

INSEGNAMENTO SUBJECT	Introduzione alle tecniche di modellizzazione termodinamica di sistemi geopetrologici e geochimici: teoria ed applicazioni <i>Introduction to thermodynamic modelling techniques of geopetrological and geochemical systems: theory and applications</i>
PREREQUISITI PREREQUISITES	Conoscenze fondamentali di chimica fisica e di geologia <i>Basic knowledge of physical-chemistry and geology.</i>
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI LEARNING OUTCOMES	CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRESIONE Conoscenza dei principi fondamentali che governano i processi chimico fisici di interesse geopetrologico; conoscenza di alcuni software di ampia diffusione dedicati alla modellistica molecolare. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRESIONE Capacità di utilizzare un programma di simulazione in questioni di interesse geopetrologico. AUTONOMIA DI GIUDIZIO Capacità di scegliere il software adatto e la strategia di calcolo appropriata a seconda del problema. ABILITÀ COMUNICATIVE Lo studente dovrà essere in grado di divulgare il suo bagaglio di conoscenze e competenze relativo a simulazioni strutturali e termodinamiche di sistemi mineralogico-petrografici. CAPACITÀ D'APPRENDIMENTO Capacità di aggiornamento e approfondimento degli argomenti analizzati durante le lezioni. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING <i>Knowledge of the fundamental principles governing chemical and physical processes of interest in geopetrologic questions; knowledge of some widely used software dedicated to molecular modelling.</i> APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING <i>Ability to use a simulation program in matters of geopetrological interest.</i> MAKING JUDGMENTS <i>Ability to choose the appropriate software and computing strategy depending on the problem.</i> COMMUNICATION SKILLS <i>The student should be able to disseminate his knowledge and skills related to structural and thermodynamic simulations of mineralogical-petrographic systems.</i> LEARNING SKILLS <i>Ability to update and deepen the topics analyzed during lessons.</i>
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO ASSESSMENT METHODS	Lo studente al termine del corso presenterà una relazione su quanto studiato, ed eventualmente un esempio di calcolo. <i>The student at the end of the course will present a report on what has been studied, and possibly an example of calculation.</i>
OBIETTIVI FORMATIVI EDUCATIONAL OBJECTIVES	Obiettivo dell'insegnamento è fornire allo studente gli strumenti utili alla scelta di una strategia computazionale utile alla analisi o alla risoluzione di una questione scientifica in ambito geo-petrologico e geochimico. Tale processo implica da un lato la capacità di razionalizzare a livello teorico il problema e, dall'altro, di calare nella pratica computazionale il problema stesso. <i>The objective of the course is to provide the student with useful tools for choosing a computational strategy addressed to the analysis or to the solution of a scientific problem in the geopetrological and geochemical field. This process implies, on the one hand, the ability to rationalize the problem at a theoretical level and, on the other, to reduce the problem itself in the computational practice.</i>
PROGRAMMA SYLLABUS	Il corso prevede un'introduzione alle tecniche computazionali di modellizzazione termodinamica di sistemi geopetrologici e geochimici. La struttura del corso consiste in una prima parte introduttiva generale alla termodinamica necessaria a questo tipo di modellizzazioni, una seconda parte in cui si illustrano alcune tecniche computazionali, ovvero alcuni programmi dedicati di grande diffusione, ed una terza parte fatta di esempi pratici al computer.

ARGOMENTI

Parte prima (5 ore) – Richiami di termodinamica e di semplici concetti quantomeccanici.

Parte seconda (5 ore) – Excursus su alcuni software di modellizzazione quantomeccanica di minerali (come ad esempio CRYSTAL, GULP, CP2K) e di modellizzazione termodinamica di sistemi di interesse geopetrologico (come Burnman) .

Parte terza – esempi pratici (5 ore):

Calcolo di equazioni di stato, modellizzazione di reazioni mineralogiche di interesse geopetrologico, modellizzazione di frazionamenti isotopici.

The course includes an introduction to the computational techniques of thermodynamic modelling of geopetrological and geo-chemical systems. The structure of the course consists of a first general introduction to thermodynamics necessary for this type of modelling, a second part which illustrates some computational techniques, or some dedicated programs of great diffusion, and a third part made of practical examples to the computer.

ARGUMENTS

Part 1 (5 hours) - Thermodynamics and simple quantum mechanical concepts:

Part 2 (5 hours) - An overview of some quantum mechanical mineral modelling software (such as CRYSTAL, GULP, CP2K) and thermodynamic modelling of geotrological interest systems (such as Burnman)

Part 3 - practical examples (5 hours): Calculation of equations of state, modelling of mineralogical reactions of geopetrological interest, as well as modelling of isotopic fractionations.