

Séminaire LIONS

Jeudi 22 Mars à 11h, pce. 157, bât. 125

Théorie de la fonctionnelle de la densité classique: application à la solvation moléculaire

DANIEL BORGIS

Département de Chimie, UMR PASTEUR

Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 PARIS Cedex 05

Je montrerai comment la fonctionnelle de la densité classique, développée en mécanique statistique, peut se nourrir des méthodes numériques de la DFT électronique et être utilisée pour résoudre des problèmes d'intérêt physico-chimique, comme la solvation moléculaire ou la structure d'interface complexes.

Quelques références:

- [1] R. Ramirez, R. Gebauer, M. Mareschal, and D. Borgis, Phys. Rev. E, 66, 031206 (2002).
- [2] R. Ramirez and D. Borgis, J. Phys. Chem B 109, 6754 (2005).
- [3] S. Zhao, R. Ramirez, R. Vuilleumier, and D. Borgis, J. Chem. Phys. 134, 194102 (2011)
- [4] D.Borgis, L.Gendre, and Rosa Ramirez, J. Phys. Chem. B (2012) DOI: 10.1021/jp210817s