

- 1) Quali sono le caratteristiche principali di un metodo continuo di solvatazione?
- 2) Che cosa si intende per metodo ibrido QM/MM?
- 3) Che cosa si intende per metodo DFT?
- 4) Scrivere l'equazione Hartree-Fock per un metodo QM/MM nella formulazione "electrostatic embedding"
- 5) Si elenchino vantaggi e svantaggi dei metodi CAS-SCF e TDDFT per lo studio degli stati elettronici eccitati di sistemi molecolari.
- 6) Proporre una strategia di calcolo per ottenere le proprietà molecolari di una molecola che presenta diverse conformazioni.
- 7) Schematizzare i passaggi di una simulazione di dinamica molecolare classica.
- 8) Si disegni un diagramma di Jablonski
- 9) Che cosa determina la forma di un segnale di assorbimento elettronico per un sistema molecolare in fase gassosa e in soluzione?
- 10) Che cosa si intende per solvatazione di non equilibrio?