

INSEGNAMENTO/MODULO CHIMICA QUANTISTICA E MODELLISTICA MOLECOLARE**ANNO ACCADEMICO: 2017-2018**

TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: attività a scelta

DOCENTE: Camilla Minichino

e-mail: camilla.minichino@unibas.it

sito web: scienze.unibas.it/site/home.html.

telefono: 0971/202154906158

cell. 3204371123

Lingua di insegnamento: italiano

n. CFU: 6

(6 di lezione e 0 di
esercitazioni/laboratorio)

n. ore: 48

(di 48 lezione e 0 di
esercitazione/laboratorio)Sede: **Potenza**

Dipartimento/Scuola:

Dipartimento di Scienze

CdS

Semestre**Il Semestre: dal
05/03/2018 al 15-
30/06/2018****OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO**

- L'obiettivo del corso è quello di fornire una comprensione dei principi e delle tecniche della meccanica quantistica in modo da affinare le capacità di descrizione teorica della struttura e delle proprietà di atomi e molecole. Lo studente alla fine del corso deve dimostrare di a) conoscere i fondamenti della meccanica quantistica ed i modelli che sono alla base della teoria del legame chimico e della spettroscopia molecolare, b) comprendere il nesso tra simmetria e meccanica quantistica e saper far uso della teoria dei gruppi nello studio della struttura elettronica delle molecole, c) essere in grado di risolvere in maniera qualitativa e quantitativa semplici problemi di meccanica quantistica applicata alla chimica.

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

- L. Piel* *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.

Il docente di solito riceve gli studenti presso il proprio studio (3D-103B) il lunedì e il mercoledì dalle 13 alle 15 o in altri giorni e orari da concordare tramite e-mail o cellulare.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

15/01/2018, 19/02/18, 12/03/2018, 16/04/2018, 21/05/2018, 11/06/2018, 23/07/2018, 10/09/2018, 08/10/2018, 17/12/2018

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI ☐ NO ☒

ALTRE INFORMAZIONI
