

Titre: Une méthode de diabatisation efficace pour les diatomiques et autorisant des applications vibroniques.

F.X. GADEA

Résumé: Après des rappels sur l'intérêt des approches diabatiques et adiabatiques, une méthode très efficace pour les diatomiques sera présentée ainsi que les résultats obtenus pour la molécule LiH notamment, pour diverses grandeurs comme l'énergie potentielle, les moments dipolaires électriques ou le couplage radial. Nous montrerons ensuite l'intérêt des résultats diabatiques couplés à une approche vibronique et une représentation pseudo spectrale pour une estimation d'effets nonadiabatiques comme le déplacement vibronique et la durée de vie nonradiative ou encore la section efficace lors de collisions.