



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