

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2013/2014
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Corso di Laurea Magistrale in Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Teorica e Computazionale
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline inorganiche e chimico-fisiche
CODICE INSEGNAMENTO	16581
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	1
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE	Francesco Ferrante Ricercatore Università di Palermo
CFU	4 + 2
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	32 + 24
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Primo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula E
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni al computer
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Secondo il calendario approvato dal CISC
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Lu, Me, Ve ore 12-13

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione della meccanica quantistica e della chimica quantistica

Capacità di applicare conoscenza e comprensione della meccanica quantistica in ambito chimico, in particolare nel calcolo della struttura elettronica molecolare e delle proprietà che ne derivano

Autonomia di giudizio nell'applicazione dei modelli di risoluzione del problema polielettronico a problematiche di natura chimica e chimico-fisica

Abilità comunicative riguardanti i concetti e le problematiche generali della chimica quantistica e la loro applicazione a problemi di natura chimica specifica

Capacità d'apprendimento di testi a livello universitario riguardanti metodi e applicazioni della chimica quantistica; di articoli scientifici riportanti ricerche originali

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

Il corso di Chimica Teorica e Computazionale ha lo scopo di impartire allo studente i concetti fondamentali della meccanica quantistica e le tecniche per la loro applicazione alle problematiche chimiche legate alla struttura elettronica degli atomi e delle molecole. La parte centrale del corso

riguarda l'esposizione dei più comuni metodi di risoluzione approssimata del problema polielettronico, a partire dal modello di Hartree-Fock per arrivare alle più sofisticate metodologie moderne, come la teoria *coupled cluster*, passando per le tecniche basate sulla teoria del funzionale della densità. Il corso prevede due crediti di esercitazioni al computer, dove vengono applicate le metodologie esposte nelle lezioni frontali a problemi chimici e chimico-fisici, come il calcolo di proprietà molecolari e spettroscopiche, la simulazione di reazioni chimiche, la trattazione di sistemi complessi. Lo studente avrà anche modo, con tali esercitazioni, di imparare l'utilizzo di svariati *software* per il calcolo delle struttura elettronica di una molecola.

MODULO	CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
4	Complementi di matematica
	Spazi vettoriali N-dimensionali complessi
	Equazioni agli autovalori
5	Fondamenti della Meccanica Quantistica
	Formulazione assiomatica della Meccanica Quantistica
	Richiami sui sistemi quantistici risolvibili esattamente
	Gli atomi idrogenoidi
	Gli orbitali atomici e le loro proprietà
3	Introduzione al problema polielettronico
	Il teorema variazionale
	Il problema dello spin
	I determinanti di Slater
6	Il metodo di Hartree-Fock
	Derivazione e significato delle equazioni di Hartree-Fock
	Il concetto di orbitale molecolare
	La procedura del campo autoconsistente
	I set di base
	Le proprietà molecolari
5	I metodi post-Hartree-Fock
	L'interazione di configurazione e la funzione d'onda Full-CI
	Il metodo perturbativo
	Il metodo Coupled Cluster
4	La teoria del funzionale della densità
	Concetti alla base della teoria
	Le equazioni di Kohn-Sham
	I funzionali di scambio-correlazione
5	La teoria dei gruppi di simmetria
	La simmetria molecolare e i gruppi di simmetria
	Proprietà del prodotto diretto
	Applicazioni ai sistemi molecolari
	ESERCITAZIONI
1	L'utilizzo del computer e dei programmi di calcolo della struttura elettronica
4	L'ottimizzazione della geometria molecolare e il calcolo delle frequenze di vibrazione armonica; i metodi per descrivere l'effetto del solvente; applicazioni.
3	I metodi per la caratterizzazione degli stati di transizione e dei meccanismi di reazione; applicazioni.
3	Simulazione di uno spettro NMR: calcolo dei tensori di shielding e delle costanti di accoppiamento tramite la teoria del funzionale della densità; applicazioni.
3	Calcolo di costanti spettroscopiche tramite metodi accuratissimi: le transizioni rotazionali; applicazioni.
3	Calcolo di costanti spettroscopiche tramite metodi <i>multireference</i> : le transizioni elettroniche; applicazioni.
4	L'utilizzo di metodi ibridi per lo studio di una reazione chimica catalizzata da un <i>cluster</i> metallico supportato.
3	Versione relativistica della meccanica quantistica. Metodi e software per la risoluzione approssimata dell'equazione di Dirac. Valutazione dell'accoppiamento spin-orbita nei metalli pesanti.

TESTI CONSIGLIATI	Dispense fornite dal docente Testi di riferimento: <ul style="list-style-type: none">- Ira N. Levine "Quantum Chemistry" Ed. Prentice Hall- Christopher J. Cramer "Computational Chemistry - Theories and Models" Ed. Wiley.- Attila Szabo, Neil S. Ostlund "Modern Quantum Chemistry - Introduction to Advanced Electronic Structure Theory" Ed. MacMillan Publishing Co.
------------------------------	--