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

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, omessi 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: "Molecolar 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