

1 Solvant

Ne pas oublier les interactions électrostatiques

2 Orbitales

Déterminant de Slater ou produit de Hartree on obtient le même résultat On part d'orbitale atomique puis moléculaire puis déterminant de Slater

Attention en réalité E n'est pas la somme des E_i

3 Biblio

Miessler, Albright Canadell (TiO₂) : Moore/Marucco