



ARCUS E2D2

Sujet de Thèse ARCUS E2D2 2017

sélection de la thématique : (cochez une ou plusieurs cases)

- Sp1 « Ville, Aménagement et Développement Durable »:
- Sp2 « Modélisation et Infrastructure pour l'Environnement »:
- Sp3 « Expertise et Traitement en Environnement »:
- Sp4 « Calcul Scientifique » :

Partenaire proposant le Sujet :

Laboratoire d'accueil :

Laboratoire PhLAM (Physique des Lasers, Atomes et Molécules

Responsable(s) :

Marc Douay, Directeur

Patrice CACCIANI, directeur de la thèse

Université d'accueil :

Université Lille 1

Partenaire potentiel pour la collaboration et la co-tutelle :

- Si le partenaire n'est pas défini, veuillez sélectionner les partenaires potentiels :

FRANCE LIBAN MAROC PALESTINE

- Si un partenaire est déjà identifié, veuillez compléter les informations suivantes (si disponible) :_Double diplôme Master Université Lille 1 Université Marocaine Mohamed I

Laboratoire d'accueil :

Responsable(s) :

Université d'accueil :

Faculté des Sciences Université Mohamed I Oujda (Maroc)

Mots clés : Spectroscopie moléculaire, polluants

Points particuliers : (précisez les points particuliers que le candidat devra considérer, langue, compétences)

TITRE DE LA THÈSE

SPECTROSCOPIE DES MOLÉCULES DEUTERÉES ND_3 , NH_2D , ND_2H ET CONVERSION DE SPIN NUCLEAIRE

SUJET DE LA THÈSE

(Une page maximum)

Notre groupe étudie les mécanismes de modification interne (« conversion ») du spin nucléaire dans les molécules possédant des noyaux identiques, mais se différenciant par la valeur de leur spin nucléaire total (modifier le spin total de la molécule signifie tourner le spin d'un des atomes). L'exemple le plus connu est la molécule d'hydrogène (dont chaque noyau possède un spin $\frac{1}{2}$) qui peut se présenter sous la forme *ortho* (spins parallèles d'où un spin total I égal à un : $\frac{1}{2} + \frac{1}{2}$) ou *para* (spins antiparallèles : $I = 0 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}$).

Dans ce cadre nous nous intéressons à la molécule d'ammoniac NH_3 , (importante dans les phénomènes de pollution atmosphérique) ainsi qu'à ses isotopologues deutérés (ND_3 , NH_2D , ND_2H). Avant d'aborder les phénomènes de conversion, il convient de connaître la spectroscopie de ces molécules dans le domaine infrarouge. Si celle-ci a vu de nombreux apports récents pour l'isotopologue principal où une bande d'absorption autour de $1.5 \mu\text{m}$ a été étudiée mais reste encore partiellement interprétée, elle reste encore quasiment inconnue pour les espèces deutérées entre $1,0$ et $2,0 \mu\text{m}$.

Cette étape est la connaissance de celle-ci en particulier pouvoir attribuer les transitions observées et connaître leur caractère *ortho*, *para* ou *meta*.

Le projet a une dimension à la fois théorique et expérimentale.

La partie principale est l'étude de la spectroscopie de la molécule permettant d'aborder ensuite le phénomène de conversion de spin nucléaire.

Il est prévu d'enregistrer les spectres de ces molécules grâce à 2 sources laser ECDL et d'étudier leur évolution en fonction de la température. Cela permet d'obtenir une information cruciale sur l'état de départ de chaque transition, facilitant ainsi leur identification. La confrontation avec des calculs théoriques *ab initio* sera un guide précieux pour valider l'identification rovibrationnelle. Les méthodes développées pour l'isotope principal encore en cours d'analyse permettront d'aborder les isotopologues deutérés.

Dans un second volet, un calcul préparatoire du taux de conversion de spin nucléaire sera mené dans le cadre du modèle de relaxation quantique.