

Tecniche di programmazione in chimica computazionale

Introduction

Emanuele Coccia

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche

- ecoccia@units.it
- edificio C11, quarto piano, stanza 453/454
- appuntamento: giovedì 15h-17h

- ecoccia@units.it
- edificio C11, quarto piano, stanza 453/454
- appuntamento: giovedì 15h-17h
- Registratevi su Moodle

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)

Struttura del corso

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni
 - Cicli, scelte e decisioni

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni
 - Cicli, scelte e decisioni
 - Subroutines e funzioni

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni
 - Cicli, scelte e decisioni
 - Subroutines e funzioni
 - Variabili globali e l'utility make

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni
 - Cicli, scelte e decisioni
 - Subroutines e funzioni
 - Variabili globali e l'utility make
 - Tipi derivati e puntatori

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni
 - Cicli, scelte e decisioni
 - Subroutines e funzioni
 - Variabili globali e l'utility make
 - Tipi derivati e puntatori
 - Formato I/O e files

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni
 - Cicli, scelte e decisioni
 - Subroutines e funzioni
 - Variabili globali e l'utility make
 - Tipi derivati e puntatori
 - Formato I/O e files
 - Ottimizzazione e parallelizzazione di codici (cenni)

- Introduzione pratica al sistema operativo [Linux](#)
- Elementi di programmazione in [Fortran90](#)
 - Direttive per il compilatore
 - Tipi di variabili
 - Operatori ed espressioni
 - Cicli, scelte e decisioni
 - Subroutines e funzioni
 - Variabili globali e l'utility make
 - Tipi derivati e puntatori
 - Formato I/O e files
 - Ottimizzazione e parallelizzazione di codici (cenni)
- Esempi legati alla chimica computazionale (quantistica)

Come e dove studiare

- [Appunti](#) delle lezioni

Come e dove studiare

- [Appunti](#) delle lezioni
- [Open books](#) e [tutorial](#) in rete

Come e dove studiare

- [Appunti](#) delle lezioni
- [Open books](#) e [tutorial](#) in rete
- [Libri](#):
 - Fortran 90/95 for Scientists and Engineers, S. J. Chapman, McGraw-Hill College
 - Introduction to Programming with Fortran, I. Chivers & J. Sleightholme, Springer-Nature New York Inc

- **Prova pratica:** scrivere un codice Fortran, compilarlo e produrre i risultati richiesti
- **Prova orale:** discussione della prova pratica