



UNIVERSITÀ DI PISA

CHIMICA TEORICA

IVO CACELLI

Anno accademico	2018/19
CdS	CHIMICA
Codice	191CC
CFU	6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHIMICA TEORICA	CHIM/02	LEZIONI	48	IVO CACELLI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Lo studente che completa il corso con successo avrà l'abilità di comprendere i concetti fondamentali della Meccanica Quantistica e della Chimica Teorica. Il formalismo della seconda quantizzazione viene ampiamente discusso e usato nello studio dei principali metodi a molti corpi. I metodi della Chimica Teorica più frequentemente usati verranno presentati e analizzati nei dettagli per permetterne una profonda comprensione. In particolare verranno discussi i seguenti argomenti: formalismo della seconda quantizzazione, spin, matrici densità, Hartree-Fock, DFT, MC-SCF, CI, metodi perturbativi, Coupled Cluster. In alcuni casi per studenti interessati possono essere trattati i metodi di risposta lineare dipendente e non dal tempo e le interazioni intermolecolari. Parecchi esercizi ed esempi verranno svolti durante il corso per preparare lo studente all'esame scritto.

Modalità di verifica delle conoscenze

Esame scritto: lo studente deve essere in grado di lavorare e manipolare le principali equazioni discusse nel corso.

Esame orale: lo studente deve avere una profonda comprensione dei concetti inerenti i principali metodi della Chimica Teorica.

Methods:

- Final oral exam
- Final written exam

Indicazioni metodologiche

Lezioni frontali.

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Principi della Meccanica Quantistica, stati e operatori. Seconda quantizzazione, operatori di spin, matrici densità, metodo Hartree-Fock, Density Functional Theory. Estensività dell'energia, Hartree Fock multi configurazionale, interazione di configurazioni, metodi perturbativi, Coupled Cluster.

Bibliografia e materiale didattico

Qualsiasi libro sui principi della Meccanica Quantistica e sui metodi della Chimica Teorica. Gli appunti di tutti gli argomenti del corso sono disponibili sul sito del docente e possono essere scaricati liberamente.

Modalità d'esame

Esame scritto ed esame orale.

Ultimo aggiornamento 27/11/2018 11:02