



Eric Cancès, École Nationale des Ponts et Chaussées, Marne-la-Vallée, France;
Claude Le Bris, École Nationale des Ponts et Chaussées, Marne-la-Vallée, France;
Yvon Maday, Université Pierre et Marie Curie, France

Méthodes mathématiques en chimie quantique. Une introduction

Ce cours est une introduction à la modélisation mathématique et à l'analyse numérique pour la chimie moléculaire quantique, un champ peu connu des mathématiciens et pourtant riche en sujets d'investigation. Le point de vue choisi est celui du mathématicien appliqué. Le cours est construit de manière auto-consistante. Seules des notions de base en analyse fonctionnelle sont requises pour l'aborder. Les outils mathématiques plus élaborés sont introduits progressivement et les connaissances nécessaires en physique et en théorie spectrale sont regroupées dans des annexes. On présente d'abord les modèles les plus utilisés en pratique. Puis, on analyse ces modèles d'un point de vue mathématique (questions d'existence de solutions, d'unicité, ...). On introduit ensuite les différentes stratégies numériques employées pour la résolution pratique, et on fournit, quand ceci est possible, des éléments d'analyse numérique de ces méthodes. Les liens existants entre les modèles de la chimie moléculaire et des sujets connexes sont aussi explorés : modélisation de la phase liquide, physique de l'état cristallin, biologie, simulation des matériaux, ... Le cours peut aussi intéresser le chimiste ou le physicien curieux de comprendre les techniques mathématiques dont relèvent les modèles qu'il utilise, et de découvrir comment de telles techniques peuvent améliorer significativement l'efficacité et la qualité des simulations numériques.

Contents: Présentation succincte des modèles.- Un problème modèle sur un domaine borné.- Le même problème sur l'espace tout entier.- Un cas difficile : fonctionnelle d'énergie non convexe sur l'espace entier.- Le modèle de Hartree-Fock.- Simulation numérique des modèles.- Choix des bases.- Convergence des algorithmes SCF.- Modèles pour les phases condensées.- Un cas périodique.- Ouvertures.- Annexes.- Références.- Index.

2006 XV, 409 p. Broché
Mathématiques et Applications, tome 53
ISBN 3-540-30996-9 • € 76.73 | £ 59.00

available

Order Now!

Yes, please send me

___ copies Cancès/Le Bris/Maday: Chimie Quantique (Math. et Applic. 53)
ISBN 3-540-30996-9 € 76.73 | £ 59.00

- Please bill me
 Please charge my credit card: Eurocard/Access/Mastercard Visa/Barclaycard/Bank/Americard AmericanExpress

Number Valid until

Available from

Springer
Distribution Center GmbH
Haberstr. 7
69126 Heidelberg
Germany

Name
Dept.
Institution
Street
City / ZIP-Code
Country
Email
Date ✕
Signature ✕