

# Paramétrisation Polysphérique d'un système à N atomes : Principes et Applications

Christophe Iung<sup>1</sup> and Fabien Gatti<sup>2</sup>

LSDSMS (UMR-CNRS 5636), CC 014, Université Montpellier II  
34095 Montpellier Cedex 05 (France)

Nous présenterons dans cet exposé la paramétrisation polysphérique d'un système comportant N atomes. Dans cette formulation générale, un système à N atomes est décrit par un bouquet de (N-1) vecteurs  $\{\mathbf{R}_i, (i = 1, \dots, N-1)\}$  choisis par l'utilisateur et repérés par leurs coordonnées sphériques  $(R_i, \theta_i, \phi_i)$  dans le repère "Body Fixed". Nous présenterons la méthode générale permettant d'établir l'expression générale de l'opérateur Énergie Cinétique en fonction du moment angulaire total  $\mathbf{J}$  et soit des moments angulaires  $\{\mathbf{L}_i; (i = 1, \dots, N-2)\}$  soit des moments conjugués  $\{(p_{R_i}, p_{\theta_i}, p_{\phi_i}); (i = 1, \dots, N-2)\}$  associés aux coordonnées polysphériques. Nous proposerons d'adopter une définition précise du repère BF mais montrerons comment l'on peut facilement adapter cette paramétrisation afin de modifier sa définition et exploiter des spécificités du système étudié. Nous montrerons comment cette formulation peut être facilement et efficacement couplées à des méthodes numériques performantes de résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps ou de propagation d'un paquet d'onde. Nous mentionnerons en particulier les applications concrètes de cette paramétrisation effectuées récemment soit par notre groupe soit par d'autres groupes afin d'étudier la spectroscopie infrarouge et la dynamique d'un grande variété de systèmes polyatomiques semi-rigides ou de systèmes présentant des mouvements de grande amplitude.

## Références

- X. Chapuisat et C. Iung, Physical Review A, **45**,6217 (1992)  
F. Gatti, C. Iung, M. Menou, Y. Justum, A. Nauts et X. Chapuisat, J. Chem. Phys, **108**,8804 (1998)  
F. Gatti, C. Iung, M. Menou et X. Chapuisat, J. Chem. Phys, **108**,8821 (1998)  
F. Gatti, J. Chem. Phys. **111**, 7225 (1999)  
F. Gatti, C. Munoz et C.Iung, J. Chem. Phys. **114**,8275 (2001)  
F. Gatti et C. Iung, J. Theor. Comp. Chem, **2**,507 (2003)  
F. Gatti et A. Nauts, Chem. Phys., **295**,167 (2003)  
C. Iung, F. Gatti, A. Viel et X. Chapuisat, Phys. Chem. Chem. Phys., **1**, 3377 (1999)  
C. Iung et F. Gatti, International Journal of Quantum Chemistry, sous presse (2006)

---

<sup>1</sup>iung@univ-montp2.fr

<sup>2</sup>gatti@univ-montp2.fr