

Tavola Periodica (lezione 9)

Giovanni Bachelet, 26 ottobre 2005

- Ultimi due potenziali di ionizzazione
- Primo potenziale di ionizzazione
- Autovalori delle equazioni di Hartree-Fock:
potenziali di ionizzazione, energie di eccitazione (Koopman)
- Raggi atomici e ionici

Teoria del Funzionale Densità (lezioni 10 e 11)

Giovanni Bachelet, 26 ottobre 2005

- Primo teorema di Hohenberg e Kohn:
il potenziale esterno è funzionale universale della densità a un corpo
- Secondo teorema di Hohenberg e Kohn:
il funzionale energia a potenziale esterno fissato.
- Equazioni di Kohn e Sham: il potenziale x_c