

Allegato 1

Dottorato in Scienze Chimiche

Corso Avanzato

Metodi Computazionali per lo studio degli Equilibri Chimici

Prof. Roberto Cammi

Durata: 8 ore.

Periodo: giugno-luglio 2020

I metodi della chimica computazionale sono diventati uno strumento indispensabile in ampi settori della ricerca chimica sia pura che applicata. Il corso offerto vuole introdurre gli studenti del Dottorato in Scienze Chimiche ad corretto e consapevole uso di questi metodi nel caso dello studio degli equilibri chimici.

Il corso consiste di 2-3 h di lezioni frontali e di 6-5 h di esercitazioni al computer.

Gli argomenti trattati saranno:

- 1) Richiami ai metodi di struttura elettronica molecolare
- 2) Richiami ai concetti di base della termodinamica statistica molecolare per lo studio degli equilibri chimici in fase gassosa.
- 2) Modelli di solvatazione per lo studio computazionale degli equilibri chimici in soluzione
- 3) Esempi di studio computazionale di equilibri chimici: sistemi acido-base (pKa), complessi metallo-legante, etc.