

Introduction aux aspects mathématiques de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et de sa variante N-centrée

Guillaume Grente (IRMA et IRIMAS)

Résumé: Après une brève présentation à la DFT, théorie établie dans l'optique d'étudier l'état fondamental de systèmes électroniques, nous verrons comment celle-ci (ainsi que sa variante N-centrée) peut être décrite avec le formalisme mathématique de l'analyse convexe. Ceci nous permettra de mettre en avant certaines difficultés mathématiques inhérentes à cette théorie et nous mènera à discuter de l'utilisation de méthodes de régularisation dans le but de les résoudre.