

# Séminaire de Chimie Théorique

Salle groupe theo 3eme Est, Bat. A12  
Jeudi 29 Novembre 2012 à 15:30

---

Pr. Majdi HOCHLAF

Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Echelle

Equipe de Chimie Théorique, 5, Boulevard Descartes, 77454, Marne-la-Vallée Cedex 2

---

## Calculs de structure électroniques: des problèmes et quelques solutions

A travers quelques exemples, je montrerai les performances et les limites des méthodes de calculs électroniques pour le traitement des systèmes moléculaires dans leurs états électroniques fondamentaux, électronique excités de valence et dans des états à fort mélange Valence-Rydberg. La comparaison avec les résultats expérimentaux les plus précis permet de montrer les performances et les limites de ces approches. Je montrerai également les possibilités de développements futurs pour y remédier.

Contact : [t.stoecklin@ism.u-bordeaux1.fr](mailto:t.stoecklin@ism.u-bordeaux1.fr)