



## 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.

---