

## COURSE SYLLABUS

### Molecular Modelling

2122-1-F5401Q026

---

#### Obiettivi

Presentare i fondamenti teorici dei metodi di calcolo quantomeccanici e classici al fine del calcolo di proprietà molecolari e della modellizzazione di processi a livello molecolare, fornendo gli strumenti operativi per il loro utilizzo mediante esercitazioni al computer svolte in laboratori informatici.

#### *Conoscenze e capacità di comprensione*

Al termine del corso lo studente conosce:

- i metodi quantomeccanici basati sulla funzione d'onda (MO ab initio) e quelli basati sul metodo della teoria della funzionale densità;
- i metodi per il calcolo delle proprietà molecolari;
- i metodi di simulazione molecolare basati su una descrizione classica dei sistemi molecolari;
- la superficie di energia potenziale e i metodi per l'individuazione e la caratterizzazione dei punti stazionari su di essa.

#### *Conoscenza e capacità di comprensione applicate*

Al termine del corso lo studente è in grado di:

- calcolare proprietà stereo-elettroniche (geometrie, densità elettroniche, momenti di dipolo) e spettroscopiche (spettri infrarosso) dei sistemi molecolari;
- campionare la superficie di energia potenziale (conformazionale e reattiva) sia mediante metodi globali (simulazioni di dinamica molecolare, tecniche di ricerca sistematica) sia mediante metodi locali;

#### *Autonomia di giudizio*

Al termine del corso lo studente è in grado di:

- scegliere il metodo di calcolo più appropriato per lo studio del sistema di interesse;
- individuare e calcolare le grandezze più appropriate dato il problema da affrontare.

#### *Abilità comunicative*

Saper descrivere in una relazione tecnica in modo chiaro e sintetico ed esporre oralmente con proprietà di

linguaggio gli obiettivi, il procedimento ed i risultati delle elaborazioni effettuate.

#### *Capacità di apprendere*

Essere in grado di applicare le conoscenze acquisite a contesti differenti da quelli presentati durante il corso, e di comprendere gli argomenti trattati nella letteratura scientifica riguardante gli aspetti modellistici di chimica computazionale.

### **Contenuti sintetici**

Metodi quantomeccanici basati sui metodi della funzione d'onda (MO ab initio) e sul metodo della teoria del funzionale densità. Calcolo proprietà molecolari. La superficie di energia potenziale. Metodo della Meccanica Molecolare e metodi di simulazione molecolare

### **Programma esteso**

Equazione di Schrödinger per sistemi molecolari e sue approssimazioni fondamentali. Richiami dei metodi MO ab initio e del metodo Hartree-Fock. Il metodo dell'interazione di configurazioni e forme approssimate; il metodo perturbativo Møller-Plesset (MPn). Introduzione ai metodi basati sulla teoria del funzionale densità. La funzione densità elettronica e le proprietà derivate: proprietà elettroniche interne e di risposta. Studio della superficie di energia potenziale (PES): definizione della PES; analisi conformazionale. Metodi di ricerca punti stazionari. Analisi vibrazionale. Analisi termochimica. Il metodo della Meccanica Molecolare. Metodi di simulazione molecolare. Metodo Monte Carlo e metodo della Dinamica Molecolare. Analisi delle traiettorie.

Esercitazioni in laboratorio informatico relative a: calcolo energie elettroniche e proprietà molecolari; calcolo superficie energia potenziale (PES) conformazionale con metodi quantomeccanici (a livello Hartree Fock, HF, e con metodi che includano la correlazione elettronica) e classici; calcolo PES reattiva con metodi quantomeccanici; analisi di traiettorie di dinamica molecolare classica su PES conformazionali; studio di proprietà di sistemi in soluzione acquosa mediante simulazioni di DM.

### **Prerequisiti**

La teoria della meccanica quantistica: principi e applicazioni allo studio della struttura atomica e molecolare. Equazione di Schroedinger, metodo variazionale, metodo perturbativo, atomi idrogenoidi, atomi polielettronici, approssimazione di Born-Oppenheimer, struttura elettronica di molecole diatomiche. Principi di termodinamica statistica

### **Modalità didattica**

L'insegnamento prevede 3 CFU (24 ore) di lezioni frontali e 3 CFU (36 ore) di esercitazioni in laboratorio informatico.

---

## **Materiale didattico**

Dispensa fornite dai docenti: U. Cosentino, G. Moro, C. Greco, D. Pitea *Molecular Modelling*  
Videoregistrazioni delle lezioni sulla pagina e-learning dell'insegnamento.

Libri suggeriti:

F. Jensen "*Introduction to computational chemistry*", 2a edizione, Ed. John Wiley & Sons Ltd, 2006.

A.R. Leach: "*Molecular Modelling: Principles and Applications*", Ed. Prentice-Hall, 2001.

## **Periodo di erogazione dell'insegnamento**

**Secondo semestre**

## **Modalità di verifica del profitto e valutazione**

L'esame consiste di due prove. Una valutazione della relazione tecnica di gruppo relativa alle esperienze di laboratorio in termini di completezza, accuratezza e chiarezza espositiva. Un colloquio orale individuale sui contenuti della relazione tecnica volto a verificare: il livello delle conoscenze acquisite; l'autonomia di analisi e giudizio; le capacità espositive dello studente. Il voto finale, espresso in trentesimi con eventuale lode, è dato dalla media delle due prove.

Su richiesta dello studente, l'esame potrà essere svolto in lingua inglese.

## **Orario di ricevimento**

In qualsiasi giorno, previo appuntamento

---