

# Utilisation des gaussiennes pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger

Service de Chimie Physique Théorique - Université de Mons

**Description du sujet** L'équation de Schrödinger est techniquement impossible à résoudre lorsque l'on s'intéresse aux systèmes atomiques et moléculaires. Il est cependant possible d'approximer numériquement les fonctions d'onde et niveaux d'énergie de ces systèmes grâce à un certain nombre de méthodes bien établies. Il est souvent commode d'utiliser des fonctions gaussiennes pour effectuer le développement mathématique des fonctions d'onde et utiliser ensuite ces méthodes numériques. Ce stage a pour but d'introduire l'étudiant à ces fonctions gaussiennes et lui permettre de jouer avec le principe variationnel de la mécanique quantique pour évaluer numériquement les niveaux d'énergie de systèmes atomiques ou moléculaires.

**Contact** Pour toute question : [colin.vandyck@umons.ac.be](mailto:colin.vandyck@umons.ac.be)