



UNIVERSITÀ DI PISA

CHIMICA TEORICA ORGANICA

CLAUDIO AMOVILLI

Anno accademico 2017/18
CdS CHIMICA
Codice 091CC
CFU 3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHIMICA TEORICA ORGANICA	CHIM/02	LEZIONI	24	CLAUDIO AMOVILLI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Lo studente che supererà con successo il corso avrà acquisito nuove conoscenze sul trattamento teorico-computazionale del riarrangiamento elettronico in processi termini coinvolgenti composti del carbonio.

Modalità di verifica delle conoscenze

Anche se non sono previste esplicite verifiche in itinere, il grado di apprendimento dello studente sarà considerata nelle prove pratiche in laboratorio informatico.

Capacità

Al termine del corso lo studente:

- 1) saprà applicare il software Gaussian 2009 alle tematiche specifiche del corso;
- 2) sarà in grado di discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso.

Modalità di verifica delle capacità

Durante le sessioni di laboratorio saranno svolti piccoli progetti e/o esercizi numerici per comprendere l'utilizzo del software Gaussian 2009.

Lo studente dovrà preparare e discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso

Comportamenti

Lo studente potrà acquisire e/o sviluppare sensibilità alle problematiche teorico-computazionali associate allo studio di processi che coinvolgono sostanze organiche.

Modalità di verifica dei comportamenti

Durante le sessioni di laboratorio saranno valutati il grado di accuratezza e precisione delle attività svolte

Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Nozioni di base dei corsi di Fisica, Matematica e Chimica Fisica del corso di laurea triennale in Chimica.

Indicazioni metodologiche

Le lezioni in aula sono frontali con lo sviluppo dettagliato alla lavagna del programma;

Le esercitazioni in aula informatica sono svolte individualmente con connessione remota tramite PC ai server di calcolo. Il sistema operativo usato è linux;

Le lezioni in aula informatica potranno usare il web come supporto;

Sul sito di e-learning del corso verrà caricato materiale didattico in formato pdf;

Gli studenti possono comunicare con il docente tramite e-mail e, ovviamente, nei ricevimenti;

Se necessario, per la presenza di studenti stranieri ERASMUS, le lezioni potrebbero tenersi anche in



UNIVERSITÀ DI PISA

lingua Inglese.

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Fondamenti di meccanica quantistica. Equazione di Schroedinger elettronica. Superfici di energia potenziale. Teoria degli orbitali molecolari e metodi correlati come il DFT e i metodi semiempirici. Metodo di Huckel. Poliacetilene, grafene, nanotubi di carbonio e polimeri semiconduttori. Derivate dell'energia: potenziale chimico, densità elettronica, indici di reattività (durezza, funzione di Fukui), funzioni di risposta. Funzioni d'onda multideterminanti. CI, MCSCF e CASSCF. Diagrammi di correlazione degli orbitali (Woodward-Hoffmann). Esempi.

Bibliografia e materiale didattico

Coulson's Valence Roy McWeeny Oxford University Press, 1979

Modalità d'esame

L'esame è composto da una prova ^{orale} tradizionale oppure, in via sperimentale soprattutto per favorire scegliere la forma, da una prova pratica seguita da una esposizione ^{orale}. Lo studente potrà scegliere la forma.

La prova ^{orale} tradizionale consiste in un colloquio tra il candidato e il docente con domande che di norma la commissione è formata da due docenti. La durata media del colloquio è di circa mezz'ora e il colloquio non avrà esito positivo se il candidato mostrerà ripetutamente l'incapacità di mettere in relazione le varie parti del programma e nozioni che deve usare in modo congiunto per rispondere in modo corretto alle domande poste.

La prova pratica, nella forma alternativa, sarà svolta in aula informatica e lo studente dovrà svolgere un'esperienza computazionale su un esercizio proposto dal docente. Lo studente avrà a disposizione tutto il supporto necessario per potere portare a termine la prova in circa tre ore.

Alla prova pratica seguirà, in un'altra giornata, un'esposizione di tipo seminariale tenuta dallo studente su un argomento proposto dal docente e attinente la prova pratica stessa. Al termine della relazione, la commissione potrà effettuare domande per valutare il grado di apprendimento raggiunto dallo studente.

Ultimo aggiornamento 20/06/2018 15:58