



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Fisica e Chimica - Emilio Segrè		
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2022/2023		
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2022/2023		
CORSO DILAUREA MAGISTRALE	CHIMICA		
INSEGNAMENTO	CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE		
TIPO DI ATTIVITA'	B		
AMBITO	50483-Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche		
CODICE INSEGNAMENTO	16581		
SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI	CHIM/02		
DOCENTE RESPONSABILE	FERRANTE FRANCESCO	Professore Associato	Univ. di PALERMO
ALTRI DOCENTI			
CFU	8		
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	124		
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA	76		
PROPEDEUTICITA'			
MUTUAZIONI			
ANNO DI CORSO	1		
PERIODO DELLE LEZIONI	2° semestre		
MODALITA' DI FREQUENZA	Obbligatoria		
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi		
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	FERRANTE FRANCESCO Martedì 14:00 18:00 Viale delle Scienze, edificio 17, ufficio P1080 Giovedì 14:00 18:00 Viale delle Scienze, edificio 17, ufficio P1080		

DOCENTE: Prof. FRANCESCO FERRANTE

PREREQUISITI	Algebra di base dei vettori e delle matrici; nozioni di meccanica quantistica elementare
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	<ul style="list-style-type: none"> - Conoscenza e capacita' di comprensione della meccanica quantistica e della chimica quantistica - Capacita' di applicare conoscenza e comprensione della meccanica quantistica in ambito chimico, in particolare nel calcolo della struttura elettronica molecolare e delle proprieta' chimiche e fisiche che ne derivano - Autonomia di giudizio nell'applicazione dei modelli di risoluzione del problema polielettronico in ambito chimico - Abilita' comunicative riguardanti i concetti e le problematiche generali della chimica quantistica - Capacita' d'apprendimento di testi di livello universitario riguardanti metodi e applicazioni della chimica quantistica; di articoli scientifici riportanti ricerche originali
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	<p>Una prova orale Votazione in trentesimi</p> <p>La prova, che consiste di un numero minimo di due domande, e' pensata per accertare la conoscenza dei contenuti del corso e la visione critica dei concetti fondamentali in esso esposti. Le domande cominciano con un argomento di carattere molto generale; si entra sempre piu' nello specifico con il procedere dell'esposizione.</p> <p>Lo studente dovrebbe:</p> <ul style="list-style-type: none"> - inquadrare nel giusto e rigoroso contesto concetti quali funzione d'onda, orbitali atomici e molecolari, proprieta' molecolari, transizioni tra livelli energetici - riconoscere le potenzialita' e i limiti dei vari approcci di calcolo della struttura elettronica - mostrare un'adeguata proprieta' di linguaggio <p>Criteri per la valutazione della prova:</p> <p>30 e lode: Oltre ai criteri che portano a una valutazione di 30/30, lo studente ha dimostrato un vivo interesse per la disciplina, tanto da riflettere autonomamente sui concetti del corso e comprenderli in pieno.</p> <p>30: Ottima conoscenza degli argomenti, brillante proprieta' di linguaggio, buona capacita' analitica, ottima capacita' di applicare le conoscenze acquisite.</p> <p>26-29 Buona padronanza degli argomenti, piena proprieta' di linguaggio, buona capacita' di applicare le conoscenze acquisite.</p> <p>24-25: Conoscenza di base dei principali argomenti, discreta proprieta' di linguaggio, limitata capacita' di applicare le conoscenze acquisite.</p> <p>21-23: Non ha piena padronanza degli argomenti, benché ne possieda la conoscenza, scarsa proprieta' di linguaggio, scarsa capacita' di applicare le conoscenze acquisite.</p> <p>18-20: Scarsa padronanza degli argomenti, scarsa proprieta' di linguaggio, scarsissima capacita' di applicare le conoscenze acquisite.</p> <p>La prova e' ritenuta insufficiente qualora lo studente non mostri la conoscenza minima richiesta dei contenuti del corso.</p>
OBIETTIVI FORMATIVI	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 piu' comuni metodi di risoluzione approssimata del problema polielettronico, a partire dal modello di Hartree-Fock per arrivare alle piu' sofisticate metodologie moderne, come la teoria coupled cluster, passando per le tecniche basate sulla teoria del funzionale della densita'. Il corso prevede tre crediti di esercitazioni, dove vengono approfonditi aspetti applicativi e utilizzate le metodologie esposte nelle lezioni frontali per la risoluzione al computer di problemi chimici e chimico-fisici, come il calcolo di proprieta' molecolari e spettroscopiche, la simulazione di reazioni chimiche, la trattazione di sistemi complessi. Lo studente avra' anche modo, con tali esercitazioni, di conoscere i piu' comuni software per il calcolo delle struttura elettronica.
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali (5 CFU, 40 ore), esercitazioni (3 CFU, 36 ore)
TESTI CONSIGLIATI	<ul style="list-style-type: none"> - Dispense fornite dal docente (Lecture notes) - Ira N. Levine "Quantum Chemistry" Ed. Prentice Hall (settima edizione - 2013) - Christopher J. Cramer "Essential of Computational Chemistry - Theories and Models" Ed. Wiley (seconda edizione - 2004)

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
4	Richiami di algebra degli spazi vettoriali N-dimensionali complessi
4	Formulazione assiomatica della Meccanica Quantistica; Richiami sui sistemi quantistici risolvibili esattamente; Gli atomi idrogenoidi; Gli orbitali atomici e le loro proprieta'

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
4	Introduzione al problema polielettronico: Il teorema variazionale; Il problema dello spin; I determinanti di Slater
8	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
4	Richiami sulla teoria dei gruppi di simmetria e applicazione al problema polielettronico
10	I metodi post-Hartree-Fock: La funzione d'onda esatta e il metodo d'interazione di configurazione; Il metodo perturbativo; Il metodo Coupled Cluster; Metodi multiconfigurazionali e multiriferimento
6	La teoria del funzionale della densità: Concetti alla base della teoria; Le equazioni di Kohn-Sham; I funzionali di scambio-correlazione
ORE	Esercitazioni
8	I software per il calcolo delle strutture elettroniche: caratteristiche e peculiarità. Software di grafica molecolare. Il pacchetto di calcolo Gaussian: funzionalità, creazione del file di input e lettura del file di output. Ottimizzazione della geometria molecolare e calcolo delle frequenze dei modi normali di vibrazione; grandezze termochimiche. Popolazione all'equilibrio delle conformazioni molecolari
8	I metodi per la caratterizzazione degli stati di transizione e dei meccanismi di reazione; applicazioni.
8	Simulazione di uno spettro NMR: calcolo dei tensori di shielding e delle costanti di accoppiamento tramite la teoria del funzionale della densità; applicazioni.
12	Spettroscopia computazionale. Definizione delle più importanti costanti spettroscopiche molecolari e loro calcolo teorico tramite metodi estremamente accurati; applicazioni.