

Partie 3 : Éléments de théorie de la structure électronique

- *En quoi le principe variationnel de Rayleigh-Ritz est une alternative à la résolution de l'équation de Schrödinger pour l'état fondamental ? Quel est son intérêt en « pratique » ?*
- *Quel terme dans l'hamiltonien électronique complexifie la résolution de l'équation de Schrödinger ? Peut-on le négliger ?*
- *Dans quelle situation (fictive) l'approche usuelle dite « mono-électronique », dans laquelle on distribue les électrons dans des orbitales, est-elle exacte ?*
- *La méthode Hartree-Fock néglige-t-elle la répulsion électronique ? Repose-t-elle sur une approximation ? Si oui, laquelle ?*
- *En quoi les équations Hartree-Fock diffèrent d'une équation de Schrödinger pour un seul électron ?*
- *Comment peut-on utiliser la méthode Hartree-Fock pour prédire un spectre électronique ? Cette approche est-elle fiable ?*