
Etude de la convergence en base de l'énergie de corrélation de longue portée

Odile Franck^{*1,2}, Bastien Mussard^{2,1}, Eleonora Luppi¹, and Julien Toulouse¹

¹Laboratoire de chimie théorique (LCT) – CNRS : UMR7616, Université Pierre et Marie Curie (UPMC) - Paris VI, Université Pierre et Marie Curie [UPMC] - Paris VI – Tour 12-13, 4ème étage, 4 place Jussieu, Case Courrier 137, 75252 PARIS, France

²Institut du Calcul et de la Simulation (ICS) – Université Pierre et Marie Curie (UPMC) - Paris VI – UPMC Paris 06, 4, place Jussieu, 75005 Paris, France

Résumé

En DFT avec séparation de portée on combine la DFT pour traiter la courte portée tandis que la longue portée est traitée par une méthode fonction d'onde [1], par exemple une théorie de la perturbation MP2 [2]. Nous nous intéressons à l'analyse de la convergence en base de l'énergie de corrélation, qui est plus rapide dans ce contexte de séparation de portée. On montre une description du trou de corrélation d'une part et d'autre part une étude dans le cadre de l'expansion en onde partielle, c'est à dire dans le cadre du développement de la base en fonction du nombre quantique orbital l . On part pour cela d'études de convergence pour le cas coulombien proposées par Schwartz [3] en 1963 pour He dans le cas d'une théorie de la perturbation en $1/r_{12}$ et étendue aux atomes à n -électrons par Kutzelnigg et Morgan pour la théorie de perturbation Møller-Plesset au second ordre [4]. Nous avons ensuite effectué une étude analytique avec Mathematica qui nous a permis de trouver un modèle exponentiel qui décrit la convergence dans le cas de la séparation de portée.

Références

J. Toulouse, F. Colonna, A. Savin, Phys. Rev. A, **70**, 062505 (2004)

J. G. Ángyán, I. C. Gerber, A. Savin, J. Toulouse, Phys. Rev. A, **72**, 0125101 (2005)

C. Schwartz, in Methods in computational physics Advances in Research and Applications, edited by B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg (Academic Press, New York and London, 1963)

W. Kutzelnigg, J. D. Morgan III, J. Chem. Phys, **96**, 4484 (1992)

Mots-Clés: séparation de portée, convergence en base

*Intervenant