UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Molecular Modelling

2223-1-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 calcolatore 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 del 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.

Nel laboratorio informatico viene assegnato agli studenti, suddivisi in piccoli gruppi, un problema da risolvere utilizzando le tecniche presentate nelle lezioni teoriche. Lo svolgimento del problema è guidato dal docente e tende a sviluppare e rafforzare le capacità dello studente di identificare le tecniche più idonee all'applicazione. Viene anche presentata la metodologia utile per produrre un elaborato chiaro nella descrizione del procedimento seguito

e accurato nella presentazione dei risultati ottenuti.

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

Sustainable Development Goals

ISTRUZIONE DI QUALITÁ | ENERGIA PULITA E ACCESSIBILE