

FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE CHIMIE

DEVOIR N° 1
CHM 514 – MODÉLISATION MOLÉCULAIRE
Professeur: Armand Soldera

Remis le: Vendredi 10 janvier 2014

À rendre le: Vendredi 24 janvier 2014

QUESTION *Application du principe variationnel* (20 points)

Dans le cas des ensembles de base, les fonctions gaussiennes sont régulièrement utilisées. Une fonction gaussienne s'écrit :

$$\phi(r) = \exp(-\alpha r^2)$$

Où r est la distance de l'électron par rapport au centre du noyau, et le paramètre α va être déterminé. L'hamiltonien se met en unités atomiques, et seule la composante radiale est considérée :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r}$$

1. Que représentent les 2 termes dans l'expression de l'hamiltonien? (2 points)
2. Calculez $\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle$ (6 points)
3. Calculez $\langle \phi | \phi \rangle$ (6 points)
4. Que vaut α pour que l'énergie soit minimale? (6 points)

Remarque : les formes générales d'intégrales avec des fonctions gaussiennes se retrouvent dans le livre de Engel, utilisé pour CPH 404.