

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

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 GAMESS-US

Descrizione generale del formato di input.

Programmi di visualizzazione ed editing molecolare

Esempi di calcolo HF, DFT e ORMAS-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*

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

avogadro: http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page

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

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