

# **FACTORISATION EXACTE POUR LA DYNAMIQUE NON-ADIABATIQUE À PLUSIEURS DIMENSIONS**

**Francesco Talotta, Lorenzo Ugo Ancarani**

Dans le domaine de la physique moléculaire, la dynamique non-adiabatique des états excités revêt un intérêt pour des applications variées, de la biologie à la science des matériaux. L'utilisation d'outils numériques pour la modélisation de ces processus implique des méthodes approximées, notamment l'approche surface-hopping, qui permet de traiter des systèmes à plusieurs dimensions mais intrinsèquement implique des approximations qui limitent l'interprétation des phénomènes quantiques.

Pour surmonter ces limites, l'algorithme G-CT-MQC, basé sur la théorie de la factorisation exacte, émerge comme une approche prometteuse. Dans l'état actuel, l'application de l'algorithme G-CT-MQC reste cependant encore limité à des systèmes modèles à une ou deux dimensions, en raison des contraintes computationnelles. Dans ce projet de recherche, nous visons à développer et étendre le domaine d'application de cet algorithme pour étudier la dynamique des états excités des systèmes moléculaires à plusieurs dimensions. Les résultats de l'algorithme G-CT-MQC serviront de référence précise pour guider l'amélioration des approximations dans le cadre des méthodes de surface-hopping, visant à affiner les modèles tout en préservant l'efficacité computationnelle.