

## Chimica Teorica

*Theoretical Chemistry*

<b>A.A.</b>	2025/2026	<b>CdS</b>	LAUREA MAGISTRALE IN CHIMICA
<b>Codice</b>	8066440	<b>Canale</b>	Unico
<b>CFU</b>	6	<b>Lingua</b>	—

### DOCENTE RESPONSABILE

**Andrea Amadei**

### OBIETTIVI FORMATIVI

<b>Italiano</b>	<p><b>OBIETTIVI FORMATIVI:</b>          Comprensione delle basi della meccanica quantistica e sua relazione con la meccanica classica; Comprensione delle basi della meccanica statistica e del suo utilizzo nei sistemi chimico-fisici; acquisizione della capacità di descrivere in modo fisico-matematico gli aspetti fondamentali dei processi atomici e molecolari; conoscenza delle basi dei metodi e modelli attuali in chimica teorica e dei suoi settori di maggiore sviluppo ed interesse.</p> <p><b>CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE:</b>          abbiano dimostrato di avere la conoscenza delle basi teoriche della chimica fisica con la capacità di elaborare e/o applicare idee originali, anche in un contesto di ricerca</p> <p><b>CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE:</b>          siano capaci di applicare le loro conoscenze, capacità di comprensione e abilità nel risolvere problemi e tematiche nuove o non familiari, inserite in contesti più ampi (o interdisciplinari) connessi alla chimica teorica.</p> <p><b>AUTONOMIA DI GIUDIZIO:</b>          abbiano la capacità di integrare le conoscenze e gestire la complessità, nonché di formulare giudizi sulla base di informazioni limitate o incomplete.</p> <p><b>ABILITÀ COMUNICATIVE:</b>          sappiano comunicare in modo chiaro e privo di ambiguità le loro conclusioni a interlocutori specialisti e non specialisti</p> <p><b>CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO:</b>          abbiano sviluppato quelle capacità di apprendimento che consentano loro di continuare a studiare per lo più in modo auto-diretto e autonomo</p>
<i>Inglese</i>	<p><b>LEARNING OUTCOMES:</b>  <i>Understanding of the quantum mechanics basis and its relation with classical mechanics; Comprehension of the statistical mechanics basis and its use in physical-chemical systems; Ability to use physical mathematical modeling to describe the basic atomic-molecular processes; Knowledge of the state of the art of the theoretical methods in chemistry.</i></p>

	<p><b>KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:</b>  <i>the student must have the knowledge and understanding of the theoretical basis of physical chemistry, with the ability of applying and developing new ideas.</i></p> <p><b>APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:</b>  <i>the student should be able to use the knowledge and understanding to solve non-familiar problems even within interdisciplinary contexts.</i></p> <p><b>MAKING JUDGEMENTS:</b>  <i>the student should be able to combine the knowledge and understanding to make judgements even if based on limited information.</i></p> <p><b>COMMUNICATION SKILLS:</b>  <i>the student should be able to communicate in a clear way and without ambiguities their conclusions to specialists and non-specialists.</i></p> <p><b>LEARNING SKILLS:</b>  <i>the student should possess the knowledge and understanding for further studying with an essentially independent approach.</i></p>
--	--

## PREREQUISITI

<b>Italiano</b>	Conoscenza dei principi fisici e chimici di base
<i>Inglese</i>	<i>Basic knowledge on physical chemical principles.</i>

## PROGRAMMA

<b>Italiano</b>	<p>1) Stati fisici ed osservabili in meccanica classica e meccanica quantistica; gli stati quantistici e gli operatori; la rappresentazione delle coordinate e l'uso di basi discrete; (10 ore).</p> <p>2) l'equazione di Schroedinger; approssimazione Born-Oppenheimer; le coordinate generalizzate in meccanica quantistica; gli autostati Hamiltoniani in sistemi misti classico-quantistici; (12 ore).</p> <p>3) l'operatore densità; distribuzioni di equilibrio e gli ensemble meccanico-statistici; fondamenti di meccanica statistica di equilibrio; la funzione di partizione e le sue proprietà in sistemi molecolari; lo spazio delle fasi; (12 ore).</p> <p>4) calcoli meccanico-statistici e dinamica molecolare; introduzione ai calcoli misti classico-quantistici (6 ore).</p>
<i>Inglese</i>	<p><i>1) Physical states and observables in classical and quantum mechanics; quantum states and operators; coordinates representation and the use of discrete basis sets; (10 hours).</i></p> <p><i>2) the Schroedinger equation; the Born-Oppenheimer approximation; the use of generalized coordinates in quantum mechanics; Hamiltonian eigenstates in mixed classical-quantum systems; (12 hours).</i></p> <p><i>3) the density operator; equilibrium distributions and statistical mechanical ensembles; equilibrium statistical mechanics foundation; the partition function and its properties in molecular systems; phase space; (12 hours).</i></p>

	4) <i>statistical mechanical calculations and molecular dynamics simulations: introduction to mixed quantum-classical calculations. (6 hours).</i>
--	--

## TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano	Dirac P.A.M. (1958) <i>The principles of quantum mechanics</i> . Clarendon Press. Amadei A., Aschi M. (2025) <i>Statistical mechanics for chemical thermodynamics and kinetics</i> , Springer.
Inglese	Dirac P.A.M. (1958) <i>The principles of quantum mechanics</i> . Clarendon Press. Amadei A., Aschi M. (2025) <i>Statistical mechanics for chemical thermodynamics and kinetics</i> , Springer.

## MODALITÀ DI SVOLGIMENTO

Italiano	Lezioni frontali
Inglese	Lectures

## MODALITÀ DI VALUTAZIONE

### Prova orale

Italiano	<p>L'esame consiste in un colloquio orale volto a verificare il livello di conoscenza degli argomenti svolti e valutare la capacità di utilizzare le conoscenze per la comprensione dei processi chimico-fisici.</p> <p>Graduazione del voto dell'esame orale:</p> <p>18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina e si esprime con un linguaggio sufficientemente corretto ed appropriato.</p> <p>22-25, lo studente ha acquisito in modo approfondito i concetti di base della disciplina ed è adeguatamente in grado di effettuare i collegamenti tra le varie materie. Presenta linearità nella strutturazione del discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto.</p> <p>26-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare autonomamente le conoscenze acquisite. Mette in evidenza una ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario.</p> <p>30 e 30 e lode, lo studente possiede una base di conoscenze completa e approfondita. È in grado di applicare la conoscenza a casi e problemi complessi ed estenderla a nuove situazioni. I riferimenti culturali sono ricchi e aggiornati. Si esprime con brillantezza e perfetta proprietà di linguaggio.</p>
Inglese	<p><i>Oral examination.</i></p> <p><i>Graduation of the grade of the oral exam:</i></p> <p><i>18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline and expresses himself with a sufficiently correct and appropriate language.</i></p> <p><i>22-25, the student has acquired in depth the basic concepts of the discipline and is adequately able to make the connections between the various subjects. Presents linearity in the structuring of speech. The language is appropriate and correct.</i></p> <p><i>26-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. He is able to independently apply and re-elaborate the acquired knowledge. It highlights a wealth of references and logical-analytical skills with a fluid, appropriate and varied language.</i></p> <p><i>30 and 30 cum laude, the student has a complete and in-depth knowledge base. Is able to apply knowledge to complex cases and problems and extend it to new situations. The</i></p>

	<i>cultural references are rich and up-to-date. It expresses itself with brilliance and perfect language properties.</i>
--	--

## **MODALITÀ DI FREQUENZA**

---

### **Frequenza facoltativa**

<b>Italiano</b>	—
<i>Inglese</i>	—