

Laurea Specialistica in Scienze Fisiche
a.a. 2003-2004
Chimica Fisica Molecolare
Titolare: Prf.ssa Carla Guidotti

Programma.

Aspetti generali della struttura delle molecole - Moti nucleari ed approssimazione di Born-Oppenheimer.

Struttura elettronica molecolare: funzioni d'onda mono-elettroniche e determinanti di Slater - Metodo Hartree-Fock: operatore coulombiano e di scambio, operatore di Fock e loro elementi di matrice - Equazioni di Hartree-Fock e loro derivazione - Energie orbitali e teorema di Koopmans - Teorema di Brillouin - Sistemi a guscio chiuso e a guscio aperto - Orbitali molecolari come combinazione lineare di orbitali atomici - Equazioni di Roothaan per sistemi a guscio chiuso - Metodo SCF - Orbitali atomici di base: funzioni di Salter e funzioni gaussiane - Esempi illustrativi di calcoli per semplici sistemi: H_2 e HeH^+ - Determinazione di funzioni d'onda per sistemi a guscio aperto: equazioni di Pople-Nesbet - Esempi illustrativi - Problema della dissociazione molecolare.

Correlazione elettronica ed energia di correlazione - Possibili metodi per lo studio della correlazione elettronica - Metodo della Interazione delle Configurazioni (CI) e problemi connessi - Uso della teoria delle perturbazioni ed esempi illustrativi.

Determinazione di osservabili molecolari: esempio dei momenti multipolari, del campo elettrico e del gradiente di campo elettrico ai nuclei.

Risposta lineare di una molecola ad un campo elettrico esterno: polarizzabilità statica e polarizzabilità dinamica.

Proprietà magnetiche molecolari: suscettività magnetica, costante di "shielding", "chemical shift".