



UNIVERSITÀ DI PISA

METODI MATEMATICI DELLA CHIMICA FISICA

MAURIZIO PERSICO

Anno accademico 2021/22
CdS CHIMICA
Codice 202CC
CFU 6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
METODI MATEMATICI DELLA CHIMICA FISICA	CHIM/02, CHIM/02	LEZIONI	70	GIOVANNI GRANUCCI MAURIZIO PERSICO

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Al termine del corso lo studente avrà acquisito conoscenze matematiche (spazi vettoriali e operatori, trasformate di Fourier, teoria delle distribuzioni), sui fondamenti della meccanica quantistica, su metodi di calcolo numerico e su linguaggi di programmazione.

Modalità di verifica delle conoscenze

L'accertamento delle conoscenze acquisite avverrà tramite l'esame finale.

Capacità

Al termine del corso lo studente sarà in grado di

- approfondire autonomamente gli argomenti del corso;
 - utilizzare le conoscenze matematiche acquisite per la comprensione di argomentazioni teoriche su soggetti chimico fisici;
 - utilizzare metodi di calcolo numerico in applicazioni a problemi chimico-fisici e in particolare in chimica quantistica;
 - programmare semplici algoritmi di calcolo.
-

Modalità di verifica delle capacità

L'accertamento delle capacità acquisite avverrà tramite l'esame finale.

Comportamenti

Lo studente si avvicinerà con maggior confidenza a spiegazioni o problemi che richiedono determinate conoscenze matematiche. Inoltre potrà sfruttare correttamente il calcolo numerico, con la consapevolezza dei suoi limiti e possibili insuccessi.

Modalità di verifica dei comportamenti

Durante le lezioni gli studenti sono spesso chiamati alla lavagna, non per verificare le loro conoscenze, ma per aiutarli ad affrontare le difficoltà che sorgono nel passaggio dalla teoria all'applicazione a semplici problemi matematici. Le esercitazioni al calcolatore sono un altro momento utile per verificare l'atteggiamento dello studente verso i metodi di calcolo e la programmazione, con lo scopo di indirizzarlo verso i comportamenti più corretti ed efficaci.

Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Conoscenze di base di matematica (analisi) e meccanica quantistica.



UNIVERSITÀ DI PISA

Indicazioni metodologiche

L'insegnamento consiste di lezioni alla lavagna e in esercitazioni di programmazione al calcolatore. Durante le lezioni, gli studenti sono spesso chiamati alla lavagna. Sono fornite note delle lezioni dei docenti che coprono solo alcuni argomenti specifici.

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Sp Spazi vettoriali: prodotto scalare e notazione di Dirac, operatori lineari, operatore inverso, operatore aggiunto, operatori hermitiani ed unitari, proiettori, indipendenza lineare, basi in spazi a dimensione finita, rappresentazione matriciale, determinanti, sistemi di equazioni lineari, matrice inversa, cambiamenti di base, autovalori ed autovettori, operatori hermitiani che commutano.

Post Postulati, teoremi e metodi della meccanica quantistica: identificazione degli stati quantici, indeterminazione, teoremi di Ehrenfest, del viriale e di Hellmann-Feynman, hamiltoniani efficaci.

Tr Trasformata di Fourier, funzioni generalizzate, funzione delta di Dirac con esempi di applicazione: convoluzione, equazioni di diffusione, normalizzazione di autostati con spettro continuo, evoluzione di pacchetti d'onda.

C Calcolo numerico: ricerca degli zeri di una funzione, derivazione e quadratura numerica, inversione e diagonalizzazione di matrici, Discrete Fourier Transform e Fast FT, integrazione di equazioni differenziali ordinarie.

Bibliografia e materiale didattico

G. B. Arfken, H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*.

P. Dennery, A. Krzywicki, *Mathematics for Physicists*.

V. Comincioli, *Analisi Numerica*.

Note delle lezioni dei docenti su alcuni argomenti specifici (in italiano).

Modalità d'esame

L'esame consiste in una breve prova scritta (uno o due esercizi) seguita da una prova orale. Tende ad accertare le capacità di applicare concetti e metodi matematici piuttosto che la pura conoscenza di dimostrazioni o procedure.
