

Soutenance d' HDR de Michael Rey, le vendredi 26 janvier 2018 à 10h00, Amphi 4 de l'UFR Sciences Exactes et Naturelles.

Titre : *Développements théoriques, méthodes de calcul et bases de données pour la spectroscopie moléculaire*

Membres du Jury :

Peter Bernath (Pr. Old Dominion University, Norfolk, USA), Rapporteur

Tucker CARRINGTON, Jr. (Pr. Queen's University, Kingston, Canada), Rapporteur

Olivier DULIEU (Directeur de Recherches à l'Université Paris-Sud) , Rapporteur

Fabien GATTI (Directeur de Recherches à l'Université Paris-Sud), Examineur

Jean-Michel HARTMANN (Directeur de Recherches à l'École Polytechnique) , Examineur

Roberto MARQUARDT (Pr. à l'Université de Strasbourg), Examineur

Vladimir TYUTEREV (Pr. à l'Université de Reims), Garant de l'HDR

Pierre DROSSART (Directeur de Recherches à l'Observatoire de Paris), Membre invité

Résumé :

Ce travail décrit le développement de méthodes analytiques/algébriques/numériques pour l'optimisation des calculs variationnels appliqués à la spectroscopie moléculaire. Ainsi, nous disposons maintenant d'outils théoriques permettant de traiter toutes les molécules semi-rigides jusqu'à 6 atomes, allant de la construction globale de listes calculées jusqu'à l'analyse "raie par raie" à haute résolution en passant par la distribution des données via un site web. Une extension aux molécules jusqu'à 8 atomes est en cours. La finalité de ce travail est l'étude d'atmosphères planétaires et d'objets astronomiques, pour des températures allant de quelques dizaines de Kelvin jusqu'à plus de 2500 K.