

# Approche RPMD pour les collisions moléculaires réactives à basse température

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

## Contexte :

Pour les collisions moléculaires de type  $A + BC \rightarrow AB + C$  (atome-diatome) se produisant à des températures suffisamment élevées et impliquant des atomes lourds, la dynamique moléculaire classique peut être utilisée pour obtenir des constantes de vitesse cinétiques précises. Aux basses températures (comme celles rencontrées dans le milieu interstellaire), en particulier pour les réactions impliquant le mouvement des atomes légers, ces méthodes classiques échouent car les effets de la mécanique quantique (tels que l'énergie du point zéro, l'effet tunnel et la cohérence quantique) deviennent critiques. Par ailleurs, il est encore impossible de résoudre le problème de la diffusion quantique réactionnelle pour plus de quelques atomes [1].

Au cours des deux dernières décennies, un certain nombre de méthodes quantiques approchées, qui évitent les complications de la formulation quantique complète, ont été proposées. L'une de ces méthodes approximatives - la méthode RPMD (Ring Polymer Molecular Dynamics) - a été récemment développée comme une alternative efficace aux méthodes de la théorie des états de transition [2]. Elle a notamment été appliquée avec succès pour le calcul des constantes de vitesse pour lesquelles l'effet tunnel joue un rôle important [3].

## Objectif du stage :

Durant ce stage, l'étudiant(e) se formera au formalisme de la méthode RPMD. Une partie de ce travail consistera à exploiter le code numérique RPMDrate et illustrera son efficacité sur l'étude de la réaction  $H + H_2$  afin de déterminer la constante de vitesse thermalisée. Une partie de ce travail consistera à évaluer l'influence de la surface de potentiel électronique utilisée dans le calcul de la constante de vitesse. Une étude des effets isotopiques sur la constante de vitesse pourra également être envisagée.

**Pré-requis :** Physique des collisions atomiques et moléculaires, méthodes numériques en physique, langage de programmation Fortran 90/95, système d'exploitation Linux/Unix.

## Références :

1. P. Honvault and Y. Scribano, J. Phys. Chem. A, (2013), 117 (39)
2. Suleimanov, Yu. V.; Aoiz, F. J.; Guo, J. Phys. Chem. A, 2016, 120, 8488
3. de Tudela, R. P.; Suleimanov, Yu. V.; Richardson, J. O.; Green, W. H.; Rabanos, V. S.; Aoiz, F. J., J. Phys. Chem. Lett. 2014, 5, 4219.