UNIVERSITÀ DI PISA

FONDAMENTI MOLECOLARI DELLE SPETTROSCOPIE

FILIPPO LIPPARINI

Academic year	2022/23
Course	CHIMICA
Code	337CC
Credits	3

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
FONDAMENTI MOLECOLARI DELLE SPETTROSCOPIE	CHIM/02	LEZIONI	24	FILIPPO LIPPARINI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze
Lo studente che completa il corso con successo conoscerà

- I fondamenti teorici dell'interazione fra la materia e un campo elettromagnetico
- I fondamenti della teoria delle derivate analitiche e della teoria della risposta lineare
- La definizione come proprietà molecolare delle quantità misurate sperimentalmente in alcune spettroscopie
- Alcune tecniche di calcolo per tali proprietà

Modalità di verifica delle conoscenze
Esame orale

Capacità
Al termine del corso, lo studente sarà in grado di interpretare le proprietà spettroscopiche da un punto di vista teorico in termini di processi e proprietà molecolari

Modalità di verifica delle capacità
Esame orale

Comportamenti
Lo studente imparerà come utilizzare strategie computazionali per predire o interpretare misure spettroscopiche sperimentali

Modalità di verifica dei comportamenti
Esame orale

Prerequisiti (conoscenze iniziali)
Si richiede che lo studente abbia una buona conoscenza dei fondamenti della meccanica quantistica, dell'elettrodinamica classica e degli elementi fondamentali della chimica quantistica (metodo di Hartree-Fock)

Corequisiti
E' fortemente consigliato aver già seguito il corso di Chimica Teorica

Indicazioni metodologiche
Il corso consisterà principalmente in lezioni frontali tenute alla lavagna.
Gli argomenti da approfondire verrano concordati con gli studenti: a seconda degli argomenti, alcune lezioni potranno essere sostituite da seminari tenuti da esperti dell'argomento

UNIVERSITÀ DI PISA

Programma (contenuti dell'insegnamento)

L’obiettivo del corso è quello di fornire gli strumenti teorici per definire e calcolare gli osservabili spettroscopici come proprietà di risposta molecolari a campi elettromagnetici statici e dinamici. Data la vastità dell’argomento, non tutte le spettroscopie potranno essere coperte. All’inizio del corso verrà concordata con gli studenti una lista di argomenti da approfondire. Gli argomenti trattati nel corso saranno

- interazione luce-materia: richiami di elettrodinamica classica, Hamiltoniano del campo elettromagnetico e cenni alla sua quantizzazione. Hamiltoniano di interazione.
- Proprietà di risposta a campi statici: teoria delle derivate analitiche, equazioni Coupled-Perturbed Hartree-Fock, derivate prime e seconde analitiche dell’energia SCF.
- Proprietà di risposta a campi oscillanti: funzione di risposta molecolare, teoria della risposta lineare per metodi SCF ed equazioni time-dependent SCF.

Per ogni argomento saranno approfonditi aspetti e forniti esempi coerentemente con le richieste degli studenti.

Bibliografia e materiale didattico

Craig, Thirunamachandran: Molecular Quantum Electrodynamics (Dover)
Norman, Ruud, Saue: Principles and Practices of Molecular Properties

Il docente è disponibile a fornire ulteriore bibliografia specifica in dipendenza degli argomenti approfonditi

Modalità d'esame

Esame orale
L'esame consiste in un colloquio sugli argomenti trattati nel corso.

Ultimo aggiornamento 29/07/2022 10:37