



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

<b>DIPARTIMENTO</b>	Fisica e Chimica - Emilio Segrè		
<b>ANNO ACCADEMICO OFFERTA</b>	2015/2016		
<b>ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE</b>	2015/2016		
<b>CORSO DILAUREA MAGISTRALE</b>	CHIMICA		
<b>INSEGNAMENTO</b>	CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE		
<b>TIPO DI ATTIVITA'</b>	B		
<b>AMBITO</b>	50483-Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche		
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	16581		
<b>SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI</b>	CHIM/02		
<b>DOCENTE RESPONSABILE</b>	FERRANTE FRANCESCO	Professore Associato	Univ. di PALERMO
<b>ALTRI DOCENTI</b>			
<b>CFU</b>	6		
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	94		
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA</b>	56		
<b>PROPEDEUTICITA'</b>			
<b>MUTUAZIONI</b>			
<b>ANNO DI CORSO</b>	1		
<b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>	1° semestre		
<b>MODALITA' DI FREQUENZA</b>	Facoltativa		
<b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>	Voto in trentesimi		
<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	<b>FERRANTE FRANCESCO</b> 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

<b>PREREQUISITI</b>	
<b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Conoscenza e capacità di comprensione della meccanica quantistica e della chimica quantistica</li> <li>- Capacità di applicare conoscenza e comprensione della meccanica quantistica in ambito chimico, in particolare nel calcolo della struttura elettronica molecolare e delle proprietà chimiche e fisiche che ne derivano</li> <li>- Autonomia di giudizio nell'applicazione dei modelli di risoluzione del problema polielettronico a problematiche di natura chimica e chimico-fisica</li> <li>- Abilità comunicative riguardanti i concetti e le problematiche generali della chimica quantistica e la loro applicazione a problemi di natura chimica specifica</li> <li>- Capacità d'apprendimento di testi a livello universitario riguardanti metodi e applicazioni della chimica quantistica; di articoli scientifici riportanti ricerche originali</li> </ul>
<b>VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO</b>	Prova orale
<b>OBIETTIVI FORMATIVI</b>	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 della struttura elettronica di un sistema molecolare.
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	Lezioni, esercitazioni
<b>TESTI CONSIGLIATI</b>	Dispense fornite dal docente  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.

### PROGRAMMA

ORE	Lezioni
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
8	I metodi post-Hartree-Fock: L'interazione di configurazione e la funzione d'onda Full-CI; Il metodo perturbativo; Il metodo Coupled Cluster
6	La teoria del funzionale della densità: Concetti alla base della teoria; Le equazioni di Kohn-Sham; I funzionali di scambio-correlazione
ORE	Esercitazioni
6	L'ottimizzazione della geometria molecolare e il calcolo delle frequenze di vibrazione armonica; i metodi per descrivere l'effetto del solvente; applicazioni.
6	I metodi per la caratterizzazione degli stati di transizione e dei meccanismi di reazione; applicazioni.
6	Simulazione di uno spettro NMR: calcolo dei tensori di shielding e delle costanti di accoppiamento tramite la teoria del funzionale della densità; applicazioni.
6	Calcolo di costanti spettroscopiche tramite metodi estremamente accurati; applicazioni.