Université de Monastir
Faculté des Sciences
Département de Physique

stage de Master de Recherche en Physique
Parcours:
MNS, PQ

sujet: Etude théorique ab initio des systèmes alcalins-métaux de transition, structure électronique et spectroscopique.

Proposé par: Héla HABLI
Contact(email): hablihela@gmail.com
Structure de recherche: LPQS

Directeur de la structure de recherche: Gazzah Mohamed Hichem
Le sujet sera suivi par une thèse: Oui

Résumé:
Ce travail porte sur l'étude des systèmes moléculaires Alcalin-métaux de transition. Ces systèmes jouent un rôle puissant dans la dynamique de collision, le refroidissement laser, astrophysique, etc. Cette étude sera effectuée dans la représentation 2s+1Λ(+/-) par les différentes méthodes théoriques implantées dans le logiciel MOLPRO telles que: la théorie du champ auto-cohérent multi-configurationnel (MCSCF), la théorie du champ auto-cohérent de l'espace actif complet (CASSCF) et la méthode d'interaction de configuration multi-référence avec la correction de Davidson (MRCI+Q). Par la suite, les courbes d'énergie potentielle, les niveaux vibrationnels et les moments dipolaires seront déterminés pour l'état fondamentale et les états excités. Les paramètres spectroscopiques (Re, Te, De, Be, ωe et ωeχe) ainsi que les points tournants (Rmin, Rmax) seront déduites pour chaque état électronique et comparées aux résultats théoriques et expérimentaux disponibles dans la littérature.
Références: