

**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

---

**Programma di insegnamento per l'a.a. 2015-2016**

Insegnamento: Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare

Docente: Camilla MINICHINO

Corso di studio: Scienze Chimiche (Magistrale)

Anno di corso: II

Periodo didattico: I Semestre

Tipologia: A Scelta

Totale crediti: 6

Tipo esame: Orale, con la possibilità di discussione di un breve elaborato relativo ad un progetto di calcolo o ad un approfondimento di un argomento specifico (concordati con il docente).

Valutazione: Voto

Lingua di insegnamento: Italiano

Frequenza  Consigliata  \_\_\_\_\_

Inizio corso : 5 Ottobre 2015    Fine corso: Gennaio 2016

**APPELLI DI ESAME**

Mese	Anno	Appello previsto
Febbraio	2016	X
Marzo	2016	X
Aprile	2016	
Maggio	2016	X
Giugno	2016	X
Luglio	2016	X
Settembre	2016	X
Ottobre	2016	X
Novembre	2016	X
Dicembre	2016	X
Gennaio	2017	X

**COMMISSIONE ESAME:**

Presidente: Camilla MINICHINO

Componente: Sergio BRUTTI

Componente: Luciano D'ALESSIO

Componente: Angela DE BONIS

Componente: Roberto TEGHIL

# UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA

## DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

### ORARIO RICEVIMENTO STUDENTI

<i>GIORNO</i>	<i>DALLE ORE</i>	<i>ALLE ORE</i>	<i>PRESSO</i>
LUNEDI'	13	15	Studio Docente
MARTEDI'	13	15	Studio Docente
MERCOLEDI'			
GIOVEDI'			
VENERDI'			

ricevimento in altri orari/giorni da concordare con il docente via e-mail (camilla.minichino@unibas.it)

### Eventuali prerequisiti:

Conoscenza delle discipline di base chimico-fisiche.

### Obiettivi formativi:

Il corso ha lo scopo di i) fornire una panoramica dei metodi di chimica teorica con particolare riferimento agli aspetti della determinazione della struttura elettronica delle molecole ii) mostrare come questi metodi possano essere utilizzati per modellare sistemi chimici e per calcolare proprietà molecolari. Al termine del corso lo studente i) conosce i fondamenti teorici, le potenzialità e limitazioni dei metodi di chimica quantistica; ii) sa impostare e elaborare un semplice progetto di chimica computazionale; iii) • comprende il linguaggio della modellistica molecolare (acronimi, abbreviazioni); iv) è in grado di affrontare la vasta letteratura esistente sull'argomento.

### Programma del corso

#### **Separazione dei moti in meccanica quantistica.**

Separazione tra elettroni e nuclei: approssimazione adiabatica e di Born-Oppenheimer, confronto tra approccio adiabatico, diabatico e non-adiabatico. La regola del non incrocio e le intersezioni coniche. Separazione tra moti nucleari esterni ed interni. Sistemi di coordinate e descrizione dei moti vibrazionali.

#### **Superfici di energia potenziale e loro esplorazione.**

Metodi per la ricerca di estremi locali sulle superfici di energia potenziale. Cammini di reazione. Campi di forze molecolari. Breve panoramica sulle simulazioni di dinamica molecolare classica e Monte Carlo e sul loro uso nei problemi di ottimizzazione globale.

#### **Metodi teorici per lo studio della struttura elettronica delle molecole.**

Aspetti generali del modello degli orbitali molecolari. Metodo HF. Insiemi di base. Correlazione elettronica. Proprietà molecolari, descrittori della funzione d'onda elettronica e della distribuzione di carica. Teoria del funzionale della densità. Metodi per la descrizione di stati elettronici eccitati. Solvatazione e modelli del continuo.

#### **Aspetti computazionali.**

Presentazione di alcuni programmi di calcolo di struttura elettronica, preparazione dell'input e lettura dell'output, esempi di calcolo, analisi delle principali informazioni, strategie per risolvere problemi connessi alla ottimizzazione delle geometrie molecolari e alla convergenza dei calcoli SCF, visualizzazione dei risultati mediante programmi di grafica molecolare.

**Argomenti supplementari che potrebbero essere trattati.**



Alcuni approcci teorici per lo studio di processi chimici elementari, effetto di modulazione dei moti nucleari su osservabili molecolari, teoria del legame di valenza, chimica quantistica relativistica, descrizione di sistemi in fase condensata nell'ambito della teoria DFT, modelli ibridi di meccanica molecolare / meccanica quantistica, metodo Carr-Parrinello.

### Metodi didattici

Lezioni frontali

### Modalità di verifica dell'apprendimento

Esame orale con la possibilità di discussione di un breve elaborato relativo ad un progetto di calcolo o ad un approfondimento di un argomento specifico (concordati con il docente), discussione di articoli scientifici e di problemi assegnati.

### Testi di Riferimento

Appunti e presentazioni del corso, articoli e capitoli libri su argomenti specifici.

L. Piela *Ideas of Quantum Chemistry, II Edition*, Elsevier, 2013.

A. Szabo and N.S. Ostlund *Modern Quantum Chemistry – Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover, 1996.

C. J. Cramer *Essentials of Computational Chemistry Theories and Models. II Edition*, Wiley, 2004.

F. Jensen *Introduction To Computational Chemistry, II Edition*, Wiley, 2007.

Ulteriori riferimenti:

R. Mc Weeny *Methods of Molecular Quantum Mechanics, II Edition*, Academic Press, 1992.

W. Koch and M.C. Holthausen *A Chemist's Guide to Density Functional Theory. II Edition*, Wiley-VCH, 2001.

D. C. Young *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*, Wiley, 2001.

A. Leach *Molecular Modelling: Principles and Application, II Edition*, Prentice Hall, 2001.

J.B. Foresman and A. Frisch *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian. II Edition*, Gaussian Inc., 1996.

S. P. A. Sauer *Molecular Electromagnetism: A Computational Chemistry Approach*, Oxford University Press, 2011.

T. Helgaker, P. Jørgensen, and J. Olsen *Molecular Electronic Structure Theory*, Wiley, 2000.

I. Mayer *Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry*, Springer, 2003.

### Altre informazioni:

Il programma dettagliato ed il materiale didattico sono distribuiti dal docente durante il corso e sono anche disponibili sul link <http://www2.unibas.it/minichino/ChimicaQuantistica-15-16/>. Parte del materiale è protetto da password.

**Syllabus a.a. 2015-2016**



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA  
DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

Course: Quantum Chemistry and Molecular Modeling

Professor: Camilla MINICHINO

Course of studies: Chemical Sciences

Academic Year: II

ECTS: 6

Teaching Methods: Lectures

Evaluation Method: Oral Exam , with the possibility of discussing a short written report on a modeling project or on a depth study of a specific topic (agreed with the instructor).

Evaluation: score on 30 points

Semester: I

Language: ITALIAN

Course beginning on October 5 2015 ending on January 2016

**CALLS FOR EXAMINATION**

Month	Year	Expected call
February	2016	X
March	2016	X
April	2016	
May	2016	X
June	2016	X
July	2016	X
September	2016	X
October	2016	X
November	2016	X
December	2016	X
January	2017	X

**Note:** In the previous table you can see in which months an examination call is expected.

The exact dates for the exams can be found at the following link (sorry, at the present time, only in italian):

<http://oldwww.unibas.it/selfserve/query.appelli.asp>

EXAMINATION PANEL:

President: Camilla MINICHINO

Member: Sergio BRUTTI

Member: Luciano D'ALESSIO

Member: Angela DE BONIS

Member: Roberto TEGHIL



**Previous requirements:**

Knowledge of basic physico-chemical disciplines.

**Learning Outcomes:**

The course has the purpose of i) providing an overview of the methods of theoretical chemistry with particular reference to the aspects of the determination of the molecular electronic structure ii) showing how these methods may be used for modelling chemical systems and for computing molecular properties. After completing the course the student i) knows the theoretical foundations, the potential and limitations of the methods of quantum chemistry; ii) is able to set up and develop a simple computational chemistry project; iii) • understands the language of molecular modelling (acronyms and abbreviations); iv) is able to deal with the vast literature on the subject.

**Syllabus:**

**Separation of motions in quantum mechanics.**

Separation between electronic and nuclear Motions: adiabatic and Born-Oppenheimer approximation. Comparing adiabatic, diabatic and non-adiabatic approach. Non-crossing rule and conical intersections. Separation between internal and external nuclear motions. Coordinate systems and vibrational modes.

**Potential energy surfaces and their exploration.**

Methods for finding local extrema on the potential energy surfaces. Reaction pathways. Molecular force fields. Brief overview of classical molecular dynamics and Monte Carlo simulations and their use in the global optimization problems.

**Theoretical methods for molecular electronic structure.**

General aspects of the molecular orbital model. HF method. Basis sets. Electron correlation. Molecular properties, descriptors of the electronic wave function and the charge distributions. Density functional theory. Methods for describing electronic excited states. Solvation and continuum models.

**Computational aspects.**

Presentation of some quantum chemistry software packages, input preparation and output reading, calculation examples, analysis of the key information, strategies for solving problems related to the optimization of molecular structures and the SCF convergence, visualization and analysis of the results using molecular graphics programs.

**Additional topics that could be treated.** Some theoretical approaches in the study of elementary chemical processes, modulation effect of nuclear motions on molecular observables, valence bond theory, relativistic quantum chemistry, description of condensed phase systems in the framework of DFT theory, hybrid models of molecular mechanics / quantum mechanics, Carr-Parrinello method.

**Suggested textbooks:**

Lecture notes and presentations, scientific papers and books chapters on specific topics.

L. Piela *Ideas of Quantum Chemistry, II Edition*, Elsevier, 2013.

A. Szabo and N.S. Ostlund *Modern Quantum Chemistry – Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover, 1996.

C. J. Cramer *Essentials of Computational Chemistry Theories and Models. II Edition*, Wiley, 2004.

F. Jensen *Introduction To Computational Chemistry, II Edition*, Wiley, 2007.

*Additional Readings:*

- R. Mc Weeny *Methods of Molecular Quantum Mechanics, II Edition*, Academic Press, 1992.
- W. Koch and M.C. Holthausen *A Chemist's Guide to Density Functional Theory. II Edition*, Wiley-VCH, 2001.
- D. C. Young *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*, Wiley, 2001.
- A. Leach *Molecular Modelling: Principles and Application, II Edition*, Prentice Hall, 2001.
- J.B. Foresman and A. Frisch *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian. II Edition*, Gaussian Inc., 1996.
- S. P. A. Sauer *Molecular Electromagnetism: A Computational Chemistry Approach*, Oxford University Press, 2011.
- T. Helgaker, P. Jørgensen, and J. Olsen *Molecular Electronic Structure Theory*, Wiley, 2000.
- I. Mayer *Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry*, Springer, 2003.

**Further information:**

The detailed list of topics and course material will be distributed in class and will also be available (partially password protected) on the link <http://www2.unibas.it/minichino/ChimicaQuantistica-15-16/>.