

Exercice sur le cours de structure électronique :

- 1- Rappeler brièvement en quoi consiste les approximations de Born-Oppenheimer et LCAO.
- 2- Quelles sont les hypothèses de la méthode Hartree-Fock en termes de fonction d'onde et d'Hamiltonien ?
- 3- Décrire rapidement comment on obtient en pratique les énergies et fonctions propres électroniques par la méthode Hartree-Fock.
- 4- Quels sont les fondements de la méthode DFT ? En quoi cette dernière est-elle plus performante que la méthode Hartree-Fock ?
- 5- Expliquer quel type de méthode de calcul électronique est à utiliser pour décrire correctement l'énergie potentielle de la molécule H_2 de la zone d'équilibre jusqu'à la dissociation. Justifier votre réponse.
- 6- Donner la formule de Lewis et écrire la Z-matrice de la molécule BH_3 . C'est une molécule plane, avec $R_{BH} = 1.1883 \text{ \AA}$. Quelles sont les étapes à suivre pour obtenir le spectre de vibration de cette molécule avec Gaussian ? Proposer une méthode de calcul ab-initio, ainsi que les conditions pré-requises à son utilisation, et une base pour mener à bien ses calculs. Justifier votre réponse.