



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## FOTOCHIMICA: TEORIA E METODI DI SIMULAZIONE

**GIOVANNI GRANUCCI**

Anno accademico 2023/24  
CdS CHIMICA  
Codice 381CC  
CFU 6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
FOTOCHIMICA: TEORIA E METODI DI SIMULAZIONE	CHIM/01	LEZIONI	48	GIOVANNI GRANUCCI

Obiettivi di apprendimento

### *Conoscenze*

Al termine del corso lo studente avrà acquisito conoscenze teoriche di base sui processi di eccitazione e decadimento di stati elettronici molecolari e sulle tecniche impiegate per la loro simulazione computazionale.

### *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 acquisite per la comprensione di argomentazioni teoriche concernenti problemi di fotochimica;
- applicare i metodi e i modelli studiati a problemi concreti.

### *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 una conoscenza di base dei principi teorici della fotochimica.

### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Durante l'esame finale.

### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Conoscenze di base di meccanica quantistica e algebra lineare.

### *Indicazioni metodologiche*

L'insegnamento consiste di lezioni alla lavagna. Sono fornite note delle lezioni.

### *Programma (contenuti dell'insegnamento)*



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

L'hamiltoniano molecolare: separazione dei moti. Approssimazione di Born-Oppenheimer, stati adiabatici e diabatici, accoppiamenti nonadiabatici.

Evoluzione temporale: l'equazione di Schroedinger dipendente dal tempo. Moto di pacchetti d'onda. Teoremi di Ehrenfest, del viriale e di Hellmann-Feynman. Teoria perturbativa dipendente dal tempo, regola d'oro di Fermi, interazione con un impulso di radiazione di durata finita. Decadimento di stati eccitati in molecole poliatomiche: modello di Bixon-Jortner.

Incroci evitati: modello di Landau-Zener. Intersezioni coniche: classificazione, esempi, fase di Berry, degenerazione di Kramers, spazio di rimozione della degenerazione, teorema di Jahn-Teller.

Processi di trasferimento di energia e di carica. Modello eccitonico.

Metodi per la simulazione della dinamica molecolare nonadiabatica. Metodi quantistici e misti classici-quantistici.

### Bibliografia e materiale didattico

P. W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics*.

D.J. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics: A Time Dependent Perspective*.

M. Persico, G. Granucci, *Photochemistry: a modern theoretical perspective*.

Note delle lezioni del docente (in italiano).

### Modalità d'esame

L'esame consiste in una prova orale. Tende ad accertare la capacità da parte dello studente di applicare le conoscenze teoriche acquisite allo studio di semplici problemi concreti.

*Ultimo aggiornamento 31/07/2023 16:12*