

Avis de Soutenance

Thibault DELAHAYE

Sciences - STS

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Contribution aux méthodes de calcul de spectres moléculaires à partir de surfaces ab initio : application à l'éthylène et au méthane

Soutenance prévue le **vendredi 07 novembre 2014** à 13h45

Lieu : UFR Sciences Exactes et Naturelles, Moulin de la Housse, 51100 REIMS salle Amphi 3

Composition du jury proposé

M. Vladimir TYUTEREV	URCA	Directeur de thèse
M. Michaël REY	URCA	Co-encadrant de thèse
M. Vincent BOUDON	Université de Bourgogne	Rapporteur
M. Patrick CASSAM-CHENAI	Université de Nice	Rapporteur
M. Olivier DULIEU	Université Paris Sud	Examinateur
M. Andrei NIKITIN	University of Tomsk, Academy of Sciences (Tomsk, Russie)	Examinateur
M. Johannes ORPHAL	Karlsruher Institut für Technologie (Karlsruhe, Allemagne)	Examinateur
M. Jean VANDER AUWERA	Université Libre de Bruxelles (Belgique)	Examinateur
Mme Maud ROTGER-LANGUEREAU	URCA	

Mots-clés : Spectroscopie moléculaire, Ethylène, Méthane, Surfaces ab initio, Calculs variationnels, Modèles effectifs

Résumé :

Les travaux présentés dans ce manuscrit sont consacrés à l'étude des molécules d'éthylène C_2H_4 et de méthane CH_4 pour des applications planétologiques et astrophysiques. La première partie de ce travail de thèse concerne la construction de surfaces ab initio (surface d'énergie potentielle et surfaces de moment dipolaire) pour l'éthylène. Une procédure permettant la détermination précise de la géométrie d'équilibre de cette molécule a été mise en place, car elle conditionne en partie la précision sur les niveaux rotationnels. Dans la seconde partie, ces surfaces ont été utilisées pour le calcul des niveaux d'énergie vibrationnels de l'éthylène et des isotopologues $^{12}C_2D_4$, $^{13}C_2H_4$ et $^{13}C^{12}CH_4$ par calcul variationnel, ainsi que l'étude des positions et intensités de raies pour les molécules $^{12}C_2H_4$ et $^{13}C^{12}CH_4$. Ces nouvelles surfaces ont permis des avancées significatives pour la prédiction variationnelle ab initio des spectres de l'éthylène. L'extension de ces calculs à l'étude de ces spectres à des températures élevées, pour des applications astrophysiques, a été pour la première fois abordée. La dernière partie concerne la construction non empirique d'un modèle effectif pour le moment dipolaire du méthane à partir de surfaces ab initio. Pour cela, une technique algébrique, basée sur la méthode des Transformations de Contact, et développée au sein de notre équipe pour les molécules triatomiques, a été pour la première fois étendue au cas des molécules penta-atomiques. L'ensemble de ces résultats a été confronté aux informations présentes dans les bases de données spectroscopiques, ce qui a permis de valider nos différentes approches.