



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

## SYLLABUS DEL CORSO

### Chimica Fisica Superiore - Modulo 1

2122-1-F5401Q027-M1

---

#### Obiettivi

Il primo modulo del Corso di Chimica Fisica Superiore ha un duplice obiettivo: (i) consentire agli studenti di acquisire i concetti fondamentali della chimica quantistica; (ii) consentire l'acquisizione dei principali metodi teorici ab-initio di determinazione della struttura elettronica e delle proprietà di sistemi chimici

#### Conoscenze e capacità di comprensione acquisite

- Definizioni, principali postulati e teoremi della meccanica quantistica
- Metodologie quantistiche per la descrizione degli atomi e delle molecole, e per il calcolo delle loro proprietà
- Formalismo appropriato per il trattamento di problemi di chimica quantistica

#### Conoscenze e capacità di comprensione applicative acquisite

A seguito della comprensione del significato fisico e delle condizioni di applicabilità delle leggi e dei teoremi alla base della chimica quantistica, lo studente sarà in grado di applicare questi ultimi alla risoluzione di semplici problemi.

#### Autonomia di giudizio acquisita

Al termine del corso, lo studente è in grado di valutare le potenzialità e i limiti delle diverse metodologie, ed è quindi in grado di individuare l'approccio quanto-meccanico più appropriato dato il problema da affrontare.

#### Abilità comunicative

Saper usare correttamente il formalismo della chimica quantistica e saper esporre oralmente con proprietà di linguaggio i fondamenti della disciplina e i casi di studio proposti.

#### Capacità di apprendere

Capacità di apprendimento da testi di livello universitario che trattino dello studio della chimica quantistica e della chimica teorica e computazionale; sviluppo di competenze critiche nell'analisi di modelli scientifici.

## **Contenuti sintetici**

Fondamenti della meccanica quantistica; teoria perturbativa e metodo variazionale; atomi polielettronici; struttura elettronica molecolare.

## **Programma esteso**

- Richiami e approfondimenti sull'approccio ondulatorio della meccanica quantistica;
- Metodi della meccanica quantistica: calcolo variazionale e metodo perturbativo per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger per sistemi polielettronici
- Spin elettronico e antisimmetria.
- Atomi polielettronici.
- Struttura elettronica molecolare: approssimazione di Born-Oppenheimer; teoria degli orbitali molecolari. Approccio Hartree-Fock-Roothan a sistemi molecolari. Esempi di calcolo della struttura elettronica molecolare.

## **Prerequisiti**

Precedente frequenza di un insegnamento di chimica quantistica elementare. Conoscenze di base di matematica e fisica

## **Modalità didattica**

L'insegnamento è ripartito in due moduli, erogati da Claudio Greco (meccanica quantistica) e da Dario Narducci (meccanica statistica).

## **Materiale didattico**

Trasparenze illustrate dal docente a lezione

I.N. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall.

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

Primo anno, primo semestre

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

Esame orale. Il colloquio orale è volto a verificare il livello delle conoscenze acquisite, la comprensione dell'approccio concettuale nello sviluppo della teoria presentata durante il corso ed il corretto uso del linguaggio da parte dell'esaminando/a.

Il voto finale dell'insegnamento "Chimica Fisica Superiore" è la media dei voti acquisiti nei 2 moduli. Lo studente può, a sua richiesta, sostenere prove separate sui due moduli.

## Orario di ricevimento

Su appuntamento

---