

Soutenance de thèse

Marie BASIRE

ISMO (Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay), Orsay

Anharmonicité et spectroscopie IR de systèmes moléculaires complexes : application aux hydrocarbures aromatiques polycycliques

Je présenterai mon travail théorique portant sur la spectroscopie IR de systèmes moléculaires complexes en me focalisant tout particulièrement sur les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAPs) dont la présence dans le milieu interstellaire est bien établie à partir de leur signature spectrale dans le domaine infrarouge. Les spectres d'absorption et d'émission de ces molécules ont été simulés afin d'appréhender les effets d'anharmonicité de la surface d'énergie potentielle (SEP) de l'état électronique fondamental sur leurs propriétés spectroscopiques. Ces résultats seront confrontés aux données expérimentales et/ou observationnelles afin de confirmer la présence de molécules HAPs isolées dans le MIS.

Dans un premier temps, nous avons simulé les spectres d'absorption et d'émission dans l'ensemble microcanonique, à partir d'une procédure Monte Carlo multicanonique. Pour atteindre cet objectif, nous avons développé une méthode originale, basée sur l'algorithme Wang-Landau, permettant de calculer la densité d'états rovibrationnels anharmonique quantique.

Le spectre d'absorption IR à une température donnée pour une molécule est calculé directement par transformée de Laplace de la quantité microcanonique correspondante. Il est alors aisé d'étudier l'évolution du profil spectral des différentes bandes (ro-) vibrationnelles en fonction de la température interne de la molécule.

A partir d'une procédure Monte Carlo cinétique, les spectres d'émission résultant d'une cascade d'émission IR dans l'état électronique fondamental ont pu être simulés. En suivant le même schéma théorique, les spectres d'absorption multiphotonique (IRMPD) des HAPs (cations et protonés) ont également été calculés. Ces spectres IRMPD ont pu ainsi être directement comparés aux spectres d'absorption.

Finalement, la simulation du spectre d'absorption IR des HAPs en fonction de la température a été abordée par dynamique moléculaire *ab-initio* de type Car-Parrinello (CPMD), qui ne nécessite pas de connaissance a priori de la SEP.

ATTENTION DATE ET HEURE INHABITUELLES

Vendredi 1^{er} octobre 2010 à 13h30
Bât 210 - 2^{ème} étage - Amphi I
Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex

La soutenance sera suivie d'un pot auquel vous êtes chaleureusement invités