

# Énergies de dissociation limite pour différents modèles dans le cadre de la DFT

*lundi 15 janvier 2024 13:30 (1 heure)*

Je présenterai quelques problèmes de calcul des variations qui apparaissent dans l'étude de l'état fondamental d'une molécule dans le cadre de la théorie des fonctionnelles de densité (DFT).

**Orateur:** CHAMPION, Thierry (Université de Toulon)