

# Tecniche di programmazione in chimica computazionale

## Introduction

Emanuele Coccia

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche

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

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

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

- 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)

- [Appunti](#) delle lezioni



# Come e dove studiare

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

- [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 (1h)
- **Prova orale:** discussione della prova pratica e domande sul programma