

INSEGNAMENTO/MODULO CHIMICA QUANTISTICA E MODELLISTICA MOLECOLAREANNO ACCADEMICO: **2019-2020**TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: **A SCELTA**

DOCENTE: Camilla Minichino

e-mail: camilla.minichino@unibas.itsito web: scienze.unibas.it/site/home.html.

telefono: 0971/206158

cell.

Lingua di insegnamento: italiano

n. CFU: **6**(6 di lezione e 0 di
esercitazioni/laboratorio)n. ore: **48**(48 di lezione e 0 di
esercitazione/laboratorio)Sede: **Potenza**
Dipartimento di Scienze
CdS Scienze Chimiche (LM 54)**Semestre II**
Dal 02.03.2020
al 31 maggio-30
giugno 2020**OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO**

Il corso ha lo scopo di i) fornire una panoramica dei metodi di chimica teorica con particolare riferimento alla determinazione della struttura elettronica molecolare ii) mostrare come tali metodi possano essere utilizzati per la descrizione atomistica di sistemi chimici e per il calcolo di proprietà molecolari.

Dopo aver completato il corso lo studente i) conosce i fondamenti teorici, le potenzialità e le limitazioni dei metodi della chimica quantistica; ii) è in grado di creare e sviluppare un semplice progetto di chimica computazionale; iii) comprende il linguaggio della modellistica molecolare (acronimi e abbreviazioni); iv) è in grado di orientarsi nella vasta letteratura sull'argomento.

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. (8 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. (20 ore)

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

Aspetti computazionali. (6 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 grafica dei risultati.

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, elementi di dinamica quantistica molecolare.

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

METODI DIDATTICI

Lezioni ed illustrazione guidata per l'uso di alcuni programmi di calcolo di chimica quantistica.

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

Appunti e presentazioni del corso (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/vsLv006oK1cXVjQ> e/o <https://elearning.unibas.it/>)

o *Libri di testo:*

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, III Edition, Wiley, 2017.*

o *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, III Edition, Gaussian Inc., 2015.*

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

P. Norman, K. Ruud, and T.Saue. *Principles and Practices of Molecular Properties: Theory, Modeling, and Simulations, Wiley, 2018.*

F. Gatti, B. Lasorne, H.-D. Meyer, and A. Nauts. *Applications of Quantum Dynamics in Chemistry, Springer, 2018.*

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso, dopo aver descritto obiettivi, programma dettagliato e metodi di verifica, il docente comunica la password per accedere al sito su cui viene depositato il materiale didattico. Inoltre raccoglie l'elenco degli studenti, corredato di nome, cognome, matricola, e-mail e (eventualmente) numero di cellulare e ricorda di essere sempre disponibile per informazioni, chiarimenti o aiuto.

Il ricevimento studenti si svolge di norma il martedì ed il mercoledì dalle 11 alle 13 presso lo studio 3D-103B (essendo possibili variazioni, in corrispondenza di impegni ufficiali/istituzionali, si prega di contattare prima il docente via e-mail) ed in altri giorni/orari da concordare.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

21/01/2020, 04/02/2020, 20/02/2020, 03/03/2020, 26/05/2020, 09/06/2020, 07/07/2020, 21/07/2020, 15/09/2020, 06/10/2020, 15/12/2020.

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI

¹Potrebbero subire variazioni: consultare <https://unibas.esse3.cineca.it/ListaAppelliOfferta.do?jsessionid=> per eventuali aggiornamenti