

Corso di laurea Specialistica in Scienze Fisiche
a.a. 2005-2006
Chimica Fisica Molecolare
Titolare: Prof.ssa C. Guidotti

Programma.

Considerazioni generali sulla struttura delle molecole. Moti nucleari. Approssimazione di Born-Oppenheimer.

Struttura elettronica di una molecola: orbitali molecolari e determinanti di Slater. Metodo di Hartree-Fock e relative equazioni. Energie orbitali e teorema di Koopmans. Sistemi a guscio chiuso: equazione di Roothaan; sistemi a guscio aperto: equazioni di Pople-Nesbet. Calcolo di osservabili molecolari. Esempi illustrativi.

Superamento dell'approssimazione Hartree-Fock: metodo della interazione di configurazioni e uso della teoria delle perturbazioni.

Studio della risposta lineare di una molecola ad un campo elettrico esterno: polarizzabilità statica e polarizzabilità dinamica.

Cenno alla Teoria del Funzionale della Densità di carica (DFT): teoremi di Hohenberg – Kohn ed equazioni di Kohn – Sham. Discussione ed esempi illustrativi.

Testi consigliati:

A. Szabo, N.S. Ostlund – Modern Quantum Chemistry, MacMillan Publishing Co., New York, 1982

Altro materiale didattico fornito dal docente.