



SEMINAIRE ISMO

Jacky Liévin

*Service de Chimie Quantique et Photophysique
Université Libre de Bruxelles, Belgique*

Calculs *ab initio* de grande taille sur des petits hydrocarbures d'intérêt astrophysique : théorie et applications.

Dans cet exposé, nous ferons le point sur les avancées des méthodes de calcul *ab initio* hautement corrélé, appliquées conjointement à la détermination des structures électroniques et ro-vibrationnelles de petits hydrocarbures comme le méthane et l'acétylène. Les transferts méthodologiques exploités pour passer de la description des degrés de liberté électroniques à ceux des noyaux seront évoqués et illustrés par divers exemples. L'intérêt de ces calculs quantiques, qui pour de tels systèmes peuvent être amenés à convergence des bases utilisées, est d'apporter un support prédictif et interprétatif solide aux observations expérimentales.

Les applications, où la synergie expérience-théorie sera mise en évidence, concerneront notamment : la détermination précise de structures d'équilibre, l'étude d'états électroniques hautement excités, en particulier les états de Rydberg du système acétylène/vinylidène, la spectroscopie des complexes formés par l'acétylène avec un atome de gaz rare et le calcul *ab initio* du spectre ro-vibrationnel du méthane.

* * * * *

Mardi 20 mars 2012 à 11 h 00
Bât. 351 (2^{ème} étage)
Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex