

Programma per il corso di Chimica Fisica II, modulo Informatica.

Fulvio Ciriaco

- note sulla compatibilità tra sistemi operativi e sullo standard POSIX.
- note sul file system e sulla comunicazione fra programmi
- il potenziale interatomico, natura fisica e modelli
 - il potenziale armonico
 - il potenziale di Morse
 - il potenziale Lennard-Jones
- la trasformata di Fourier
 - definizione e proprietà
 - la trasformata discreta
 - funzioni delta continue e discrete
 - relazione tra trasformata diretta ed inversa
 - relazione tra la dispersione di una distribuzione e la dispersione della sua trasformata, considerazioni su:
 - * relazioni fra grandezze coniugate in meccanica quantistica e FT: posizione e momento, principio di indeterminazione di Heisenberg
 - * allargamento di banda nell'FTIR, uso e funzionamento dei filtri
 - fast fourier transform: funzionamento e vantaggi in termini di efficienza e stabilità
- soluzioni del moto della particella in un potenziale a gradini:
 - caso limite del confinamento completo (potenziale infinito ai bordi),
 - natura delle soluzioni per $E < V$, effetto tunnel
 - potenziale a gradini come approssimazione di un potenziale generico

- soluzione numerica di problemi quantistici monodimensionali
 - rappresentazione matriciale dell'equazione di Schrödinger
 - teoria perturbativa
 - il moto nel potenziale anarmonico: calcolo numerico delle soluzioni e dei valori di aspettazione per gli operatori più interessanti per la spettroscopia IR: x, x^2 e $1/x^2$