



# UNIVERSITÀ DI PISA

## CHIMICA TEORICA

---

**FILIPPO LIPPARINI**

Anno accademico 2020/21  
CdS CHIMICA  
Codice 191CC  
CFU 6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHIMICA TEORICA	CHIM/02	LEZIONI	48	FILIPPO LIPPARINI

### Obiettivi di apprendimento

#### *Conoscenze*

Lo studente che completa il corso con successo conoscerà i principali metodi della chimica teorica per il calcolo dell'energia di correlazione, per la descrizione degli stati eccitati e per il calcolo di proprietà molecolari.

Conoscerà inoltre, in alcuni casi semplici, come viene progettata ed implementata la realizzazione numerica di tali tecniche.

#### *Modalità di verifica delle conoscenze*

Esame orale

#### *Capacità*

Lo studente avrà preso dimestichezza con le tecniche di chimica teorica, come l'uso della seconda quantizzazione, le basi del calcolo variazionale e alcuni metodi numerici per la soluzione di problemi lineari. Avrà inoltre preso contatto con alcuni fondamenti di un codice di calcolo elettronico e sarà in grado, dati gli integrali molecolari, di scrivere un semplice programma di calcolo.

#### *Modalità di verifica delle capacità*

Realizzazione di un progetto computazionale

#### *Comportamenti*

Lo studente imparerà a pensare ai metodi di calcolo non solo come strumento astratto e teorico, ma anche come strumento numerico, ponendosi il problema della loro realizzazione numerica, della loro implementazione, del loro costo computazionale.

#### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Esame orale e progetto computazionale

#### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Conoscenza dei principi della meccanica quantistica e dei fondamenti della chimica quantistica, ad esempio, tramite la frequenza del corso di Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare del primo semestre.

Buona conoscenza e praticità con l'analisi matematica e l'algebra lineare. Qualche conoscenza di elettrodinamica.

Conoscere i rudimenti della programmazione in Fortran è fortemente consigliato, ma non obbligatorio.

#### *Corequisiti*

Si consiglia fortemente la frequenza in contemporanea del corso di Metodi Matematici per la Chimica Fisica (proff. Persico e Granucci)

#### *Prerequisiti per studi successivi*

La frequenza del corso di chimica teorica è generalmente consigliata per gli insegnamenti specialistici del settore.

#### *Indicazioni metodologiche*

Lezioni frontali, laboratorio computazionale



## UNIVERSITÀ DI PISA

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Parte di teoria:

=====

Seconda quantizzazione: stati, operatori, matrici densità.

Il metodo di Hartree Fock in seconda quantizzazione e con il formalismo delle matrici densità.

Interazione di configurazioni e metodi MCSCF. Cenni all'implementazione di un metodo Full CI.

Algoritmi di ottimizzazione al primo e al secondo ordine e applicazione di quest'ultimi al metodo di Hartree-Fock e CASSCF.

Metodo Coupled Cluster. Cenni alle tecniche diagrammatiche: le equazioni CCD.

Introduzione alla teoria delle derivate analitiche a livello HF. Cenni al calcolo delle derivate per metodi post-HF. Metodo dello "Z-Vector".

Proprietà molecolari: introduzione alla teoria della risposta statica e della risposta lineare dinamica.

A richiesta degli studenti, alcuni argomenti potranno essere approfonditi maggiormente, omissi o aggiunti.

Parte pratica:

=====

Rudimenti di programmazione in Fortran. Integrali molecolari e il loro stoccaggio su disco. Implementazione delle equazioni di Roothan.

Convergenza del metodo SCF e tecniche di accelerazione della convergenza: Damping e DIIS. Alcune considerazioni

sull'efficienza computazionale, uso di librerie ottimizzate.

### Bibliografia e materiale didattico

Qualsiasi libro sui principi della Meccanica Quantistica e sui metodi della Chimica Teorica, ad esempio

Helgaker, Olsen, Jorgensen: "Molecular Electronic-Structure Theory", Wiley

### Indicazioni per non frequentanti

La frequenza è fortemente consigliata. Gli studenti non frequentanti sono invitati a contattare il docente.

### Modalità d'esame

Esame orale.

Prima dell'esame orale, verrà assegnato un progetto computazionale da eseguire, a scelta, da soli o in gruppo, che prevederà l'implementazione rudimentale di una delle tecniche viste durante il corso a partire da quanto fatto durante il laboratorio. Lo svolgimento di tale progetto è obbligatorio.

### Stage e tirocini

no

Ultimo aggiornamento 27/08/2020 07:51