

# Programma per il corso di Chimica Computazionale.

Fulvio Ciriaco

## **L'operatore hamiltoniano per le molecole**

Fattorizzazione del moto nucleare nell'approssimazione Born-Oppenheimer

Requisiti di simmetria delle funzioni d'onda fermioniche. Approcci alla antisimmetrizzazione della funzione d'onda

Densità elettronica e matrici densità

Osservazioni sulla natura degli operatori energia cinetica ed interazione elettrostatica

## **Soluzioni del problema: principali implementazioni**

Soluzione delle equazioni Hartree-Fock nelle molecole. Vincoli di simmetria.

Correlazione.

Interazione di configurazione.

Tecniche coupled-cluster: accenni

Introduzione al funzionale densità

Basi nucleo-centriche: GTO e STO. Potenziali di core.

Metodi semiempirici

Modelli per l'interazione della molecola con il solvente

Metodi per il calcolo in fase solida

## Configurazione nucleare

Concetto di superficie di energia potenziale nell'approssimazione Born-Oppenheimer

Gradi di libertà, coordinate interne, matrice  $z$  ed altre descrizioni della configurazione nucleare.

Determinazione della struttura di minima energia e dello stato di transizione.

## Sperimentazione

Introduzione al software di calcolo opensource: Orca, GAMESS-US, NWChem, Psi4, GPaw

Descrizione generale del formato di input.

Programmi di visualizzazione ed editing molecolare

Esempi di calcolo HF, DFT e CI di energie di formazione/dissociazione, curve di dissociazione, spettro vibrazionale con correzioni anarmoniche, stati di transizione

## Bibliografia

F. Ciriaco: *Dispense*: <http://puccini.chimica.uniba.it/didattica/corsi/chim-comp/>

A.S. Davidov: *Meccanica Quantistica*

R. McWeeney: *Molecular Quantum Mechanics*

Orca: <https://www.kofo.mpg.de/en/research/services/orca>,  
<https://www.faccts.de/docs#orca>

GAMESS-US: <http://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/>

NWChem: <https://github.com/nwchemgit/nwchem/wiki>

Psi4: <http://www.psicode.org/>

GPaw: <https://wiki.fysik.dtu.dk/gpaw/documentation/manual.html>

Gabedit: <http://gabedit.sourceforge.net/>

avogadro: [http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main\\_Page](http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page)

Jmol: <http://jmol.sourceforge.net/>

molden: <http://www.cmbi.ru.nl/molden/>

## Valutazione

La valutazione del corso consiste di una prova articolata di calcolo, che può essere individuale o di coppia, e viene tagliata sugli interessi dello studente, e.g. sull'argomento di tesi, per consentirgli di apprezzare le possibilità dell'uso del calcolo nel suo ambito di sviluppo. La

prova viene valutata sulla base di un enunciato scritto e sulla base di un approfondimento orale.