

# 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  $1/x^2$