

Méthode vibrationnelle SCF

Responsable de stage : Yohann Scribano
Equipe Astrophysique Stellaire
Laboratoire Univers et Particules de Montpellier

Contexte :

La spectroscopie vibrationnelle s'intéresse aux transitions entre les niveaux vibrationnels d'un système donné que l'on peut rencontrer en physique moléculaire (spectroscopie moléculaire infra rouge) ou en physique nucléaire (vibration des noyaux). Les données expérimentales obtenues (par les différentes techniques adaptées au problème physique) nécessitent des prédictions théoriques pour leur interprétation ainsi que pour une meilleure compréhension de la structure quantique de la matière (noyaux et collisions à basse énergie, molécules et structure de la matière condensée . . .). Une modélisation quantitative de ces spectres vibrationnels au moyen des outils de la physique quantique représente un domaine actif de recherche de par l'intérêt suscité pour leur applications technologiques ou fondamentales.

Une des approches théoriques couramment utilisée pour traiter le problème à N corps (constituants dépendant du domaine physique considéré) de façon simplifiée consiste à employer le formalisme de la théorie de champ moyen de Hartree (et Hartree-Fock pour les fermions) basé sur l'approximation de particules indépendantes. Dans ce type d'approche, chaque particule obéit à une équation de type Schrödinger mais évoluant dans un potentiel effectif moyenné sur les états propres des autres particules. Ce processus est notamment utilisé en physique moléculaire [1] (méthode vibrationnelle SCF) pour pouvoir calculer les spectres vibrationnels de systèmes polyatomiques d'intérêt atmosphérique ou astrophysique (atmosphère planétaire et milieu interstellaire).

Objectif du stage :

Durant ce stage, l'étudiant(e) se formera aux méthodes théoriques de champ moyen de type Hartree et sera illustré dans le contexte de la physique moléculaire. Une illustration de cette méthode sera faite pour un système modèle [2] et une partie du stage sera notamment consacrée à l'utilisation d'un code numérique [3] pour illustrer cette méthode.

Pré-requis : Physique quantique, thorie de la diffusion ; outils de programmation Fortran 90/95.

Références :

1. J. Bowman, K. M. Christoffel and F. L. Tobin, *J. Phys. Chem.* 83, 905, 1979.
2. A. V. Sergeev and D. Z. Goodson, *Int. J. Inter. Chem. Phys.* vol 93, pages 477-484, 1998.
3. Y. Scribano, D. M. Lauvergnat and D. M. Benoit, *J. Chem. Phys.* vol 133, page 094103 (2010)