

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