

Laboratoire de Spectroscopie & Dynamique Moléculaire المطيافية و الدينامية الجزيئية



I- Identification du laboratoire

Université/Centre de recherche/EPS	Université de Tunis
Etablissement:	Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs de Tunis (ENSIT)
Dénomination LR/UR	Laboratoire de Spectroscopie et Dynamique Moléculaire
Code structure	LR18ES02
Chef LR/UR	AROUI Hassen
Grade	Professeur d'Enseignement Supérieur
Tél Fixe:	71496066
Fax:	71391166
E-mail:	Hassen.Aroui@ensit.rnu.tn haroui@yahoo.fr
Site Web	http://www.ensit.tn/

II- Activités de Recherche

1- RESUME DES ACTIVITES DU LR/UR

Le Laboratoire de Spectroscopie et Dynamique Moléculaire vient d'être créé décembre 2018. Les travaux de recherche de laboratoire constituent une continuité des travaux L'unité de Recherche « Dynamique Moléculaire et Matériaux Photoniques » de l'Université de Tunis à l'Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs de l'Université de Tunis travaille depuis plus d'une vingtaine d'années dans le domaine spectroscopie molécules infrarouge et Raman pour le développement de techniques d'analyse innovantes de spectre de infrarouge et Raman. Il possède un savoir-faire remarquable et reconnu à l'échelle internationale dans l'analyse des spectres rovibrationnels haute- résolution de molécules d'intérêt atmosphérique et le développement de modèles physiques permettant de comprendre et d'ajuster avec précision les profils de raies d'absorption. Ces travaux ont trouvé une reconnaissance internationale à travers leurs diffusions (publications de haut rang, conférences internationales...) et leurs contributions à alimenter les bases de données internationales (HITRAN, JPL...).

Cette unité de Recherche créée en 1994 a contribué à la formation diplômante d'un grand nombre de jeunes doctorants et à promouvoir la recherche scientifique dans le domaine de la spectroscopie, de la dynamique moléculaire et leurs applications dans les domaines de la physique fondamentale et de l'environnement. Un grand nombre d'articles de revue ont été publiés (70 articles) et environ 200 actes de communication à de manifestations scientifiques (congrès, colloques, conférences, ...). Plusieurs collaborations ont été initiées à travers des thèses en codirection ou en cotutelle.

2- THEMATIQUE ESSENTIELLES DE RECHERCHE

Spectroscopie IR
Spectroscopie Raman
Spectroscopie Térahertz
Dynamique moléculaire
Spectroscopie atomique

3- BILAN GLOBAL DES ACTIVITES DE RECHERCHE (DEPUIS LA CREATION DU LR

- 80 publications dans des revues scientifiques à facteur d'impact
- 250 communications des congrès
- 17 thèses soutenues :
- 2 habilitations soutenues
- 40 Mastères de recherche soutenus
- Organisation d'une conférence internationale (mai 2014)
- 10 conventions de cotutelles de thèse - Une convention de Partenariat
- 2 projets CMCU
- 10 collaborations Européennes ayant abouti à des actions diplômantes communes et des nombreux articles en commun.

I- Composition de l'équipe de recherche (2018)

1- Corps A

Grades	Nom et prénom	N C.I.N	Etablissement	Université
PROFESSEUR D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR	AROUI HASSEN	03906268	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
Maître de Conférences	BEN ABDALLAH DRISS	00918556	UNIVERSITE DU CARTHAGE	UNIVERSITE DE CARTHAGE
PROFESSEUR D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR	DHIB MOHAMED	00928679	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
Maître de Conférences	ELABIDI HAYKEL	04489429	UNIVERSITE DU CARTHAGE	UNIVERSITE DE CARTHAGE
PROFESSEUR D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR	MARRAKCHI HMAIED	01061615	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS

2- Corps B

Grades	Nom et prénom	N C.I.N	Etablissement	Université
Maître Assistant	ABCHA FETHI	03559742	ENSIT	Université de Tunis
PES	BOUSSETTA ZOUHAIER	04563896	ENSIT	Université de Tunis
Maître Assistant	BOUTIBA SAMIA	00213624	ENSIT	Université de Tunis
Maître Assistant	CHEIKH MONIA	00586248	ENSIT	Université de Tunis El Manar
Maître Assistant	EL HEDDA SAHNOUN SOFIA	00546382	ENSIT	université de tunis
Maître Assistant	GALALOU SOUHAIL	09001674	ENSIT	Université de Gabes
Maître Assistant	GESSEM FAOUZI	05731110	ISIMA	Université de Monastir
Maître Assistant	HADDED SAMIA	07024181	ISETT	Université de Gafsa
Maître Assistant	NOURI SALIHA	05987962	ENSIT	Université de Tunis
Maître Assistant	SALEM JAMEL	06137090	FSG	Université de Gafsa

3- Les Doctorants

Nom et prénom	N C.I.N	Etablissement	Université
ALOUÏ RIHAB	08373381	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
ATTAFI YOSRA	07946725	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
AYARI CHAÏMA	07162971	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
BEN CHOUÏKHA ISLEM	09612368	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
BEN KRID AMIRA	04844357	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
BOUGHDIRI ARWA	09772257	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
DHIB DORRA	10803946	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
DRIDI NAWEL	07960394	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
FARJÏ AMAL	09619078	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
GHARBI CHAYMA	10807836	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
LAAMIRI KHOULOUD	09830095	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
MAAROUFI NOURHENE	08097798	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
MATTOUSSI MANEL	08749359	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
MOUELHI MERIAM	09614821	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
RADDAOUI EMNA	09801680	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS

4- Les Post-Doc

Grades	Nom et prénom	N C.I.N	Etablissement	Université
Post- Doc	CHALLOUF MOUNIR	05763937	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
Post- Doc	JELLALI CHAKER	06097448	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
Post- Doc	HMIDA FADOUA	09605358	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
Post- Doc	BEN HASSEN AMANI	07115990	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
Post- Doc	DEKHILI RAWDHA	07154494	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
Post-Doc	BEJAOU I INES	08712694	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS

5- Etudiants en mastère de recherche

Nom et prénom	N C.I.N	Etablissement	Université
HAMMI WIEM	07213917	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS
BEN FATHALLAH ONS	09831142	ENSIT	UNIVERSITE DE TUNIS

II- Les projets du laboratoire

Projet N°1 : Spectroscopie de molécule d'intérêt atmosphérique

Cet axe concerne la caractérisation spectrale des molécules présentes dans l'atmosphère terrestre. Depuis plusieurs décennies, les scientifiques cherchent à comprendre les mécanismes physico-chimiques se produisant dans les milieux interstellaires et dans les atmosphères planétaires afin de surveiller l'évolution de leurs propriétés physiques et chimiques.

La spectroscopie moléculaire joue un rôle de plus en plus important dans l'identification des composants des atmosphères planétaires. Une très bonne modélisation du spectre d'absorption ou d'émission de ces composants est essentielle pour des mesures de concentration atmosphérique et par suite pour une meilleure protection de l'environnement.

L'analyse se base sur la comparaison entre spectres observés et spectres calculés. Plusieurs méthodes et outils théoriques ont été développés. La modélisation des spectres moléculaires au moyen d'un Hamiltonien de vibration-rotation effectif est actuellement l'une des plus précises pour la détermination des positions et des intensités de raies pour des systèmes de bandes complexes en interaction (Polyades). Nous pouvons grâce à la forme tensorielle de l'Hamiltonien calculer toutes les fréquences possibles d'un spectre rovibrationnel d'une molécule. Cette forme permet de développer l'Hamiltonien en l'écrivant comme une combinaison linéaire d'opérateurs rovibrationnels. Les paramètres initiaux de cet Hamiltonien sont déterminés à l'aide d'un calcul ab-initio des surfaces de potentiels décrivant l'énergie interne de la molécule.

Pour mener à bien ces études, nous utilisons la spectroscopie à Transformée de Fourier de très haute résolution permettant d'enregistrer des spectres d'absorption entre 900 cm^{-1} et 9000 cm^{-1} . Cependant nous avons besoin d'outils mathématiques et informatiques qui permettent de reproduire les spectres observés avec la plus grande précision possible.

Cette analyse sera réalisée à l'aide de plusieurs logiciels XTDS, SPVIEW [1], MIRS [2] développés à Dijon, à Reims en France et à Tomsok en Russie. Ces logiciels se basent sur une écriture tensorielle de l'Hamiltonien moléculaire. Dans ce cadre, pour des niveaux vibrationnels en interaction, on considère que les niveaux rovibrationnels sont regroupés dans des séries de polyades. Les niveaux de vibration de la même polyade ont des énergies proches et peuvent être soumis à des interactions vibrationnelles ou rovibrationnelles.

Dans ce contexte, nous étudions 3 molécules de symétrie différente.

La 1^{ère} molécule étudiée est le fluorure de sulfuryle (SO_2F_2) de groupe de symétrie C_{2v} apparu récemment comme un important polluant atmosphérique [3]. SO_2F_2 est aussi un fumigant pour les produits agro-alimentaires utilisé de façon croissante pour remplacer le bromure de méthyle (CH_3Br) qui a été classé par le protocole de Montréal en 2005 comme l'une des substances qui détruisent la couche d'ozone [4].

La modélisation du spectre d'absorption (plus précisément l'analyse en position et en intensité des spectres associés au neuf bandes fondamentales de cette molécule) est réalisée avec le logiciel C_{2v} TDS qui met en œuvre un modèle théorique basé sur l'extrapolation vibrationnelle et le formalisme tensoriel[5]. adapté au cas des molécules toupies asymétriques de type XY_2Z_2 et de symétrie C_{2v} ainsi qu'avec le logiciel de visualisation SPVIEW.

Ce travail fait partie de la thèse de Fadoua HMIDA en cotutelle avec le *Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique*(GMSA) de Reims. Cette thèse est bien avancée. Deux articles sont déjà publiés dans le Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer (JQSRT) et dans le Journal of Molecular Spectroscopy (JMS), un 3^{ème} article est cours.

La 2^{ème} molécule étudiée est l'iodure de méthyle (CH_3I) de groupe de symétrie C_{3v} . C'est un gaz d'intérêt atmosphérique dans la haute troposphère et la basse stratosphère[6]. C'est une source du radical iode destructeur de la couche d'ozone. La spectroscopie de cette molécule est essentielle pour des études fondamentales et pour des mesures atmosphériques. Cette molécule fait l'objet de la thèse en cotutelle de Arwa BOUGHDIRI démarré en septembre 2015.

Nous avons enregistré des spectres expérimentaux des bandes ν_2 et ν_5 de la molécule CH_3I pur

et perturbé par N_2 dans la région spectrale de 1200 à 1600 cm^{-1} au centre de recherche Synchrotron Soleil à Saclay à l'aide d'un spectromètre à transformée de Fourier de très haute résolution Bruker IFS 125 HR. La source est un rayonnement Synchrotron fournissant une grande luminance et un très bon rapport sur bruit.

L'analyse spectrale se fera en utilisant le code de calcul MIRS développé par A. Nikitin du Laboratoire de spectroscopie théorique de Tomsk en Russie. Une collaboration est en cours d'initiation avec ce laboratoire.

L'analyse en position de raies est bien avancée. Les résultats obtenus sont encourageants, et feront bientôt l'objet d'un article.

La 3^{ème} molécule étudiée est le tétrafluorométhane (CF_4). Elle est rejetée en quantité importante par l'industrie électronique et par le raffinage de l'aluminium. Son potentiel de réchauffement est 6500 fois plus élevé que celui du CO_2 [7]. C'est un polluant atmosphérique très stable de durée de vie très grandes par comparaison avec celle de CH_4 de 12 ans. La spectroscopie de cette molécule est assez méconnue.

La spectroscopie de cette molécule sera étudiée dans le cadre de la thèse en cotutelle de Manel Mattoussi avec le GSMA de Reims.

Nous proposons, dans un premier temps, d'aborder l'étude en position et en intensité de raies de la région de la bande ν_3 dans la région de 10 μm .

L'analyse en position et en intensité sera effectuée avec un modèle basé sur le formalisme tensoriel et l'extrapolation vibrationnelle développées à Dijon pour les molécules toupies sphériques. Une autre approche pourra être utilisée grâce aux calculs de surface de potentiel en collaboration avec M. Rey (GSMA, Reims).

Les actions de ce projet seront menées en collaboration avec le *Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique*(GMSA) de Reims.

Ces études seront complétées par des études de dynamique moléculaire faisant l'objet du projet suivant.

Références

- [1] C. Wenger, V. Boudon, M. Rotger, M. Sanzharov, J.-P. Champion, J. Mol. Struct. 251, 102-113 (2008).
- [2] AV. Nikitin, JP. Champion, VIG. Tyuterev. The MIRS computer package for modeling the rovibrational spectra of polyatomic molecules. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf, **82**, 239–49 (2003).
- [3] J. Mühle et al., Journal of Geophysical Research 114, D05306 (2009).
- [4] United Nations Environment Programme, Handbook for the Montreal Protocol on Substances that Deplete the Ozone Layer, Ozone Secr., Nairobi (2006).
- [5] M. Rotger, V. Boudon and M. Loëte, Journal of Molecular Spectroscopy 216, 297–307 (2002).
- [6] N. Bell, L. Hsu, D. J. Jacob, M. G. Schultz, D. R. Blake, J. H. Butler, D. B. King, J. M. Lobert, and E. Maier-Reimer, Journal of Geophysical Research, 107, (2002).
- [7] V. Boudon, J. P. Champion, T. Gabard, G. Pierre, M. Loëte, C. Wenger, Chemical letters, Fév. (2003)

Projet N°2 : Spectroscopie et profil de raies

1- Analyse de profils de raies ro-vibrationnels de composés d'intérêt atmosphériques sondés par spectroscopie IR.

Cet axe de recherche est dédié à l'étude des profils de raies d'absorption infrarouge des molécules atmosphériques et astrophysiques. Il permet la détermination précise des paramètres spectraux (élargissement, déplacement, intensité et effets de "line mixing" ») des raies d'absorption des molécules étudiées [1-3]. Notre choix c'est porté sur les molécules CH_3Cl , CH_3F , CH_3Br , CH_3I , SO_2F_2 , CF_4 , GeH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , et NH_3 . L'intérêt de ces molécules est indiscutable, leurs études s'inscrivent dans un vaste programme international visant la protection de l'environnement et la planétologie. Pour la communauté des spectroscopistes, l'étude de ces molécules est considérée actuellement des priorités.

L'étude des effets collisionnels de la molécule NH_3 entre dans le cadre de la thèse Nourhene Maaroufi en cotutelle avec le Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA) à Créteil. La dynamique collisionnelle des molécules CH_3I et GeH_4 fait l'objet de la thèse en cotutelle de Yosra Attafi avec le LISA. Les autres molécules ont fait l'objet de thèses soutenues dans notre laboratoire (S. Hadded, S. Nouri, J. Salem, A.

Barbouchi, S. Galalou, Z. Boussetta, A. Ben Hassen, ...).

L'analyse des profils de raies nous permet d'avoir des informations sur la dynamique de la molécule étudiée et sur ses interactions avec le milieu dans lequel elle se trouve. Ainsi la connaissance du déplacement en fréquence, de l'élargissement et du couplage des raies constitue un bon critère de test du potentiel d'interaction moléculaire et du modèle spectral choisi.

Dans le cas de faibles pressions, lorsque l'on peut négliger les échanges de population induits par les collisions entre les différents états rotationnels, le spectre résulte de la somme des contributions de profils individuels de raies isolées. Dans le cas contraire, à des pressions plus élevées, pour lesquelles les transitions d'une même bande sont suffisamment élargies par les collisions pour que leurs spectres se recouvrent, les raies ne sont plus isolées et on parle dans ce cas d'interférences ou de couplages entre raies.

Les spectres seront enregistrés en France (Créteil, Reims, Saclay) dans différentes régions de fréquence à l'aide d'un spectromètre à Transformée de Fourier de très haute résolution. Cet équipement coûte très cher, il n'existe pas dans notre pays. Un appel d'offre est en cours de montage pour l'acquérir.

Les traitements des spectres seront faits par déconvolution des spectres enregistrés. On tiendra compte des contributions de la fonction d'appareil et des fonctions exprimant la physique du système dynamique illustrée le profil de raie. Différents modèles de profils de raies seront utilisés: le profil de Voigt, le profil Rautian, le profil de Galatry. Ces modèles peuvent prendre en compte les effets de couplage entre raies en utilisant le modèle de Rosenskrantz à pression modérée ($P \approx 100$ mbar).

Pour des hautes pressions des modèles plus complexes utilisant les approximations IOS et ECS permettent de prédire le coefficient d'absorption lorsque les interférences collisionnelles significatives se produisent entre un grand ensemble de raies (voir entre branches ou entre bandes). Ce modèle nécessite le calcul de la matrice de relaxation dans la limite de l'approximation d'impact où la durée des collisions du système molécule active - gaz perturbateur est supposée très petite devant les temps caractéristiques du domaine spectral considéré. Les données obtenues à basse pression sont nécessaires pour l'implémentation de cette modélisation.

2- Analyse de profils de raies rotationnels de composés d'intérêt atmosphériques sondés par spectroscopie TéraHertz.

La thématique spectroscopie TéraHertz (THz) abordée dans ce futur laboratoire traite la physico-chimie moléculaire de l'atmosphère à l'aide d'une instrumentation innovante dans l'objectif de développer des outils d'investigation de l'atmosphère dans le domaine du THz pour la détection, la quantification et le suivi cinétique de molécules d'intérêt atmosphérique. La spectroscopie d'absorption en phase gazeuse dans ce domaine permet d'obtenir des signatures spectrales des molécules grâce à leur rotation pure ou à leur vibration-rotation. Dans ce domaine, les intensités des raies d'absorption sont plus intenses que celles dans le domaine micro-onde ce qui augmente la sensibilité des spectromètres. La résolution des spectres est meilleure qu'en infrarouge moyen puisqu'il n'y a pas, ou peu de recouvrement de raies adjacentes en régime Doppler (à très basse pression).

Dans la première partie de cette thématique, on réalisera les premières mesures de spectroscopie rotationnelle THz sur des molécules comme le dioxyde de soufre SO_2 , un polluant important de l'atmosphère et l'ammoniac (NH_3) existant dans l'atmosphère terrestre et dans les milieux interstellaires. On commencera par modéliser les profils de raies enregistrés en modulation de fréquence [4]. Ce travail aura pour premier objectif de reconstituer le spectre expérimental à partir d'un signal modulé en fréquence du profil d'absorption des transitions rotationnelles enregistrées.

Le second objectif sera de tirer profit des avancées significatives réalisées en termes de rapports Signal/Bruit de la spectroscopie THz pour modéliser des écarts des profils observés par rapport au profil de Voigt.

Le prochain volet de ce travail portera sur l'étude des coefficients d'auto-élargissement du méthane deutéré CH_3D , une espèce très importante pour l'étude des atmosphères terrestres et planétaires présentant une très faible polarité. Il s'agira d'un point de vue expérimental de pousser les expériences THz à la limite de leur sensibilité et du point de vue théorique de modéliser théoriquement l'auto-élargissement collisionnel d'une toupie symétrique faiblement polaire à l'aide d'un code de calcul développé dans notre laboratoire depuis plusieurs années.

3- Analyse de profils de raies vibrationnels des oxydes ABO₃ par spectroscopie Raman

La spectroscopie Raman permet de mesurer les propriétés des matériaux grâce à leurs signatures spectrales. Ces matériaux sont représentés par un ensemble d'oscillateurs harmoniques et anharmoniques.

Les composés oxydes ABO₃ constituent des substances à multiples applications : ferroélectricité (FE), piézoélectricité, optique non linéaire... Le titanate de baryum (BaTiO₃), par exemple, est un composé ferroélectrique largement utilisé dans l'industrie électronique [5]. Son excellent pouvoir piézoélectrique [6] lui permet d'être utile pour de nombreuses applications telles que les condensateurs multicouches et les mémoires ferroélectriques.

Certains défauts de ces matériaux sont responsables de leur vieillissement ou leur endommagement. A l'opposé, d'autres défauts conduisent à l'optimisation de leurs propriétés.

Les structures idéales pérovskites ABO₃ sont bien connues mais souvent ces composés développent des structures non stœchiométriques présentant des défauts ponctuels qui provoquent des variations importantes de leurs propriétés.

Ce projet a pour but une meilleure compréhension de la structure de ces défauts par la mesure et l'interprétation des paramètres spectroscopiques (position, intensité, amortissement) des modes de vibration des composés SrTiO₃, BaTiO₃ et PbZrO₃. Les propriétés diélectriques et structurales de ces matériaux seront investiguées par spectroscopie Raman en fonction de la température, de la polarisation, et en fonction de la composition chimique (substitution de dopants). Les transitions de phase et les changements structuraux correspondants seront abordés. Le désordre provoqué par ces changements devrait engendrer l'augmentation de l'anharmonicité par rapport aux structures idéales.

Pour une température donnée, nous commençons par valider les modes Raman attendus par les règles de sélection déduite par la théorie de groupe en fonction de la polarisation du cristal.

Pour la détermination des paramètres spectroscopiques, nous adoptons une approche qui consiste en la déconvolution des spectres Raman en raies de premier ordre et bandes de second ordre.

Les dépendances en température des fréquences et des amortissements des modes Raman seront simulées à l'aide d'un modèle qui tient compte à la fois de l'effet de la dilatation thermique (effet harmonique) et des effets anharmoniques d'ordre trois et quatre. Pour BaTiO₃ nous avons adopté le modèle de Balakanski [7].

L'Anharmonicité et les phénomènes ordre désordre dans BaTiO₃ et ses composés dérivés a fait l'objet de la thèse de Ines BEJAOUI soutenue en octobre 2016. Les mesures ont été effectuées par spectroscopie Raman au LMOPS de l'université de Lorraine.

Les prochaines actions de ce projet sont :

Améliorer le code de fit des spectres observés.

Améliorer le modèle de simulation des paramètres spectroscopiques. On se propose, en particulier d'écrire un code permettant de mieux décrire l'évolution de ces paramètres en fonction de la température.

Nous envisageons substituer dans les pérovskites considérées des espèces ayant des rayons atomiques différents de ceux des atomes originaux dans le but d'étudier l'effet de la compacité sur l'anharmonicité de ces composés. Dans BaTiO₃, on envisage substituer le rhodium (Rh) et le strontium (Sr).

Nous proposons de mesurer aussi les températures des transitions de phase des cristaux étudiés. La théorie de groupe et les règles de sélection permettront de détecter ces transitions.

Un autre volet de ce projet concerne l'étude d'un nouveau composé centrosymétrique le KLDP(KLi(H₂PO₄)₂) de la famille des KDP. La synthèse de ce cristal a été effectuée à la Faculté des Sciences de Tunis par la méthode d'évaporation lente à température ambiante.

Notre contribution pour ce cristal sera de déterminer les signatures Raman et IR de ce cristal. On mesurera ensuite ses paramètres spectroscopiques en fonctions des conditions physiques (température, dopage, pression), un savoir faire que nous maîtrisons dans notre équipe de recherche.

Ce travail entre dans le cadre des travaux de thèse de Rawdha DEKHILI en collaboration avec le laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes (LMOPS) de l'université de Lorraine.

Les actions de ce projet seront menés en collaboration avec l'université de Sfax sous la direction du professeur Hamadi khemakhem et l'Université de Lorraine sous la direction du

professeur Marc Fontana avec lequel nous collaborons depuis plusieurs années.

Références

- [1] H. Aroui, H. Laribi, J. Orpha, P. Chelin
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 110 (2009) 2037–2059
- [2] H. Aroui, K. Ben Mabrouk, R. Boussassi
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 130 (2013) 273-283.
- [3] F. Hmida, S. Galalou, F. KwabiaTchana, M. Rotger, H. Aroui
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 189, 351–360(2017)
- [4] C. Bray, D. Jacquemart, N. Lacome, M. Guinet, A. Cuisset, S. Eliet, F. Hindle, G. Mouret, F. Rohart, J. Buldyreva, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 116, 87–100 (2013).
- [5] E. K. Akdogan, M. R. Leonard, and A. Safari, in Handbook of Low and High Dielectric Constant Materials for Applications, edited by H. S. Nalwa Academic, New York 2, (1999)
- [6] J. Y. Lee, J. H. Lee, S. H. Hong, Y. K. Lee, and J. Y. Choi, Adv. Mater 15, 1655 (2003) [11] M. Balkanski, R.F. Wallis, E. Haro, Phys. Rev. B **28**, 1928 (1983)

Projet N° 3: Caluls théoriques et Modélisations

I – Formalisme semiclassical appliqué au calcul des élargissements de raies des systèmes moléculaires

Il s'agit d'une étude théorique des élargissements collisionnels de molécules linéaires ou de toupies symétriques en collision avec des espèces d'intérêt atmosphériques comme O₂, N₂, CO₂ ou des atomes gaz rares.

Les collisions intermoléculaires sont décrites par un modèle semi-classique développé par Robert et Bonamy [1]. Celui-ci considère que les niveaux d'énergie des molécules sont quantifiés mais suppose que leurs trajectoires sont régies par les lois de la mécanique classique. Nous avons bénéficié de l'existence de surfaces de potentiel intermoléculaire récentes et plus précisément pour les systèmes HCl-He [2], HCl-Ar [3] et NH₃-He [4]. Ces systèmes collisionnels font l'objet des thèses des doctorantes Chaima AYARI [5] et Dorra DHIB. Utiliser un potentiel *ab initio*, c'est s'affranchir d'éventuelles approximations mais c'est aussi et surtout une manière plus honnête de tester le modèle semi-classique.

Afin d'avoir un excellent accord entre les valeurs théoriques et expérimentales, un calcul précis de la trajectoire est essentiel. Nous avons utilisé le modèle de la trajectoire exacte proposé par Bykov et al.[6]. Dans ce modèle la distance intermoléculaire $R(t)$ et l'angle de collision $\Psi(t)$ sont calculés numériquement.

Toutes les routines numériques nécessaires employées étaient du FORTRAN disponible dans la bibliothèque IMSL. L'intégration en fonction du temps a été exécuté avec double précision en utilisant la routine DQDAG basée sur la quadrature de Gauss-Konrad. Les intégrations en fonction de temps sont les calculs numériques cruciaux à cause de l'oscillation de ces fonctions en raison du terme exponentiel complexe $\exp(i\omega t)$.

Ces calculs ont permis d'interpréter les résultats expérimentaux des élargissements et des déplacements de raies de plusieurs molécules (NH₃, PH₃, CH₃Cl, CH₃Br, OCS, C₂H₂, C₂H₄,) étudiées par notre équipe et qui ont fait l'objet d'une quinzaine de thèses soutenues.

II- Formalisme ab-initio appliqué au calcul des élargissements de raies des plasmas astrophysiques.

L'élargissement spectral sous l'effet de collision dans un plasma est dû à la perturbation des niveaux d'énergie de l'émetteur par les particules environnantes du plasma. La connaissance des paramètres d'élargissement de raies spectrales est un outil très important de diagnostic des plasmas naturels et de laboratoire. En outre le mécanisme d'élargissement de raie est primordial en Astrophysique pour l'étude des naines blanches et des étoiles chaudes du types O, A et B. En effet, la donnée des largeurs de raies peut nous renseigner sur l'abondance chimique des éléments d'un plasma stellaire. Ces largeurs peuvent nous renseigner aussi sur la température et la densité électronique des plasmas.

Les calculs quantiques d'élargissement Stark en couplage *LS* quand les interactions électrostatiques dominent les interactions magnétiques, et en couplage *jj* quand les interactions magnétiques dominent les interactions électrostatiques ont été réalisés par plusieurs auteurs depuis les années 2000 (Ralchenko *et al.* JQSRT, 2003,81, 371). Les résultats de ces calculs présentent un désaccord significatif avec les valeurs expérimentales surtout pour les ions fortement chargés. Dans le but d'expliquer et de remédier à ce désaccord, nous avons établi le formalisme quantique de l'élargissement Stark de raies spectrales en couplage intermédiaire en

tenant compte des effets relativistes et des interactions de configurations (H. Elabidi *et al.* 2004, *J. Phys. B*.37, 63). Les résultats obtenus ont été encourageants et en accord acceptable avec l'expérience.

Actuellement, on se propose d'appliquer ce formalisme à quelques ions de l'élément argon (Ar VII –Ar XVI) où le couplage *LS* n'est plus valide. Il a été montré récemment que l'argon a des intérêts astrophysiques importants (Werner *et al.* 2007, *Astron. Astrophys.*474, 591) ; des raies UV lointains de l'ion Ar VII ont été découvertes dans les spectres d'étoiles centrales très chaudes des nébuleuses planétaires et des naines blanches. Ceci est une preuve de l'intérêt astrophysique des données atomiques et des élargissements de cet élément (Ar) dans tous ses niveaux d'ionisation.

Pour ce calcul quantique nous utilisons les codes numériques de calculs structural (SUPERSTRUCTURE) et collisionnel (DISTORTED WAVE et JAJOM). Ces codes ont déjà été validés dans des études antérieures.

Par ailleurs, les missions spatiales Herschel et l'interféromètre ALMA ont ouvert de nouvelles fenêtres d'observation planétaire avec des hautes résolutions spatiales et spectrales. Pour interpréter ces observations, il est nécessaire de connaître les populations des niveaux des molécules observées et par suite les taux d'excitation collisionnelle par les espèces les plus abondantes (H, He, H₂).

Ceci permettra la détermination de l'abondance des molécules interstellaires puisque ces abondances sont essentielles pour connaître les processus physico-chimiques qui se déroulent dans ces milieux.

La thèse de Chaima Gharbi entre dans ce cadre. Il s'agit de déterminer à l'aide d'un formalisme *ab initio* les sections efficaces et les taux d'excitation et de désexcitation rotationnelles de la molécule asymétriques NaCN en collisions avec paraH₂(J=0) et He. Cette molécule existe dans les milieux interstellaires.

En amont du calcul des élargissements collisionnels des raies d'émission des plasmas stellaires, on peut intégrer un volet préliminaire qui consiste à caractériser les étoiles considérées par leur brillance de surface et leurs propriétés géométriques (diamètres angulaires). Ceci peut s'effectuer par interférométrie optique à haute résolution angulaire, pour déterminer avec précision le diamètre angulaire d'étoiles de type spectral O, B et A afin d'étalonner la relation entre la couleur de ces étoiles et leur brillance de surface. Pour l'observation de ces étoiles, nous collaborons avec le Laboratoire Lagrange de l'Observatoire de Côte d'Azur de l'Université Nice Sophia Antipolis. Les mesures sont basées sur l'observable interférométrique qui est la visibilité des franges d'interférences permettant une détermination directe du diamètre angulaire des étoiles.

Les données obtenues ont permis la détermination de diamètre de plusieurs étoiles et l'étalonnage, pour la première fois, de la relation de brillance de surface des étoiles chaudes. Ce travail a fait l'objet de la thèse de Mounir Challouf soutenue en 2015 et a donné lieu à plusieurs publications dans des journaux spécialisées (journal *Astronomy & Astrophysics* ; *A&A*).Cependant, cette relation reste encore très dispersée en raison de la rotation rapide des étoiles qui biaise les mesures interférométriques.

Dans une prochaine étape on élargira notre étude de la relation brillance de surface en la soumettant à des étoiles rotateurs rapides. Le choix de ces étoiles est lié à l'influence de leurs structures géométriques sur leur brillance de surface pour quantifier l'impact de la rotation.

Nous avons choisi d'étudier le rotateur rapide Delta Per. Cette étoile sera observée et suivie avec l'instrument VEGA installé à Mont Welson piloté depuis l'observatoire de Nice. Ce travail permettra de déterminer l'aplatissement de cette étoile en mesurant ses diamètres polaire et équatorial.

Références

- [1] D. Robert and J. Bonamy, *J. Phys.* 40, 923 (1979).
- [2] Y. Ajili, K. Hammami, N. Jaidane, M. Lanza, Y. N. Kalugina, F. Lique and M. Hochlaf, *PCCP*,**15**, 10062 (2013).
- [3] J. M. Geremia and H. Rabitz, *J. Chem. Phys.* 115, 8899 (2001).
- [4] K. B. Gubbels, Y. T. Sebastiaan, van de Meeraker, G. C. Groenenboom, G. Meijer, and van der Avoird, *J. Chem. Phys* 136, 74301 (2012).
- [5] C. Ayari, J. Loreau, M. Dhib, C. Daussy, H. Aroui *J. Mol. Spectrosc.* 318 (2015) 46-52
- [7] A.D. Bykov, L.N. Lavrentieva and L.N. Sinitsa, *Atm. Ocean. Opt.* 5, 1127(1992).

III- Coopération et partenariats

Nom et prénom du chercheur associé (partenaire scientifique)	Grade	Structure de recherche partenaire (dénomination, établissement et responsable)
Fontana Marc, Salvestrini Jean Paul, Guilbert Laurent	Professeur des Universités	LMOPS, Université de Lorraine
Mourard Denis, Nardetto Nicolas	Professeur des Universités	Laboratoire Hippolyte Fizeau de l'Université de Nice
Kwabia Tchana Fridolin	Maître de Conférences	Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA)
David Jacquemart	Maître de Conférences	Laboratoire de Dynamique, Interactions et Réactivité (LADIR)
Maud Rotger	Professeur des Universités	<i>Université de Reims Champagne-Ardenne</i>
Arnaud Cuisset	Maître de Conférences	Laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère - Université du Littoral Côte d'Opale
Muriel Lepère	Professeur	Laboratoire Lasers et Spectroscopies (LLS), Namur
Jean Vander Auwera	Professeur	Service de Chimie Quantique et Photophysique - Université Libre de Bruxelles
Vincent Boudon	Directeur de recherche	Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne (Dijon)
Laurent Manceron	Directeur de recherche	Synchrotron Soleil, Saclay

RESUME DU RAPPORT 2018

Rubrique	Nombre
I- Ressources Humaines et espace de recherche	
Enseignants-chercheurs du corps A	5
Enseignants-chercheurs du corps B	10
Doctorants	15
Etudiants en stage de M2	2
I-5 Cadres ayant un grade équivalent au grade d'assistant de	2
PRODUCTION SCIENTIFIQUE	
II-1 Publications impactées parues en 2018 (JCR)	15
Séminaires, journées et ateliers scientifiques organisés en 2018	7

IV Production scientifique

2018 – 2017 - 2016

IV.1 Production scientifique 2018

1- Liste des publications impactées 2018

1	A. Boughdiri, L. Manceron, N. Maaroufi, M. Rotger, H. Aroui Measurements of line intensities for some lines of methyl iodide in the ν_5 and $\nu_3+\nu_6$ bands Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 2018
2	N. Maaroufi, C. Jellali, F. Kwabia Tchana, H. Aroui Absolute line intensities and first measurements of self-collisional broadening and shift coefficients in the $2\nu_4$ band of NH_3 . Journal of Molecular Spectroscopy 2018
3	N. Maaroufi, F. Kwabia Tchana, X. Landsheere, H. Aroui Pressure broadening and shift coefficients in the ν_1 and ν_3 bands of NH_3 Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer
4	D. Dhib, C. Ayari, E. Raddaoui, M. Dhib, H. Aroui Pressure Broadening Coefficients in the ν_6 Band of CH_3F in Collision with He Journal of Molecular Spectroscopy
5	R. Dekhili T.H. Kauffmann, H. Aroui, M. D Fontana Phase transformations in LiH_2PO_4 (LDP) revealed by Raman spectroscopy Solid State Communications
6	C. Jellali, N. Maaroufi, H. Aroui Theoretical Calculation of $\text{CH}_3\text{F}/\text{N}_2$ -Broadening Coefficients and their Temperature Dependence Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer
7	R. Dekhili, T.H. Kauffmann, H. Aroui, M.D. Fontana. Elaboration and structural characterization of new materials of KDP Family. Journal of Material Sciences & Engineering. Doi: 10.4172/2169-C1-1092.
8	R. Dekhili, T.H. Kauffmann, H. Aroui, M.D. Fontana, Phase transformations in LiH_2PO_4 (LDP) revealed by Raman spectroscopy, Solid State Communications (2018), doi: 10.1016/j.ssc.2018.04.016.
9	R. Aloui, H. Elabidi, S. Sahal-Bréchet and M S. Dimitrijevi Quantum and Semiclassical Stark Widths for Ar VI Spectral Lines Atoms 2018, 6, 20
10	C. Jellali, N. Dridi, N. Maaroufi, F. Kwabia-Tchana, H. Aroui. He-Broadening Coefficients and Line Intensities in the $2\nu_1$ Band of OCS. Journal of Molecular Structure 1180: 747-753(2019). https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.12.028
11	A. Chefai, C. Jellali, K. Hammami and H. Aroui. Rotational excitation of OCS by Ar : New potential energy surface, collisional cross sections and rate coefficients. Astrophysics and Space Science. 265: 363-370(2018). https://doi.org/10.1007/s10509-018-3481-0
12	R. Aloui, H. Elabidi, S. Sahal-Bréchet and M. S. Dimitrijevic Quantum and Semiclassical Stark Widths for Ar VII Spectral Lines. Atoms 6, 20: 1-14 (2018). doi:10.3390/atoms6020020
13	H. Elabidi and S. Sahal-Bréchet Quantum mechanical Stark widths for Ar V and Ar VI lines: scaling with temperature. MNRAS 480, 697–706 (2018). doi:10.1093/mnras/sty1858.
14	F. Hindle, C. Bray, K. Hickson, D. Fontanari, M. Mouelhi, A. Cuisset, G. Mouret and R. Bocquet. Chirped pulse spectrometer operating at 200 GHz. Journal of infrared, millimeter and terahertz waves 39: 105-119 (2017). DOI: 10.1007/s10762-017-0445-3.
15	H. Elabidi and S. Sahal-Bréchet Quantum mechanical Stark widths for Ar V and Ar VI lines: scaling with temperature. MNRAS 480, 697–706 (2018). doi:10.1093/mnras/sty1858

2- Liste des communications en 2018

1	Absolute line intensities and first measurements of self-collisional broadening and shift coefficients in the $2\nu_4$ band of NH_3 . N. Maaroufi , C. Jalleli, F. Kwabia Tchana, X. Landsheere and H. Aroui, PCFM'18, 19-21 June 2018 at Firat University, Elazig-Turkey
2	Semiclassical Line Broadening Calculations with Exact Trajectory for Symmetric Tops with Inversion Symmetry Application to NH_3 Perturbed by He C. Ayari , D. Dhib, M. Dhib and H. Aroui PCFM'18, 19-21 June 2018 at Firat University, Elazig-Turkey
3	Preliminary analysis of the interacting ($\nu_2 + 2\nu_4, \nu_2 + \nu_3, 4\nu_2, \nu_1 + 2\nu_2, 2\nu_1$) pentad of CF_4 M. Mattoussi , M. Rey, A.V. Nikitin, I. Chizhmakova, M. Rotger, H. Aroui, S. Tashkun, V.G. Tyutereva Hitran 13-15 June 2018 Cambridge, Massachusetts, USA
4	Self-broadening coefficients of rotational transitions of H_2S measured by submillimeter-wave spectroscopy Meriem Mouelhi , François Rohart, Francis Hindle, Cédric Bray, Gaël Mouret, Robin Bocquet, Hassen Aroui ² , Arnaud Cuisset HRMS 2018 : High Resolution Molecular Spectroscopy, septembre 3-7 2018, Bilbao, Espagne.
5	THz spectroscopy: a solution to monitor spoilage indicators. The case of atlantic salmon. M. Mouelhi , L. Kuuliala, F. Hindle, A. Cuisset, C. Bray, M. Vanwolleghem, F. Devlieghere, G. Mouret and R. Bocquet. HRMS 3-7 september 2018, Bilbao-Espagne.
6	Rawdha Dekhili , Thomas H. Kauffmann, H. Aroui and Marc D. Fontana, Elaboration and structural characterization of new materials of KDP-Family. Advance Materials Research for Better Future, February 18-20.2018.
7	Rawdha Dekhili , Thomas H. Kauffmann, H. Aroui and Marc D. Fontana. Etude de la transition de phase dans LiH_2PO_4 (LDP) par mesures Raman en fonction de la température. GFSV-2018. Mai 16-18, 2018. Ventron (Les voges), France.

3- Liste des thèses et mastères Soutenues en 2018

Nom et Prénom	Titre Thèse	Date de Soutenance
Rawdha Dkhili	Synthèse et étude des propriétés, structurales et spectroscopiques des composés de la famille du KDP	11 Décembre 2018

4- Liste des mastères soutenus en 2018

Année	Année de la première inscription	Sujet	Encadrant
2018	2018	Etude des effets d'interférences collisionnelles sur les spectres infrarouge de l'ammoniac dans la bande ν_4	Hassen AROUI
2018	2018	Détermination des largeurs de raies de la bande $2\nu_4$ de NH_3 perturbé par N_2 dans la région de $3\ \mu\text{m}$	Hassen AROUI

IV.2 Production scientifique 2017

1- Liste des Publications impactées 2017

1	F. Hmida , B. Grouiez , M. Rotger, L. Manceron, V. Boudon, H. Aroui Line position analysis of the (ν_9 ; ν_7 ; ν_3) bending triad of SO_2F_2 using the C2vTop Data System. Journal of Molecular Spectroscopy 339 (2017) 23–30
2	F. Hmida, S. Galalou, F. Kwabia Tchana, M. Rotger, H. Aroui Line mixing effect in the ν_2 band of CH_3Br Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 189, 351–360 (2017).
3	F. Hindle; C. Bray; K. Hickson ; D. Fontanari; M. Mouelhi; A Cuisset; G. Mouret; R. Bocquet. Chirped pulse spectrometer operating at 200 GHz. Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves Vol. 39 105–119 (2018)
4	C. Jellali, N. Maaroufi, H. Aroui Theoretical Calculation of $\text{CH}_3\text{F}/\text{N}_2$ -Broadening Coefficients and their Temperature Dependence Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer (accepted)
5	N. Maaroufi, C. Jalleli, F. Kwabia Tchana, and H. Aroui Line intensities, self-broadening and self-shift coefficients in the $2\nu_4$ band of NH_3 , <u>J Mol Spectrosc</u> (soumis)
6	R. Aloui, H. Elabidi, S. Sahal-Bréchet and M. S. Dimitrijević Quantum and Semiclassical Stark Widths for Ar VII Spectral Lines Journal of Atoms (Soumis)
7	Rawdha Dekhili, Thomas H. Kauffmann, Hassen Aroui and Marc D. Fontana Phase transformations in LiH_2PO_4 (LDP) revealed by Raman spectroscopy. Journal Solide States Communications (soumis)

2- Liste des communications 2017

1	N. Maaroufi, F. Kwabia Tchana et Hassen AROUI, Détermination des paramètres spectroscopiques de la molécule d'ammoniac (NH_3) dans la bande ν_1 . 12 ^{ème} Colloque National de Recherche en Physique, 18-21 Mars 2017, Yasmine Hammamet, Tunisie
2	N. Maaroufi, F. Kwabia Tchana et Hassen AROUI, Spectroscopic parameters of NH_3 in the ν_3 fundamental band. International Quantum Africa 4 , April 30 – May 5, 2017 Tunis, Tunisia
3	C. Jellali, N. Dridi, N. Maaroufi, F. Kwabia-Tchana, H. Aroui , He-broadening Coefficients and Line Intensities in the $2\nu_1$ Band of OCS International Quantum Africa 4 , April 30 – May 5, 2017 Sousse, Tunisia
4	E. Raddaoui, M. Guinet, P. Soulard, H. Aroui Self-broadening Coefficients of CH_3I using THz spectroscopy, International Quantum Africa 4 , April 30 – May 5, 2017 Sousse, Tunisia,
5	M. Mattoussi, M. Rey, A.V. Nikitin, I. Chizhmakova, M. Rotger, H. Aroui, S. Tashkun, V.I.G. Tyuterev Preliminary analysis of the interacting ($\nu_2+2\nu_4$, $\nu_2+\nu_3$, $4\nu_2$, $\nu_1+2\nu_2$, $2\nu_1$, $2\nu_2+2\nu_4-\nu_2$, $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$, $\nu_2+3\nu_4-\nu_4$, $\nu_2+\nu_3+\nu_4-\nu_4$) band system of CF_4 High-Resolution Molecular Spectroscopy HRMS 2017 HELSINKI, 20-25 Aout 2017
6	M. Mattoussi, M. Rey, A.V. Nikitin, I. Chizhmakova, M. Rotger, H. Aroui, S. Tashkun, V.I.G. Tyuterev Analysis of the ($\nu_2+2\nu_4$, $\nu_2+\nu_3$, $4\nu_2$, $\nu_1+2\nu_2$, $2\nu_1$) pentad of CF_4 Spectroscopy and Dynamics of Ozone and Related Atmospheric Species, Reims 04-06 Octobre 2017
7	F. Hmida, B. Grouiez, M. Rotger, V. Boudon, L. Manceron, H. Aroui Analysis of the (ν_3 , ν_7 , ν_9) bending triad of the quasispherical top molecule SO_2F_2 12 th SOLEIL Users' Meeting, SUM 2017 19-20 Janvier 2017 Paris
8	F. Hmida, B. Grouiez, M. Rotger, V. Boudon, L. Manceron, H. Aroui Analysis of the (ν_3 , ν_7 , ν_9) bending triad of the quasispherical top molecule SO_2F_2 SpecMo « Forum des Jeunes 2017 22-23 Mai 2017 Lille France
9	F. Hmida, B. Grouiez, M. Rotger, V. Boudon, L. Manceron, H. Aroui Analysis of the (ν_3 , ν_7 , ν_9) bending triad of the quasispherical top molecule SO_2F_2 SpecMo « Forum des Jeunes 2017 22-23 Mai 2017 Lille France
10	C. Bejaoui Ouni, M. D. Fontana, D. Chapron and H. Aroui Soft mode in BaTiO_3 Investigation by Raman spectroscopy. Quantum Africa 4 Conference , Gammarth, Tunis, Mai 2017
11	C. Ayari , A. Ben Krid , D. Dhib et M. Dhib Semiclassical line broadening calculations using an ab initio potential: Application to NH_3 perturbed by He International Quantum Africa 4 , April 30 – May 5, 2017 Sousse, Tunisia
12	D. Dhib, C. Ayari, M. Dhib and H. Aroui Collisional broadening coefficients of HCl in collision with H Quantum Africa 4 , 30 April-5 May, 2017 Tunis – Tunisia
13	F. Hmida, B. Grouiez, M. Rotger, L. Manceron, H. Aroui Line intensities parameters of sulfonyl fluoride self-perturbed in the ν_2 band, International Quantum Africa 4 , April 30 – May 5, 2017 Sousse, Tunisia
14	R. Aloui, H. Elabidi, S. Sahal-Bréchet and M. S. Dimitrijević Quantum and Semiclassical Stark Widths for Ar VII Spectral Lines 11 th Serbian Conference on Spectral Shapes in Astrophysics : 11 th SCSLSA, 21 to 25 August 2017 – Belgrade, Serbia
15	R. Aloui, H. Elabidi and S. Sahal-Bréchet Radiative atomic data and electron impact broadening of spectral lines Ar VIII : quantum calculations

	Quantum Dynamics, 18 to 20 November 2017 Sousse –Tunisia.
16	<u>Meriem Mouelhi</u> , Hassen Aroui, Arnaud Cuisset et Francis Hindle Line shape of frequency modulated spectral profiles in THz frequency: Application to rotational lines of ammonia. Quantum Dynamics, 18 to 20 November 2017 Sousse –Tunisia
17	<u>C. Ayari</u> , M. Dhib and H. Aroui Coefficients d'élargissement dans les bandes ν_4 et ν_1 de NH_3 en collision avec He Quantum Africa 4, QA42017,30 avril-05 mai 2017 Gammaret-Tunisie
18	A.Farji, N.Maaroufi, F. Kwabia Tchana, H .Aroui Determination of transition dipole moments of the $2\nu_4$ band of ammonia International Quantum Africa 4 , April 30 – May 5, 2017 Sousse –Tunisia
19	<u>Boughdiri</u> , L. Manceron, M. Rotger and H. Aroui Spectroscopic parameters of CH_3I self perturbed in the ν_5 and $\nu_3 + \nu_6$ bands International Conference on Spectroscopy HRMS, 25 th Colloquium, 20 – 24 Aug, 2017 ,Helsinki, Finlande.
20	<u>Boughdiri</u> , M.Rey, A. Nikitin, M. Rotger, L. Manceron and H. Aroui Frequency analysis of the ($\nu_2/\nu_3+\nu_6/\nu_5/3\nu_3$) tetrad of CH_3I International Conference on Spectroscopy HRMS, 25 th Colloquium, 20 – 24 Aug , 2017 ,Helsinki, Finlande.
21	<u>Boughdiri</u> , M. Rey, A. Nikitin, M. Rotger, L. Manceron and H. Aroui Frequency analysis of the bending ($\nu_2/\nu_3+\nu_6/\nu_5/3\nu_3$) tetrad of CH_3I . Colloque Ozone et molécules d'intérêt atmosphérique, 4-6 octobre 2017 à Reims.
22	C. Gharbi, Y. Ajili, D. Ben Abdallah, M. Hochlaf Rotational (de)-excitation of NaCN by He at low temperature: 3D potential energy surface International Quantum Africa 4 , April 30 – May 5, 2017 Sousse,Tunisia

3- Liste des thèses soutenues

Nom et Prénom	Titre Thèse	Date de Soutenance
Fadoua Hmida	Spectroscopie FTIR à très haute résolution de SO ₂ F ₂	08 Décembre 2017

4- Liste des mastères soutenus

Nom et Prénom	Titre Thèse	Date de Soutenance
BEN KRID Amira	Etude théorique de l'élargissement collisionnel par des surfaces de potentiel ab initio: application à NH ₃ en collision avec He	18 décembre 2017
DRIDI Nawel	Détermination des paramètres collisionnels du système OCS-He	06 octobre 2017
FARJI Amal	Détermination des moments dipolaires de transition de la bande 2n ₄ de l'ammoniac	18 octobre 2017
RADDAOUI Emna	Spectroscopie Infrarouge autour de 10 µm Bande n ₆ et Spectroscopie THz de la molécule Iodure de méthyle CH ₃ I	22 septembre 2017
DERBELI Imen	Détermination des paramètres spectroscopiques des bandes n ₁ et n ₂ de la molécule d'ammoniac avec un profil de Galatry.	29 novembre 2017

5- Conventions de cotutelles signées en 2017

Doctorant	Université Partenaire
Mawel DRIDI	Laboratoire GSMA - Université de Reims France
Emna RADDAOUI	Monaris - Université Pierre et Marie Curie France
Amal FARJI	ULB Bruxelles - Belgique

IV.3 Production scientifique 2016

1- Liste des publications impactées 2016

1	A. Ben Hassen, S. Galaloua, F. Kwabia Tchanab, M. Dhib, H. Aroui Self- and N ₂ -collisional broadening coefficients of ethylene in the 1800 -2350 cm ⁻¹ spectral region Journal of Molecular Spectroscopy, Volume 326, 73-80 (2016)
2	F. Hmida,d, B. Grouiez, M. Rotger, M. Faye, L. Manceron, V. Boudon, H. Aroui Line position analysis of the m ₂ band of SO ₂ F ₂ using the C ₂ vTop Data System Journal of Molecular Spectroscopy 325 29–34 (2016)
3	Jamel Salem, Ghislain Blanquet, MurielLepère, Hassen Aroui H ₂ Line-mixingcoefficients inthe v ₂ and v ₄ bands ofPH ₃ at lowtemperature Jamel Journal of Quantitative Spectroscopy and RadiativeTransfer 173 34–39 (2016)
4	Inès Bejaoui Ouni, David Chapron, Hassen Aroui, Marc D. Fontana Thermal behavior of high-frequency optical phonons in tetragonal BaTiO ₃ single crystal Applied Physics A 122:480 (2016),
5	C. Jellali, S. Galalou, A. Cuisset, M. Dhib and H. Aroui Semi-classical calculations of self-broadening coefficients of OCS and HCN at temperatures between 200 K and 298 K J Mol Spectrosc. 329: 35–42 (2016)
6	N. Nardetto, A. Mérand, D. Mourard,, M. Challouf, VEGA/CHARA interferometric observations of Cepheids. I. A resolved structure around the prototype classical Cepheid delta Cep in the visible spectral range Journal Astronomy and Astrophysics A45, 593 (2016)
7	Arnaud Cuisset, Dean S. Venables, Xiaoming Gao, and Hassen Aroui Applications of Spectroscopy in Environmental Monitoring of Gases and Aerosols, Journal of Spectroscopy, special issue (2016), Article ID 2575782
8	Flattening and surface-brightness of the Be-type star _ Per with the visible VEGA/CHARA interferometer M. Challouf ¹ , N. Nardetto ² , A. Domiciano de Souza ² , D. Mourard ² , I. Tallon-Bosc ³ , H. Aroui ¹ , C. Farrington ⁴ , R. Ligi ² , A. Meilland ² , and M. Mouelhi ¹ Astronomy & Astrophysics "delta_Per v2" cESO 2016

2- Liste des ouvrages scientifiques édités en 2016

Titre du livre: Applications of Spectroscopy in Environmental Monitoring of Gases and Aerosols

Date d'édition: Mai 2016

Auteurs: Arnaud Cuisset, Dean Venables, Xiaoming Gao, and Hassen Aroui

Maison d'édition: Hindawi Publishing Corporation , Journal of Spectroscopy

3- Liste des Communications en 2016

1	Analysis of the ν_2 band of the Quasi-Spherical Top Molecule SO_2F_2 F. Hmida ^{1,4} , M. Faye ³ , B. Grouiez ¹ , M. Rotger ¹ , V. Boudon ² , L. Manceron ³ , H. Aroui ⁴ ASA – HITRAN 2016 (Reims, France, 24 – 26 August 2016)
2	Frequency analysis of the (ν_3 , ν_7 , ν_9) bending triad of SO_2F_2 using the C_{2v} Top Data System F. Hmida ^{1,4} , B. Grouiez ¹ , M. Rotger ¹ , V. Boudon ² , L. Manceron ³ , H. Aroui ⁴ ASA – HITRAN 2016 (Reims, France, 24 – 26 August 2016)
3	Frequency analysis of the ν_2 band of SO_2F_2 using the C_{2v} Top Data System F. Hmida ^{1,4} , M. Faye ³ , B. Grouiez ¹ , M. Rotger ¹ , V. Boudon ² , L. Manceron ³ , H. Aroui ⁴ 11 th SOLEIL USERS' MEETING - SUM 2016 – 21-22 Janvier 2016
4	Frequency analysis of the ν_2 band of SO_2F_2 using the C_{2v} Top Data System F. Hmida ^{1,4} , M. Faye ³ , B. Grouiez ¹ , M. Rotger ¹ , V. Boudon ² , L. Manceron ³ , H. Aroui ⁴ International Conference On Materials and Spectroscopy Methods (ICMSM) 25-28 march 2016, Yasmine Hammamet – Tunisia
5	Line broadening, shifting and mixing parameters of OCS perturbed by He in $2\nu_1$ band JELLALI Chaker ¹ , DHIB Mohamed ¹ , ROTGER-LANGUEREAU Maud ² International Conference On Materials and Spectroscopy Methods (ICMSM) 25-28 march 2016, Yasmine Hammamet – Tunisia
6	Semi-classical calculations of self-broadening coefficients of OCS and HCN for temperatures between 200 and 298 K Chaker Jellali ^{1,*} , Souhail Galalou ¹ , Arnaud Cuisset ² , M. Dhib ¹ and H. Aroui ¹ ASA – HITRAN 2016 - Reims, France, 24 – 26 August 2016
7	Measured and calculated O2-broadening coefficients of C_2H_4 in the n_7+n_8 band Amani Ben Hassen ^{1,*} , Souhail Galalou ¹ , Fridolin Kwabia Tchana ² and Hassen Aroui ¹ ASA – HITRAN 2016 - Reims, France, 24 – 26 August 2016
8	Self-, N2- and O2-broadening coefficients of CH_3Br in the ν_2 band S. Galalou ^{1,*} , Z. Boussetta ¹ , I. Bejaoui Ouni ¹ , F. Kwabia Tchana ² and H. Aroui ¹ ASA – HITRAN 2016 - Reims, France, 24 – 26 August 2016
9	Theoretical Self and N2-broadening coefficients of CH_3Br Z. Boussetta ¹ , S. Galalou ¹ and H. Aroui ¹ ASA – HITRAN 2016 - Reims, France, 24 – 26 August 2016
10	Polarized Raman spectroscopy of $\text{Ba}_{0.97}\text{Ca}_{0.03}\text{TiO}_3$ I. BEJAOUI OUNI ^A , M. D. FONTANA ^B , D. CHAPRON ^B AND H. AROUI ^A 4 ^{ème} conférence Internationale sur l'Optique, la Photonique et ses Applications (ICOPA-4) – 5-7/12/2016 - ICMCB-CNRS Pessac, France
11	Phase transition in $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{TiO}_3$: Investigation by Raman Spectroscopy. I. BEJAOUI OUNI ^A , M. D. FONTANA ^B , D. CHAPRON ^B AND H. AROUI ^A ICMSM 25-28 march 2016, Yasmine Hammamet – Tunisia
12	Collisional broadening coefficients in the ν_4 and ν_1 bands of NH_3 perturbed by Ar: Calculations from an ab-initio potential AYARI Chaima ^{1,*} , DHIB Mohamed ¹ , LOREAU Jerome ² and AROUI Hassen ICMSM 25-28 march 2016, Yasmine Hammamet – Tunisia
13	Measurements and calculations of Self- and N2-broadening coefficients of ethylene in the 1800 - 2350 cm^{-1} spectral region. A.BEN HASSEN ¹ , S. GALALOU ¹ , F. KWABIA TCHANA ² , H.AROUI ¹ ICMSM 25-28 march 2016, Yasmine Hammamet – Tunisia

4- Liste des thèses soutenues en 2016

Nom et Prénom	Titre Thèse	Date de Soutenance
Ben Hassen Amani	Spectroscopie à haute résolution de la région 1800-2350 cm^{-1} de l'éthylène : Intensités et largeurs de raies	02 Juillet 2016
Boussetta Zouhaier	Détermination des paramètres collisionnels de bromure de méthyle	23 Mars 2016
Bejaoui Ouni	Anharmonicité et phénomènes ordre désordre dans BaTiO_3 et ses composés dérivés : étude par spectroscopie Raman et simulation des propriétés phononiques	19 Novembre 2016

5- Liste des mastères soutenus en 2016

Nom et Prénom	Titre Thèse	Date de Soutenance
MOUELHI Meriem	Etude de systèmes binaires séparés par interférométrie optique	07 octobre 2016
MATTOUSSI Manel	Détermination des paramètres de raies de la molécule d'ammoniac perturbée par N ₂	07 octobre 2016
ATTAFI Yosra	Détermination des paramètres de raies des bandes infrarouges ν_2 , $2\nu_2$ et ν_4 de l'ammoniac	07 octobre 2016
ALLOUI Rihab	Etude de l'effet de couplage dans la bande ν_5 de la molécule CH ₃ Br	07 octobre 2016

6- Conventions de cotutelles signées en 2016

Doctorant	Université Partenaire
Manel MATTOUSSI	Laboratoire GSMA - Université de Reims France
Mariam MOUELHI	Université du Littoral-Côte-d'Opale Dunkerque France
Yosra ATTAFI	LISA Université Paris Diderot France
