

Arnaud Leclerc (Metz)

Amphi IPREM - 11h

Le 6 avril 2017



Calcul de spectres vibrationnels sans mise en mémoire de vecteurs multidimensionnels

Arnaud Leclerc¹, Tucker Carrington², Phillip Thomas²

¹Laboratoire SRSMC, UMR 7565 CNRS-Université de Lorraine, 1 Bd Arago 57070 Metz.

²Chemistry department, Queen's University, Kingston, Ontario K7L3N6, Canada.

Arnaud.Leclerc@univ-lorraine.fr

Nous présentons des méthodes itératives qui permettent de déterminer les états propres d'un système quantique de dimensionnalité élevée, avec un coût mémoire significativement réduit. Le calcul de spectres vibrationnels de molécules polyatomiques appartient à cette catégorie car il implique la description de nombreuses coordonnées qui doivent être associées chacune à un jeu de fonctions de base. Cela engendre en principe un coût mémoire augmentant exponentiellement avec le nombre d'atomes dans la molécule considérée. Afin de limiter ce coût, nous construisons des fonctions de base intermédiaires sous la forme de sommes de produits de fonctions à une dimension, dont les facteurs sont progressivement optimisés. La nouvelle difficulté réside alors dans le compromis à trouver entre une nécessaire limitation du rang (nombre de termes dans les développements) et flexibilité suffisante pour décrire correctement les fonctions d'ondes vibrationnelles. Des approches fondées sur l'itération puissance, l'itération de Chebyshev et l'algorithme de Davidson sont développées dans ce cadre, avec comme cas d'étude la molécule d'acétonitrile, un problème à 12 dimensions [1-3].

[1] A. Leclerc et T. Carrington, J. Chem. Phys. 140, 174111 (2014)

[2] A. Leclerc et T. Carrington, Chem. Phys. Lett. 644, 183 (2016)

[3] A. Leclerc, P.S. Thomas et T. Carrington, Mol. Phys. DOI : 10.1080/00268976.2016.1249980 (2016)



Jeudi 6 avril 2017, 11h - Amphi IPREM