Bonjour, je travaille dans un système de coordonnées elliptiques et l'expression de la fonction d'onde est la suivante en omettant volontairement le terme en exponentiel(i phi) :

$\psi = \sum_{i=1}^{2} c_{ij} \sum_{p=0}^{n(j)} \sum_{q=0}^{n'(j)} \lambda^p \mu^q e^{-\alpha_j R/2} (\lambda + \epsilon_i \mu) \left[\sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \right]^m$

Un tel système de coordonnées est utile dans un cas diatomique.
Nous considérons deux centres A et B (ou 1 et 2).
Le terme m caractérise la symétrie orbitale (L)
Le terme ϵ_i vaut 1 pour le centre 1 ou A et deux pour le centre 2 ou B
On a :

$$\lambda = \frac{r_{A+} r_B}{R} \tag{1}$$

$$\mu = \frac{r_{A-} r_B}{R} \tag{2}$$

On considère des orbitales de type Slater qui ont la forme ci-dessous :

$$R_n(r) = N r^n e^{-\alpha R} \tag{3}$$

Les coefficients $\alpha_j$correspondent donc aux coefficients des orbitales de Slater
Je cherche à calculer

$$I =< \Psi / A / \psi > \tag{4}$$

qui vaut $I = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^{1} \int_1^{\infty} \psi * \hat{A} \psi \frac{R^3}{8} (\lambda^2 - \mu^2) d\varphi d\lambda d\mu$

$$d\varphi = 2\pi$$

Ensuite je fais la différence entre \psi*et psi en affectant les indices g et d (pour fonction siuée à gauche ou à droite) à leurs différents paramètres comme ci-dessous

$$I = \int_{-1}^{1} \int_{1}^{\infty} 2\pi \frac{R^3}{8} \sum_{i=1}^{2} c \sum_{p=0}^{n(j)} \sum_{q=0}^{n'(j)} \lambda^{pg} \mu^{qg} e^{-\alpha_{gj} r/2} (\lambda + \varepsilon_{gi} \mu) \left[\sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \right]^{mg} \tag{5}$$

$$(suite) A \ \lambda^{pd} \mu^{qd} e^{-\alpha_{dj} r/2} (\lambda + \varepsilon_{di} \mu) \left[\sqrt{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \right]^{md} (\lambda^2 - \mu^2) d\lambda d\mu$$

Je cherche donc à calculer cette intégrale de manière numérique, si quelqu'un connnaissait un moyen de résoudre ce calcul, cela serait très sympathique. J'ai regardé du côté des intégrales de GAUSS et des Developpements limités mais sans succès, je sèche. A l'aide. Merci