



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### CHIMICA FISICA MOLECOLARE

**CLAUDIO AMOVILLI**

Anno accademico 2022/23  
CdS FISICA  
Codice 244CC  
CFU 9

| Moduli                       | Settore/i | Tipo    | Ore | Docente/i        |
|------------------------------|-----------|---------|-----|------------------|
| CHIMICA FISICA<br>MOLECOLARE | CHIM/02   | LEZIONI | 54  | CLAUDIO AMOVILLI |

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Lo studente che completerà con successo il corso sarà in grado di progettare, attraverso le metodologie più adatte, lo studio teorico della struttura elettronica di una molecola o di un aggregato molecolare. Lo studente sarà anche in grado di potere usare alcuni codici di calcolo fra i più usati per questo scopo. Lo studente avrà acquisito una buona conoscenza delle tecniche più avanzate per lo studio della correlazione elettronica nelle molecole.

##### *Modalità di verifica delle conoscenze*

Anche se non sono previste esplicite verifiche in itinere, il grado di apprendimento dello studente sarà considerata nelle prove pratiche in laboratorio informatico.

##### *Capacità*

Al termine del corso:

lo studente saprà utilizzare alcuni software specifici per la trattazione computazionale di strutture cristalline;

lo studente sarà in grado di discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso.

##### *Modalità di verifica delle capacità*

Durante le sessioni di laboratorio saranno svolti piccoli progetti e/o esercizi numerici per comprendere l'utilizzo del software specifico.

##### *Comportamenti*

Lo studente potrà acquisire e/o sviluppare sensibilità alle problematiche computazionali nello studio di sistemi molecolari anche complessi.

##### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Durante le sessioni di laboratorio saranno valutati il grado di accuratezza e precisione delle attività svolte.

##### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Conoscenze di base della Meccanica Quantistica, della Elettrodinamica e dell'Algebra Lineare.

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

Approssimazione di Born-Oppenheimer. Teoria Hartree-Fock (gusci aperti e gusci chiusi). Basi di funzioni atomiche. Pseudopotenziali. Energia di correlazione. Superfici di energia potenziale. Interazione di configurazioni. MCSCF. CASSCF. Teorie perturbative. Forze intermolecolari. Matrici di densità a N



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

corpi. Teoria del funzionale della densità. Funzioni Jastrow-Slater. Metodi quantum Monte Carlo. Principi della teoria della risposta lineare. Simulazioni di spettri IR, Raman e Vis-UV.

### Bibliografia e materiale didattico

Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory Attila Szabo, Neil S. Ostlund Dover Books on Chemistry

Density-Functional Theory of Atoms and Molecules Robert G. Parr, Yang Weitao International Series of Monographs on Chemistry

### Modalità d'esame

L'esame è composto da una prova orale.

La prova orale consiste in un colloquio tra il candidato e il docente con domande che spazieranno su tutto il corso. La durata media del colloquio è di circa un'ora e di norma la commissione è formata da due docenti.

Il colloquio non avrà esito positivo se il candidato mostrerà ripetutamente l'incapacità di mettere in relazione le varie parti del programma e nozioni che deve usare in modo congiunto per rispondere in modo corretto alle domande poste.

Ultimo aggiornamento 14/09/2022 12:48