MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DJILLALI LIABES SIDI BEL ABBES

FACULTE DES SCIENCES

RESUME DE THESE DE DOCTORAT

Nom & Prénom(s)	ZEMOULI Mostefa
E-mail (obligatoire)	Mostefa.zemouli@univ-saida.dz m_zemouli@yahoo.fr
Spécialité	Physique
Titre	Analyse des spectres infrarouges haute résolution des molécules non-rigides $^{15}NH_2D$, $^{15}ND_2H$ et CH_2DOH
Date de soutenance	24 juin 2014
Nom, prénom(s) et grade de l'encadreur	BELGOUMENE Berrrezoug Professeur

Résumé :

Au cours de cette thèse, on a procédé à une étude théorique des spectres d'absorption haute résolution des molécules non-rigides CH_2DOH, $^{15}NH_2D$ et $^{15}ND_2H$.

En ce qui concerne CH_2DOH, nous nous sommes intéressés au spectre de rotation-torsion. La première approche théorique visant à calculer les niveaux d'énergie d'une molécule non-rigide présentant une rotation interne top-asymétrique frame-asymétrique est développée. Elle est appliquée à l'analyse de la position des raie du spectre à haute résolution de la molécule non rigide de CH_2DOH et permet de réaliser une analyse globale d'un ensemble de données constitué de données déjà disponibles, et des transitions micro-ondes et infrarouges lointains mesurées dans ce travail. L'analyse se limite aux trois niveaux de torsion les plus bas (e_0, e_1, et o_1) avec $K \leq 11$ et une valeur de $J \leq 26$. Pour les 8329 lignes analysées, la déviation standard sans unité est de 2,6 et 103 paramètres sont déterminés comprenant l'énergie cinétique, le potentiel gênant la rotation interne, et les paramètres d'effets de distorsion.

En ce qui concerne les deux molécules d'ammoniac partiellement deutéré, leurs spectres de rotation-inversion ont été analysés et environ 220 transitions ont été attribuées pour chaque molécule. L'analyse de ces données a conduit à la détermination des dédoublements d'inversion, des constantes rotationnelles et des paramètres relatifs à l'interaction rotation-inversion.

L'analyse de ces données a permis l'obtention de la hauteur de la barrière de potentielle gênant la rotation interne. Pour ces trois molécules, nous avons construit des bases de données spectroscopiques à usage astrophysique.

Mot clés : *Molécule non-rigide, spectre haute résolution, mouvement de grande amplitude, torsion, inversion*

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DJILLALI LIABES SIDI BEL ABBES

FACULTE DES SCIENCES

RESUME DE THESE DE DOCTORAT

Abstract

In this thesis, we performed a theoretical study of the absorption spectra of high resolution of non-rigid molecules CH_2DOH, $^{15}NH_2D$ and $^{15}ND_2H$.

For CH_2DOH, we are interested to torsion-rotation spectrum. The first theoretical approach to calculate the energy levels of a non-rigid molecule frame having an asymmetrical top asymmetric internal rotation is developed. It is applied to the analysis of the position of the spectral line high resolution of the non-rigid molecule CH_2DOH and allows a global analysis of a data set consisting of already available data, and microwave transitions and far infrared measured in this work. The analysis is limited to the three lowest torsional levels (e_0, e_1 and o_1) with $K \leq 11$ and $J \leq 11$. For the 8329 fitted lines, the unitless standard deviation is 2.4and 103 parameters are determined including the kinetic energy, hindering potential rotation, and distortion effect parameters.

For the two partially deuterated ammonia molecules, their rotation- inversion spectra were analyzed and about 220 transitions have been attributed for each molecule. Analysis of these data led to the identification of inversion splitting, rotational constants and rotation-inversion interaction parameters.

Analysis of these data allowed us to obtain the potential barrier height of the hindering potential. For these three molecules, we have built spectroscopic databases of astrophysics usage.

Keywords: *non-rigid Molecule, high resolution spectrum, large amplitude motion, torsion, inversion*

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DJILLALI LIABES SIDI BEL ABBES

FACULTE DES SCIENCES

RESUME DE THESE DE DOCTORAT

ملخص

في هذه الأطروحة، أجرينا دراسة نظرية لأطياف امتصاص عالية الدقة للجزيئات غير الصلدة HC_2DOH , $^{15}NH_2D$ و $^{15}ND_2H$.

فيما يتعلق بCH_2DOH، انصب اهتمامنا على طيف الدوران- الالتواء بتقديم المنهج النظري الأول لحساب مستويات الطاقة لجزيئ غير صلد مع وجود دوران داخلي غير متماثل : iquertemassy-frame eeassymetriqu-top. يتم تطبيق هذا المنهج على تحليل وضعية خطوط الطيف عالية الدقة للجزيء غيرالصلد CH_2HOD مما يسمح بتحليل شامل لمجموعة بيانات تتألف من بيانات متاحة ، بلاصافة إلى الانتقال في مجال الميكروويف و الأشعة تحت الحمراء المقاسة في هذا العمل. يقتصر التحليل على ثلاث مستويات الدنيا (e_0 ، e_1 وo_1) مع $J \geq 26$ $K \geq 11$ 8329 خطا تم تحليلها، الانحراف المعياري بدون وحدة هو 2.6 و تم تحديد 103 معاملا بما في ذلك الطاقة الحركية، الطاقة الكامنة التي تعيق الدوران الداخلي و معاملات التشويه.

فيما يتعلق بجزيء الأمونيا $^{15}NH_2D$ و $^{15}ND_2H$ ، فان أطياف دوران- انعكاس حللت ونسبت نحو 220 انتقال إلى كل جزيء. أدى تحليل هذه البيانات لتحديد ازدواجية الانعكاس ، وثوابت الدوران ومعلمات التفاعل دوران- انعكاس.

يسمح تحليل هذه البيانات بالحصول على ارتفاع حاجز الطاقة الكامنة التي تعيق الدوران الداخلي لهذه الجزيئات الثلاثة، وقمنا ببناء قواعد بيانات للاستخدام في الفيزياء الفلكية الطيفية.

كلمات مفتاحية: جزيء غير صلد ، الطيف عالي الدقة ، الحركة ذات السعة الكبيرة،، الالتواء، انعكاس