

Etude des collisions moléculaires par la méthode des trajectoires quasi-classiques

Responsable de stage : Duncan Bossion, Yohann Scribano
Equipe Astrophysique Stellaire, LUPM, Montpellier

Contexte :

L'étude des processus de formation/destruction de H_2 représente un domaine actif de recherche en astrophysique moléculaire de par le fait qu'il s'agit de la molécule la plus abondante dans l'Univers. Si de nombreux résultats théoriques au moyen de méthodes quantiques sophistiquées [1,2] (approches dépendantes ou indépendantes du temps) ont récemment permis de fournir des constantes de vitesse dans le milieu interstellaire froid ($T < 100$ K) il en est tout autrement pour les environnements chauds ($T > 2000$ K) comme les atmosphères stellaires. Pour ce type d'environnement, les approches usuelles quantiques sont très coûteuses du point de vue numérique et une étude au moyen d'un formalisme classique (ou quasi-classique) permet un bon compromis entre précision et efficacité numérique. La dynamique des noyaux obéit aux équations de Hamilton et les états internes de la molécule initiale et finale est décrite par un traitement quantique.

Objectif du stage :

Durant ce stage, l'étudiant(e) se formera aux méthodes théoriques et numériques des trajectoires quasi-classiques [3]. Une application de ce travail consistera à utiliser le code numérique pour le processus $H_2(v, j) + H$ dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer. Il s'agira également de faire une analyse de la dynamique en fonction du type classification des trajectoires (modèle HB, GB, ...). Un développement du code pourra aussi être envisagé concernant la détermination des états propres quantiques du fragment diatomique (réactif ou produit).

Pré-requis : Physique atomique et moléculaire, théorie des collisions, outils de programmation (Fortran 90/95).

Références :

1. P. Honvault and J.-M. Launay. Theory of Chemical Reaction Dynamics, pages 187-218. Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004.
2. T. Gonzalez-Lezana, Y. Scribano and P. Honvault. J. Phys. Chem A, 118(33), pages 6416-6424, 2014.
3. Ralph D. Levine. Molecular reaction reaction dynamics. Cambridge University Press, New York, 2005.