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

FACULTE DES SCIENCES EXACTES

RESUME DE THESE DE DOCTORAT

Nom & Prénom(s)	MESKINE Mohamed
E-mail (obligatoire)	meskine202002@yahoo.fr
Spécialité	Physique, Spectroscopie Moléculaire
Titre	Modélisation de l'absorption infrarouge de bandes de combinaison de $^{32}SF_6$, $^{34}SF_6$
Date de soutenance	28/01/2015
Nom, prénom(s) et grade de l'encadreur	OUARDI Okkacha Professeur université D. Tahar Moulay de SAIDA

Résumé : Dans ce travail, nous nous sommes proposé d'étudier les fréquences de la bande ν_4 de la molécule $^{34}SF_6$. L'analyse et le calcul du spectre infrarouge sont faits grâce à l'utilisation des logiciels XTDS et SPVIEW développés à Dijon. On utilise 10 paramètres de niveau de base GS, et qui sont fixés durant l'analyse et on a déterminé 27 paramètres relatifs au niveau ν_4 intervenant à l'ordre six dans le développement de l'Hamiltonien et pour une valeur de *Jmax* = 95, en utilisant 1497 données avec un $EQM = 0{,}598.10^{-3}\ cm^{-1}$.

Nous présentons une nouvelle contribution pour cette molécule, concernant la bande de combinaison $(\nu_2 + \nu_4)$. La prédiction du spectre relatif à cette bande contient la contribution des niveaux GS, ν_2, ν_4 et $(\nu_2 + \nu_4)$. En utilisant les deux logiciels XTDS et SPVIEW.

Mots clés : Hexafluoride de Sulfure, formalisme Octaédrique, Hamiltonien, Bande de Combinaison, XTDS, SPVIEW.

Abstract : In the present work, we have to analyze the frequencies of the ν_4 band of monoisotopic $^{34}SF_6$. The fitting of parameters and calculation of infrared spectrum are made using the two softwares XTDS and SPVIEW developed in Dijon. We used 10 parameters of the ground state, these parameters are fixed during the analysis and we have determined 27 others parameters for the ν_4 band at the six order of the rovibrational Hamiltonian, and for *Jmax* = 95, using 1497 observed data with an root mean square equal to $0{,}598.10^{-3}\ cm^{-1}$. We present a new contribution to this topic concerning $(\nu_2 + \nu_4)$ combination band.
The prediction of this band is based on the tensorial formalism and vibrational extrapolation methods developed in Dijon. The effective Hamiltonian contains contribution from the ground state level GS, ν_2, ν_4 and $(\nu_2 + \nu_4)$. The analysis has been performed using non linear least squares fit procedure included in the XTDS program to *Jmax* = 95.

Keywords : Sulfur hexafluoride, Octaedral formalism, Hamiltonian, Combination Band, XTDS, SPVIEW.

ملخص في هذا العمل قمنا بدراسة توترات الحزمة الطاقوية ν_4 للجزيء $^{34}SF_6$، مستعملين في ذلك برنامجين XTDS و SPIEW المطورين بجامعة DIJON، حيث قمنا باستعمال معاملات هاميلتون خاصة بالمستوى الطاقوي الأساسي والتي تم تثبيتها خلال عملية الحساب. أين قمنا بتحديد 27 معامل هاميلتون خاص بالمستوى الطاقوي الاهترازي ν_4، مجموع هاته المعاملات سمح لنا بحساب المستويات الطاقوية الخاصة بالحزمة ν_4، باستعمال عدد كمي دوراني $j_{max} = 75$ مع الأخذ بعين الاعتبار قيمة الانحراف EQM.

كما قمنا بإعطاء تنبؤ لمستويات الطاقة الخاصة بالحزمة $(\nu_2 + \nu_4)$ مستعملين في ذلك معاملات هاميلتون للمستويات GS, ν_2 , ν_4 و $(\nu_2 + \nu_4)$

كلمات مفتاحيه SF_6، الشكل ثماني السطوح، معامل هاميلتون, الحزمة المركبة XTDS ،SPVIEW