

Partie 3 : Éléments de théorie de la structure électronique

Les sujets suivants sont traités dans cette troisième et dernière partie du cours :

- Motivation et rappels sur l'importance de la structure électronique, non seulement en spectroscopie électronique, mais également en spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle (slide 2).
- Rappels sur l'écriture de l'hamiltonien électronique (slide 3).
- Principe variationnel de Rayleigh-Ritz pour l'état fondamental (slide 4-5).
- Résolution de l'équation de Schrödinger pour des électrons non-interagissants (slide 6-7).
- Résolution (approchée) de l'équation de Schrödinger pour des électrons interagissants : formulation du problème pour deux électrons, approximation Hartree-Fock, concept de corrélation électronique, excitations électroniques et énergies orbitales (slide 8-14).
- Application à la molécule d'hydrogène le long de la coordonnée de dissociation (slide 15-19).