

ANNO ACCADEMICO: **2016-2017**INSEGNAMENTO/MODULO: **CHIMICA QUANTISTICA e MODELLISTICA MOLECOLARE**TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: **A Scelta**DOCENTE **Prof. Camilla Minichino**e-mail **camilla.minichino@unibas.it**

sito web:

telefono: **0971206158**cell. di servizio: **3204371123**Lingua di insegnamento: **ITALIANO**n. CFU: **6****(6 di lezione)**n. ore: **48****(48 di lezione)**Sede: **Potenza**

Dipartimento/Scuola:

Dipartimento di ScienzeCdS: **Scienze Chimiche****(LM54)**Semestre: **II**(date previste di
inizio e fine
corso:

06/03/2017,

15/06/2017)

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO

PREREQUISITI

- Conoscenze di base di meccanica quantistica molecolare

CONTENUTI DEL CORSO

Separazione dei moti in meccanica quantistica (6 ore).

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(6 ore).

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. (18 ore)

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. (10 ore)

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 * (8 ore).

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.

**Solo alcuni saranno trattati sulla base degli interessi degli studenti*

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 (concordato con il docente).

TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO, MATERIALE DIDATTICO ON-LINE

- *Materiali didattico on line* (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/PccQRh3L3ZYnXaV>)
- *Testi di riferimento*
 - 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.*

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso, dopo aver descritto obiettivi, programma e metodi di verifica, il docente mette a disposizione degli studenti il materiale didattico (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/PccQRh3L3ZYnXaV>). E Contestualmente, si raccoglie l'elenco degli studenti che intendono iscriversi al corso, corredato di nome, cognome, matricola, e-mail ed eventualmente numero di cellulare.

Orario di ricevimento: il lunedì dalle 13 alle 15 presso studio 3D-103B e il martedì dalle 13 alle 15 presso studio 3D-103B.

Oltre all'orario di ricevimento settimanale, il docente è disponibile in ogni momento per un contatto con gli studenti, attraverso la propria e-mail o il cellulare di servizio .

DATE DI ESAME PREVISTE¹

10/01/2017, 07/2/2017 , 07/03/2017, 30/05/2017, 27/06/2017, 25/07/2017, 12/09/2017, 03/10/2017, 19/12/2017.

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI

¹ Potrebbero subire variazioni: consultare la pagina web del docente o del Dipartimento/Scuola per eventuali aggiornamenti