

Propriétés d'optique non linéaire des matériaux

Michel RERAT

Equipe de chimie physique, IPREM, UMR5254, e2s UPPA

Dans ce travail avec utilisation du cluster, il s'agit d'implémenter et programmer (en FORTRAN essentiellement) des méthodes de calcul de propriétés électroniques et vibrationnelles de matériaux dans le code CRYSTAL (www.crystal.unito.it), programme international de calcul de fonctions d'onde pour les systèmes périodiques. Une application sur la biréfringence sera présentée.