

$$H\Psi = E\Psi$$

Couplage Spin–Orbite

Inclus

Perturbation

Approche relativiste

Approche non–relativiste

Équations de Hartree–Fock

Équations de Kohn–Sham

$$\tilde{h}_i \tilde{\Phi}_i = \tilde{\epsilon}_i \tilde{\Phi}_i$$

$$h_i \Phi_i = \epsilon_i \Phi_i \text{ avec } n = \Phi_i^2$$