
Bibliographie

Premières approches d'un problème à N-corps

- [1] I. MAYER. *Simple theorems, proofs and derivations in quantum chemistry*. Kluwer, 2003 (dans le texte, cité p. 22).
- [2] J. G. ÁNGYÁN, R.-F. LIU, J. TOULOUSE et G. JANSEN. « Correlation Energy Expressions from the Adiabatic-Connection Fluctuation–Dissipation Theorem Approach ». *J. Chem. Theory Comput.* 7 (2011), 3116 (dans le texte, cité p. 23, 42, 44, 48, 55, 127, 153).
- [3] A. SZABO et N. S. OSTLUND. *Modern Quantum Chemistry, Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. McGraw-Hill, 1989 (dans le texte, cité p. 23, 24, 26).
- [4] M. LEVY. « Universal Variational Functionals of Electron Densities, First Order Density Matrices, and Natural Spin Orbitals and Solution of the v -Representability Problem ». *Proc. Natl. Acad. Sci.* 76 (1979), 6062 (dans le texte, cité p. 28).
- [5] W. KOHN et L. J. SHAM. « Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects ». *Phys. Rev. B* 140 (1965), A1133 (dans le texte, cité p. 29).
- [6] P. HOBZA, R. ZAHRADNÍK et K. MÜLLER-DETHLEFS. « The World of non-covalent interactions ». *Coll. Czech. Chem. Commun.* 71 (2006), 443 (dans le texte, cité p. 29).
- [7] E. H. LIEB et W. E. THIRRING. « Universal nature of van der Waals forces for Coulomb systems ». *Phys. Rev. A* 34 (1986), 40 (dans le texte, cité p. 30).
- [8] F LONDON. « Zur Theorie und Systematik der Molekularkräfte ». *Z. Physik* 63 (1930), 245 (dans le texte, cité p. 30).
- [9] T. JANOWSKI et P. PULAY. « High accuracy benchmark calculations on the benzene dimer potential energy surface ». *Chem. Phys. Lett.* 447 (2007), 27 (dans le texte, cité p. 30).
- [10] D. C. LANGRETH, B. I. LUNDQVIST, S. D. CHAKAROVA-KÄCK, V. R. COOPER, M DION, P HYLDEGAARD, A KELKKANEN, J KLEIS, L. KONG, S. LI, P. G. MOSES, E MURRAY, A PUZDER, H. RYDBERG, E SCHRODER et T THONHAUSER. « A density functional for sparse matter ». *J. Phys. Cond. Matt.* 21 (2009), 084203 (dans le texte, cité p. 30).
- [11] A. J. STONE. *The Theory of Intermolecular Forces*. Oxford University Press, 1997 (dans le texte, cité p. 30).

BIBLIOGRAPHIE

- [12] J. F. DOBSON, K. McLENNAN, A. RUBIO, J. WANG, T. GOULD, H. M. LE et B. P. DINTE. « Prediction of Dispersion Forces : Is There a Problem ? » *Austral. J. Chem.* 54 (2001), 513 (dans le texte, cité p. 30, 37).
- [13] Y. ZHAO, N. E. SCHULTZ et D. G. TRUHLAR. « Exchange-correlation functional with broad accuracy for metallic and nonmetallic compounds, kinetics, and noncovalent interaction ». *J. Chem. Phys.* 123 (2005), 161103 (dans le texte, cité p. 30).
- [14] Y. ZHAO, N. E. SCHULTZ et D. G. TRUHLAR. « Design of Density Functionals by Combining the Method of Constraint Satisfaction with Parametrization for Thermochemistry, Thermochemical Kinetics, and Noncovalent Interactions ». *J. Chem. Theory Comput.* 2 (2006), 364 (dans le texte, cité p. 30).
- [15] G. MENCONI et D. J. TOZER. « Enhancement factors in semi-empirical exchange-correlation functionals ». *Mol. Phys.* 103 (2005), 2397 (dans le texte, cité p. 30).
- [16] X. XU et W. A. GODDARD III. « The X3LYP extended density functional for accurate descriptions of nonbond interactions, spin states, and thermochemical properties ». *Proc. Natl. Acad. Sci.* 101 (2004), 2673 (dans le texte, cité p. 30).
- [17] X. XU, Q. ZHANG, R. P. MULLER et W. A. GODDARD III. « An extended hybrid density functional (X3LYP) with improved descriptions of nonbond interactions and thermodynamic properties of molecular systems ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 014105 (dans le texte, cité p. 30).
- [18] S. GRIMME. « Accurate Description of van der Waals Complexes by Density Functional Theory Including Empirical Corrections ». *J. Comp. Chem.* 25 (2004), 1463 (dans le texte, cité p. 30).
- [19] M. ELSTNER, P. HOBZA, T. FRAUENHEIM, S. SUHAI et E. KAXIRAS. « Hydrogen bonding and stacking interactions of nucleic acid base pairs : A density functional-theory based treatment ». *J. Chem. Phys.* 114 (2001), 5149 (dans le texte, cité p. 30).
- [20] Q. WU et W. YANG. « Empirical correction to density functional theory for van der Waals interactions ». *J. Chem. Phys.* 116 (2002), 515 (dans le texte, cité p. 30).
- [21] S. GRIMME. « Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction ». *J. Comp. Chem.* 27 (2006), 1787 (dans le texte, cité p. 30).
- [22] U. ZIMMERLI, M. PARRINELLO et P. KOUMOUTSAKOS. « Dispersion corrections to density functionals for water aromatic interactions ». *J. Chem. Phys.* 120 (2004), 2693 (dans le texte, cité p. 30).
- [23] L. C. WILSON et M. LEVY. « Nonlocal Wigner-like correlation-energy density functional through coordinate scaling ». *Phys. Rev. B* 41 (1990), 12930 (dans le texte, cité p. 30).
- [24] J. M. PEREZ-JORDA, E. SAN-FABIAN et A. J. PÉREZ-JIMÉNEZ. « Density-functional study of van der Waals forces on rare-gas diatomics : Hartree-Fock exchange ». *J. Chem. Phys.* 110 (1999), 1916 (dans le texte, cité p. 30).
- [25] T. R. WALSH. « Exact exchange and Wilson-Levy correlation : a pragmatic device for studying complex weakly-bonded systems ». *Phys. Chem. Chem. Phys.* 7 (2005), 443 (dans le texte, cité p. 30).
- [26] A. D. BECKE. « Real-space post-Hartree-Fock correlation models ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 064101 (dans le texte, cité p. 30).
- [27] A. D. BECKE et E. R. JOHNSON. « Exchange-hole dipole moment and the dispersion interaction ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 154104 (dans le texte, cité p. 30).

BIBLIOGRAPHIE

- [28] A. D. BECKE et E. R. JOHNSON. « A density-functional model of the dispersion interaction ». *J. Chem. Phys.* 123 (2005), 154101 (dans le texte, cité p. 30).
- [29] E. R. JOHNSON et A. D. BECKE. « A post-Hartree-Fock model of intermolecular interactions ». *J. Chem. Phys.* 123 (2005), 024101 (dans le texte, cité p. 30).
- [30] E. R. JOHNSON et A. D. BECKE. « A post-Hartree-Fock model of intermolecular interactions : Inclusion of higher-order corrections ». *J. Chem. Phys.* 124 (2006), 174104 (dans le texte, cité p. 30).
- [31] J. G. ÁNGYÁN. « On the exchange-hole model of London dispersion forces ». *J. Chem. Phys.* 127 (2007), 024108 (dans le texte, cité p. 30, 81, 87, 92).
- [32] B. I. LUNDQVIST, Y. ANDRESON, H. SHAO, S. CHAN et D. C. LANGRETH. « Density Functional Theory Including van der Waals Forces ». *Int. J. Quantum Chem.* 56 (1995), 247 (dans le texte, cité p. 30).
- [33] Y. ANDERSSON, D. C. LANGRETH et B. I. LUNDQVIST. « van der Waals Interactions in Density-Functional Theory ». *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) (dans le texte, cité p. 30).
- [34] J. F. DOBSON et B. P. DINTE. « Constraint Satisfaction in Local and Gradient Susceptibility Approximations : Application to a van der Waals Density Functional ». *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996), 1780 (dans le texte, cité p. 30).
- [35] E. HULT, H. RYDBERG, B. I. LUNDQVIST et D. C. LANGRETH. « Unified treatment of asymptotic van der Waals forces ». *Phys. Rev. B* 59 (1999), 4708 (dans le texte, cité p. 30).
- [36] H. RYDBERG, B. I. LUNDQVIST, D. C. LANGRETH et M DION. « Tractable nonlocal correlation density functionals for flat surfaces and slabs ». *Phys. Rev. B* 62 (2000), 6997 (dans le texte, cité p. 30).
- [37] H. RYDBERG, M DION, N. JACOBSON, E. SCHROEDER, P HYLDGAARD, S. I. SIMAK, D. C. LANGRETH et B. I. LUNDQVIST. « Van der Waals Density Functional for Layered Structures ». *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), 126402 (dans le texte, cité p. 30, 37).
- [38] H. RYDBERG, N. JACOBSON, P HYLDGAARD, S. I. SIMAK, B. I. LUNDQVIST et D. C. LANGRETH. « Hard numbers on soft matter ». *Surf. Sci.* 532-535 (2003), 606 (dans le texte, cité p. 30).
- [39] M DION, H. RYDBERG, E. SCHRÖDER, D. C. LANGRETH et B. I. LUNDQVIST. « Van der Waals density functional for general geometries ». *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004), 246401 (dans le texte, cité p. 30, 37).
- [40] D. C. LANGRETH, M DION, H. RYDBERG, E SCHRODER, P HYLDGAARD et B. I. LUNDQVIST. « Van der Waals density functional theory with applications ». *Int. J. Quantum Chem.* 101 (2005), 599 (dans le texte, cité p. 30).
- [41] A. HESSELMANN et G. JANSEN. « Intermolecular induction and exchange-induction energies from coupled-perturbed Kohn–Sham density functional theory ». *Chem. Phys. Lett.* 362 (2002), 319 (dans le texte, cité p. 30).
- [42] A. HESSELMANN et G. JANSEN. « Intermolecular dispersion energies from time-dependent density functional theory ». *Chem. Phys. Lett.* 367 (2003), 778 (dans le texte, cité p. 30).
- [43] A. HESSELMANN, G JANSEN et M. SCHÜTZ. « Density-functional theory-symmetry-adapted intermolecular perturbation theory with density fitting : A new efficient method to study intermolecular interaction energies ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 014103 (dans le texte, cité p. 30).

BIBLIOGRAPHIE

- [44] A. J. MISQUITTA, B JEZIORSKI et K SZALEWICZ. « Dispersion Energy from Density-Functional Theory Description of Monomers ». *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), 033201 (dans le texte, cité p. 30).
- [45] K. PATKOWSKI, B JEZIORSKI et K SZALEWICZ. « Unified treatment of chemical and van der Waals forces via symmetry-adapted perturbation expansion ». *J. Chem. Phys.* 120 (2004), 6849 (dans le texte, cité p. 30).
- [46] J. G. ÁNGYÁN, I. C. GERBER, A SAVIN et J TOULOUSE. « van der Waals forces in density-functional theory : Perturbational long-range electron-interaction corrections ». *Phys. Rev. A* 72 (2005), 012510 (dans le texte, cité p. 30–32, 48).
- [47] I. C. GERBER et J. G. ÁNGYÁN. « Hybrid functional with separated range ». *Chem. Phys. Lett.* 415 (2005), 100 (dans le texte, cité p. 30–32).
- [48] H. STOLL et A SAVIN. « Density functionals for correlation energies of atoms and molecules ». *Density functional methods in Physics*. 1985, 177 (dans le texte, cité p. 30).
- [49] A SAVIN. « Combined density functional and configuration interaction method ». *Int. J. Quantum Chem.* S22 (1988), 59 (dans le texte, cité p. 30).
- [50] A SAVIN. « On degeneracy, near-degeneracy and density functional theory ». *Recent developments and Applications of Modern Density Functional Theory*. 1996, 327 (dans le texte, cité p. 30).
- [51] T. LEININGER, H. STOLL, H.-J. WERNER et A SAVIN. « Combining long-range configuration interaction with short-range density functionals ». *Chem. Phys. Lett.* 275 (1997), 151 (dans le texte, cité p. 30, 32).
- [52] J TOULOUSE, F. COLONNA et A SAVIN. « Long-range – short-range separation of the electron-electron interaction in density-functional theory ». *Phys. Rev. A* 70 (2004), 062505 (dans le texte, cité p. 30, 31).
- [53] E. GOLL, H.-J. WERNER et H. STOLL. « A short-range gradient-corrected density functional in long-range coupled-cluster calculations for rare gas dimers ». *Phys. Chem. Chem. Phys.* 7 (2005), 3917 (dans le texte, cité p. 30, 32).
- [54] E. GOLL, H.-J. WERNER et H. STOLL. « Short-range density functionals in combination with local long-range ab initio methods : Application to non-bonded complexes ». *Chem. Phys.* 346 (2008), 257 (dans le texte, cité p. 30, 32).
- [55] A SAVIN et H.-J. FLAD. « Density functionals for the Yukawa electron-electron interaction ». *Int. J. Quantum Chem.* 56 (1995), 327 (dans le texte, cité p. 30).
- [56] R. BAER et D. NEUHAUSER. « Density Functional Theory with Correct Long-Range Asymptotic Behavior ». *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005), 043002 (dans le texte, cité p. 30).
- [57] J.-W. SONG, K. YAMASHITA et K. HIRAO. « Gaussian attenuation hybrid scheme applied to the Ernzerhof-Perdew exchange hole model (Gau-PBEh) ». *J. Chem. Phys.* 137 (2012), 244105 (dans le texte, cité p. 30).
- [58] J TOULOUSE, A SAVIN et H.-J. FLAD. « Short-range exchange-correlation energy of a uniform electron gas with modified electron-electron interaction ». *Int. J. Quantum Chem.* 100 (2004), 1047 (dans le texte, cité p. 30, 31, 121).
- [59] H. IKURA, T. TSUNEDA, T. YANAI et K. HIRAO. « A long-range correction scheme for generalized-gradient-approximation exchange functionals ». *J. Chem. Phys.* 115 (2001), 3540 (dans le texte, cité p. 31).

BIBLIOGRAPHIE

- [60] S. PAZIANI, S. MORONI, P. GORI-GIORGI et G. B. BACHELET. « Local spin-density functional for multideterminant density functional theory ». *Phys. Rev. B* 73 (2006), 155111 (dans le texte, cité p. 31, 121).
- [61] E. FROMAGER, P. WÅHLIN, J TOULOUSE, H. J. A. JENSEN et W. ULF. « On the universality of the long/short-range separation in multi-configurational density functional theory ». *J. Chem. Phys.* 126 (2007), 074111 (dans le texte, cité p. 32).
- [62] J. HEYD, G. E. SCUSERIA et M. ERNZERHOF. « Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential ». *J. Chem. Phys.* 118 (2003), 8207 (dans le texte, cité p. 32).
- [63] J TOULOUSE, F. COLONNA et A SAVIN. « Short-range exchange and correlation energy density functionals : Beyond the local-density approximation ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 14110 (dans le texte, cité p. 32).
- [64] I. C. GERBER et J. G. ÁNGYÁN. « Potential curves for alkaline-earth dimers by density functional theory with long-range correlation corrections ». *Chem. Phys. Lett.* 416 (2005), 370 (dans le texte, cité p. 32, 48).
- [65] I. C. GERBER et J. G. ÁNGYÁN. « London dispersion forces by range separated hybrid density functional with second order perturbational corrections (RSH+MP2) : the case of rare gas complexes ». *J. Chem. Phys.* 126 (2007), 044103 (dans le texte, cité p. 32).
- [66] E. GOLL, T. LEININGER, F. R. MANBY, A. MITRUSHCHENKOV, H.-J. WERNER et H. STOLL. « Local and density fitting approximations within the short-range/long-range hybrid scheme : application to large non-bonded complexes ». *Phys. Chem. Chem. Phys.* 10 (2008), 3353 (dans le texte, cité p. 32).
- [67] B. G. JANESKO et G. E. SCUSERIA. « Coulomb-only second-order perturbation theory in long-range-corrected hybrid density functionals ». *Phys. Chem. Chem. Phys.* 11 (2009), 9677 (dans le texte, cité p. 32, 50).
- [68] R. POLLET, A SAVIN, T. LEININGER et H. STOLL. « Combining multideterminantal wave functions with density functionals to handle near-degeneracy in atoms and molecules ». *J. Chem. Phys.* 116 (2002), 1250 (dans le texte, cité p. 32).
- [69] E. GOLL, H.-J. WERNER, H. STOLL, T. LEININGER, P. GORI-GIORGI et A SAVIN. « A Short-Range Gradient-Corrected Spin Density Functional in Combination with Long-Range Coupled-Cluster Methods : Application to Alkali-Metal Rare-Gas Dimers ». *Chem. Phys.* 329 (2006), 276 (dans le texte, cité p. 32).
- [70] E. GOLL, H. STOLL, C. THIERFELDER et P. SCHWERDTFEGER. « Improved dipole moments by combining short-range gradient-corrected density-functional theory with long-range wave-function methods ». *Phys. Rev. A* 76 (2007), 032507 (dans le texte, cité p. 32).
- [71] E. GOLL, M. ERNST, F. MOEGLE-HOFACKER et H. STOLL. « Development and assessment of a short-range meta-GGA functional ». *J. Chem. Phys.* 130 (2009), 234112 (dans le texte, cité p. 32).
- [72] E. FROMAGER, R. CIMIRAGLIA et H. J. A. JENSEN. « Merging multireference perturbation and density-functional theories by means of range separation : Potential curves for Be_2 , Mg_2 , and Ca_2 ». *Phys. Rev. A* 81 (2010), 024502 (dans le texte, cité p. 32).
- [73] W. ZHU, J. TOULOUSE, A. SAVIN et J. G. ÁNGYÁN. « Range-separated density functional theory with random phase approximation applied to non-covalent intermolecular interactions ». *J. Chem. Phys.* 132 (2010), 244108 (dans le texte, cité p. 32).

BIBLIOGRAPHIE

- [74] E. FROMAGER, F RÉAL, P WÄHLIN, U. WAHLGREN et H. J. A. JENSEN. « On the universality of the long-/short-range separation in multiconfigurational density-functional theory. II. Investigating f actinide species ». *J. Chem. Phys.* 131 (2009), 054107 (dans le texte, cité p. 32).
- [75] O. A. VYDROV, J. HEYD, A. V. KRUKAU et G. E. SCUSERIA. « Importance of short-range versus long-range Hartree-Fock exchange for the performance of hybrid density functionals ». *J. Chem. Phys.* 125 (2006), 074106 (dans le texte, cité p. 32).
- [76] T. STEIN, H. EISENBERG, L. KRONIK et R. BAER. « Fundamental Gaps in Finite Systems from Eigenvalues of a Generalized Kohn-Sham Method ». *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010), 266802 (dans le texte, cité p. 32).
- [77] T. STEIN, J. AUTSCHBACH, N. GOVIND, L. KRONIK et R. BAER. « Curvature and Frontier Orbital Energies in Density Functional Theory ». *J. Phys. Chem. Lett.* 3 (2012), 3740 (dans le texte, cité p. 32).
- [78] W. YANG. « Generalized adiabatic connection in density functional theory ». *J. Chem. Phys.* 109 (1998), 10107 (dans le texte, cité p. 32, 34).
- [79] A SAVIN, F. COLONNA et R. POLLET. « Adiabatic Connection Approach to Density Functional Theory of Electronic Systems ». *Int. J. Quantum Chem.* 93 (2003), 166 (dans le texte, cité p. 32).
- [80] J. TOULOUSE, W. ZHU, J. G. ÁNGYÁN et A. SAVIN. « Range-separated density-functional theory with the random-phase approximation : Detailed formalism and illustrative applications ». *Phys. Rev. A* 82 (2010), 032502 (dans le texte, cité p. 34, 39, 41, 137, 153).
- [81] A SAVIN. « Potential-Driven Adiabatic Connection in Density Functional Theory ». *J. Chem. Theory Comput.* 5 (2009), 822 (dans le texte, cité p. 34).

RPA : Approximation de la Phase Aléatoire

- [2] J. G. ÁNGYÁN, R.-F. LIU, J. TOULOUSE et G. JANSEN. « Correlation Energy Expressions from the Adiabatic-Connection Fluctuation–Dissipation Theorem Approach ». *J. Chem. Theory Comput.* 7 (2011), 3116 (dans le texte, cité p. 23, 42, 44, 48, 55, 127, 153).
- [12] J. F. DOBSON, K. MCLENNAN, A. RUBIO, J. WANG, T. GOULD, H. M. LE et B. P. DINTE. « Prediction of Dispersion Forces : Is There a Problem ? » *Austral. J. Chem.* 54 (2001), 513 (dans le texte, cité p. 30, 37).
- [31] J. G. ÁNGYÁN. « On the exchange-hole model of London dispersion forces ». *J. Chem. Phys.* 127 (2007), 024108 (dans le texte, cité p. 30, 81, 87, 92).
- [37] H. RYDBERG, M DION, N. JACOBSON, E. SCHROEDER, P HYLDGAARD, S. I. SIMAK, D. C. LANGRETH et B. I. LUNDQVIST. « Van der Waals Density Functional for Layered Structures ». *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), 126402 (dans le texte, cité p. 30, 37).
- [39] M DION, H. RYDBERG, E. SCHRÖDER, D. C. LANGRETH et B. I. LUNDQVIST. « Van der Waals density functional for general geometries ». *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004), 246401 (dans le texte, cité p. 30, 37).
- [46] J. G. ÁNGYÁN, I. C. GERBER, A SAVIN et J TOULOUSE. « van der Waals forces in density-functional theory : Perturbational long-range electron-interaction corrections ». *Phys. Rev. A* 72 (2005), 012510 (dans le texte, cité p. 30–32, 48).

BIBLIOGRAPHIE

- [64] I. C. GERBER et J. G. ÁNGYÁN. « Potential curves for alkaline-earth dimers by density functional theory with long-range correlation corrections ». *Chem. Phys. Lett.* 416 (2005), 370 (dans le texte, cité p. 32, 48).
- [67] B. G. JANESKO et G. E. SCUSERIA. « Coulomb-only second-order perturbation theory in long-range-corrected hybrid density functionals ». *Phys. Chem. Chem. Phys.* 11 (2009), 9677 (dans le texte, cité p. 32, 50).
- [80] J. TOULOUSE, W. ZHU, J. G. ÁNGYÁN et A. SAVIN. « Range-separated density-functional theory with the random-phase approximation : Detailed formalism and illustrative applications ». *Phys. Rev. A* 82 (2010), 032502 (dans le texte, cité p. 34, 39, 41, 137, 153).
- [82] D. BOHM et D. PINES. « A Collective Description of Electron Interactions. I. Magnetic Interactions ». *Phys. Rev.* 82 (1951), 625 (dans le texte, cité p. 36, 37).
- [83] D. PINES et D. BOHM. « A Collective Description of Electron Interactions : II. Collective vs Individual Particle Aspects of the Interactions ». *Phys. Rev.* 85 (1952), 338 (dans le texte, cité p. 36).
- [84] D. BOHM et D. PINES. « A Collective Description of Electron Interactions : III. Coulomb Interactions in a Degenerate Electron Gas ». *Phys. Rev.* 92 (1953), 609 (dans le texte, cité p. 36).
- [85] M GELL-MANN et K. A. BRUECKNER. « Correlation energy of an electron gas at high density ». *Phys. Rev.* 106 (1957), 364 (dans le texte, cité p. 36).
- [86] F. FURCHE. « Molecular tests of the random phase approximation to the exchange-correlation energy functional ». *Phys. Rev. B* 64 (2001), 195120 (dans le texte, cité p. 37, 38, 46, 50, 65).
- [87] M. FUCHS et X. GONZE. « Accurate density functionals : Approaches using the adiabatic-connection fluctuation-dissipation theorem ». *Phys. Rev. B* 65 (2002), 235109 (dans le texte, cité p. 37).
- [88] M. FUCHS, Y.-M. NIQUET, X. GONZE et K. BURKE. « Describing static correlation in bond dissociation by Kohn-Sham density functional theory ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 094116 (dans le texte, cité p. 37, 38).
- [89] F. FURCHE et T. van VOORHIS. « Fluctuation-dissipation theorem density functional theory ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 164106 (dans le texte, cité p. 37, 40).
- [90] H. JIANG et E. ENGEL. « Random-phase-approximation-based correlation energy functionals : Benchmark results for atoms ». *J. Chem. Phys.* 127 (2007), 184108 (dans le texte, cité p. 37).
- [91] M. HELLGREN et U. von BARTH. « Correlation potential in density functional theory at the GWA level : Spherical atoms ». *Phys. Rev. B* 76 (2007), 075107 (dans le texte, cité p. 37).
- [92] F. FURCHE. « Developing the random phase approximation into a practical post-Kohn-Sham correlation model ». *J. Chem. Phys.* 129 (2008), 114105 (dans le texte, cité p. 37, 42, 50).
- [93] T. MIYAKE, F. ARYASETIAWAN, T. KOTANI, M. van SCHILFGAARDE, M. USUDA et K. TERAKURA. « Total energy of solids : An exchange and random-phase approximation correlation study ». *Phys. Rev. B* 66 (2002), 245103 (dans le texte, cité p. 37).
- [94] A. MARINI, P. GARCIA-GONZALES et A. RUBIO. « First-Principles Description of Correlation Effects in Layered Materials ». *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006), 136404 (dans le texte, cité p. 37).
- [95] J. HARL et G. KRESSE. « Cohesive energy curves for noble gas solids calculated by adiabatic connection fluctuation-dissipation theory ». *Phys. Rev. B* 77 (2008), 045136 (dans le texte, cité p. 37).

BIBLIOGRAPHIE

- [96] K. S. SINGWI, M. P. TOSI, R. H. LAND et A. SJÖLANDER. « Electron correlation at metallic densities ». *Phys. Rev. B* 176 (1968), 589 (dans le texte, cité p. 37).
- [97] Z. YAN, J. P. PERDEW et S. KURTH. « Density functional for short-range correlation : Accuracy of the random-phase approximation for isoelectronic energy changes ». *Phys. Rev. B* 61 (2000), 16430 (dans le texte, cité p. 37).
- [98] J. TOULOUSE, I. C. GERBER, G. JANSEN, A. SAVIN et J. G. ÁNGYÁN. « Adiabatic-Connection Fluctuation-Dissipation Density-Functional Theory Based on Range Separation ». *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), 096404 (dans le texte, cité p. 37, 39).
- [99] B. G. JANESKO, T. M. HENDERSON et G. E. SCUSERIA. « Long-range-corrected hybrids including random phase approximation correlation ». *J. Chem. Phys.* 130 (2009), 081105 (dans le texte, cité p. 37).
- [100] B. G. JANESKO, T. M. HENDERSON et G. E. SCUSERIA. « Long-range-corrected hybrid density functionals including random phase approximation correlation : Application to noncovalent interactions ». *J. Chem. Phys.* 131 (2009), 034110 (dans le texte, cité p. 37).
- [101] B. G. JANESKO et G. E. SCUSERIA. « The role of the reference state in long-range random phase approximation correlation ». *J. Chem. Phys.* 131 (2009), 154106 (dans le texte, cité p. 37).
- [102] J. PAIER, B. G. JANESKO, T. M. HENDERSON, G. E. SCUSERIA, A. GRÜNEIS et G. KRESSE. « Hybrid functionals including random phase approximation correlation and second-order screened exchange ». *J. Chem. Phys.* 132 (2010), 094103 (dans le texte, cité p. 37, 57).
- [103] M. DION, H. RYDBERG, E. SCHRÖDER, D. C. LANGRETH et B. I. LUNDQVIST. « Erratum : Van der Waals Density Functional for General Geometries [Phys. Rev. Lett. 92, 246401 (2004)] ». *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005), 109902(E) (dans le texte, cité p. 37).
- [104] J. F. DOBSON, J. WANG, B. P. DINTE, K. McLENNAN et H. M. LE. « Soft Cohesive Forces ». *Int. J. Quantum Chem.* 101 (2005), 579 (dans le texte, cité p. 37).
- [105] J. F. DOBSON. « Validity Comparison Between Asymptotic Dispersion Energy Formalisms for Nanomaterials ». *J. Comput. Theor. Nanosci.* 6 (2009), 960 (dans le texte, cité p. 37).
- [106] G. E. SCUSERIA, T. M. HENDERSON et D. C. SORENSEN. « The ground state correlation energy of the random phase approximation from a ring coupled cluster doubles approach ». *J. Chem. Phys.* 129 (2008), 231101 (dans le texte, cité p. 37, 53).
- [107] X. REN, P. RINKE et M. SCHEFFLER. « Exploring the random phase approximation : Application to CO adsorbed on Cu(111) ». *Phys. Rev. B* 80 (2009), 045402 (dans le texte, cité p. 37).
- [108] D. LU, Y. LI, D. ROCCA et G. GALLI. « Ab initio Calculation of van der Waals Bonded Molecular Crystals ». *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), 206411 (dans le texte, cité p. 37).
- [109] J. HARL et G. KRESSE. « Accurate Bulk Properties from Approximate Many-Body Techniques ». *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009), 056401 (dans le texte, cité p. 37).
- [110] H.-V. NGUYEN et S. de GIRONCOLI. « Efficient calculation of exact exchange and RPA correlation energies in the adiabatic-connection fluctuation-dissipation theory ». *Phys. Rev. B* 79 (2009), 205114 (dans le texte, cité p. 37).
- [111] J. HARRIS et R. O. JONES. « The surface energy of a bounded electron gas-solid ». *J. Phys. F : Metal Phys.* 4 (1974), 1170 (dans le texte, cité p. 38).
- [112] D. C. LANGRETH et J. C. PERDEW. « The exchange-correlation energy of a metallic surface ». *Solid State Commun.* 17 (1975), 1425 (dans le texte, cité p. 38).

BIBLIOGRAPHIE

- [113] D. C. LANGRETH et J. C. PERDEW. « Exchange-correlation energy of a metallic surface : Wave-vector analysis ». *Phys. Rev. B* 15 (1977), 2884 (dans le texte, cité p. 38).
- [114] G. GIULIANI et G. VIGNALE. « 3 - Linear Response Theory ». *Quantum Theory of the Electron Liquid*. 2005 (dans le texte, cité p. 39).
- [115] A. HESSELMANN et A. GÖRLING. « Correct Description of the Bond Dissociation Limit without Breaking Spin Symmetry by a Random-Phase-Approximation Correlation Functional ». *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011), 093001 (dans le texte, cité p. 47).
- [116] A. D. McLACHLAN et M. A. BALL. « Time-dependent Hartree-Fock Theory for Molecules ». *Rev. Mod. Phys.* 36 (1964), 844 (dans le texte, cité p. 50).
- [117] I. TAMM. *J. Phys. (USSR)* 9 (1945), 449 (dans le texte, cité p. 52).
- [118] S. M. DANCOFF. « Non-Adiabatic Meson Theory of Nuclear Forces ». *Phys. Rev.* 78 (1950), 382 (dans le texte, cité p. 52).
- [119] E. A. SANDERSON. « Nuclear ground state in the random phase approximation ». *Phys. Lett.* 19 (1965), 141 (dans le texte, cité p. 54).
- [120] D. L. FREEMAN. « Coupled-cluster expansion applied to the electron gas : Inclusion of ring and exchange effects ». *Phys. Rev. B* 15 (1977), 5512 (dans le texte, cité p. 54).
- [121] R. MOSZYNSKI, B. JEZIORSKI et K. SZALEWICZ. « Møller-Plesset expansion of the dispersion energy in the ring approximation ». *Int. J. Quantum Chem.* 45 (1993), 409 (dans le texte, cité p. 54).
- [122] B. WANG, X. WANG, G. CHEN, S. NAGASE et J. ZHAO. « Cage and tube structures of medium-sized zinc oxide clusters (ZnO)_n (n=24, 28, 36, and 48) ». *J. Chem. Phys.* 128 (2008) (dans le texte, cité p. 56).
- [123] A. GRÜNEIS, M. MARSMAN, J. HARL, L. SCHIMKA et G. KRESSE. « Making the random phase approximation to electronic correlation accurate ». *J. Chem. Phys.* 131 (2009), 154115 (dans le texte, cité p. 57).
- [124] G. JANSEN, R.-F. LIU et J. G. ÁNGYÁN. « On the equivalence of ring-coupled cluster and adiabatic connection fluctuation-dissipation theorem random phase approximation correlation energy expressions ». *J. Chem. Phys.* 133 (2010), 154106 (dans le texte, cité p. 57).
- [125] A. HESSELMANN. « Third-order corrections to random-phase approximation correlation energies ». *J. Chem. Phys.* 134 (2011), 204107 (dans le texte, cité p. 57).
- [126] A. HESSELMANN. « Random-phase-approximation correlation method including exchange interactions ». *Phys. Rev. A* 85 (2012), 012517 (dans le texte, cité p. 57, 61, 65).
- [127] A. SZABO et N. OSTLUND. « The correlation energy in the random phase approximation : Intermolecular forces between closed-shell systems ». *J. Chem. Phys.* 67 (1977), 4351 (dans le texte, cité p. 58).
- [128] A. SZABO et N. S. OSTLUND. « Interaction energies between closed-shell systems : the correlation energy in the random phase approximation ». *Int. J. Quantum Chem. Symp* S11 (1977), 389 (dans le texte, cité p. 58).
- [129] T.-i. SHIBUYA et V. McKOY. « Application of the RPA and Higher RPA to the V and T States of Ethylene ». *J. Chem. Phys.* 54 (1971), 1738 (dans le texte, cité p. 58).
- [130] N. OSTLUND et M. KARPLUS. « The self-consistent random phase approximation ». *Chem. Phys. Lett.* 11 (1971), 450 (dans le texte, cité p. 58).

- [131] H.-J. WERNER, P. J. KNOWLES, G. KNIZIA, F. R. MANBY, M. SCHÜTZ, P. CELANI, T. KORONA, R. LINDH, A. MITRUSHENKOV, G. RAUHUT, K. R. SHAMASUNDAR, T. B. ADLER, R. D. AMOS, A. BERNHARDSSON, A. BERNING, D. L. COOPER, M. J. O. DEEGAN, A. J. DOBBYN, F. ECKERT, E. GOLL, C. HAMPEL, A. HESSELMANN, G. HETZER, T. HRENAR, G. JANSEN, C. KÖPPL, Y. LIU, A. W. LLOYD, R. A. MATA, A. J. MAY, S. J. MCNICHOLAS, W. MEYER, M. E. MURA, A. NICKLASS, D. P. O'NEILL, P. PALMIERI, D. PENG, K. PFLÜGER, R. PITZER, M. REIHER, T. SHIOZAKI, H. STOLL, A. J. STONE, R. TARRONI, T. THORSTEINSSON et M. WANG. *MOLPRO, version 2012.1, a package of ab initio programs*. <http://www.molpro.net>. 2012 (dans le texte, cité p. 63, 73, 86, 118).
- [132] S. F. BOYS. « Localized orbitals and localized adjustment functions ». *Quantum theory of atoms, molecules, and the solid state*. 1966 (dans le texte, cité p. 68).
- [133] C. EDMISTON et K. RUEDENBERG. *Quantum theory of atoms, molecules, and the solid state*. 1966 (dans le texte, cité p. 68).
- [134] P. SURJÁN. « The Two-Electron Bond as a Molecular Building Block ». *Theoretical Models of Chemical Bonding, Part 2 : The Concept of the Chemical Bond*. 1990 (dans le texte, cité p. 68).
- [135] S. SAEBØ, W. TONG et P. PULAY. « Efficient elimination of basis set superposition errors by the local correlation method : Accurate ab initio studies of the water dimer ». *J. Chem. Phys.* 98 (1993), 2170 (dans le texte, cité p. 68).
- [136] C. HAMPEL et H.-J. WERNER. « Local treatment of electron correlation in coupled cluster theory ». *J. Chem. Phys.* 104 (1996), 6286 (dans le texte, cité p. 68).
- [137] M. SCHÜTZ, G. HETZER et H.-J. WERNER. « Low-order scaling local electron correlation methods. I. Linear scaling local MP2 ». *J. Chem. Phys.* 111 (1999), 5691 (dans le texte, cité p. 68).
- [138] T. L. GILBERT. *Molecular Orbitals in Chemistry, Physics and Biology*. Academic Press, New York, 1964 (dans le texte, cité p. 68).
- [139] H. BRION, R. LEFEBVRE et C. MOSER. « Alternative method for calculating SCF orbitals ». *J. Chem. Phys.* 23 (1955), 1972 (dans le texte, cité p. 68).
- [140] J. P. DAUDEY. « Direct determination of localized SCF orbitals ». *Chem. Phys. Lett.* 24 (1974), 574 (dans le texte, cité p. 68).
- [141] E. R. DAVIDSON. « The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real-symmetric matrices ». *J. Comp. Phys.* 17 (1975), 87 (dans le texte, cité p. 68).
- [142] P. REINHARDT, J.-P. PIQUEMAL et A. SAVIN. « Fragment-Localized Kohn-Sham Orbitals via a Singles Configuration-Interaction Procedure and Application to Local Properties and Intermolecular Energy Decomposition Analysis ». *J. Chem. Theory Comput.* 4 (2008), 2020 (dans le texte, cité p. 68).
- [143] I. MAYER. « On the Derivation of the Hartree–Fock Equations ». *Acta Phys. Hung.* 30 (1971), 373 (dans le texte, cité p. 68).
- [144] I. MAYER. « On the Derivation of the Hartree–Fock Equations III. Introduction of the LCAO Formalism ». *Acta Phys. Hung.* 36 (1974), 11 (dans le texte, cité p. 68).
- [145] C. EDMISTON et K. RUEDENBERG. « Localized Atomic and Molecular Orbitals ». *Rev. Mod. Phys.* 35 (1963), 457 (dans le texte, cité p. 69).

BIBLIOGRAPHIE

- [146] J. M. FOSTER et S. F. BOYS. « Canonical Configurational Interaction Procedure ». *Rev. Mod. Phys.* 32 (1960), 300 (dans le texte, cité p. 69).
- [147] S. F. BOYS. « Construction of some molecular orbitals to be approximately invariant for changes from one molecule to another ». *Rev. Mod. Phys.* 32 (1960), 296 (dans le texte, cité p. 69).
- [148] V. MAGNASCO. « Uniform Localization of Atomic and Molecular Orbitals. I ». *J. Chem. Phys.* 47 (1967), 971 (dans le texte, cité p. 69).
- [149] I. MAYER et P. VALIRON. « Second order Moller–Plesset perturbation theory without basis set superposition error ». *J. Chem. Phys.* 109 (1998), 3360 (dans le texte, cité p. 69).
- [150] I. MAYER. « Orthogonal effective atomic orbitals in the topological theory of atoms ». *Can. J. Chem.* 74 (1996), 939 (dans le texte, cité p. 69).
- [151] S. F. BOYS. « Localized orbitals and localized adjustment functions ». *Quantum Theory of Atoms, Molecules, and the Solid State, A Tribute to John C. Slater*. 1966, 253 (dans le texte, cité p. 69, 74).
- [152] J. PIPEK et P. G. MEZEY. « A fast intrinsic localization procedure applicable for ab initio and semiempirical linear combination of atomic orbital wave functions ». *J. Chem. Phys.* 90 (1989), 4916 (dans le texte, cité p. 70).
- [153] J. G. ÁNGYÁN. « Linear response and measures of electron delocalization in molecules ». *Curr. Org. Chem.* 15 (2011), 3609 (dans le texte, cité p. 70, 92).
- [154] J. E. SUBOTNIK, A. D. DUTOI et M. HEAD-GORDON. « Fast localized orthonormal virtual orbitals which depend smoothly on nuclear coordinates ». *J. Chem. Phys.* 123 (2005), 114108 (dans le texte, cité p. 70).
- [155] E. KAPUY et C. KOZMUTZA. « Calculation of the dispersion interaction energy by using localized molecular orbitals ». *J. Chem. Phys.* 94 (1991), 5565 (dans le texte, cité p. 70).
- [156] P. PULAY. « Localizability of dynamic electron correlation ». *Chem. Phys. Lett.* 100 (1983), 151 (dans le texte, cité p. 70, 71, 116).
- [157] M. SCHÜTZ, G. RAUHUT et H. WERNER. « Local Treatment of Electron Correlation in Molecular Clusters : Structures and Stabilities of $(H_2O)_n$, $n = 2 - 4$ ». *J. Phys. Chem. A* 102 (1998), 5997 (dans le texte, cité p. 70).
- [158] N. BEN AMOR, F. BESSAC, S. HOYAU et D. MAYNAU. « Direct selected multireference configuration interaction calculations for large systems using localized orbitals ». *J. Chem. Phys.* 135 (2011), 014101 (dans le texte, cité p. 70).
- [159] K. KRISTENSEN, I.-M. HØYVIK, B. JANSÍK, P. JØRGENSEN, T. KJAERGAARD, S. REINE et J. JAKOWSKI. « MP2 energy and density for large molecular systems with internal error control using the Divide-Expand-Consolidate scheme ». *J. Chem. Phys.* 14 (2012), 15706 (dans le texte, cité p. 70).
- [160] Z. ROLIK, L. SZEGEDY, I. LADJÁNSZKI, B. LADÓCZKI et M. KÁLLAY. « An efficient linear-scaling CCSD(T) method based on local natural orbitals ». *J. Chem. Phys.* 139 (2013), 094105 (dans le texte, cité p. 70).
- [161] B. JANSÍK, S. HØST, K. KRISTENSEN et P. JØRGENSEN. « Local orbitals by minimizing powers of the orbital variance ». *J. Chem. Phys.* 134 (2011), 194104 (dans le texte, cité p. 70).

BIBLIOGRAPHIE

- [162] I.-M. HØYVIK, B. JANSÍK et P. JØRGENSEN. « Orbital localization using fourth central moment minimization ». *J. Chem. Phys.* 137 (2012), 224114 (dans le texte, cité p. 70).
- [163] F. NEESE, A. HANSEN et D. G. LIAKOS. « Efficient and accurate approximations to the local coupled cluster singles doubles method using a truncated pair natural orbital basis ». *J. Chem. Phys.* 131 (2009), 064103 (dans le texte, cité p. 70).
- [164] J. YANG, Y. KURASHIGE, F. R. MANBY et G. K. L. CHAN. « Tensor factorizations of local second-order Møller–Plesset theory ». *J. Chem. Phys.* 134 (2011), 044123 (dans le texte, cité p. 70).
- [165] A. G. TAUBE et R. J. BARTLETT. « Frozen natural orbital coupled-cluster theory : Forces and application to decomposition of nitroethane ». *J. Chem. Phys.* 128 (2008), 164101 (dans le texte, cité p. 70).
- [166] A. LANDAU, K. KHISTYAEV, S. DOLGIKH et A. I. KRYLOV. « Frozen natural orbitals for ionized states within equation-of-motion coupled-cluster formalism ». *J. Chem. Phys.* 132 (2010), 014109 (dans le texte, cité p. 70).
- [167] M. PITOŇÁK, F. HOLKA, P. NEOGRÁDY et M. URBAN. « Optimized virtual orbitals for correlated calculations : Towards large scale CCSD(T) calculations of molecular dipole moments and polarizabilities ». *J. Mol. Struct. THEOCHEM* 768 (2006), 79 (dans le texte, cité p. 70).
- [168] M. PITOŇÁK, P. NEOGRÁDY, V. KELLÖ et M. URBAN. « Optimized virtual orbitals for relativistic calculations : an alternative approach to the basis set construction for correlation calculations ». *Mol. Phys.* 104 (2006), 2277 (dans le texte, cité p. 70).
- [169] P. J. KNOWLES, M. SCHÜTZ et H.-J. WERNER. « Ab Initio Methods for Electron Correlation in Molecules ». *Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry*. 2000 (dans le texte, cité p. 71, 75).
- [170] P. PULAY et S. SAEBØ. « Orbital-invariant formulation and second-order gradient evaluation in Moller-Plesset perturbation theory ». *Theor. Chim. Acta* 69 (1986), 357 (dans le texte, cité p. 71).
- [171] S. SAEBØ et P. PULAY. « Fourth-order Møller–Plessett perturbation theory in the local correlation treatment. I. Method ». *J. Chem. Phys.* 86 (1987), 914 (dans le texte, cité p. 71).
- [172] J. W. BOUGHTON et P. PULAY. « Comparison of the Boys and Pipek-Mezey localizations in the local correlation approach and automatic virtual basis selection ». *J. Comp. Chem.* 14 (1993), 736 (dans le texte, cité p. 71).
- [173] G. HETZER, P. PULAY et H.-J. WERNER. « Multipole approximation of distant pair energies in local MP2 calculations ». *Chem. Phys. Lett.* 290 (1998), 143 (dans le texte, cité p. 72, 79).
- [174] J. E. SUBOTNIK, A. SODT et M. HEAD-GORDON. « A near linear-scaling smooth local coupled cluster algorithm for electronic structure ». *J. Chem. Phys.* 125 (2006), 074116 (dans le texte, cité p. 72).
- [175] J. E. SUBOTNIK, A. SODT et M. HEAD-GORDON. « The limits of local correlation theory : Electronic delocalization and chemically smooth potential energy surfaces ». *J. Chem. Phys.* 128 (2008), 034103 (dans le texte, cité p. 72).
- [176] E. CHERMAK, B. MUSSARD, J. G. ÁNGYÁN et P. REINHARDT. « Short range DFT combined with long-range local RPA within a range-separated hybrid DFT framework ». *Chem. Phys. Lett.* 550 (2012), 162 (dans le texte, cité p. 72).
- [177] J. M. FOSTER et S. F. BOYS. « A Quantum Variational Calculation for HCHO ». *Rev. Mod. Phys.* 32 (1960), 303 (dans le texte, cité p. 74).

BIBLIOGRAPHIE

- [178] G. ALAGONA et J. TOMASI. « Contracted and uncontracted oscillator orbitals in CI calculations on two electron systems ». *Theor. Chem. Acc.* 24 (1972), 42 (dans le texte, cité p. 74).
- [179] R. RESTA. « Polarization Fluctuations in Insulators and Metals : New and Old Theories Merge ». *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006), 137601 (dans le texte, cité p. 74).
- [180] R. P. STEELE, Y. SHAO, R. A. DI STASIO et e. AL. « Dual-Basis Analytic Gradients. 1. Self-Consistent Field Theory ». *J. Phys. Chem. A* 110 (2006) (dans le texte, cité p. 75).
- [181] K. WOLINSKI et P. PULAY. « Second-order Møller–Plesset calculations with dual basis sets ». *J. Chem. Phys.* (2003) (dans le texte, cité p. 75).
- [182] G. HETZER, M. SCHÜTZ, H. STOLL et H.-J. WERNER. « Low-order scaling local correlation methods II : Splitting the Coulomb operator in linear scaling local second-order Møller–Plesset perturbation theory ». *J. Chem. Phys.* 113 (2000), 9443 (dans le texte, cité p. 79).
- [183] R. McWEENY. « Weak interactions between molecules ». *Croat. Chem. Acta* 57 (1984), 865 (dans le texte, cité p. 81).
- [184] Y. DMITRIEV et G. PEINEL. « Coupled perturbation theory within the antisymmetrized product of separated geminals (APSG) framework ». *Int. J. Quantum Chem.* 19 (1981), 763 (dans le texte, cité p. 81).
- [185] P. L. SILVESTRELLI. « Van der Waals Interactions in Density Functional Theory by combining the Quantum Harmonic Oscillator-model with Localized Wannier Functions ». *arXiv* (2013) (dans le texte, cité p. 82).

Visualisations dans l'espace réel

- [31] J. G. ÁNGYÁN. « On the exchange-hole model of London dispersion forces ». *J. Chem. Phys.* 127 (2007), 024108 (dans le texte, cité p. 30, 81, 87, 92).
- [131] H.-J. WERNER, P. J. KNOWLES, G. KNIZIA, F. R. MANBY, M. SCHÜTZ, P. CELANI, T. KORONA, R. LINDH, A. MITRUSHENKOV, G. RAUHUT, K. R. SHAMASUNDAR, T. B. ADLER, R. D. AMOS, A. BERNHARDSSON, A. BERNING, D. L. COOPER, M. J. O. DEEGAN, A. J. DOBBYN, F. ECKERT, E. GOLL, C. HAMPPEL, A. HESSELMANN, G. HETZER, T. HRENAR, G. JANSEN, C. KÖPPL, Y. LIU, A. W. LLOYD, R. A. MATA, A. J. MAY, S. J. McNICHOLAS, W. MEYER, M. E. MURA, A. NICKLASS, D. P. O'NEILL, P. PALMIERI, D. PENG, K. PFLÜGER, R. PITZER, M. REIHER, T. SHIOZAKI, H. STOLL, A. J. STONE, R. TARRONI, T. THORSTEINSSON et M. WANG. *MOLPRO, version 2012.1, a package of ab initio programs*. <http://www.molpro.net>. 2012 (dans le texte, cité p. 63, 73, 86, 118).
- [153] J. G. ÁNGYÁN. « Linear response and measures of electron delocalization in molecules ». *Curr. Org. Chem.* 15 (2011), 3609 (dans le texte, cité p. 70, 92).
- [186] V. TSCHINKE et T. ZIEGLER. « On the shape of spherically averaged Fermi-hole correlation functions in density functional theory. 1. Atomic systems ». *Can. J. Chem.* 67 (1989), 460 (dans le texte, cité p. 87).
- [187] W. L. LUKEN et D. N. BERATAN. « Localized orbitals and the Fermi hole ». *Theor. Chim. Acta* 61 (1982), 265 (dans le texte, cité p. 87).
- [188] W. L. LUKEN. « Properties of the Fermi hole and electronic localization ». *Properties of the Fermi hole and electronic localization*. 1990, 287 (dans le texte, cité p. 87).

BIBLIOGRAPHIE

- [189] M. A. BUIJSE et E. J. BAERENDS. « An approximate exchange-correlation hole density as a functional of the natural orbitals ». *Mol. Phys.* 100 (2002), 401 (dans le texte, cité p. 87).

EED : Approximation du dénominateur effectif

- [190] A. UNSOLD. « Quantentheorie des Wasserstoffmolekuelions und der Born-Landeschen Abstossungskraefte ». *Z. Physik* 43 (1927), 563 (dans le texte, cité p. 96).
- [191] S. PATIL et K. T. TANG. « Asymptotic method for polarizabilities and dispersion coefficients : With applications to hydrogen and helium systems ». *J. Chem. Phys.* 107 (1997), 3894 (dans le texte, cité p. 96).
- [192] A. T. AMOS et J. A. YOFFE. « The Drude oscillator model with different frequencies for different atomic and molecular properties ». *J. Phys. B : At. Molec. Phys.* 12 (1979), 4021 (dans le texte, cité p. 96, 97).
- [193] J. A. BERGER, L. REINING et F. SOTTILE. « Ab initio calculations of electronic excitations : Collapsing spectral sums ». *Phys. Rev. B* 82 (2010), 041103 (dans le texte, cité p. 96, 99).
- [194] J. A. BERGER, L. REINING et F. SOTTILE. « Efficient calculation of the polarizability : a simplified effective-energy technique ». *Eur. Phys. J. B* 85 (2012), 326 (dans le texte, cité p. 96, 99, 169, 170).
- [195] J. HIRSCHFELDER, W. B. BROWN et S. T. EPSTEIN. « Recent developments in perturbation theory ». *Adv. Quantum Chem.* 1 (1964), 255 (dans le texte, cité p. 98).
- [196] J. O. HIRSCHFELDER. « Classical and Quantum Mechanical Hypervirial Theorems ». *J. Chem. Phys.* 33 (1960), 1462 (dans le texte, cité p. 99).
- [197] J. C. Y. CHEN. « Off-Diagonal Hypervirial Theorem and Its Applications ». *J. Chem. Phys.* 40 (1964), 615 (dans le texte, cité p. 99).

Gradients analytiques des énergies RSH-RPA

- [2] J. G. ÁNGYÁN, R.-F. LIU, J. TOULOUSE et G. JANSEN. « Correlation Energy Expressions from the Adiabatic-Connection Fluctuation–Dissipation Theorem Approach ». *J. Chem. Theory Comput.* 7 (2011), 3116 (dans le texte, cité p. 23, 42, 44, 48, 55, 127, 153).
- [58] J. TOULOUSE, A. SAVIN et H.-J. FLAD. « Short-range exchange-correlation energy of a uniform electron gas with modified electron-electron interaction ». *Int. J. Quantum Chem.* 100 (2004), 1047 (dans le texte, cité p. 30, 31, 121).
- [60] S. PAZIANI, S. MORONI, P. GORI-GIORGI et G. B. BACHELET. « Local spin-density functional for multideterminant density functional theory ». *Phys. Rev. B* 73 (2006), 155111 (dans le texte, cité p. 31, 121).

BIBLIOGRAPHIE

- [131] H.-J. WERNER, P. J. KNOWLES, G. KNIZIA, F. R. MANBY, M. SCHÜTZ, P. CELANI, T. KORONA, R. LINDH, A. MITRUSHENKOV, G. RAUHUT, K. R. SHAMASUNDAR, T. B. ADLER, R. D. AMOS, A. BERNHARDSSON, A. BERNING, D. L. COOPER, M. J. O. DEEGAN, A. J. DOBBYN, F. ECKERT, E. GOLL, C. HAMPEL, A. HESSELMANN, G. HETZER, T. HRENAR, G. JANSEN, C. KÖPPL, Y. LIU, A. W. LLOYD, R. A. MATA, A. J. MAY, S. J. MCNICHOLAS, W. MEYER, M. E. MURA, A. NICKLASS, D. P. O'NEILL, P. PALMIERI, D. PENG, K. PFLÜGER, R. PITZER, M. REIHER, T. SHIOZAKI, H. STOLL, A. J. STONE, R. TARRONI, T. THORSTEINSSON et M. WANG. *MOLPRO, version 2012.1, a package of ab initio programs*. <http://www.molpro.net>. 2012 (dans le texte, cité p. 63, 73, 86, 118).
- [156] P. PULAY. « Localizability of dynamic electron correlation ». *Chem. Phys. Lett.* 100 (1983), 151 (dans le texte, cité p. 70, 71, 116).
- [198] J. REKKEDAL, S. CORIANI, M. F. IOZZI, A. M. TEALE, T. HELGAKER et T. B. PEDERSEN. « Communication : Analytic gradients in the random-phase approximation ». *J. Chem. Phys.* 139 (2013), 081101 (dans le texte, cité p. 107, 122).
- [199] P. POPE, KRISHAN, SCHLEGEL et J. S. BINKLEY. « Derivative studies in Hartree-Fock and Moller-Plesset Theories ». *Int. J. Quantum Chem.* 13 (1979), 225 (dans le texte, cité p. 108).
- [200] N. C. HANDY et H. F. S. III. « On the evaluation of analytic energy derivatives for correlated wave functions ». *J. Chem. Phys.* 81 (1984), 5031 (dans le texte, cité p. 108, 115).
- [201] R. J. BARTLETT. « Analytical evaluation of gradients in coupled-cluster and many-body perturbation theory ». *Geometrical Derivatives of Energy Surfaces and Molecular Properties*. 1986 (dans le texte, cité p. 108).
- [202] R. SHEPARD. *Int. J. Quantum Chem.* 31 (1987), 33 (dans le texte, cité p. 108).
- [203] J. E. RICE et R. D. AMOS. « On the efficient evaluation of analytic energy gradients ». *Chem. Phys. Lett.* 122 (1985), 585 (dans le texte, cité p. 108).
- [204] P. PULAY. « Analytical Derivative Methods in Quantum Chemistry ». *Ab Initio Methods in Quantum Chemistry-II*. 1987, 241 (dans le texte, cité p. 108).
- [205] P. PULAY. « Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules ». *Mol. Phys.* 17 (1969), 197 (dans le texte, cité p. 108).
- [206] P. JØRGENSEN et T. HELGAKER. « Møller-Plesset energy derivatives ». *J. Chem. Phys.* 89 (1988), 1560 (dans le texte, cité p. 108, 109).
- [207] T. HELGAKER et P. JØRGENSEN. « Configuration interaction energy derivatives in a fully variational formalism ». *Theoret. Chim. Acta* 75 (1989), 111 (dans le texte, cité p. 108, 109).
- [208] T. HELGAKER, P. JØRGENSEN et N. C. HANDY. « A numerically stable procedure for calculating Moller-Plesset energy derivatives, derived using the theory of Lagrangians ». *Theoret. Chim. Acta* 76 (1989), 227 (dans le texte, cité p. 108).
- [209] H.-J. WERNER. *Analytical energy gradients*. Rapp. tech. 2003 (dans le texte, cité p. 108, 109).
- [210] P. G. SZALAY. « Analytic Energy Derivatives for Coupled-Cluster Methods Describing Excited States : General Formulas and Comparison of Computational Costs ». *Int. J. Quantum Chem.* 55 (2004), 151 (dans le texte, cité p. 108).
- [211] P. O. LÖWDIN. *Adv. Chem. Phys.* 2 (1959), 207 (dans le texte, cité p. 108).
- [212] T. HELGAKER et J. ALMLÖF. « A second-quantization approach to the analytical evaluation for response properties for perturbation-dependent basis sets ». *Int. J. Quantum Chem.* 26 (1984), 275 (dans le texte, cité p. 108).

BIBLIOGRAPHIE

- [213] M. J. FRISCH, M. HEAD-GORDON et J. A. POPLE. « A direct MP2 gradient method ». *Chem. Phys. Lett.* 166 (1990), 275 (dans le texte, cité p. 115).
- [214] J. GERRATT et I. M. MILLS. « Force Constants and Dipole-Moment Derivatives of Molecules from Perturbed Hartree-Fock Calculations. I ». *J. Chem. Phys.* 49 (1968), 1719 (dans le texte, cité p. 115).
- [215] Y. OSAMURA, Y. YAMAGUCHI, P. SAXE, D. J. FOX, M. A. VINCENT et H. F. SCHAEFER. « Analytic Second Derivative Techniques for Self-Consistent-Field Wave Functions : A New Approach to the Solution of the Coupled Perturbed Hartree-Fock Equations ». *J. Mol. Struct.* 103 (1983), 183 (dans le texte, cité p. 115).
- [216] S. CHABBAL, H. STOLL, H.-J. WERNER et T. LEINENGER. « Analytic gradients for the combined sr-DFT/Ir-MP2 method : application to weakly bound systems ». *Mol. Phys.* 108 (2010), 3373 (dans le texte, cité p. 115, 118).
- [217] E. A. HYLLEAAS. « Über den Grundterm der Zweielektronenprobleme von H^- , He, Li^+ , Be^{++} usw. ». *Z. Phys.* 65 (1930), 209 (dans le texte, cité p. 116).
- [218] C. HAMPEL, K. A. PETERSON et H.-J. WERNER. « A comparison of the efficiency and accuracy of the quadratic configuration interaction (QCISD), coupled cluster (CCSD), and Brueckner coupled cluster (BCCD) methods ». *Chem. Phys. Lett.* 190 (1992), 1 (dans le texte, cité p. 116).
- [219] P. PULAY, S. SAEBOØ et W. MEYER. « An efficient reformulation of the closed-shell self-consistent electron pair theory ». *J. Chem. Phys.* 81 (1984), 1901 (dans le texte, cité p. 116).
- [220] A. EL AZHARY, G. RAUHUT, P. PULAY et H.-J. WERNER. « Analytical energy gradients for local second-order Møller–Plesset perturbation theory ». *J. Chem. Phys.* 108 (1998), 5185 (dans le texte, cité p. 117).
- [221] M. SCHÜTZ, H.-J. WERNER, R. LINDH et F. R. MANBY. « Analytical energy gradients for local second-order Møller–Plesset perturbation theory using density fitting approximations ». *J. Chem. Phys.* 121 (2004), 737 (dans le texte, cité p. 117).
- [222] R. H. HERTWIG. *J. Comput. Chem.* 16 (1995), 576 (dans le texte, cité p. 119).
- [223] V. H. SMITH et I. ABSAR. « concepts of quantum chemistry for electron density studies ». *Isr. J. Chem.* 16 (1977), 87 (dans le texte, cité p. 119).
- [224] V. H. J. SMITH. « Theoretical Determination and Analysis of Electronic Charge Distributions ». *Phys. Scripta* 15 (1977), 147 (dans le texte, cité p. 119).
- [225] T. KORONA. « The effect of local approximations on first-order properties from expectation-value coupled cluster theory ». *Theoret. Chim. Acta* 129 (2010), 15 (dans le texte, cité p. 119).
- [226] T. BUCKO, J. HAFNER et J. G. ÁNGYÁN. « Geometry optimization of periodic systems using internal coordinates ». *J. Chem. Phys.* 122 (2005), 124508 (dans le texte, cité p. 120).
- [227] T. HELGAKER, T. A. RUDEN, P. JØRGENSEN, J. OLSEN et W. KLOPPER. « A priori calculation of molecular properties to chemical accuracy ». *J. Phys. Org. Chem.* 17 (2004), 913 (dans le texte, cité p. 121).
- [228] F. PAWŁOWSKI, P. JØRGENSEN, J. OLSEN, F. HEGELUND, T. HELGAKER, J. GAUSS, K. L. BAK et J. F. STANTON. « Molecular equilibrium structures from experimental rotational constants and calculated vibration–rotation interaction constants ». *J. Chem. Phys.* 116 (2002), 6482 (dans le texte, cité p. 122–125).

BIBLIOGRAPHIE

Un contexte pour la RPA, des discussions autour des fonctions de réponse

- [80] J. TOULOUSE, W. ZHU, J. G. ÁNGYÁN et A. SAVIN. « Range-separated density-functional theory with the random-phase approximation : Detailed formalism and illustrative applications ». *Phys. Rev. A* 82 (2010), 032502 (dans le texte, cité p. 34, 39, 41, 137, 153).
- [229] R. MCWEENY. « 12 - Dynamic Properties and Response Theory ». *Methods of Molecular Quantum Mechanics*. 1989 (dans le texte, cité p. 131, 133, 139–141).
- [230] P. NOZIÈRES. « 2 - Response of a System to External Excitations ». *Theory of Interacting Fermi Systems*. 1997 (dans le texte, cité p. 131, 133).
- [231] P. A. MARTIN. *Mécanique statistique avancée - Physique statistique des processus irréversibles - 7 : Théorie de la réponse linéaire*, p. 139. Rapp. tech. 2004 (dans le texte, cité p. 132).
- [232] R. MCWEENY. « 13 - Propagator and Equation-of-Motion Methods ». *Methods of Molecular Quantum Mechanics*. 1989 (dans le texte, cité p. 133, 134, 141, 142).
- [233] R. D. MATTUCK. « 10 - Dyson's Equation, Renormalization, RPA and Ladder Approximations ». *A Guide to Feynman Diagrams*. 1974 (dans le texte, cité p. 133, 134).
- [234] A. L. FETTER et J. D. WALECKA. « 3 - Green's Functions and Field Theory (Fermions) ». *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. 1971 (dans le texte, cité p. 133, 134, 138).
- [235] A. L. FETTER et J. D. WALECKA. « 15 - Applications to Finite Systems : the Atomic Nucleus ». *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. 1971 (dans le texte, cité p. 133).
- [236] P. NOZIÈRES. « 3 - General Properties of Green's Functions ». *Theory of Interacting Fermi Systems*. 1997 (dans le texte, cité p. 133).
- [237] F. BRUNEVAL. « Exchange and Correlation in the Electronic Structure of Solids, from Silicon to Cuprous Oxide : GW Approximation and beyond ». Thèse de doct. Ecole Polytechnique, 2005 (dans le texte, cité p. 133–135, 137, 138).
- [238] H HANSEN. « Méthodes non-perturbatives en théorie quantique des champs. Au-delà du champ moyen, l'approximation de la phase aléatoire. » Thèse de doct. Université Claude Bernard, 2002 (dans le texte, cité p. 133, 134).
- [239] G STRINATI. « Application of the Green's functions method to the study of the optical properties of semiconductors ». *Riv. Nuovo Cimento* 11 (1988), 1 (dans le texte, cité p. 133, 134).
- [240] B. ONIDA, L. REINING et A. RUBIO. « Electronic excitations : density-functional versus many-body Green's-function approaches ». *Rev. Mod. Phys.* 74 (2002), 601 (dans le texte, cité p. 133, 134, 137, 138).
- [241] L. HEDIN. « New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem ». *Phys. Rev.* 139 (1965), A796 (dans le texte, cité p. 136).
- [242] J. HUBBARD. « The Description of Collective Motions in Terms of Many-Body Perturbation Theory ». *Proc. Roy. Soc. A* 240 (1957), 539 (dans le texte, cité p. 136).
- [243] E. E. SALPETER et H. A. BETHE. « A Relativistic Equation for Bound-State Problems ». *Phys. Rev.* 84 (1951), 1232 (dans le texte, cité p. 137).

Éléments d'intégration complexe

- [244] L. AHLFORS. « Complex Integration ». *Complex Analysis, An Introduction to the Theory of Analytic Functions of One Complex Variable*. 1979 (dans le texte, cité p. 145–147).
- [245] A. D. McLACHLAN, R. D. GREGORY et M. A. BALL. « Molecular interactions by the time-dependent Hartree method ». *Mol. Phys.* 7 (1963), 119 (dans le texte, cité p. 151).

Détails de l'adaptation de spin

- [2] J. G. ÁNGYÁN, R.-F. LIU, J. TOULOUSE et G. JANSEN. « Correlation Energy Expressions from the Adiabatic-Connection Fluctuation–Dissipation Theorem Approach ». *J. Chem. Theory Comput.* 7 (2011), 3116 (dans le texte, cité p. 23, 42, 44, 48, 55, 127, 153).
- [80] J. TOULOUSE, W. ZHU, J. G. ÁNGYÁN et A. SAVIN. « Range-separated density-functional theory with the random-phase approximation : Detailed formalism and illustrative applications ». *Phys. Rev. A* 82 (2010), 032502 (dans le texte, cité p. 34, 39, 41, 137, 153).
- [246] J. TOULOUSE, W. ZHU, A. SAVIN, G. JANSEN et J. G. ÁNGYÁN. « Closed-shell ring coupled cluster doubles theory with range separation applied on weak intermolecular interactions ». *J. Chem. Phys.* 135 (2011), 084119 (dans le texte, cité p. 153).

Dérivations autour de l'approximation EED

- [194] J. A. BERGER, L. REINING et F. SOTTILE. « Efficient calculation of the polarizability : a simplified effective-energy technique ». *Eur. Phys. J. B* 85 (2012), 326 (dans le texte, cité p. 96, 99, 169, 170).
- [247] F. MULDER et W. J. MEATH. « Multipole sum rules. Ab initio SCF calculations for H_2 , BH_3 , CH_4 , NH_3 , H_2O , HF , N_2 , CO ». *Mol. Phys.* 42 (1981), 629 (dans le texte, cité p. 170).
- [248] R. JACKIW. « Quantum-Mechanical Sum Rules ». *Phys. Rev. B* 157 (1967), 1220 (dans le texte, cité p. 170).