenze di base della Meccanica Quantistica, della Elettrodinamica e dell'Algebra Lineare.

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Approssimazione di Born-Oppenheimer. Teoria Hartree-Fock (gusci aperti e gusci chiusi). Basi di funzioni atomiche. Pseudopotenziali. Energia di correlazione. Superfici di energia potenziale. Interazione di configurazioni. MCSCF, CASSCF. Teorie perturbative. Forze intermolecolari. Matrici di densità a N



UNIVERSITÀ DI PISA

corpi. Teoria del funzionale della densità. Funzioni Jastrow-Slater. Metodi quantum Monte Carlo. Principi della teoria della risposta lineare. Simulazioni di spettri IR, Raman e Vis-UV.

Bibliografia e materiale didattico

Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory Attila Szabo, Neil S. Ostlund Dover Books on Chemistry

Density-Functional Theory of Atoms and Molecules Robert G. Parr, Yang Weitao International Series of Monographs on Chemistry

Modalità d'esame

L'esame è composto da una prova orale.

La prova orale consiste in un colloquio tra il candidato e il docente con domande che spazieranno su tutto il corso. La durata media del colloquio è di circa un'ora e di norma la commissione è formata da due docenti. Il colloquio non avrà esito positivo se il candidato mostrerà ripetutamente l'incapacità di mettere in relazione le varie parti del programma e nozioni che deve usare in modo congiunto per rispondere in modo corretto alle domande poste.

Ultimo aggiornamento 20/06/2018 15:57