

Progetti di tesi

Emanuele Coccia

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche

Simulazione di spettroscopie ultraveloci risolte nel tempo: il ruolo della coerenza quantistica in molecole, clusters metallici e nanostrutture

Collaborazione con l'Università di Padova

Simulazione di spettroscopie ultraveloci risolte nel tempo: il ruolo della coerenza quantistica in molecole, clusters metallici e nanostrutture

Collaborazione con l'Università di Padova

- 1 Studio della coerenza vibrazionale in molecole come N-methylacetamide
- 2 Studio della coerenza vibronica in fluorofori complessi
- 3 Studio della dinamica di elettroni "caldi" in clusters metallici (Rh_n), interagenti con frammenti molecolari

Simulazione di risposte ottiche **non-lineari** in campi elettrici intensi: spettroscopia **high-harmonic generation (HHG)**

Collaborazione con l'Università Sorbona di Parigi e di Nova Gorica

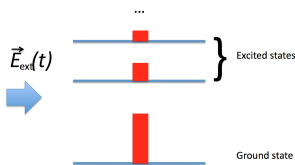
Simulazione di risposte ottiche **non-lineari** in campi elettrici intensi: spettroscopia **high-harmonic generation** (HHG)

Collaborazione con l'Università Sorbona di Parigi e di Nova Gorica

- 1 Studio di HHG su molecole organiche come uracile e timina
- 2 Implementazione e studio di effetti vibronici su spettri HHG di piccole molecole (come N_2)
- 3 Studio dell'effetto di due impulsi sullo spettro HHG di gas nobili

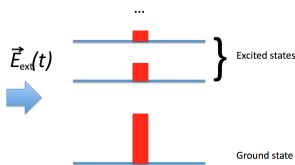
- Atoms/molecules via quantum chemistry
- Solve Schrödinger equation with electronic/vibronic \hat{H}_0
- Set of $|\phi_q\rangle$ wavefunctions of \hat{H}_0 with energy E_q

- Atoms/molecules via **quantum chemistry**
- Solve Schrödinger equation with electronic/vibronic \hat{H}_0
- Set of $|\phi_q\rangle$ wavefunctions of \hat{H}_0 with energy E_q
- Add an external electric field $\vec{E}_{ext}(t)$: **interaction** Hamiltonian $-\vec{\hat{\mu}} \cdot \vec{E}_{ext}(t)$ ($\vec{\hat{\mu}}$ dipole)



- Propagate time-dependent Schrödinger equation ("standard" and stochastic)
- Excited states populated by the **interaction** term
- Time evolution of the **atomic/molecular** $\vec{\hat{\mu}}$

- Atoms/molecules via **quantum chemistry**
- Solve Schrödinger equation with electronic/vibronic \hat{H}_0
- Set of $|\phi_q\rangle$ wavefunctions of \hat{H}_0 with energy E_q
- Add an external electric field $\vec{E}_{ext}(t)$: **interaction** Hamiltonian $-\vec{\hat{\mu}} \cdot \vec{E}_{ext}(t)$ ($\vec{\hat{\mu}}$ dipole)



- Propagate time-dependent Schrödinger equation ("standard" and stochastic)
- Excited states populated by the **interaction** term
- Time evolution of the **atomic/molecular** $\vec{\hat{\mu}}$
- **Time-resolved spectroscopies**

Applicazione di metodi **quantum Monte Carlo** al calcolo delle proprietà di stato elettronico fondamentale ed eccitato di molecole

Collaborazione con l'Università Sorbona di Parigi

Applicazione di metodi **quantum Monte Carlo** al calcolo delle proprietà di stato elettronico fondamentale ed eccitato di molecole

Collaborazione con l'Università Sorbona di Parigi

- 1 Calcolo di energie elettroniche di stato eccitato per un set di molecole organiche
- 2 Calcolo delle energie di legame di phenalenyl monomers and dimers