



# SEMINAIRE ISMO

## Fabien GATTI

*Institut Charles Gerhardt, Université de Montpellier*

### **Description quantique complète des processus moléculaires à l'aide de l'approche Multi-Configuration Time-Dependent Hartree (MCTDH)**

La méthode MCTDH et le logiciel de Heidelberg qui lui est associé est probablement la première approche à caractère général pour la description quantique du mouvement des noyaux dans les processus moléculaires. Il s'agit d'une méthode de propagation de paquets d'ondes couplée à un principe variationnel (méthode de type MCSCF dépendante du temps). L'utilisation du principe variationnel permet de traiter des systèmes plus grands que par les approches standards.

Après une introduction générale de la méthode et des problèmes méthodologiques (nécessité de surfaces d'énergie potentielle et d'une description en termes de coordonnées curvilignes pour les mouvements de grande amplitude), nous présenterons un panorama des différents types d'applications possibles :

- Spectroscopie UV et Infrarouge (pyrazine 24 dimensions, Dimère de l'eau protoné 15 dimensions).
- Processus guidés par effets lasers dans le contexte de la femtochimie et de l'attospectroscopie (contrôle par effet Stark, destruction ou accélération de l'effet tunnel, contrôle des transferts d'énergie vibrationnelle intramoléculaire, etc...).
- Calculs de sections efficaces de collisions entre molécules et de diffusion sur des surfaces métalliques.

D'autre part, nous présenterons les développements méthodologiques les plus récents :

- Extension de la méthode MCTDH pour résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps de façon très précise : calcul d'états propres (malonaldéhyde à 21 dimensions) et calculs de résonances quantiques.
- Développement de la version « multi-couche » de MCTDH qui va permettre de faire un bon considérable dans la taille des systèmes jusqu'à la phase condensée.

**Attention !  
Jour  
inhabituel**

**Vendredi 12 juin 2015 à 11h  
Bât 210 – Amphi 1 (2<sup>ème</sup> étage)  
Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex**