

METODI TEORICI PER LO STUDIO DELLA STRUTTURA ELETTRONICA DELLE MOLECOLE

La corretta descrizione della struttura elettronica delle molecole rimane al giorno d'oggi una sfida per la chimica teorica, in particolare per i sistemi di maggiore interesse chimico, quali le molecole durante la rottura e la formazione di legami, i radicali, i complessi dei metalli di transizione e gli stati elettronicamente eccitati. La natura complessa di questi sistemi richiede strumenti teorici molto innovativi per poter affrontare con successo il loro studio. Il gruppo di chimica teorica ha sviluppato nuovi metodi in grado di coniugare la qualità dei risultati e l'efficienza computazionale.

OBIETTIVI

La ricerca ha come obiettivo principale lo sviluppo di nuovi metodi teorici per la descrizione dei sistemi molecolari in cui la struttura elettronica non può essere descritta da una singola configurazione elettronica, la loro implementazione in codici di calcolo efficienti e la loro applicazione allo studio di problemi chimici complessi. Un grande sforzo è stato dedicato allo sviluppo di metodi detti "Multireference perturbation theory". Questi metodi verranno applicati alla descrizione degli stati elettronicamente eccitati di molecole di interesse fotochimico e alla descrizione dell'accoppiamento magnetico in complessi polinucleari di metalli di transizione. Il gruppo è inoltre attivo nello sviluppo di metodi in grado di descrivere la struttura elettronica delle molecole in termini chimici (locali).

STRUMENTAZIONI E METODI

Metodi: sviluppo formale di teorie nel campo della meccanica quantistica, implementazione in codici di calcolo mediante il linguaggio di programmazione FORTRAN, calcolo ad alte prestazioni su cluster di computer.

Strumenti: cluster di computer quad-core adatti al calcolo massicciamente parallelo in ambiente Linux.

DISCIPLINE COINVOLTE

Chimica Fisica, Chimica teorica, Chimica Computazionale

GRUPPO DI LAVORO

Celestino Angeli