



LABORATOIRE FRANCIS PERRIN
CEA/DSM/IRAMIS/SPAM - CNRS URA 2453



SEMINAIRE SPAM / LFP



Jacky LIEVIN

Service de Chimie Quantique et Photophysique,
Bruxelles, Belgique, jlieven@ulb.ac.be

Le jeudi 2 Juillet 2009 à 11h00
Bâtiment 522 - Salle 138

«Caractérisation de la structure moléculaire excitée par calculs *ab initio*»

Dans ce séminaire, nous présenterons une série choisie d'applications récentes de la chimie quantique *ab initio*, qui illustrent différentes facettes de la caractérisation théorique de la structure et de la réactivité de petites molécules en phase gazeuse : étude des états excités, détermination de la topologie des surfaces d'énergie potentielle, obtention de structures d'équilibre précises, étude des vibrations anharmoniques, prédictions spectrales, caractérisation de la dynamique collisionnelle... Les méthodes utilisées seront décryptées en fonction des couplages mis en œuvre (corrélation électronique, effets relativistes, couplages non-adiabatiques, mélanges Rydberg-valence, interactions de van der Waals, anharmonicité vibrationnelle...). L'analyse des performances et des limitations des calculs nous permettra de poser les défis méthodologiques à franchir pour aborder des systèmes de plus grandes tailles et pour sonder la structure moléculaire hautement excitée.

Formalités d'entrée :

Visiteur U.E. : Se faire connaître au moins 48 heures à l'avance pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le Centre de Saclay.

Visiteur hors U.E. : Se faire connaître au moins 4 jours à l'avance pour les formalités d'entrée et se faire accompagner par un agent CEA.

Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le Centre de Saclay. Tél. : 33.1.69.08.30.95 - Fax : 33. 1.69.08.76.39 - email : caroline.lebe@cea.fr ou veronique.gereczy@cea.fr

Dans TOUS LES CAS, se munir d'une pièce d'identité (passeport et carte d'identité - pas de permis de conduire)