

Spectroscopie infrarouge de la molécule CF₄

Résumé : Les travaux présentés dans ce manuscrit sont consacrés à l'étude de la spectroscopie FTIR à très haute résolution de la molécule de tétrafluorométhane CF₄ en vue d'applications atmosphériques. Une très bonne modélisation de son spectre d'absorption est donc essentielle pour les mesures de concentration atmosphérique. Cette thèse a été effectuée dans le cadre du Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique (GSMA) de l'Université de Reims Champagne Ardenne et au sein du Laboratoire de Spectroscopie et Dynamique Moléculaire (LSDM) de l'École Nationale Supérieure d'Ingénieurs de Tunis.

Cette thèse est structurée en cinq parties. La première partie de ce travail de thèse concerne les généralités et les propriétés physiques spectroscopiques de CF₄. La deuxième partie décrit les conditions expérimentales des différents spectres enregistrés soit à Reims ou à la ligne AILES du synchrotron SOLEIL. La troisième partie expose l'aspect théorique de la spectroscopie qui porte sur le formalisme tensoriel, Hamiltonien et moment dipolaire effectifs que nous avons utilisés pour calculer et traiter nos spectres. La quatrième partie offre une description des logiciels utilisés lors des analyses : MIRS et SpectrAssign. Finalement, la cinquième partie présente les résultats de l'analyse et les interprète en donnant des comparaisons entre les spectres observés et calculés.

Mots clé : Spectroscopie infrarouge, tétrafluorométhane, formalisme tensoriel, Hamiltonien effectif, moment dipolaire effectif, calculs variationnels *ab initio*, analyse en position et en intensité, MIRS.