

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



# MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

## MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique des rayonnements

Par

**BEKHEITIA YASSINE**

Sur le thème

**Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  
 $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$**

Soutenu le : 08/07/2021 devant le jury composé de :

Mr. DJAAFRI Abdelkader	MCB	Université D. TaharMoulay. SAiDA	Président
Mr. MESKINE Mohamed	MCA	Université D. TaharMoulay. SAiDA	Encadreur
Mr. KAAROUR Abdelkrim	MCA	Université D. TaharMoulay. SAiDA	Co-encadreur
Mr. ZEMOULI Mostefa	MCA	Université D. TaharMoulay. SAiDA	Examineur
Mr. ELKEURTI Mohammed	Pr	Université D. TaharMoulay. SAiDA	Examineur

**Année Universitaire 2020 - 2021**

# Remerciements

بسم الله الرحمن الرحيم (قل اعملوا فسيرى الله عملكم ورسوله و المؤمنون) صدق الله العظيم  
الهي الذي لا يطيب الليل الا بشكره ولا يطيب النهار الا بطاعتك . . . . . و لا تطيب اللحظات الا بذكرك و لا  
تطيب الاخرة الا بعفوك و لا تطيب الجنة الا برويتك " جل جلاله "  
الى من بلغ الرسالة و ادى الامانة و نصح الامة الى نبي الرحمة و نور العالمين  
" سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم "

*tout d'abord j'exprime ma profondeur connaissance  
à monsieur « MESKINE Mohamed » mon encadreur,  
qui à diriger notre travail ; ses conseils et ses  
commentaires précieux nous ont permis de  
surmonter mes difficultés et de se progresser dans  
mon mémoire de fin d'études.*

*Ensuite, je tiens à remercier les membres du jury Qui  
nous ont fait l'honneur d'accepter de lire ce mémoire  
et de l'évaluer. Je m'adresse aussi mes vifs  
remerciements à tous mes enseignants (es).*

*Merci pour tous les gens qui ont contribué de près ou  
de loin dans la réalisation de ce travail.*

*A mes collègues de la promotion de master :  
protection*

***Bekheitia Yassine***

# Dédicaces



*Je dédie ce modeste travail :*

*A Ceux qui m'ont donné l'aide sans rien attendre en retour*

*A ceux qui m'ont encouragé et soutenu aux moments les plus difficiles .*

*A mes chers parents (Bekheitia Bouhafas et Sadli Allaya ) qui ont toujours veillé à mon bien être, pour leur soutien et leur sacrifice, leur patience, leurs conseils, et leurs encouragements continus.*

*A toute la famille Bekheitia et Saadli*

*A mes frères : Tayeb et larbi*

*A mes soeurs : Imane maryame Manal*

*A tous et toute mes amis (M Abdelaziz*

*N.youssoufe B. HICHAME B.Nourdine A .ALI*

*M.khatir D.Azouze F.Abdelatif N Hakim Z*

*.Hicham B. Amine B.MADJID K.Ali N.djaafar*

*L.Khaled S.Tayeb C.Chahinaze H.Hayat B.Rjadja).*

*A Tous mes professeurs.*

*A toute la promo de Physique*

***Bekheitia Yassine***

# Sommaire

Remerciements

Dédicaces

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction général

1

## Chapitre I : Spectroscopie Moléculaire Et Théorie Des Représentations

I-1	Introduction.....	3
I-2-	symétrie moléculaire et théorie des représentations.....	3
	I-2-1-Symétrie moléculaire.....	3
	I-2-2-Les opérations de symétrie.....	3
	I-2-3-Les groupes ponctuels finis de symétrie.....	6
I-3-	Représentation des différentes symétries dans l'espace physique.....	10
	I-3-1-Le groupe $O_h$ .....	13
	I-3-2-Produit direct des représentations.....	15
I-4-	Les modes de vibration des molécules octaédriques.....	17
	I-4-1Théorie des caractères.....	18
	I-4-2Théorème.....	18
I-5-	Niveaux d'énergie.....	22
	I-5-1-Rotation moléculaire.....	23
	I-5-2-Vibration moléculaire.....	24
I-6-	Activité des fréquences fondamentales.....	26
	I-6-1-Spectre infrarouge.....	26
	I-6-2-Spectre Raman.....	27

## Chapitre II : Formalisme tensoriel Octaédrique

II-1	Introduction.....	29
II-2	Approximation de Borne – Oppenheimer.....	29
II-3	Transformations de contact.....	29
II-4	Expression de l'Hamiltonien.....	30
	II-4-1 Opérateurs vibrationnels.....	32
	II-4-2 Opérateurs rotationnels .....	33
	II-4-3 Opérateurs rovibrationnels.....	33
	II-4-4 Les éléments matriciels .....	34
II-5	Expression de moment dipolaire.....	35
II-6	Les règles de sélection.....	36

## Chapitre III: Prédiction du spectre infrarouge de la bande $\nu_3$ et $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$

III-1	Introduction.....	38
III-2	Description de Programmes utilisés.....	38
III-3	Analyse de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	40
	III-3 -1 Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande $\nu_3$ de La molécule $^{238}\text{UF}_6$ ..	40
	III-3 -2 Prédiction du spectre transitions rovibrationnelle de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	42
	III-3 -3 Les niveaux d'énergies réduits de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	47
III-4	Analyse de la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	48
	III-4 -1 Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande $3\nu_3$ de La molécule $^{238}\text{UF}_6$	49
	III-4 -2 Prédiction du spectre transitions rovibrationnelle de la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	50
	III-4 -3 Les niveaux d'énergies réduits de la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	56
	Conclusion générale.....	57
	Références bibliographiques.....	59
	Résumé	

# Liste des figures

<b>Fig I-1 :</b>	L'élément identité E.....	4
<b>Fig I-2 :</b>	Rotation impropre $S_4$ .....	4
<b>Fig I-3 :</b>	l'opération d'inversion $i$ sur la molécule SF <sub>6</sub> .....	5
<b>Fig I-4 :</b>	Effet de l'opération de symétrie plan.....	5
<b>Fig I-5 :</b>	L'effet de rotation de l'axe C <sub>2</sub> .....	6
<b>Fig I-6 :</b>	Tableau synoptique des différents groupes ponctuels de leurs éléments de symétries, ainsi que des molécules leur appartenant .....	9
<b>Fig I-7 :</b>	Représentation dans l'espace physique.....	10
<b>Fig I-8 :</b>	Symétrie par rapporte un point $i$ .....	12
<b>Fig I-9 :</b>	Symétrie par rapport à un plan perpendiculaire au $\vec{e}_3$ .....	12
<b>Fig I-10 :</b>	Symétrie par rapport à un plan contenant $\vec{e}_3$ .....	13
<b>Fig I-11 :</b>	Rotation propre autour $\vec{e}_3$ .....	13
<b>Fig I-12 :</b>	Géométrie d'une molécule octaédrique.....	14
<b>Fig I-13 :</b>	Illustration schématique d'une absorption ou émission .....	22
<b>Fig I-14 :</b>	Diagramme des niveaux d'énergie de la molécule en rotation.....	24
<b>Fig I-15 :</b>	Niveaux de vibrations d'une molécule.....	25
<b>Fig I-16 :</b>	Niveaux de vibration-rotation d'une molécule.....	26
<b>Fig I-17 :</b>	Diagramme des niveaux d'énergie d'une molécule avec les différentes transitions possibles dans la domaine de l'infrarouge.....	27
<b>FigII-1:</b>	Illustration schématique de l'extrapolation vibrationnelle de l'Hamiltonien et de moment dipolaire dans le cas de polyades et de bandes chaudes.....	37
<b>FigIII -1 :</b>	L'onglet "creat a job" dans XTDS.....	39
<b>FigIII -2 :</b>	Spectres des transitions rovibrationnelles de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	41
<b>FigIII -3 :</b>	Répartitions des niveaux d'énergies réduits de niveau $\nu_3$ de la Molécule $^{238}\text{UF}_6$ ..	48
<b>FigIII -4 :</b>	Spectres des transitions rovibrationnelles de la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ ..	50
<b>FigIII -5 :</b>	Répartitions des niveaux d'énergies réduits de niveau $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	56

# Liste des tableaux

<b>Tableau I-1 :</b>	Groupes ponctuels moléculaires.....	<b>8</b>
<b>Tableau I-2 :</b>	Table de caractères du groupe Oh.....	<b>14</b>
<b>Tableau I-3 :</b>	Table de produit de caractères du groupe Oh.....	<b>16</b>
<b>Tableau I-4 :</b>	caractères des opérations de symétrie.....	<b>19</b>
<b>Tableau I-5:</b>	Caractères vibrationnels des opérations de symétrie des molécules $XY_6$ .....	<b>20</b>
<b>Tableau I-6 :</b>	Table de caractères et valeurs de caractères vibrationnels des molécules $XY_6$ .....	<b>20</b>
<b>Tableau I-7 :</b>	Symétries des modes de vibrations des molécules octaédriques.....	<b>21</b>
<b>Tableau I-8 :</b>	Table de caractères et activité des modes de vibrations des molécules $XY_6$ .....	<b>27</b>
<b>Tableau I-9 :</b>	Caractéristiques des bandes d'absorption des molécules octaédriques.....	<b>28</b>
<b>Tableau II -1 :</b>	Les symétries des opérateurs (Hamiltonien, moment dipolaire et polarisabilité) dans les repères (MFF) et (LFF) des molécules ... ..	<b>36</b>
<b>Tableau III -1 :</b>	Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande $\nu_3$ de la Molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	<b>40</b>
<b>Tableau III -2 :</b>	Informations sur le spectre IR de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	<b>42</b>
<b>Tableau III -3 :</b>	Prédiction du spectre des transitions rovibrationnelles de bande $\nu_3$ de molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	<b>43</b>
<b>Tableau III -4 :</b>	Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ ...	<b>49</b>
<b>Tableau III -5 :</b>	Informations sur le spectre IR de la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	<b>50</b>
<b>Tableau III -6 :</b>	Prédiction du spectre des transitions rovibrationnelles de bande $3\nu_3$ de molécule $^{238}\text{UF}_6$ .....	<b>51</b>

*Introduction*  
*général*

### Introduction général

La spectroscopie moléculaire joue un rôle de plus en plus important et ce rôle ne fera que progresser dans les recherches scientifiques des composants minoritaires et des atmosphères planétaires. C'est la mesure quantitative de lumière qu'une substance chimique absorbe en faisant passer un faisceau lumineux à travers l'échantillon dans un spectrophotomètre [1].

La spectroscopie infrarouge est une technique indispensable aux scientifiques pour analyser, identifier et caractériser les espèces chimiques. Elle permet de déterminer avec une grande précision les structures moléculaires. Technique courante dans l'industrie, elle est même utilisée dans les investigations policières pour la détection d'explosifs par exemple [2]. Elle est basée sur l'interaction du rayonnement infrarouge avec les molécules en excitantes leur modes de vibration (déformation, élongation) spécifiques de liaisons chimiques.

Dans le domaine de spectroscopie, les scientifiques voient qu'il est nécessaire de rechercher des méthodes faciles à appliquer, et qui permettent l'étude de spectres et de déterminer les propriétés Physiques, ainsi que ces méthodes permettent d'interpréter les résultats expérimentaux (les intensités et les énergies associées aux transitions entre les états). C'est ici que la théorie des groupes joue un rôle fondamental, elle fournit à l'expérimentateur un mécanisme pour expliquer et traduire ses résultats expérimentaux, et au théoricien un guide obligatoire pour affronter le problème complexe de relation des résultats expérimentaux avec la structure moléculaire. [3].

à Dijon Les études des spectres ont été menées après l'utilisation de calcul algébrique tensoriel et la théorie des groupes. Ces méthodes ont été récemment appliquées à des molécules de symétrie différente ( $C_2$ [4]  $C_{4v}$ [5]  $C_{3v}$ [6]). les appareils informatiques sont utilisés pour le calcul des spectres à haute résolution et l'ajustement des paramètres de l'Hamiltonien. Le développement Des logiciels informatiques TDS (Top Data System) ont été mis au point pour étudier les spectres de molécules de symétrie  $O_h$  (HTDS [7]),  $C_{4v}$  ( $C_{4v}$  TDS [8]),  $T_d$  (STDS [9]).

Dans cette étude où nous nous sommes proposé d'étudier les fréquences du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ . Ce travail s'articule autour de trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous présentons les notions de base de la théorie des représentations utilisées aux calculs des fréquences et des modes normaux des vibrations des molécules  $\mathbf{XY}_6$ .

Dans un deuxième chapitre, nous allons décrire le modèle théorique, basé sur une écriture tensorielle de l'Hamiltonien, et du moment dipolaire des molécules octaédriques.

Le troisième chapitre sera consacré aux programmes utilisés dans le calcul des spectres infrarouges des deux bandes en questions. Les résultats obtenus seront analysés et discutés dans la suite.

Enfin Nous terminerons ce travail par une conclusion générale.

***Chapitre I :***  
***spectroscopie***  
***moléculaire et***  
***théorie des***  
***représentations***

## I-1- Introduction

Dans ce chapitre, on essaye de regrouper l'essentiel des outils utilisés par les spectroscopistes pour calculer et prédire les spectres rovibrationnels des molécules.

La spectroscopie moléculaire se base sur deux approches :

- une première, plus *qualitative*, qui est basée sur l'aspect géométrique de la molécule, et en particulier, sur ses éléments de symétrie.
- Une deuxième approche quantique, qui permet de calculer les moments dipolaires induits pour les fonctions d'onde limitées à une des excitations de la molécule.

Pour classer une molécule par rapport à la symétrie, on commence par lister toutes les opérations de symétrie et on affecte à chaque opération, et essayer de représenter le groupe *Oh*.

## I-2- Symétrie moléculaire et théorie des représentations

### I-2-1 Symétrie moléculaire

Un objet est dit symétrique s'il peut être superposé à lui-même par l'application d'une transformation de l'espace autre que l'identité.

L'élément de symétrie par rapport auquel la rotation a été effectué est une droite perpendiculaire au plan de l'objet au point, Chaque élément de symétrie est associée une ou plusieurs opération de symétrie [10]. L'étude des symétries d'une molécule est fondée sur l'étude de son infrastructure géométrique constituée par les noyaux de ses atomes. La molécule peut contenir des noyaux identiques et occupants, dans l'infrastructure, des positions équivalentes du point de vue physique [11]. La symétrie moléculaire nous fournit une méthode formelle pour la description de la géométrie des molécules et aussi pour étudier opérations de symétrie des molécules sont classés leurs forme.

### I-2- 2 Opérations de symétrie

L'opération de symétrie c'est le mouvement de déplacement d'un objet le conduisant soit à une position équivalente soit à une position identique, chaque opération de symétrie possède un élément de symétrie [12].

Les cinq opérations de symétrie possibles pour les molécules sont :

- L'élément identité, notée E, qui ne consiste à ne rien appliquer à la molécule.

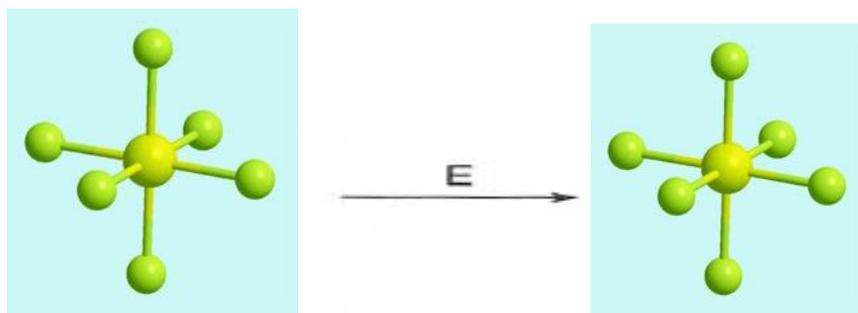


Fig I- 1 : L'élément identité E

- Une rotation impropre de multiplicité  $n$ , est une opération composite où l'on fait une rotation d'angle  $\frac{2\pi}{n}$  autour d'un axe au terme de laquelle la configuration obtenue de la molécule n'est pas la même, mais une fois suivie de la réflexion on retrouve la configuration initiale de la molécule.

nous dirons que  $S_n$  est une symétrie de la molécule, et on peut écrire :

$$S_n = \sigma \quad (\text{I-1})$$

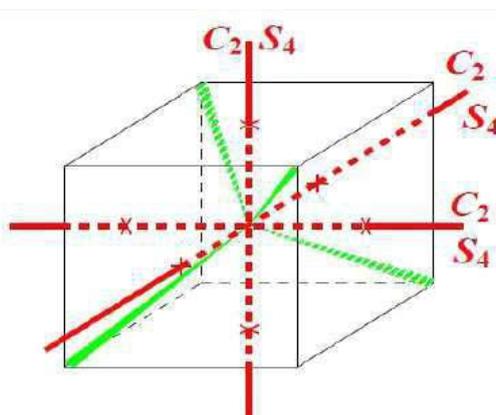


Fig I - 2 : Rotation impropre  $S_4$

- L'inversion  $i$  est l'opération de symétrie par rapport à un point, qui fait alors office de centre de symétrie de la molécule. c'est un cas particulier de rotation impropre d'angle  $180^\circ$ . Deux symétries par rapport au même point ramènent la molécule à sa position initiale, donc :

$$i^2 = E \quad (\text{I-2})$$

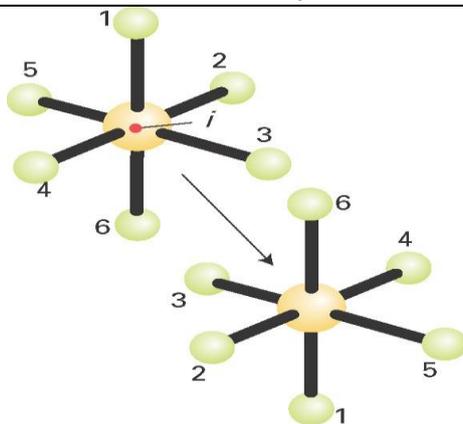


Fig I – 3 : l'opération d'inversion  $i$  sur la molécule  $SF_6$

➤ La symétrie par rapport à un plan de symétrie, notée  $\sigma$  il existe trois types de plan de symétrie selon son positionnement par rapport à l'axe principal :

- **Plan  $\sigma_h$**  : Le plan de symétrie est noté  $\sigma_h$  s'il est perpendiculaire à l'axe principal. la lettre «h» en indice signifie horizontal.
- **Plan  $\sigma_d$**  : Le plan de symétrie est noté  $\sigma_d$  s'il contient l'axe principal et au même temps il est bissecteur d'un angle formé par deux axes  $C_2$ , la lettre « d » en indice signifie diagonal.
- **Plan  $\sigma_v$**  : Le plan de symétrie est noté  $\sigma_v$  s'il contient l'axe principal, la lettre « v » en indice signifie vertical.

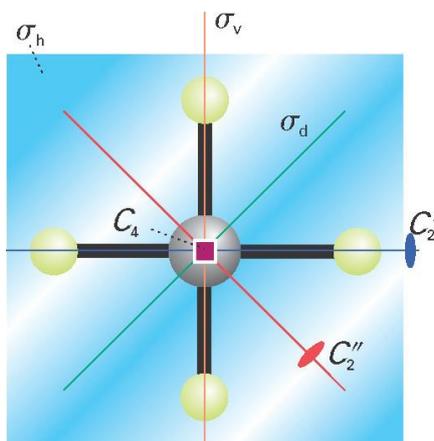
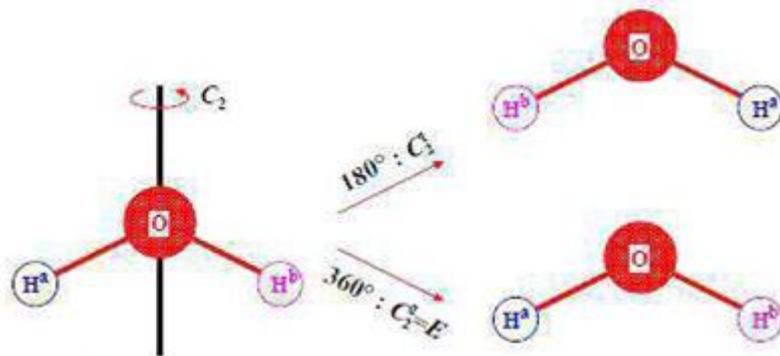


Fig I – 4 : Effet de l'opération de symétrie plan

➤ La rotation autour d'un axe de symétrie : Un axe propre de symétrie est une droite autour de laquelle on effectue une rotation propre de symétrie. La molécule d'eau possède une structure plane, les deux hydrogène et l'oxygène appartiennent au même plan, une rotation

propre de  $\alpha = 180^\circ$  autour de l'axe bissecteur de l'angle  $\text{H}_1\text{-O-H}_2$  laisse la molécule inchangée. Cette rotation est associée à l'axe propre de rotation  $C_2$  d'ordre :

$$n = 2\pi/\alpha = 2.$$



**Fig I – 5 : L'effet de rotation de l'axe C2**

### I-2- 3 Les groupe ponctuels

Un groupe ponctuel est un groupe dans lequel le centre de masse de la molécule reste inchangé. Sachant que toutes les opérations de symétrie incluent un élément de symétrie passant par ce centre de masse, toute combinaison d'opérations de symétrie forme un groupe. Par définition un groupe doit obéir aux règles mathématiques sa veut dire chaque groupe possède les propriétés suivantes :

- ❖ Tout groupe ponctuel possède E comme élément de symétrie : Si  $G=(E, \dots, R \dots)\forall R$ , une symétrie quelconque de la molécule :

$$E.R = R.E = R \quad \text{(I-3)}$$

- ❖ Associativité :  $\forall P, Q, R$  des symétries d'une molécule :

$$P(Q.R) = (P.Q)R \quad \text{(I-4)}$$

- ❖ Non commutativité : L'ordre de combinaison d'application des symétries est important, et on général on a :

$$P.Q \neq Q.P \quad \text{(I-5)}$$

- ❖ Chaque opération R a son inverse  $R^{-1}$  qui appartient au groupe, tel que

- ✚ **Les groupes  $C_1, C_s$  et  $C_i$**  : Consistent en l'identité seule pour le groupe  $C_1$ , l'identité et la réflexion pour  $C_s$ , enfin l'identité et l'inversion pour  $C_i$ .
- ✚ **Les groupes  $C_n$**  : Contiennent l'identité et une rotation de multiplicité  $n$ .
- ✚ **Les groupes  $C_{nv}$**  : contiennent, en plus des opérations des groupes  $C_n$ ,  $n$  réflexions verticales. Un cas particulier, est le groupe  $C_{\infty v}$ , c'est le groupe de symétrie pour les molécules diatomique hétéronucléaires.
- ✚ **Les groupes  $C_{nh}$**  : Contiennent, en plus des opérations des groupes  $C_n$  une réflexion horizontale.
- ✚ **Les groupes  $D_n$**  : Contiennent, en plus des opérations  $C_n$ ,  $n$  rotations de multiplicité 2 perpendiculaires aux axes de multiplicité  $n$ .
- ✚ **Les groupes  $D_{nh}$**  : En plus des éléments des groupes  $D_n$ , il y a aussi une réflexion horizontale. Un cas particulier important, est le groupe  $D_{\infty}$  qui constitue le groupe de symétrie pour les molécules diatomiques homopolaires et les molécules triatomiques linéaires  $AB_2$ , c'est le cas du  $CO_2$ .
- ✚ **Les groupes  $S_n$**  : Avec  $n$  pair, contiennent l'identité et une rotation impropre (rotation réflexion) de multiplicité  $n$ .
- ✚ **Les groupes  $T_d$**  : Ces groupes ont 4 axes d'ordre trois  $C_3$ , 3 axes d'ordre deux  $C_2$  et 6 plans  $\sigma_d$ , c'est le groupe des molécules tétraédriques.
- ✚ **le groupe O** : Les éléments de symétrie sont :  $3C_4$  mutuellement perpendiculaires plus  $4C_3$  respectivement de même orientation que le  $C_2$  et le  $C_3$  du tétraèdre. En conséquence le groupe O possède aussi  $6C_2$  en plus des  $C_2$  coïncidant avec les  $C_4$ . Ce groupe est moins symétrique que l'octaèdre régulier.

## Chapitre I : spectroscopie moléculaire et théorie des représentations

✚ **Le groupe  $O_h$**  : ce groupe contient 3 axes d'ordre quatre  $C_4$ , 4 axes d'ordre trois  $C_3$ , 6 axes d'ordre deux  $C_2$ , 3 plans  $\sigma_h$ , six plans  $\sigma_d$  et un centre de symétrie. C'est le groupe des molécules octaédriques.

Dans ce tableau, les éléments de symétrie sont :

**Tableau I -1** : Groupes ponctuels moléculaires

Groupes	Axes et plans de symétrie
$C_s$	Plan de symétrie
$C_i$	Centre de symétrie
$C_n$	Axe de symétrie d'ordre n
$S_{2n}$	Axe de symétrie inverse d'ordre 2n
$C_{nh}$	Axe d'ordre n ; plan horizontal
$C_{nv}$	Axe d'ordre n ; n plans verticaux
$D_n$	Axe d'ordre n ; n axes horizontaux d'ordre 2
$D_{nh}$	Mêmes rotations que $D_n$ ; un plan horizontal ; n plans verticaux contenant les axes d'ordre 2
$D_{nd}$	Mêmes rotations que $D_n$ ; n plans verticaux bissecteurs des angles formés par les axes horizontaux d'ordre 2
$T_d$	Tétraèdre
$O_h$	Octaèdre ou cube

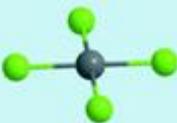
Point group	Symmetry elements	Shape	Examples
$C_1$	$E$		SiClBrF
$C_2$	$E, C_2$		H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
$C_s$	$E, \sigma$		NHF <sub>2</sub>
$C_{2v}$	$E, C_2, \sigma_v, \sigma'_v$		H <sub>2</sub> O, SO <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>
$C_{3v}$	$E, 2C_3, 3\sigma_v$		NH <sub>3</sub> , PCl <sub>3</sub> , POCl <sub>3</sub>
$C_{\infty v}$	$E, C_2, 2C_\phi, \infty\sigma_v$		CO, HCl, OCS
$D_{2h}$	$E, 3C_2, i, 3\sigma$		N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> , B <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
$D_{3h}$	$E, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2S_3, 3\sigma_v$		BF <sub>3</sub> , PCl <sub>5</sub>
$D_{4h}$	$E, 2C_4, C_2, 2C'_2, 2C''_2, i, 2S_4, \sigma_h, 2\sigma_v, 2\sigma_d$		XeF <sub>4</sub> , <i>trans</i> -[MA <sub>4</sub> B <sub>2</sub> ]
$D_{\infty h}$	$E, 2\infty C'_2, 2C_\phi, i, \infty\sigma_v, 2S_\phi$		H <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>
$T_d$	$E, 8C_3, 3C_2, 6S_4, 6\sigma_d$		CH <sub>4</sub> , SiCl <sub>4</sub>
$O_h$	$E, 8C_3, 6C_2, 6C_4, 3C_2, i, 6S_4, 8S_6, 3\sigma_h, 6\sigma_d$		SF <sub>6</sub>

Fig I- 6 : Tableau synoptique des différents groupes ponctuels de leurs éléments de symétries ,ainsi que des molécules leur appartenant

### I-3- Représentation des différents symétries dans l'espace physique

Pour représenter les différentes symétries dans l'espace physique, on associe à chaque symétrie  $R$  un opérateur linéaire  $R$  et donc une matrice  $[R]$  à trois lignes et trois colonnes [13].

$(o, \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$  le repéré dans lequel on travaille est quelconque.

$R$  : une symétrie de la molécule  $\vec{P}$  est transformé en un nouveau vecteur  $\vec{P}'$ , vecteur position d'un point  $P'$  qui est le transformé de  $P$  par  $R$ . On exprime cette relation entre  $\vec{P}$  et  $\vec{P}'$  par :

$$\vec{P}' = R \cdot \vec{P} \quad (\text{I-7})$$

Avec :

$$\vec{P} = x_1 \cdot \vec{e}_1 + x_2 \cdot \vec{e}_2 + x_3 \cdot \vec{e}_3 \quad (\text{I-8})$$

Donc :

$$\vec{P}' = x_1 \cdot (R \cdot \vec{e}_1) + x_2 \cdot (R \cdot \vec{e}_2) + x_3 \cdot (R \cdot \vec{e}_3) \quad (\text{I-9})$$

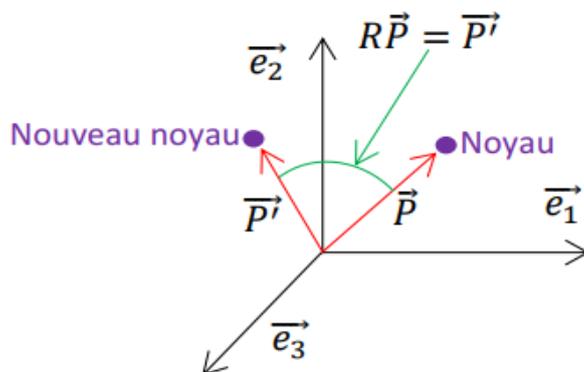


Fig I- 7 : Représentation dans l'espace physique

On obtenu :

$$\begin{cases} R \cdot \vec{e}_1 = r_{11} \cdot \vec{e}_1 + r_{21} \cdot \vec{e}_2 + r_{31} \cdot \vec{e}_3 \\ R \cdot \vec{e}_2 = r_{12} \cdot \vec{e}_1 + r_{22} \cdot \vec{e}_2 + r_{32} \cdot \vec{e}_3 \\ R \cdot \vec{e}_3 = r_{13} \cdot \vec{e}_1 + r_{23} \cdot \vec{e}_2 + r_{33} \cdot \vec{e}_3 \end{cases} \quad (\text{I-10})$$

En remplaçant  $R \cdot \vec{e}_1; R \cdot \vec{e}_2; R \cdot \vec{e}_3$  par leur valeur dans les formules (I-9) on a :

$$\vec{P}' = R \cdot \vec{P} = x_1(r_{11} \cdot \vec{e}_1 + r_{21} \cdot \vec{e}_2 + r_{31} \cdot \vec{e}_3) + x_2(r_{12} \cdot \vec{e}_1 + r_{22} \cdot \vec{e}_2 + r_{32} \cdot \vec{e}_3) + x_3(r_{13} \cdot \vec{e}_1 + r_{23} \cdot \vec{e}_2 + r_{33} \cdot \vec{e}_3) \quad (\text{I-11})$$

$$= x'_1 \vec{e}_1 + x'_2 \vec{e}_2 + x'_3 \vec{e}_3 \quad (\text{I-12})$$

Ou :

$$\begin{cases} x'_1 = r_{11} \cdot x_1 + r_{12} \cdot x_2 + r_{13} \cdot x_3 \\ x'_2 = r_{21} \cdot x_1 + r_{22} \cdot x_2 + r_{23} \cdot x_3 \\ x'_3 = r_{31} \cdot x_1 + r_{32} \cdot x_2 + r_{33} \cdot x_3 \end{cases} \Rightarrow \mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{I-13})$$

Ainsi les matrices représentant les différents types de symétries sont obtenus facilement et sont décrites ci-dessous :

➤ L'identité E :

$$E \cdot \vec{e}_1 = 1\vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3 \quad (\text{I-14})$$

$$E \cdot \vec{e}_2 = 0\vec{e}_1 + 1 \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3 \quad (\text{I-15})$$

$$E \cdot \vec{e}_3 = 0\vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 1 \cdot \vec{e}_3 \quad (\text{I-16})$$

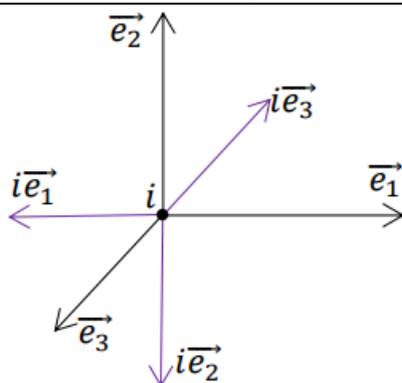
$$\Rightarrow E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-17})$$

➤ Rotation impropre  $S_n$  :

$$S_n = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) & 0 \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-18})$$

➤ Symétrie par rapport à un point  $i$  : Une symétrie point change la direction de  $\vec{e}_1, \vec{e}_2$  et  $\vec{e}_3$  en leur opposées et la matrice correspondante est :

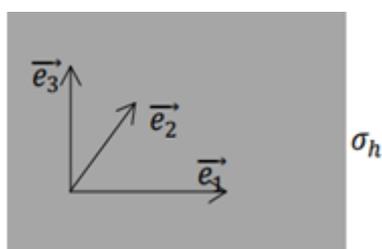
$$i = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-19})$$


 Fig I- 8 : Symétrie par rapporte un point  $i$ 

➤ Symétrie par rapport à un plan perpendiculaire à  $\vec{e}_3$  :

$$\begin{cases} \sigma_h \cdot \vec{e}_1 = 1\vec{e}_1 + 0\cdot\vec{e}_2 + 0\cdot\vec{e}_3 \\ \sigma_h \cdot \vec{e}_2 = 0\vec{e}_1 + 1\cdot\vec{e}_2 + 0\cdot\vec{e}_3 \\ \sigma_h \cdot \vec{e}_3 = 0\vec{e}_1 + 0\cdot\vec{e}_2 - 1\cdot\vec{e}_3 \end{cases} \quad (\text{I-20})$$

$$\sigma_h = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-21})$$


 Fig I- 9 : Symétrie par rapport à un plan perpendiculaire au  $\vec{e}_3$ 

➤ Symétrie par rapport à un plan contenant  $\vec{e}_3$

$$\begin{cases} \sigma_v \cdot \vec{e}_1 = \cos 2\beta \cdot \vec{e}_1 + \sin 2\beta \cdot \vec{e}_2 + 0\vec{e}_3 \\ \sigma_v \cdot \vec{e}_2 = \sin 2\beta \cdot \vec{e}_1 - \cos 2\beta \cdot \vec{e}_2 + 0\vec{e}_3 \\ \sigma_v \cdot \vec{e}_3 = 0\cdot\vec{e}_1 + 0\cdot\vec{e}_2 + 1\cdot\vec{e}_3 \end{cases} \quad (\text{I-22})$$

$$\sigma_v = \begin{pmatrix} \cos 2\beta & \sin 2\beta & 0 \\ \sin 2\beta & -\cos 2\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-23})$$

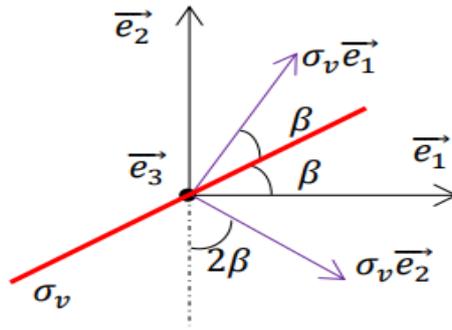


Fig I- 10 : Symétrie par rapport à plan contenant  $\vec{e}_3$

- Rotation autour de  $\vec{e}_3$  : Supposons que  $R = C(\alpha)$  est une rotation d'angle  $\alpha$  autour de  $\vec{e}_3$  ( $\alpha$  positif correspond au sens de rotation inverse de celui des aiguilles d'une montre autour de  $\vec{e}_3$ ).

$$\begin{cases} C(\alpha) \cdot \vec{e}_1 = \cos(\alpha) \cdot \vec{e}_1 + \sin(\alpha) \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3 \\ C(\alpha) \cdot \vec{e}_2 = -\sin(\alpha) \cdot \vec{e}_1 + \cos(\alpha) \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3 \\ C(\alpha) \cdot \vec{e}_3 = 0 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 1 \cdot \vec{e}_3 \end{cases} \quad (\text{I-24})$$

$$C(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-25})$$

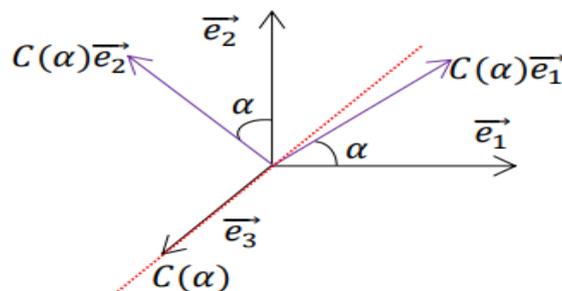


Fig I- 11 : Rotation propre autour  $\vec{e}_3$

### I-3- 1 Le groupe Oh

C'est le groupe de l'octaèdre régulier qui dérive du groupe O en lui ajoutant un centre d'inversion donc :  $\mathbf{O} + \mathbf{I} \rightarrow \mathbf{Oh}$

Un octaèdre peut être inscrit dans un cube, les sommets de l'octaèdre étant situés aux centres des faces du cube. Il existe trois axes d'ordre 4 joignant les centres de deux faces opposées du cube ; quatre axes d'ordre 3 confondus avec les diagonales ; six axes d'ordre 2 joignant les milieux de deux arêtes opposées ; six plans de symétrie passant par deux arêtes

opposées ; trois plans de symétrie passant par le centre du cube et parallèles à ses faces ; un centre de symétrie (le centre du cube).

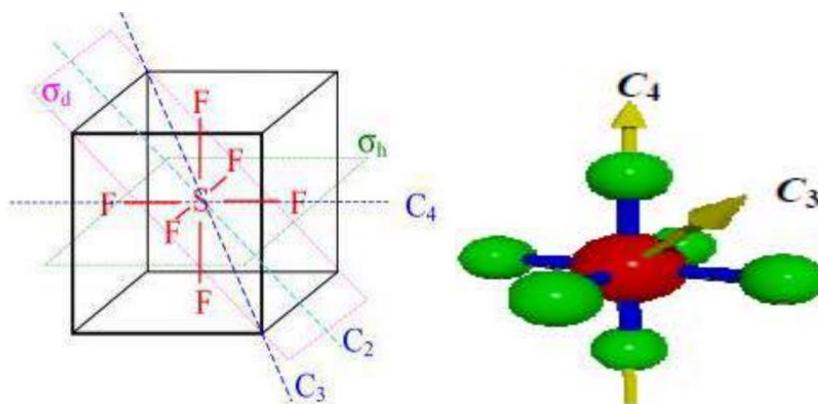


Fig I- 12 : Géométrie d'une molécule octaédrique

Les quarante-huit éléments de  $O_h$  sont répartis comme suivant :

$$O_h = \{E, 8C_3, 6C_2, 6C_4, 3C_2'', i, 6S_4, 8S_6, 3\sigma_h, 6\sigma_d\}$$

Tableau I -2 : Table de caractères du groupe  $O_h$ .

	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2''$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
$A_{2u}$	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
$E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$E_u$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$F_{1g}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$F_{1u}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$F_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$F_{2u}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1

❖ **Pour Première ligne :** Les différentes classes d'éléments conjugués du groupe Oh (les opérations de symétrie possibles)

❖ **Pour Première colonne :**

**A1g, A1u, A2g, A2u:** Représentation irréductible à une dimension. **(A ou B)**

**Eg, Eu:** Représentation irréductible à deux dimensions.

**F1g, F1u, F2g, F2u:** Représentation irréductible à trois dimensions **(F ou T)**

Pour différencier entre deux représentations de même dimension, on utilise les indices (1, 2). Puisque le groupe possède, parmi les symétries, le centre de symétrie on utilise l'indice g quand le caractère est positif et l'indice u quand le caractère est négatif.

❖ **A l'intérieur du tableau :** Est indiqué le caractère  $\chi_i^{(\mu)}$  correspondant à la classe  $K_i$  et à la représentation irréductible  $\Gamma^{(\mu)}$

$$\begin{aligned} \text{ensemble de symétrie} &= \{E, 8C_3, 6C_2, 6C_4, 3C_2'', i, 6S_4, 8S_6, 3\sigma_h, 6\sigma_d\} \\ &= \{K_1, K_2, K_3, K_4, K_5, K_6, K_7, K_8, K_9, K_{10}\} \end{aligned}$$

Les Différentes symétrie sont  $g=48$  et Le nombre de classe  $K=10$ , nous indique qu'il existe exactement  $K=10$  représentations irréductibles de dimensions  $n_1, n_2, \dots, n_{10}$  vérifiant :

$$n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_{10}^2 = g \quad \text{(I-26)}$$

Le seul ensemble qui vérifie l'équation précédente est :

$$1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 = 48 \quad \text{(I-27)}$$

### I-3-2- Produit direct des représentations

On utilise la table de caractères de Oh pour calcul tous les produits des caractères des représentations irréductibles possibles :

$$\chi^{(\mu \times \nu)} = \sum_{i=1}^{n_\mu} \sum_{j=1}^{n_\nu} [D^{(\mu)}(R)]_{ii} [D^{(\nu)}(R)]_{jj} \quad \text{(I-28)}$$

$$= \chi^{(\mu)}(R) \cdot \chi^{(\nu)}(R) \quad \text{(I-29)}$$

Et on obtient les tableaux suivant :

**Tableau I -3 :** Table de produit de caractères du groupe Oh

	E	8C <sub>3</sub>	6C <sub>2</sub>	6C <sub>4</sub>	3C'' <sub>2</sub>	i	6S <sub>4</sub>	8S <sub>6</sub>	3σ <sub>h</sub>	6σ <sub>d</sub>
A <sub>1g</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A <sub>1u</sub>	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A <sub>2g</sub>	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
A <sub>2u</sub>	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
E <sub>g</sub>	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
E <sub>u</sub>	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
F <sub>1g</sub>	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
F <sub>1u</sub>	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
F <sub>2g</sub>	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
F <sub>2u</sub>	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
A <sub>1g</sub> ⊗ A <sub>1g</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A <sub>1g</sub> ⊗ A <sub>1u</sub>	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A <sub>1g</sub> ⊗ A <sub>2g</sub>	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
A <sub>1g</sub> ⊗ A <sub>2u</sub>	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
A <sub>1g</sub> ⊗ E <sub>g</sub>	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
A <sub>1g</sub> ⊗ E <sub>u</sub>	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
A <sub>1g</sub> ⊗ F <sub>1g</sub>	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
A <sub>1g</sub> ⊗ F <sub>1u</sub>	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
A <sub>1g</sub> ⊗ F <sub>2g</sub>	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
A <sub>1g</sub> ⊗ F <sub>2u</sub>	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
A <sub>1u</sub> ⊗ A <sub>1u</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A <sub>1u</sub> ⊗ A <sub>2g</sub>	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
A <sub>1u</sub> ⊗ A <sub>2u</sub>	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
A <sub>1u</sub> ⊗ E <sub>g</sub>	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
A <sub>1u</sub> ⊗ E <sub>u</sub>	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
A <sub>1u</sub> ⊗ F <sub>1g</sub>	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
A <sub>1u</sub> ⊗ F <sub>1u</sub>	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
A <sub>1u</sub> ⊗ F <sub>2g</sub>	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
A <sub>1u</sub> ⊗ F <sub>2u</sub>	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
A <sub>2g</sub> ⊗ A <sub>2g</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A <sub>2g</sub> ⊗ A <sub>2u</sub>	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A <sub>2g</sub> ⊗ E <sub>g</sub>	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
A <sub>2g</sub> ⊗ E <sub>u</sub>	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
A <sub>2g</sub> ⊗ F <sub>1g</sub>	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
A <sub>2g</sub> ⊗ F <sub>1u</sub>	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
A <sub>2g</sub> ⊗ F <sub>2g</sub>	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
A <sub>2g</sub> ⊗ F <sub>2u</sub>	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
A <sub>2u</sub> ⊗ A <sub>2u</sub>	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A <sub>2u</sub> ⊗ E <sub>g</sub>	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
A <sub>2u</sub> ⊗ E <sub>u</sub>	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
A <sub>2u</sub> ⊗ F <sub>1g</sub>	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
A <sub>2u</sub> ⊗ F <sub>1u</sub>	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
A <sub>2u</sub> ⊗ F <sub>2g</sub>	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1

## Chapitre I : spectroscopie moléculaire et théorie des représentations

$A_{2u} \otimes F_{2u}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$E_g \otimes E_g$	4	1	0	0	4	4	0	1	4	0
$E_g \otimes E_u$	4	1	0	0	-4	4	0	-1	-4	0
$E_g \otimes F_{1g}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0
$E_g \otimes F_{1u}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0
$E_g \otimes F_{2g}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0
$E_g \otimes F_{2u}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0
$E_u \otimes E_u$	4	1	0	0	4	4	0	1	4	0
$E_u \otimes F_{1g}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0
$E_u \otimes F_{1u}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0
$E_u \otimes F_{2g}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0
$E_u \otimes F_{2u}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0
$F_{1g} \otimes F_{1g}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1
$F_{1g} \otimes F_{1u}$	9	0	1	1	1	-9	-1	0	-1	-1
$F_{1g} \otimes F_{2g}$	9	0	-1	-1	1	9	-1	0	1	-1
$F_{1g} \otimes F_{2u}$	9	0	-1	-1	1	-9	1	0	-1	1
$F_{1u} \otimes F_{1u}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1
$F_{1u} \otimes F_{2g}$	9	0	-1	-1	1	-9	1	0	-1	1
$F_{1u} \otimes F_{2u}$	9	0	-1	-1	1	9	-1	0	1	-1
$F_{2g} \otimes F_{2g}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1
$F_{2g} \otimes F_{2u}$	9	0	1	1	1	-9	-1	0	-1	-1
$F_{2u} \otimes F_{2u}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1

### I- 4- les modes de vibration des molécules octaédriques

Un mode de vibration d'une molécule est un mouvement pour lequel tous les atomes de la molécule vibrent en phase, à la même fréquence mais dans des directions ou avec des amplitudes différentes. Tel que la molécule formée de N atomes possède  $3N$  degrés de liberté. Parmi eux trois représentent la translation de la molécule dans son ensemble (le long des trois axes du repère x. y. z) et trois autres définissent la rotation de la molécule autour de chacun de ces axes. Les mouvements désordonnés les modes de vibration seront déterminés par :

- $3N - 6$  degrés de liberté pour une molécule non linéaire.
- $3N - 5$  degrés de liberté pour une molécule linéaire.

## I-4-1 Théorie des caractères

Soient :

$\chi_i^{(\mu)}$ : Le caractère d'un élément appartenant à la classe  $K_i$  dans la représentation irréductible

$\Gamma_\mu$

Le caractère  $\chi_i^{(\mu)}$  des différentes représentations irréductibles satisfait les relations suivantes :

$$\sum_{i=1}^k g_i \cdot \chi_i^{*(\mu)} \cdot \chi_i^{(\nu)} = g \cdot \delta_{\mu\nu} \quad (\text{I-30})$$

Où :

- ❖  $\chi_i^{*(\mu)}$ : Le Complexe conjugué de  $\chi_i^{(\mu)}$ .
- ❖  $K$  : Le nombre des représentations irréductibles (classes d'éléments).
- ❖  $g$  Le nombre d'éléments de symétrie du groupe  $G$ .
- ❖  $g_i$  : Le nombre d'éléments de symétrie de classe  $K_i$ .
- ❖  $\chi_i^{(\nu)}$  : Le caractère d'un élément de symétrie appartenant à la classe  $K_i$  dans la représentation  $\Gamma_\nu$
- ❖  $\delta_{\mu\nu}$  : Le symbole de kronecker.

## I-4- 2 Théorème

L'énumération des représentations irréductibles. Contenant dans une représentation réductible est :

$$a_{(u)} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^k g_i \cdot \chi_i^{*(\mu)} \cdot \chi_i^{(\Gamma)} \quad (\text{I-31})$$

- ✚  $a_{(u)}$ : Le nombre de fois où  $\Gamma_\mu$  apparaît dans la représentation réductible  $\Gamma$ .
- ✚  $g$  : Ordre du groupe.
- ✚  $g_i$  : nombre d'éléments (l'ordre) de la 2ième classe d'opérations.
- ✚  $\chi_i^{*(\Gamma)}$ : Caractère de la) matrice du ou des opérateur(s) de cette classe  $k$  dans la  $RR$ .

Et la représentation  $\Gamma_n$  peut-être écrite comme somme directe des représentations irréductibles  $\Gamma^{(\mu)}$ :

$$\Gamma_n = a_1 \cdot \Gamma^1 \oplus \dots \oplus a_{(u)} \cdot \Gamma^{(\mu)} \oplus \dots \quad (\text{I-32})$$

Notons et sans entrer dans les détails du calcul que pour trouver la base qui sert à décomposer une représentation réductible comme suit :

$$p^{(\mu)} \cdot f_g^{(\nu)} = \frac{g}{n_\mu} \cdot \delta_{\mu\nu} \cdot \delta_{ig} \cdot f_i^{(\mu)} \quad (\text{I-33})$$

Tel que :

$$p^{(\mu)} = \sum_{i=1}^n \chi^{*(\mu)}(g) \cdot g \quad (\text{I-34})$$

Avec :

- ❖  $p^{(\mu)}$  : L'opérateur de projection dans la base de la représentation irréductible  $\Gamma_\mu$ .
- ❖  $f_g^{(\nu)}$  : Vecteurs de base de la représentation irréductible  $\Gamma_\nu$ .
- ❖  $\chi^{*(\mu)}$  : Le complexe conjugué de  $\chi^{(\mu)}$ .
- ❖  $\delta_{\mu\nu}$  et  $\delta_{ig}$  : Symboles de Kronecker.
- ❖  $f_i^{(\mu)}$  : Vecteurs de base de la représentation irréductible  $\Gamma_\mu$ .
- ❖  $n_\mu$  : La dimension de la représentation irréductible  $\Gamma_\mu$ .

Comme nous le savons, les caractères, en occurrences l'espace physique, de toutes les symétries dans l'espace à 3 dimensions peuvent être regroupés dans le tableau suivant :

**Tableau I-4** : Caractères des opérations de symétrie

	Symétries propres		Symétries impropres		
<b>Symétrie (R)</b>	<b>E</b>	<b>C (α)</b>	<b>σ</b>	<b>S (α)</b>	<b>i</b>
<b>Caractères χR</b>	<b>3</b>	<b>1 + 2 cos(α)</b>	<b>1</b>	<b>-1 + 2 cos(α)</b>	<b>-3</b>

Tel que :

$$\begin{cases} E = C(2\pi) = 1 + 2\cos(2\pi) = \mathbf{3} \\ \sigma = S(2\pi) = -1 + 2\cos(2\pi) = \mathbf{1} \\ i = S(\pi) = -1 + 2\cos(\pi) = \mathbf{-3} \end{cases} \quad (\text{I-35})$$

**Remarque** : Les autres Valeurs des caractères ( $\chi R$ ) des opérations de symétrie des molécules  $XY_6$  se trouve dans le tableau suivant (I-6).

Pour chaque symétrie  $R$  de  $Oh$ , on calcule le caractère  $\chi_{vib}$  de la représentation  $\Gamma_{vib}$  par la formule:

$$\begin{cases} \chi_{vib} = (n_R - 2)\chi_R \leftrightarrow \text{pour les rotations propres} \\ \chi_{vib} = n_R\chi_R \leftrightarrow \text{pour les rotations impropres} \end{cases} \quad (\text{I-36})$$

$n_R$ : le nombre des noyaux que R laisse dans leurs positions initiales ou les noyaux qui ne se déplacent pas par l'application de R.

On obtient :

**Tableau I-5:** Caractères vibrationnels des opérations de symétrie des molécules  $XY_6$

	Symétries propres					Symétries impropres				
Symétrie (R)	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C''_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$n_R$	7	1	1	3	3	1	1	1	5	3
$\chi_R$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$\chi_{vib}$	15	0	1	1	-1	-3	-1	0	5	5

Pour la recherche des modes de vibrations et les modes de fréquences fondamentales des molécules octaédriques, on utilise les valeurs obtenues de  $\chi_{vib}$  et la table de caractère de groupe  $O_h$ .

**Tableau I-6:** Table de caractères et valeurs de caractères vibrationnels des molécules  $XY_6$

	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C''_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
$A_{2u}$	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
$E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$E_u$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$F_{1g}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$F_{1u}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$F_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$F_{2u}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
$\chi_{vib}$	15	0	1	1	-1	-3	-1	0	5	5

A partir de la formule suivante :

$$a(\mu) = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^k g_i \cdot \chi_i^{*(vib)} \cdot \chi_i^{(\Gamma)} \quad (\text{I-37})$$

on obtient, ainsi :

$$a(A_{1g}) = 1/48 [ (1)(1)(15) + (1)(8)(0) + (1)(6)(1) + (1)(6)(1) + (1)(3)(-1) + (1)(1)(-3) + (1)(6)(-1) + (1)(8)(0) + (1)(3)(5) + (1)(6)(3) ] = 1.$$

$$a(A_{1u}) = 0$$

$$a(A_{2g}) = 0$$

$$a(A_{2u}) = 0$$

$$a(E_g) = 1$$

$$a(E_u) = 0$$

$$a(F_{1g}) = 0$$

$$a(F_{1u}) = 2$$

$$a(F_{2g}) = 1$$

$$a(F_{2u}) = 1$$

Donc :

$$\Gamma_{vib} = a(A_{1g}) + a(E_g) + 2a(F_{1u}) + a(F_{2g}) + a(F_{2u}) \quad (\text{I-38})$$

On peut dire que, les molécules octaédriques possèdent six (06) modes fondamentaux de vibration :

**Tableau I-7:** Symétries des modes de vibrations des molécules octaédriques.

<b>Mode</b>	$\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4 \nu_5 \nu_6$
<b>symétrie</b>	$A_{1g} E_g F_{1u} F_{1u} F_{2g} F_{2u}$

D'après ce résultat on démontre les six modes de fréquences fondamentales pour les molécules octaédriques come suite [14] :

$\nu_1$  : Non dégénérée de symétrie  $A_{1g}$ , et dont la coordonnée normale est  $Q_{11}$  .

$\nu_2$  : Doublement dégénérée de symétrie  $E_g$  et dont les coordonnées normales sont  $Q_{21}$  et  $Q_{22}$

$\nu_3$  : Triplement dégénérée de symétrie  $F_{1u}$ , et dont les coordonnées normales sont  $Q_{31}$  et  $Q_{32}$  et  $Q_{33}$

$\nu_4$  : Triplement dégénérée de symétrie  $F_{1u}$ , et dont les coordonnées normales Sont  $Q_{41}$  et  $Q_{42}$  et  $Q_{43}$  .

$\nu_5$  :Triplement dégénérée de symétrie  $F_{2g}$ , et dont les coordonnées normales Sont  $Q_{51}$  et  $Q_{52}$  et  $Q_{53}$

$\nu_6$ : Triplement dégénérée de symétrie  $F_{2u}$ , et dont les coordonnées normales Sont  $Q_{61}$  et  $Q_{62}$  et  $Q_{63}$

## I- 5 Niveaux d'énergies

Soit un molécule  $XY_6$  , Ces énergies sont quantifiées, c'est-à-dire qu'elles ne peuvent prendre que des valeurs discrètes, et la lumière émise par l'équipement ne sera absorbée par l'échantillon que si elle permet à la molécule constituant cet échantillon de passer de son état énergétique initial  $E_1$  à un état énergétique supérieur  $E_2$ , l'énergie apportée par le quantum de lumière  $h\nu$  étant exactement égale à la différence d'énergie ( $E_2 - E_1$ ) entre les deux états. Il y aura alors, à cette fréquence  $\nu$ , affaiblissement du rayonnement continu émis par l'appareil, et donc apparition d'une bande d'absorption [15]

$$h\nu_{01} = E_2 - E_1 \quad (\text{I -39})$$

Les niveaux d'énergies  $E$  (de rotation-vibration) d'une molécule sont solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H_{RV}\Psi = E_{RV}\Psi \quad (\text{I -40})$$

Tel que  $H_{RV}$  ,  $E_{RV}$  respectivement sont L'Hamiltonien et l'énergie du système :

$$\begin{cases} H_{RV} = H_R + H_V \\ E_{RV} = E_R + E_V \end{cases} \quad (\text{I -41})$$

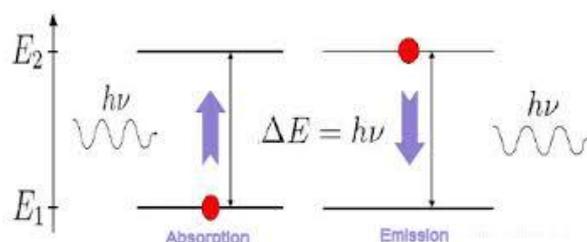


Fig I – 13 : lustration schématique d'une absorption ou émission.

### I- 5-1 Rotation moléculaire

Premièrement, on considère que la molécule est formée d'atomes liés par tiges rigides indéformables. C'est un rotateur rigide dont les solutions de l'équation de Schrödinger sont les valeurs propre de l'énergie [10]:

$$H_R \Psi_R = E_R \Psi_R \quad (\text{I -42})$$

Tel que :

$\Psi_R$  : Les fonctions d'onde propres à la rotation.

$H_R$  : Hamiltonien rotationnel

$E_R$  : Sont les niveaux d'énergie rotationnels relatifs à un niveau d'énergie vibrationnel Donné tel que :

$$E_R = \frac{\hbar^2}{2I} J (J + 1) \quad (\text{I -43})$$

On peut alors tenir compte d'effets de distorsions qui pourraient être introduits par le fait que les liens entre atomes ne sont en fait pas rigides. A mesure que la vitesse de rotation augmente (J croît) les atomes s'éloignent les uns les autre (le ressort s'étire) et B diminue (puisque I augmente) la pulsation W.

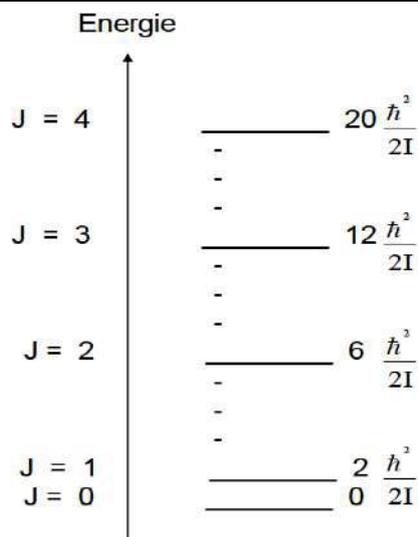
La distribution des niveaux d'énergie s'écrit alors :

$$F(J) = B J (J + 1) - D J^2 (J^2 + 1) \quad (\text{I -44})$$

J : le nombre quantique rotationnel J est un entier : (J = 0; 1; 2 ; ... ..)

D :est la constante de distribution centrifuge dont la valeur est égal à :

$$D = \frac{4 B^3}{W^3} \quad (\text{I -45})$$



**Fig I – 14 :** Diagramme des niveaux d'énergie de la molécule en rotation.

Règles de sélection rotationnelles :

- ❖  $\Delta J = -1 ; 0 ; +1$  ; qui correspond aux branches P, Q et R respectivement, pour les spectres infrarouges.
- ❖  $\Delta J = -2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2$  ; qui correspond aux branches O, P, Q, R, S respectivement pour les spectres Raman.

### I- 5- 2 Vibration moléculaire

La somme de l'énergie cinétique T et de l'énergie potentielle V est l'énergie vibrationnelle.

La molécule que vibre sans tourner s'apparent à un oscillateur harmonique, l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$H_V \Psi_V = E_V \Psi_V \quad \text{(I -46)}$$

L'Hamiltonien moléculaire n'est que :

$$H_V = T + V \quad \text{(I -47)}$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger sont alors bien connues [16] :

$$E_V = \hbar\omega \left( v + \frac{1}{2} \right) \quad \text{(I -48)}$$

$\nu$  est le nombre quantique de vibration qui prend les valeurs entières 0, 1, 2 ... Où  $\omega$  est la pulsation de l'oscillateur harmonique [ $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$  ou  $k$  est la constantes de rappel du ressort, ici la "force" du lien interatomique, et  $\mu$  la masse réduite de la molécule]

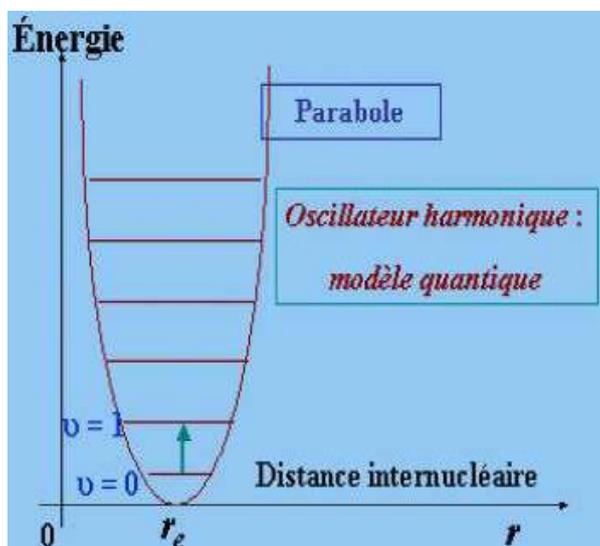


Fig I – 15 : Niveaux d'énergie d'une molécule

Les règles de sélection vibrationnelles pour les molécules octaédriques sont :

$$A_{1g} \Leftrightarrow A_{1u}$$

$$A_{2g} \Leftrightarrow A_{2u}$$

$$E_g \Leftrightarrow E_u$$

$$F_{1g} \Leftrightarrow F_{1u}$$

$$F_{2g} \Leftrightarrow F_{2u}$$

Sur la base de tout ce qu'on a vu comme définitions, les transitions rovibrationnelles, dans un spectre infrarouge, peuvent être schématisées par :

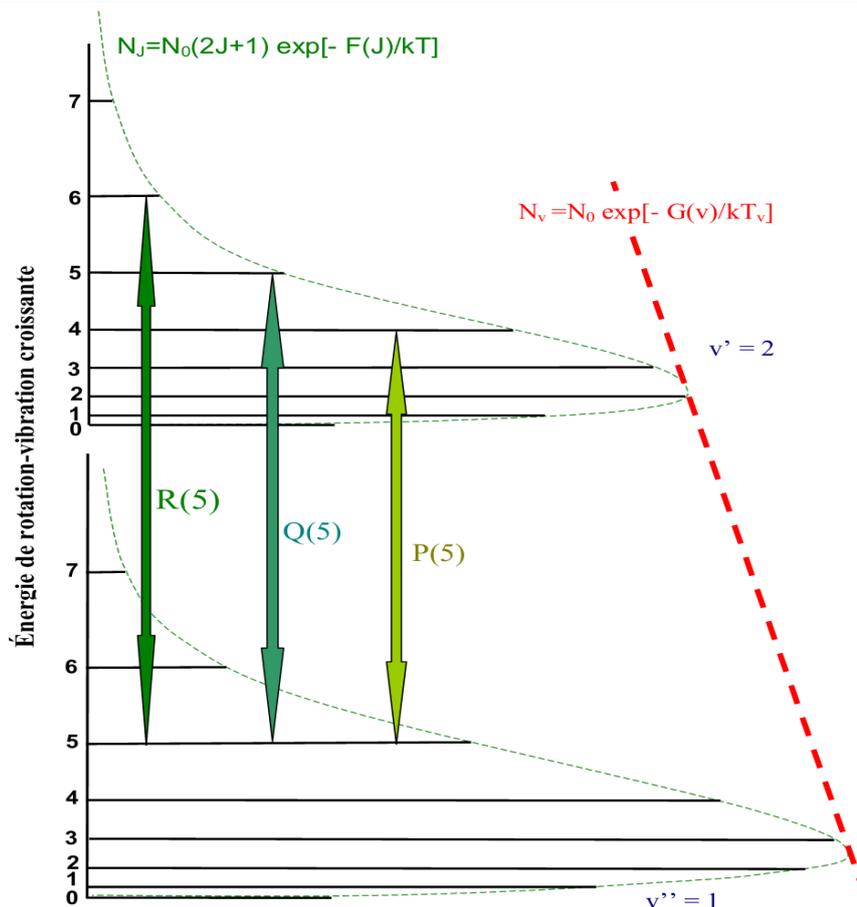


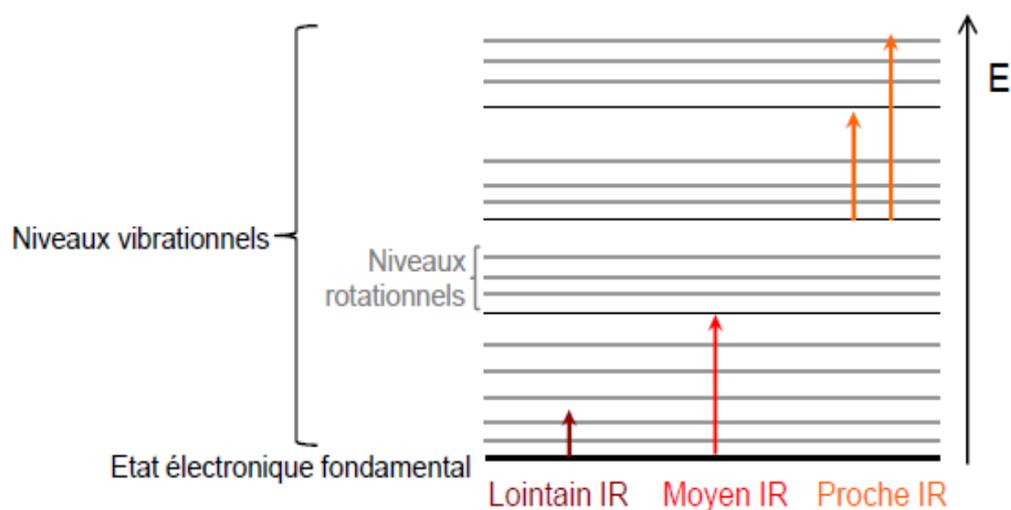
Fig I – 16 : Niveaux de vibration-rotation d'une molécule.

## I- 6- Activité des fréquences fondamentales

### I- 6- 1 Spectre infrarouge

C'est une spectroscopie d'absorption dont le principe repose sur l'absorption du rayonnement IR par la matière qui se situe entre 2  $\mu\text{m}$  et 50  $\mu\text{m}$  en longueur d'onde. Lorsqu'une radiation traverse une molécule, on constate que pour certaines longueurs d'ondes une absorption de la lumière correspondant aux fréquences de vibration caractéristiques des différentes liaisons chimiques [16].

Le principe de cette technique consiste en considérant un dipôle (les extrémités de la liaison) soumis à l'influence d'un champ électrique oscillant (onde électromagnétique). Ce champ imposé va provoquer alternativement l'éloignement puis le rapprochement des extrémités de ce dipôle (c'est-à-dire une vibration) [17].



**Fig I – 17 : Diagramme** d'énergie d'une molécule avec les différentes transitions possibles dans le domaine de l'infrarouge

### I-6- 2 Spectre Raman

Lorsqu'une molécule est irradiée par une lumière monochromatique, la majeure partie de cette lumière est absorbée, réfléchiée ou traverse la molécule. Une petite fraction, environ 0,1% de cette lumière, est élastiquement dispersée à la même fréquence que la lumière incidente, c'est la "diffusion Rayleigh" où l'énergie de la molécule reste pratiquement constante [18].

**Tableau I-8 :** Table de caractères et activité des modes de vibrations des molécules  $XY_6$ .

	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C''_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$		
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
$A_{2g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1		
$A_{2u}$	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1		
$E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0		$2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2$
$E_u$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0		
$F_{1g}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1	$R_x, R_y, R_z$	
$F_{1u}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1	$(x, y, z)$	

### Chapitre I : spectroscopie moléculaire et théorie des représentations

$F_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1		(XZ,YZ,XY)
$F_{2u}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1		

Où la table de caractères nous permet de dire que les vibrations associées à  $2F_{1u}$  seront observées en infrarouge seulement (colonne 3), celles associées à  $A_{1g}$ ,  $E_g$  et  $F_{2g}$  seront observées en Raman seulement (colonne 4), et celle associées à  $F_{2u}$  ne seront pas observées du tout.

**Tableau I-9 :** Caractéristiques des bandes d'absorption des Molécules octaédriques

$\nu_1$	$\nu_2$	$\nu_3$	$\nu_4$	$\nu_5$	$\nu_6$
$A_{1g}$	$E_g$	$F_{1u}$	$F_{1u}$	$F_{2g}$	$F_{2u}$
Raman	Raman	IR	IR	Raman	Raman
Élongation			Pliage		

***Chapitre II :***

***Formalisme tensoriel***

***Octaédrique***

## II-1- Introduction

Ce formalisme est basé sur une méthode générale de construction de tous les opérateurs de vibration et rotation avec leurs le opérateur rovibrationnelle.

Notons que pour tous les modes de vibrations et pour tous les états vibrationnels de la molécule, que la forme des opérateurs et des fonctions de base est la même.

Sur le plan théorique, nous présentons une méthode tensorielle, valable pour tous les modes de vibration, et des méthodes d'extrapolation vibrationnelles développées à Dijon. Au même temps nous avons aussi entrepris une étude sur le moment dipolaire des molécules tétraédriques  $\text{XY}_6$ . Elle comprend dans un premier temps l'écriture d'un développement formel du moment dipolaire, puis éléments matriciels.

À la fin de ce chapitre, nous donnons, les règles de sélection rovibrationnelles des molécules octaédriques  $\text{XY}_6$  parce que les résultats de la théorie des groupes qu'on a présentés au premier chapitre, montre que les transitions rovibrationnelles entre les niveaux d'énergie, ne sont pas toutes permises.

## II-2- Approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation la plus couramment utilisée est celle de *Born et Oppenheimer* [19], elle permet de séparer le mouvement des électrons de celui des noyaux en se basant sur le fait que les électrons sont beaucoup plus légers et qu'ils bougent donc beaucoup plus rapidement que les noyaux, en d'autres termes, ils s'adaptent presque instantanément aux positions des noyau . Leur comportement n'est donc pratiquement pas modifié par les faibles déplacements des noyaux que l'on peut considérer comme figés dans leurs positions instantanées. On considère donc que les électrons se déplacent dans un champ de noyaux figés [20].

## II-3- Transformations de contact

La méthode de la transformation de contact (Van Velck) est la méthode la plus utilisée pour simplifier le calcul de les intensités des transitions rovibrationnelles ou l'énergie de vibration-rotation.

Si  $A$  représente soit l'Hamiltonien (H), le moment dipolaire (m), l'opérateur transformée  $A$  est donné par [21-23] :

$$\tilde{A} = TAT^{-1} \quad (\text{II-1})$$

$T$  Est pris sous la forme :

$$T = e^{i\lambda s} \quad (\text{II-2})$$

- ❖  $S$  est hermétique (appelé générateur de transformations de contact).
- ❖  $\lambda$  est un paramètre égal à l'unité, indiquant simplement l'ordre de grandeur de chaque terme de développement.

On peut écrire :

$$T = 1 + i\lambda s - \frac{1}{2}\lambda^2 s^2 \quad (\text{II-3})$$

## II-4- Expression de l'Hamiltonien

L'Hamiltonien d'une molécule isolé constituée de  $N$  noyaux et  $n$  électrons s'écrit :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en} \quad (\text{II-4})$$

Tel que :

$T_e$  : L'énergie cinétique des électrons.

$T_n$  : L'énergie cinétique des noyaux.

$V_{ee}$  : L'énergie coulombienne d'interaction électron-électron.

$V_{nn}$  : L'énergie coulombienne d'interaction noyaux-noyaux.

$V_{en}$  : L'énergie coulombienne d'interaction électron-noyaux.

L'Hamiltonien relatif au mouvement des noyaux se limite aux termes suivants:

$$H_n = T_n + V_n \quad (\text{II-5})$$

Nous pouvons développer l'Hamiltonien de rotation- vibration en une forme convergente en fonction des coordonnées normales, des moments conjugués et des composantes du moment angulaire total.

Ce Hamiltonien de vibration – rotation possède les propriétés suivantes :

- Hermétique.
- Totalement symétrique dans le groupe de recouvrement de la molécule.
- invariant dans un renversement du temps.

L'Hamiltonien initial est développé sous la forme :

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots \quad (\text{II-6})$$

L'Hamiltonien transformé  ${}^{(2)}H$  est obtenu en faisant une première transformation de contact

$${}^{(1)}H = T_1 H T_1^{-1} = {}^{(1)}H_0 + \lambda {}^{(1)}H_1 + \lambda_2 {}^{(1)}H_2 + \dots \quad (\text{II-7})$$

Avec :

$${}^{(1)}H_0 = H_0 \quad (\text{II-8})$$

$${}^{(1)}H_1 = H_1 + i[S_1, H_0] \quad (\text{II-9})$$

$${}^{(1)}H_2 = H_2 + i[S_1, H_1] - \frac{1}{2}[S_1, [S_1, H_0]] \quad (\text{II-10})$$

$S_1$  est choisi de manière à ce que  ${}^{(1)}H_1$  soit complètement diagonale dans le cas d'une étude d'une bande vibrationnelle isolée ou de manière de conserver que les termes non diagonaux internes à la polyade dans le cas de l'étude simultanée de bandes vibrationnelles en interaction.

Puis et après la deuxième transformation  $T_2$  on obtient :

$${}^{(2)}H = T_2 {}^{(1)}H T_2^{-1} = {}^{(2)}H_0 + \lambda {}^{(2)}H_1 + \lambda_2 {}^{(2)}H_2 + \dots \quad (\text{II-11})$$

Avec :

$${}^{(2)}H_0 = H_0 \quad (\text{II-12})$$

$$\{2\}H_1 = \{1\}H_1 \quad (\text{II-13})$$

$$\{2\}H_2 = \{1\}H_2 + i[S_2, H_0] \quad (\text{II-14})$$

Les fonctions propres  $\widetilde{\Psi}_i$  de  $\widetilde{H}$  se déduisent des fonctions propres  $\Psi_i$  de  $H$  par :

$$\widetilde{\Psi}_i = T \Psi_i \quad (\text{II-15})$$

L'expression de l'Hamiltonien, développé, en utilisant le formalisme tensoriel dans le groupe  $Oh$  qui possède un indice supplémentaire pour caractériser ses représentations irréductibles, la parité (g) ou (u) précédents, en peut construire l'hamiltonien rovibrationnel complet sous la forme :

$$H = \sum_{\text{tous les indices}} \mathbf{t}_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) a_1 \Gamma_{1\chi} a_2 \Gamma_{2\chi}} \otimes \mathbf{T}_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) a_1 \Gamma_{1\chi} a_2 \Gamma_{2\chi}} \quad (\text{II-16})$$

Dans cette équation,  $\mathbf{t}_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) a_1 \Gamma_{1\chi} a_2 \Gamma_{2\chi}}$  sont les paramètres de l'Hamiltonien, et  $\chi = u$  ou  $g$  est la parité.

### II-4-1 Opérateurs vibrationnels

Les opérateurs vibrationnels sont construits en utilisant un schéma de couplage des opérateurs d'annihilation  $a_{s\sigma}$  et de création  $a_{s\sigma}^+$  élémentaire associée à chaque mode normale de vibration de la molécule.

$$a_{s\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_{s\sigma} - ip_{s\sigma}) \quad (\text{II-17})$$

$$a_{s\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_{s\sigma} + ip_{s\sigma}) \quad (\text{II-18})$$

Avec :

- (s) est le mode de vibration associé.
- $\sigma$ : désigne les composantes des représentations associées.

Les deux tenseurs ainsi obtenus sont couplés pour former l'opérateur vibrationnel final donné par :

$$\varepsilon \mathbf{V}_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) a_1 \Gamma_{1\chi} a_2 \Gamma_{2\chi}} \quad (\text{II-19})$$

Tel que :

- ❖  $a_1$ : Distingue les tenseurs de même symétrie et précise les couplages intermédiaires.
- ❖  $\varepsilon = -1$  si cet opérateur est un polynôme impair
- ❖  $\varepsilon = +1$  si cet opérateur est un polynôme pair

## II-4-2 Opérateurs rotationnels

Moret-Bailly a introduit une méthode de construction des opérateurs rotationnels sous forme tensoriels dans le groupe des rotations  $\mathbf{O}(3)$  [24], où les  $p\alpha$  désignent les composantes du moment angulaire de la molécule, et l'expression récursive de Zhinlinski [25] :

$$\left\{ \begin{array}{l} R^{1(1)} = 2J^{(1)} \\ R^{\Omega(k)} = R^{\Omega-k(0)} \cdot R^{k(k)} \\ R^{\Omega-k(0)} = ((R^{1(1)} \otimes R^{1(1)})^{(0)})^{\left(\frac{\Omega-k}{2}\right)} \\ R^{k(k)} = (R^{(k-1)(k-1)} \otimes R^{1(1)})^{(k)} \end{array} \right. \quad (\text{II-20})$$

Ces opérateurs sont symétriques dans le groupe  $Oh$ , grâce à la matrice d'orientation  $G$  : [27]

$$R_{\mathcal{O}\gamma}^{\Omega(k, n\Gamma)} = \sum_m(k) G_{n\Gamma\gamma} R_m^{\Omega(k)} \quad (\text{II-21})$$

## II-4-3 Opérateurs rovibrationnels

Les opérateurs rovibrationnels sont obtenus par couplage des deux opérateurs rotationnel  $R^{\Omega(k_g, n\Gamma_g)}$  (de degré  $\Omega$ ) et l'opérateur vibrationnel  $V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)a_1\Gamma_{1\chi}a_2\Gamma_{2\chi}}$  (de degré  $\sum_s(n_s + m_s)$ ) [26], s'écrivant d'une manière générale par:

$$T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)a_1\Gamma_{1\chi}a_2\Gamma_{2\chi}} = \beta (R^{\Omega(k_g, n\Gamma_g)} \otimes \varepsilon_V^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)a_1\Gamma_{1\chi}a_2\Gamma_{2\chi}}) \quad (\text{II-22})$$

Où  $\beta$  est un facteur numérique :

$$\beta = \begin{cases} \sqrt{[\Gamma_v] \left(\frac{-\sqrt{3}}{4}\right)^{\frac{\Omega}{2}}} & \text{si } (k, n\Gamma) = (0, 0A_{1g}) \\ 1 & \text{si non} \end{cases} \quad (\text{II-23})$$

### II-4-4 Les éléments matriciels

Les éléments matriciels de l'Hamiltonien des molécules octaédriques sont donnés par l'expression [27]:

$$\langle [\Psi^{(J_g, \dot{n}C_{rg})} \otimes \Psi_v^{(C_{v\tau})}] \sigma^{(C_\tau)} \mid [R^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)} \otimes \varepsilon_{V_{\{n_s\}\{m_s\}}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) a_1 \Gamma_{1\chi} a_2 \Gamma_{2\chi}}]^{(A_{1u})} \mid [\Psi^{(J_g, nC_{rg})} \otimes \Psi_v^{(C_{v\tau})}] \rangle = \delta_{Jg} (-1)^{\Gamma+C+C_r} \frac{(-1)^J}{\sqrt{[\Gamma]}} K_{(J_g K_g J_g) (\dot{n}C_{rg} \dot{n}_r \Gamma_g n_r C_g)} \begin{cases} \dot{C}_{rg} \dot{C}_{v\tau} C_\tau \\ C_{v\tau} C_{rg} \Gamma_g \end{cases} \quad (\text{II-24})$$

$$\langle J_g \mid \mid R^{\Omega(K_g)} \mid \mid J_g \rangle \langle \Psi_v^{(C_{v\tau})} \mid \mid \varepsilon_{V_{\{n_s\}\{m_s\}}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) a_1 \Gamma_{1\chi} a_2 \Gamma_{2\chi}} \mid \mid \Psi_v^{(C_{v\tau})} \rangle$$

- ✚ Les k sont les facteurs isoscalaires de la chaîne  $O(3) \supset O_h$
- ✚ Les termes entre accolades sont les coefficients 6C du groupe  $O_h (J=2j+1)$ .
- ✚ C : Est la dimension de la représentation irréductible C.

Pour connaître les éléments matriciels de l'Hamiltonien, il suffit de calculer ceux des opérateurs rovibrationnels, dont l'Hamiltonien effectif est une combinaison linéaire et dire éléments matriciels sont calculés dans la base couplée :

$$\mid \Psi_{M\sigma}^{(C_\tau)} \rangle = \mid [\Psi_M^{(J_g, nC_{rg})} \otimes \Psi_\sigma^{(C_{\sigma\tau})}]_\sigma^{(C_\sigma)} \rangle \quad (\text{II-25})$$

Avec :

- ❖  $\Psi_M^{(J_g, nC_{rg})}$  est la fonction rotationnelle de symétrie  $C_{rg}$ .
- ❖ n : indice de multiplication.
- ❖  $\Psi_\sigma^{(C_{\sigma\tau})}$  est la fonction d'onde vibrationnelle de symétrie  $C_{\sigma\tau}$
- ❖ J : Nombre quantique rotationnel.
- ❖ M : La composante sphérique dans le repère (LFF).
- ❖  $C_\tau$ : La symétrie rovibrationnelle de composante  $\sigma$ .
- ❖  $\tau = g$  ou  $u$  : La parité.

Les fonctions propres de l'Hamiltonien sont notées  $\mid \Psi_{M\sigma}^{(J C_{\tau\alpha})} \rangle$ ;  $\alpha$  numérote les niveaux d'énergie dans l'ordre croissant dans le bloc (J,  $C_\tau$ )

## II-5- Expression de moment dipolaire

Le moment dipolaire transformé est donné par [28] :

$$\hat{\mu} = T \mu T^{-1} \quad (\text{II-26})$$

De même que pour l'Hamiltonien transformé, nous appliquons les transformations de Contact à l'expression de moment dipolaire transformé est :

$${}^{(2)}\mu_{\alpha} = {}^{(2)}\mu_{0\alpha} + \lambda^2 {}^{(2)}\mu_{1\alpha} + \lambda^2 {}^{(2)}\mu_{2\alpha} \quad (\text{II-27})$$

Avec :

$${}^{(2)}\mu_{0\alpha} = \mu_{0\alpha} \quad (\text{II-28})$$

$${}^{(2)}\mu_{1\alpha} = \mu_{1\alpha} + i[S_1, \mu_{0\alpha}] \quad (\text{II-29})$$

$${}^{(2)}\mu_{2\alpha} = \mu_{2\alpha} + i[S_1, \mu_{1\alpha}] + \frac{i^2}{2}[S_1, [S_1, \mu_{0\alpha}]] + i[S_2, \mu_{0\alpha}] \quad (\text{II-30})$$

Les composantes de moment dipolaire dans le cadre fixe en laboratoire frame (LFF)  $\mu_{\Theta}$  (avec :  $\Theta = X; Y$  ou  $Z$ ) peuvent être liées aux composant  $\mu_{\theta}$  (avec  $\theta = x ; y$  ou  $z$ ) dans le cadre à molécule fixe (M F F) à travers

$$\mu_{\Theta} = \sum_{\theta} \lambda_{\Theta, \theta} \cdot \mu_{\theta} \quad (\text{II-31})$$

Où  $\lambda_{\Theta, \theta}$  sont les cosinus directeurs.

Dans l'approximation de mouvement de faibles amplitudes, on peut développer chaque composant  $\mu_{\theta}$  en série des coordonnées normales sans dimensions  $q_{s\sigma}$ , (  $s$  présente l'indice de l'oscillateur et  $\sigma$  sa composante) :

$$\mu_{\theta} = \mu_{\theta}^e + \sum_{s,\sigma} \left( \frac{\partial \mu_{\theta}}{\partial q_{s,\sigma}} \right) \cdot q_{s,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{s\sigma, s'\sigma'} \left( \frac{\partial^2 \mu_{\theta}}{\partial q_{s,\sigma} \partial q_{s',\sigma'}} \right) q_{s,\sigma} q_{s',\sigma'} + \dots \quad (\text{II-32})$$

Avec :

$\mu_{\theta}^e$  est le moment dipolaire permanent de la molécule, les autres termes sont introduits par les interactions moléculaire.

Après les utilisations les transformations de contact, le moment dipolaire peut être écrit sous la forme [29] :

$$\widetilde{\mu}_{\Theta} = \frac{1}{2} \sum_{\theta} (\lambda_{\Theta, \theta} \cdot \widetilde{\mu}_{\theta} + \widetilde{\mu}_{\theta} \cdot \lambda_{\Theta, \theta}) \quad (\text{II-33})$$

Pour établir l'expression de  $\widetilde{\mu}_{\Theta}$  et  $\widetilde{\mu}_{\theta}$ , il est nécessaire d'introduire les coordonnées sphériques des opérateurs de moment dipolaire.

Les coordonnées sphériques dans le repère (LFF) du moment dipolaire noté  $\mu_m^{(1)}$  sont liées aux ceux dans le repère (MFF) du moment dipolaire noté  $\mu_k^{(1)}$  par la relation [30]:

$$\mu_m^{(1)} = \sum_k D_{km}^{(1)} \cdot \mu_k^{(1)} \quad (\text{II-34})$$

Où :  $D_{km}^{(1)}$  sont les fonctions harmoniques de Wigner, et  $k, m = -1, 0$  ou  $1$ .

$$\mu_{\Theta} = \sum_m \langle 1, m \setminus \Theta \rangle \mu_m^{(1)} \quad (\text{II-35})$$

$$\mu_{\theta} = \sum_k \langle 1, k \setminus \theta \rangle \mu_k^{(1)} \quad (\text{II-36})$$

Où  $\langle 1, m \setminus \Theta \rangle$  et  $\langle 1, k \setminus \theta \rangle$  sont les coefficients de Stone [31].

## II-6- Les règles de sélection

$|\Psi_{M, \sigma}^{(C_{\tau})}\rangle$  et  $|\Psi_{M, \sigma'}^{(C_{\tau'})}\rangle$  deux fonctions rovibrationnelles, Les règles de sélection proviennent directement des expressions des éléments matriciels et des différents symboles de couplage [32, 33]. Ces règles de sélection sont regroupées dans le tableau ci-dessous :

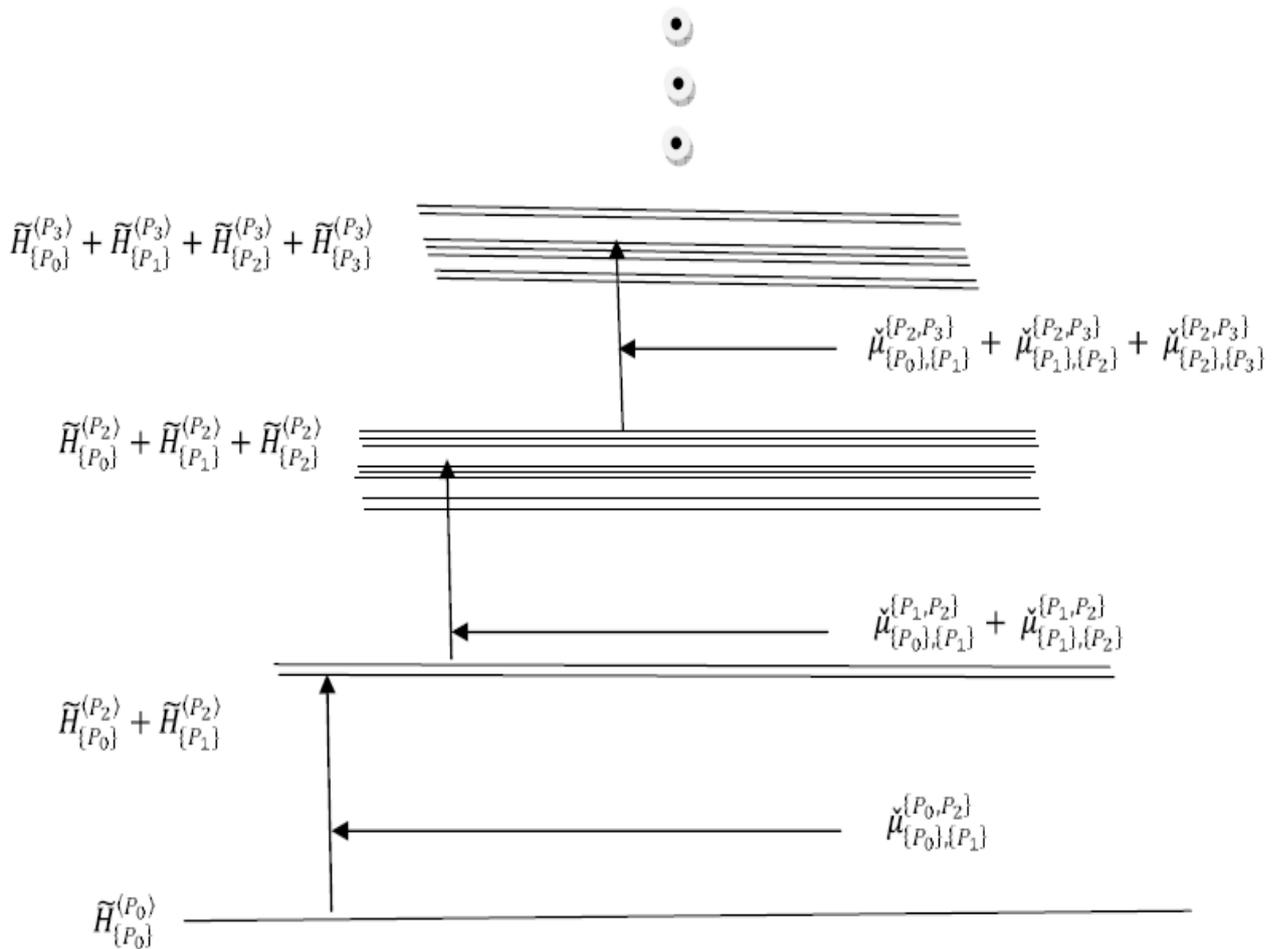
**Tableau II-1** : Les symétries des opérateurs (Hamiltonien, moment dipolaire et polarisabilité) dans les repères (MFF) et (LFF) des molécules octaédriques.

Opérateur	MFF	LFF
H	$A_{1g}$	$A_{1g}$
$\mu$	$F_{1u}$	$A_{1u}$
$\alpha$	$A_{1g} \oplus A_{1g} \oplus F_{2g}$	$A_{1g}$

Dans le cas de l'absorption ou l'émission, les transition se produisent seulement entre états de parité opposées ( $g \leftrightarrow u$ ).

Concernant le nombre quantique  $\mathbf{J}$ , les règles de sélection proviennent du non nullité des facteurs isoscalaires  $K$  qui interviennent dans l'expression des éléments matriciels.

La règle  $\hat{C} = C$  provient du fait que les trois opérateurs sont de symétrie  $A_{1g}$  dans le repère (LFF), tandis que, la règle de sélection de la parité dépend de la parité de l'opérateur à étudier.



**Fig II- 1:** Illustration schématique de l'extrapolation vibrationnelle de l'Hamiltonien et de moment dipolaire dans le cas de polyades et de bandes chaudes

*Chapitre III :*  
*Prédiction du spectre*  
*infrarouge des deux*  
*bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$*   
*de la molécule*  
 $^{238}\text{UF}_6$

### III-1 : INTRODUCTION

Nous abordons maintenant, dans ce travail, un aperçu sur le logiciel XTDS et SPVIEW qu'on a utilisé pour calculer et prédire le spectre des transitions rovibrationnelles des deux bandes isolées ( $\nu_3$  et  $3\nu_3$ ) de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ . Pour ce faire, on a besoin d'un jeu de paramètres entrant dans le développement de l'Hamiltonien à certain ordre.

Le groupe de Dijon a commencé depuis longtemps à développer ses propres programmes spécifiques dédiés à la simulation et l'analyse des spectres à toupie sphérique [34, 35], car ces spectres hautement symétriques des molécules nécessitent l'utilisation des outils mathématiques spéciales [36].

En générale, dans le domaine de la spectroscopie moléculaire, on utilise dans la plupart des cas la méthode des moindres carrés pondérées pour déterminer les paramètres de l'Hamiltonien.

### III-2- Description de Programmes utilisés

XTDS permet de calculer et de simuler les spectres des molécules appartenant aux cinq groupes ponctuels, et que chaque groupe possède son propre programme, comme suivant :

- ❖ HTDS: Pour les molécules  $\text{XY}_6$  (groupe Oh)[37] .
- ❖ STDS : Pour les molécules  $\text{XY}_4$  (groupe Td)[38] .
- ❖ D2h TDS: Pour les molécules  $\text{X}_2\text{Y}_4$  (groupe D2h)[39] .
- ❖ C4v TDS: Pour les molécules  $\text{XY}_5\text{Z}$  (groupe C4v)[40] .
- ❖ C2v TDS : Pour les molécules  $\text{XY}_2\text{Z}_2$  (groupe C2v) [41] .

XTDS permet la simulation et l'analyse de systèmes polyad pour des molécules de différentes symétries (Td et Oh sphérique sommets comme  $\text{CH}_4$  et  $\text{SF}_6$ , C2v et C4v quasi-sphériques comme  $\text{SO}_2\text{F}_2$  et  $\text{SF}_5\text{Cl}$ , molécules D2h comme  $\text{C}_2\text{H}_4$ ).

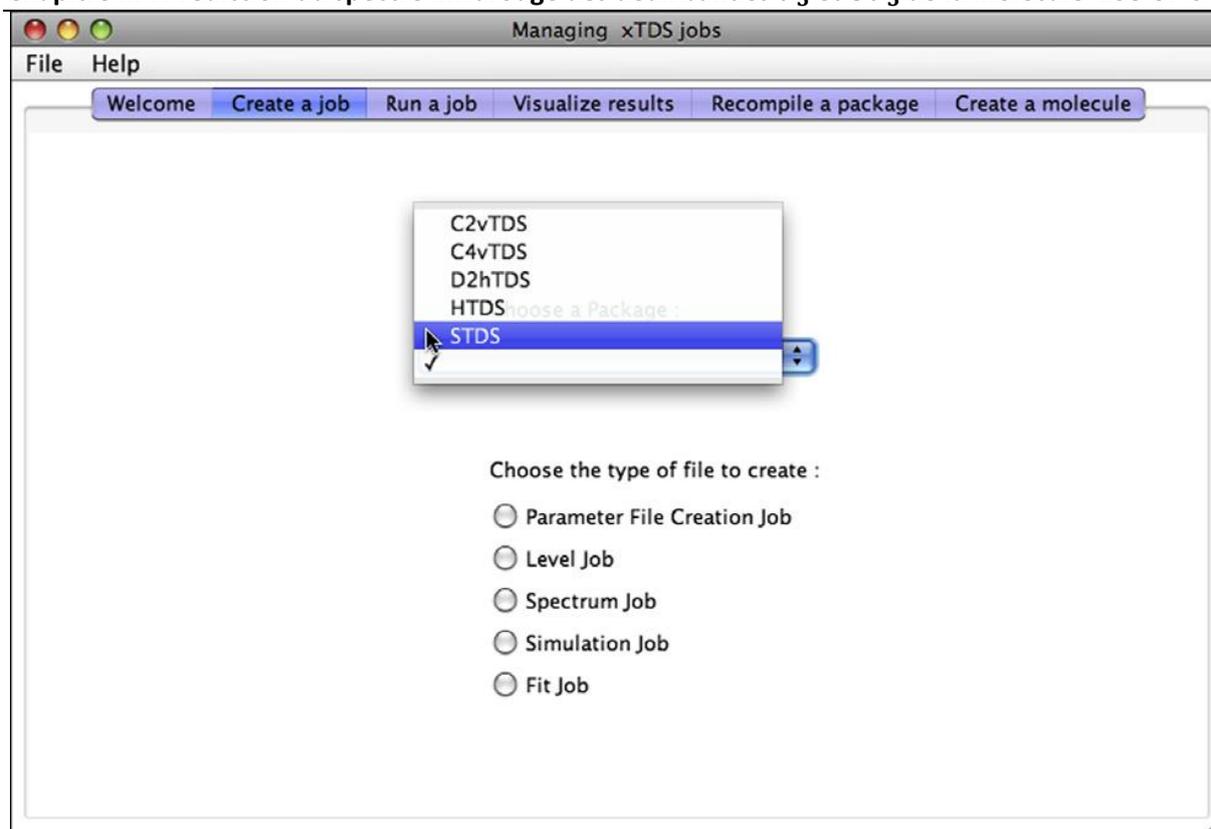


Fig - III – 1 : L'onglet "creat a job" dans XTDS

Les différents onglets de l'interface graphique de ce logiciel permet de faciliter l'utilisation (calculer , simuler .....):

- ✚ **Création des jobs** : L'onglet "Créât a job", pour choisir le type de job à créer.
- ✚ **Un travail de création des jobs de fichier de paramètres** : pour démarrer un nouveau projet en créant un fichier de paramètres «vide» (c'est-à-dire avec la liste pour le problème considéré, mais avec toutes les valeurs égales à zéro).
- ✚ **Level Job** : pour calculer les niveaux d'énergie pour un polyad donné,
- ✚ **Spectrum Job**: pour calculer un spectre de transitions (absorption ou Raman).
- ✚ **Simulation Job** : pour simuler une transmission, une absorbance ou spectre Raman comprenant des profils de ligne à un spectre de transitions
- ✚ **Fit Job** : pour adapter les données expérimentales de position ou d'intensité,

SPVIEW est un logiciel autorise l'affectation graphique de spectres moléculaires à haute résolution. Ainsi que est une multiplateforme qui permet l'affichage des spectres simulés, et des spectres mesurés en laboratoire. Les attributions peuvent également être modifiées ou supprimées. SPVIEW est également capable de produire des listes de pics à partir d'un spectre expérimental.

Les deux logiciels (XTDS ; SPVIEW) peuvent être téléchargés gratuitement à l'URL <http://icb.u-bourgogne.fr/OMR/SMA/SHTDS>.

### III -3- Analyse de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$

Dans cette partie du travail, nous allons calculer et prédire le spectre complet des transitions rovibrationnelles entre le niveau  $\nu_3$  et le niveau de base  $GS$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ ,

On peut obtenir des niveaux rovibrationnels appartenant au même niveau vibrationnel par la variation des nombres quantiques rotationnels  $J$ .

Dans le calcul du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  on utilise :

❖ États vibrationnels supérieurs :

```
#   v1           v2           v3           v4           v5           v6           Cv
1  |[0(0,0 A1g)*0(0,0A1g)*1(1,0F1u)]F1u*0(0,0A1g)]F1u*0(0,0A1g)]F1u*0(0,0 A1g)]F1u >
```

❖ États vibrationnels inférieurs :

```
#   v1           v2           v3           v4           v5           v6           Cv
1  |[0(0,0 A1g)*0(0,0 A1g)* 0(0,0 A1g)]A1g* 0(0,0 A1g)]A1g*0(0,0 A1g)]A1g* 0(0,0 A1g)]A1g>
```

#### III-3-1 Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à de la bande $\nu_3$ de molécule $^{238}\text{UF}_6$

Le développement de l'Hamiltonien relatif à la bande  $\nu_3$  des molécules  $\text{XY}_6$  comporte, et suivant le modèle octaédrique, 8 paramètres relatifs à la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ , dont 1 relatifs au niveau de base  $GS$  et 7 relatifs au niveau  $\nu_3$ .

La forme et les valeurs de ces paramètres sont regroupées dans le tableau ci-dessous :

**Tableau III -1** : Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$

i	$\Omega$ (k, n $\Gamma$ )	$n_s$	$\Gamma_1$	$m_s$	$\Gamma_2$	$\Gamma$	Hmn	Value / cm -1	St.Dev / cm -1
1	2(0,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	02	0	0	0.55670000000E-01	0.0000000E+00
2	0(0,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	20	0	0	0.62772387000E+03	0.0000000E+00
3	1(1,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	21	0	0	0.46881179593E-01	0.0000000E+00
4	2(0,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	22	0	0	-0.38930000000E-04	0.0000000E+00
5	2(2,0E g)	001000F1u	001000F1u	E g	22	0	0	-0.43958944871E-04	0.0000000E+00
6	2(2,0F2g)	001000F1u	001000F1u	F2g	22	0	0	0.40743944871E-04	0.0000000E+00
7	3(1,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	23	0	0	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
8	3(3,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	23	0	0	-0.88892297895E-08	0.0000000E+00

Où les différents termes de ce tableau représentent :

- ❖ **i**: Indice permettant de numérotter les différents paramètres.
- ❖ **(k, n  $\Gamma$ )**: Les caractéristiques de l'opérateur relatif au paramètre **i**
- ❖  **$n_s$** : Le nombre de fois qu'a  $\tilde{\alpha}^+$  été couplé pour former un tenseur de symétrie  $\Gamma_1$ .
- ❖  **$\Gamma_1$** : La symétrie de l'opérateur résultant de couplage des  $\tilde{\alpha}^+$ .
- ❖  **$m_s$** : Le nombre de fois qu'a  $\tilde{\alpha}^-$  été couplé pour former un tenseur de symétrie  $\Gamma_2$ .
- ❖  **$\Gamma_2$** : La symétrie de l'opérateur résultant de couplage des  $\tilde{\alpha}^-$ .
- ❖  **$\Gamma$** : La symétrie de l'opérateur rovibrationnel .
- ❖ **Hmn** : Le degré de polynôme rovibrationnel.

L'utilisation de l'ensemble de paramètres reportés au tableau (III - 1), nous a permis de calculer et de prédire le spectre infrarouge de la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ , on a obtenu un spectre transitions rovibrationnelles, illustrées dans la figure ci-dessous :

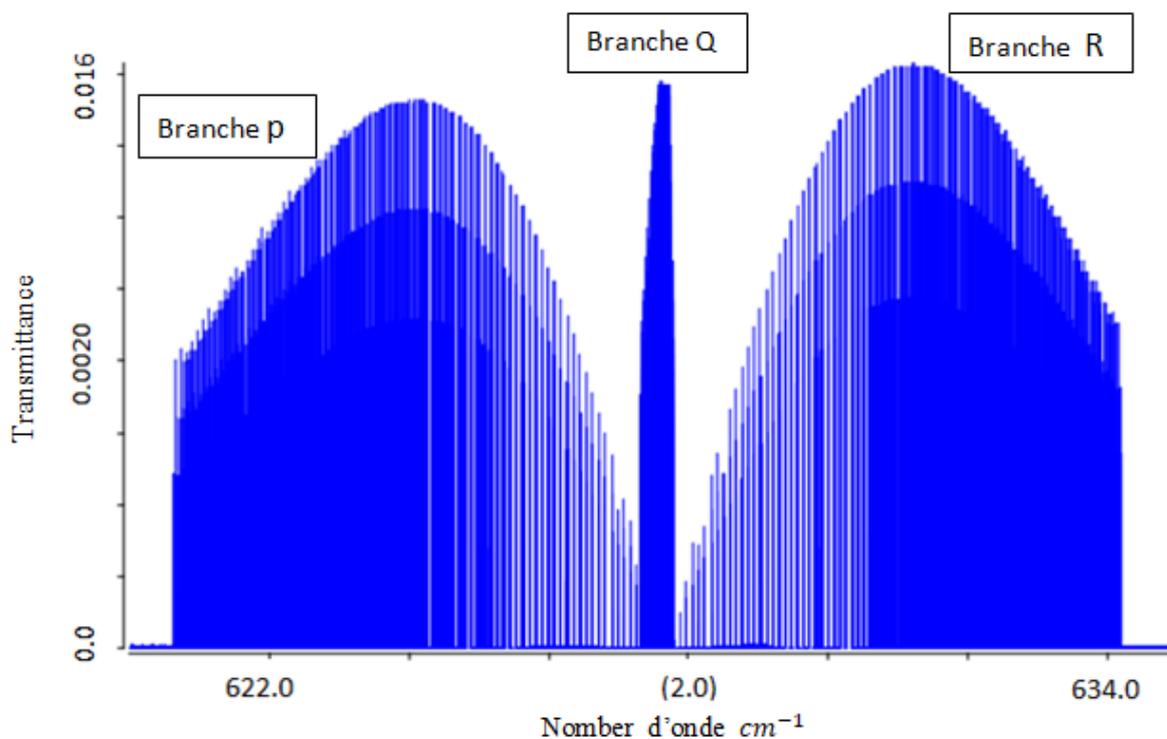


Fig -III - 2 : Spectres des transitions rovibrationnelles de la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$

Dans le tableau suivant Nous donnons des détails sur le spectre calculé.

**Tableau III -2 :** Informations sur le spectre IR de la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$

Nombre de transitions calculées	171071
première transition	620.000130 1.82E-12 P 67 F1g
Transition la plus intense	631.230284 1.63E-02 R 39 A2g
Dernière transition	634.999334 5.23E-21 R 54 F2g
<i>Jmax</i>	634.158732 9.04E-03 R 74 A2g
Intensité sommet	0.57E+02

### III-3-2 Prédiction du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$

Dans le tableau ci-dessous nous reportons un extrait de fichier de transitions rovibrationnelles appartenant au spectre calculé de la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  obtenu par le logiciel XTDS .

Dans ce tableau chaque ligne explique l'origine de la transition calculée et les différentes colonnes de ce tableau représentent :

- ❖ **1 ère colonne :** La fréquence de transitions rovibrationnelles en  $cm^{-1}$  .
- ❖ **2 ème colonne :** L'intensité calculée pour chaque transition en  $atm^{-1}.cm^{-2}$  .
- ❖ **3 ème colonne :** La branche de raie spécifique à chaque transition
- ❖ **4 ème colonne et 8 ème colonne :** Le nombre quantique rotationnel de niveau vibrationnel inférieur et supérieur respectivement.
- ❖ **5 ème colonne et 9 ème colonne :** La symétrie de niveau vibrationnel inférieur et supérieur respectivement.
- ❖ **6 ème colonne et 10 ème colonne :** l'indice permettant la distinction entre deux niveaux de même symétrie.
- ❖ **7 ème colonne :** pourcentage de vibration de niveau inférieur et supérieur
- ❖ **11 ème colonne :** L'énergie de niveau inférieur.

Tableau III -3 : Prédiction du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$

Fréquence	Intensité		J"C" n"	J C n	Energie inf	Population inf
627.612530	1.95E-04	P	1 F1g 1 1 100%	0 F1u 1 1 100%	0.111340	0.241790E-06
627.790928	1.95E-04	R	0 A1g 1 1 100%	1 A1u 1 1 100%	0.000000	0.268823E-07
627.523126	7.78E-04	P	2 E g 1 1 100%	1 E u 1 1 100%	0.334020	0.536640E-06
627.701694	5.85E-04	Q	1 F1g 1 1 100%	1 F1u 1 1 100%	0.111340	0.241790E-06
627.523269	5.84E-04	P	2 F2g 1 1 100%	1 F2u 1 1 100%	0.334020	0.402480E-06
627.434155	1.62E-03	P	3 A2g 1 1 100%	2 A2u 1 1 100%	0.668040	0.937363E-06
627.701631	1.30E-03	Q	2 E g 1 1 100%	2 E u 1 1 100%	0.334020	0.536640E-06
627.880007	9.75E-04	R	1 F1g 1 1 100%	2 F1u 1 1 100%	0.111340	0.241790E-06
627.990343	3.88E-10	R	1 F1g 1 1 100%	2 F1u 2 1 100%	0.111340	0.241790E-06
627.323307	3.87E-10	P	3 F1g 1 1 100%	2 F1u 1 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.433643	9.71E-04	P	3 F1g 1 1 100%	2 F1u 2 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.701488	9.73E-04	Q	2 F2g 1 1 100%	2 F2u 1 1 100%	0.334020	0.402480E-06
627.767891	8.93E-09	Q	2 F2g 1 1 100%	2 F2u 2 1 100%	0.334020	0.402480E-06
627.367468	8.91E-09	P	3 F2g 1 1 100%	2 F2u 1 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.433871	9.71E-04	P	3 F2g 1 1 100%	2 F2u 2 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.343909	4.52E-04	P	4 A1g 1 1 100%	3 A1u 1 1 100%	1.113400	0.240435E-06
627.700896	2.27E-03	Q	3 A2g 1 1 100%	3 A2u 1 1 100%	0.668040	0.937363E-06
627.968983	1.82E-03	R	2 E g 1 1 100%	3 E u 1 1 100%	0.334020	0.536640E-06
628.123656	5.64E-09	R	2 E g 1 1 100%	3 E u 2 1 100%	0.334020	0.536640E-06
627.189603	5.61E-09	P	4 E g 1 1 100%	3 E u 1 1 100%	1.113400	0.961739E-06
627.344276	1.81E-03	P	4 E g 1 1 100%	3 E u 2 1 100%	1.113400	0.961739E-06
627.701534	1.36E-03	Q	3 F1g 1 1 100%	3 F1u 1 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.789484	1.33E-08	Q	3 F1g 1 1 100%	3 F1u 2 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.256174	1.33E-08	P	4 F1g 1 1 100%	3 F1u 1 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.344124	1.36E-03	P	4 F1g 1 1 100%	3 F1u 2 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.969023	1.36E-03	R	2 F2g 1 1 100%	3 F2u 1 1 100%	0.334020	0.402480E-06
628.035269	4.52E-09	R	2 F2g 1 1 100%	3 F2u 2 1 100%	0.334020	0.402480E-06
628.124115	1.04E-09	R	2 F2g 1 1 100%	3 F2u 3 1 100%	0.334020	0.402480E-06
627.635003	4.49E-09	Q	3 F2g 1 1 100%	3 F2u 1 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.701249	1.36E-03	Q	3 F2g 1 1 100%	3 F2u 2 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.790095	2.80E-08	Q	3 F2g 1 1 100%	3 F2u 3 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.189643	1.06E-09	P	4 F2g 1 1 100%	3 F2u 1 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.255889	2.79E-08	P	4 F2g 1 1 100%	3 F2u 2 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.344735	1.36E-03	P	4 F2g 1 1 100%	3 F2u 3 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.701621	5.81E-04	Q	4 A1g 1 1 100%	4 A1u 1 1 100%	1.113400	0.240435E-06
628.058070	2.92E-03	R	3 A2g 1 1 100%	4 A2u 1 1 100%	0.668040	0.937363E-06
627.701104	2.33E-03	Q	4 E g 1 1 100%	4 E u 1 1 100%	1.113400	0.961739E-06
627.811884	1.16E-07	Q	4 E g 1 1 100%	4 E u 2 1 100%	1.113400	0.961739E-06
627.144404	1.16E-07	P	5 E g 1 1 100%	4 E u 1 1 100%	1.670100	0.117179E-05
627.255184	2.32E-03	P	5 E g 1 1 100%	4 E u 2 1 100%	1.670100	0.117179E-05
628.057855	1.75E-03	R	3 F1g 1 1 100%	4 F1u 1 1 100%	0.668040	0.562418E-06
628.146680	7.96E-09	R	3 F1g 1 1 100%	4 F1u 2 1 100%	0.668040	0.562418E-06
628.256319	1.29E-09	R	3 F1g 1 1 100%	4 F1u 3 1 100%	0.668040	0.562418E-06
628.257365	9.36E-09	R	3 F1g 1 1 100%	4 F1u 4 1 100%	0.668040	0.562418E-06
627.612495	7.87E-09	Q	4 F1g 1 1 100%	4 F1u 1 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.701320	1.74E-03	Q	4 F1g 1 1 100%	4 F1u 2 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.810959	1.91E-08	Q	4 F1g 1 1 100%	4 F1u 3 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.812005	3.61E-08	Q	4 F1g 1 1 100%	4 F1u 4 1 100%	1.113400	0.721304E-06
627.055795	9.38E-09	P	5 F1g 1 1 100%	4 F1u 1 1 100%	1.670100	0.878845E-06
627.055795	1.25E-09	P	5 F1g 2 1 100%	4 F1u 1 1 100%	1.670100	0.878845E-06
627.144620	3.58E-08	P	5 F1g 1 1 100%	4 F1u 2 1 100%	1.670100	0.878845E-06
627.144620	1.91E-08	P	5 F1g 2 1 100%	4 F1u 2 1 100%	1.670100	0.878845E-06
627.254259	2.57E-09	P	5 F1g 1 1 100%	4 F1u 3 1 100%	1.670100	0.878845E-06
627.254259	1.74E-03	P	5 F1g 2 1 100%	4 F1u 3 1 100%	1.670100	0.878845E-06

Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule 238 UF 6

627.255305	1.74E-03	P	5	F1g	1	1	100%	4	F1u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.255305	2.52E-09	P	5	F1g	2	1	100%	4	F1u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.057950	1.75E-03	R	3	F2g	1	1	100%	4	F2u	1	1	100%	0.668040	0.562418E-06
628.145831	1.71E-08	R	3	F2g	1	1	100%	4	F2u	2	1	100%	0.668040	0.562418E-06
628.256574	3.50E-09	R	3	F2g	1	1	100%	4	F2u	3	1	100%	0.668040	0.562418E-06
627.612590	1.71E-08	Q	4	F2g	1	1	100%	4	F2u	1	1	100%	1.113400	0.721304E-06
627.700471	1.74E-03	Q	4	F2g	1	1	100%	4	F2u	2	1	100%	1.113400	0.721304E-06
627.811214	2.43E-09	Q	4	F2g	1	1	100%	4	F2u	3	1	100%	1.113400	0.721304E-06
627.055890	3.45E-09	P	5	F2g	1	1	100%	4	F2u	1	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.143771	2.44E-09	P	5	F2g	1	1	100%	4	F2u	2	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.254514	1.74E-03	P	5	F2g	1	1	100%	4	F2u	3	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.146549	7.11E-04	R	4	A1g	1	1	100%	5	A1u	1	1	100%	1.113400	0.240435E-06
628.390702	1.00E-08	R	4	A1g	1	1	100%	5	A1u	2	1	100%	1.113400	0.240435E-06
626.921809	9.95E-09	P	6	A1g	1	1	100%	5	A1u	1	1	100%	2.338140	0.344917E-06
627.165962	7.05E-04	P	6	A1g	1	1	100%	5	A1u	2	1	100%	2.338140	0.344917E-06
627.164715	3.53E-03	P	6	A2g	1	1	100%	5	A2u	1	1	100%	2.338140	0.172458E-05
628.146734	2.84E-03	R	4	E g	1	1	100%	5	E u	1	1	100%	1.113400	0.961739E-06
628.256757	7.79E-08	R	4	E g	1	1	100%	5	E u	2	1	100%	1.113400	0.961739E-06
628.389146	8.22E-09	R	4	E g	1	1	100%	5	E u	3	1	100%	1.113400	0.961739E-06
627.590034	7.77E-08	Q	5	E g	1	1	100%	5	E u	1	1	100%	1.670100	0.117179E-05
627.700057	2.83E-03	Q	5	E g	1	1	100%	5	E u	2	1	100%	1.670100	0.117179E-05
627.832446	2.15E-08	Q	5	E g	1	1	100%	5	E u	3	1	100%	1.670100	0.117179E-05
626.921994	8.00E-09	P	6	E g	1	1	100%	5	E u	1	1	100%	2.338140	0.137967E-05
627.032017	2.16E-08	P	6	E g	1	1	100%	5	E u	2	1	100%	2.338140	0.137967E-05
627.164406	2.82E-03	P	6	E g	1	1	100%	5	E u	3	1	100%	2.338140	0.137967E-05
628.146657	2.13E-03	R	4	F1g	1	1	100%	5	F1u	1	1	100%	1.113400	0.721304E-06
628.256571	2.40E-08	R	4	F1g	1	1	100%	5	F1u	2	1	100%	1.113400	0.721304E-06
628.258131	1.27E-08	R	4	F1g	1	1	100%	5	F1u	3	1	100%	1.113400	0.721304E-06
628.390511	1.58E-08	R	4	F1g	1	1	100%	5	F1u	4	1	100%	1.113400	0.721304E-06
627.589957	2.41E-08	Q	5	F1g	1	1	100%	5	F1u	1	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.589957	1.24E-08	Q	5	F1g	2	1	100%	5	F1u	1	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.699871	2.13E-03	Q	5	F1g	1	1	100%	5	F1u	2	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.699871	6.98E-09	Q	5	F1g	2	1	100%	5	F1u	2	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.701431	7.02E-09	Q	5	F1g	1	1	100%	5	F1u	3	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.701431	2.13E-03	Q	5	F1g	2	1	100%	5	F1u	3	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.833811	1.74E-08	Q	5	F1g	1	1	100%	5	F1u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.833811	5.45E-08	Q	5	F1g	2	1	100%	5	F1u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
626.921917	1.57E-08	P	6	F1g	1	1	100%	5	F1u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.031831	1.76E-08	P	6	F1g	1	1	100%	5	F1u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.033391	5.39E-08	P	6	F1g	1	1	100%	5	F1u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.165771	2.12E-03	P	6	F1g	1	1	100%	5	F1u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.146969	2.13E-03	R	4	F2g	1	1	100%	5	F2u	1	1	100%	1.113400	0.721304E-06
628.257740	1.65E-09	R	4	F2g	1	1	100%	5	F2u	2	1	100%	1.113400	0.721304E-06
628.389224	3.42E-09	R	4	F2g	1	1	100%	5	F2u	3	1	100%	1.113400	0.721304E-06
628.390294	2.67E-09	R	4	F2g	1	1	100%	5	F2u	4	1	100%	1.113400	0.721304E-06
627.590269	1.62E-09	Q	5	F2g	1	1	100%	5	F2u	1	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.701040	2.12E-03	Q	5	F2g	1	1	100%	5	F2u	2	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.832524	2.53E-08	Q	5	F2g	1	1	100%	5	F2u	3	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.833594	1.47E-07	Q	5	F2g	1	1	100%	5	F2u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
626.922229	3.36E-09	P	6	F2g	1	1	100%	5	F2u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
626.922229	2.70E-09	P	6	F2g	2	1	100%	5	F2u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.033000	2.56E-08	P	6	F2g	1	1	100%	5	F2u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.033000	1.46E-07	P	6	F2g	2	1	100%	5	F2u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.164484	2.12E-03	P	6	F2g	1	1	100%	5	F2u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.164484	2.24E-08	P	6	F2g	2	1	100%	5	F2u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.165554	2.20E-08	P	6	F2g	1	1	100%	5	F2u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.165554	2.12E-03	P	6	F2g	2	1	100%	5	F2u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.698926	8.34E-04	Q	6	A1g	1	1	100%	6	A1u	1	1	100%	2.338140	0.344917E-06
627.700854	4.17E-03	Q	6	A2g	1	1	100%	6	A2u	1	1	100%	2.338140	0.172458E-05
627.854926	5.75E-07	Q	6	A2g	1	1	100%	6	A2u	2	1	100%	2.338140	0.172458E-05
626.921474	5.72E-07	P	7	A2g	1	1	100%	6	A2u	1	1	100%	3.117520	0.198122E-05
627.075546	4.15E-03	P	7	A2g	1	1	100%	6	A2u	2	1	100%	3.117520	0.198122E-05

Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule 238 UF 6

628.235756	3.35E-03	R	5	E	g	1	1	100%	6	E	u	1	1	100%	1.670100	0.117179E-05
628.369396	1.56E-08	R	5	E	g	1	1	100%	6	E	u	2	1	100%	1.670100	0.117179E-05
628.523518	2.45E-08	R	5	E	g	1	1	100%	6	E	u	3	1	100%	1.670100	0.117179E-05
627.567716	1.52E-08	Q	6	E	g	1	1	100%	6	E	u	1	1	100%	2.338140	0.137967E-05
627.701356	3.34E-03	Q	6	E	g	1	1	100%	6	E	u	2	1	100%	2.338140	0.137967E-05
627.855478	1.77E-07	Q	6	E	g	1	1	100%	6	E	u	3	1	100%	2.338140	0.137967E-05
626.788336	2.45E-08	P	7	E	g	1	1	100%	6	E	u	1	1	100%	3.117520	0.158498E-05
626.921976	1.75E-07	P	7	E	g	1	1	100%	6	E	u	2	1	100%	3.117520	0.158498E-05
627.076098	3.32E-03	P	7	E	g	1	1	100%	6	E	u	3	1	100%	3.117520	0.158498E-05
628.235223	1.22E-09	R	5	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	1	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.235223	2.51E-03	R	5	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	1	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.235828	2.51E-03	R	5	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	2	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.235828	1.24E-09	R	5	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	2	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.367271	1.28E-08	R	5	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	3	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.367271	3.84E-08	R	5	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	3	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.521834	9.77E-09	R	5	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.521834	8.59E-10	R	5	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.523819	2.17E-09	R	5	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	5	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.523819	3.99E-08	R	5	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	5	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.567183	3.85E-08	Q	6	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.567788	1.27E-08	Q	6	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.699231	2.50E-03	Q	6	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.853794	1.28E-08	Q	6	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.855779	3.46E-08	Q	6	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	5	1	100%	2.338140	0.103475E-05
626.787803	3.92E-08	P	7	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.787803	8.36E-10	P	7	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.788408	2.21E-09	P	7	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.788408	9.60E-09	P	7	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.919851	3.46E-08	P	7	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.919851	1.28E-08	P	7	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.074414	1.34E-09	P	7	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.074414	2.49E-03	P	7	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.076399	2.49E-03	P	7	F	1g	1	1	100%	6	F	1u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.076399	1.31E-09	P	7	F	1g	2	1	100%	6	F	1u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
628.235370	2.51E-03	R	5	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	1	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.367617	1.04E-07	R	5	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	2	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.369272	1.85E-08	R	5	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	3	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.521960	2.11E-09	R	5	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	4	1	100%	1.670100	0.878845E-06
628.523325	8.60E-09	R	5	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	5	1	100%	1.670100	0.878845E-06
627.567330	1.78E-08	Q	6	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.567330	1.04E-07	Q	6	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.699577	6.60E-08	Q	6	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.699577	2.50E-03	Q	6	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.701232	2.50E-03	Q	6	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.701232	6.66E-08	Q	6	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.853920	1.29E-08	Q	6	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.853920	1.63E-08	Q	6	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.855285	1.61E-07	Q	6	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	5	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.855285	4.64E-08	Q	6	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	5	1	100%	2.338140	0.103475E-05
626.787950	8.41E-09	P	7	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.787950	2.07E-09	P	7	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.920197	4.70E-08	P	7	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.920197	1.67E-08	P	7	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.921852	1.58E-07	P	7	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.921852	1.30E-08	P	7	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.074540	3.40E-08	P	7	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.074540	2.49E-03	P	7	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.075905	2.49E-03	P	7	F	2g	1	1	100%	6	F	2u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.075905	3.35E-08	P	7	F	2g	2	1	100%	6	F	2u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
628.324720	9.63E-04	R	6	A	1g	1	1	100%	7	A	1u	1	1	100%	2.338140	0.344917E-06
628.654336	6.63E-09	R	6	A	1g	1	1	100%	7	A	1u	2	1	100%	2.338140	0.344917E-06
626.654620	6.54E-09	P	8	A	1g	1	1	100%	7	A	1u	1	1	100%	4.008240	0.446839E-06

Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule 238 UF 6

626.984236	9.52E-04	P	8 A1g	1	1	100%	7 A1u	2	1	100%	4.008240	0.446839E-06
628.323931	4.82E-03	R	6 A2g	1	1	100%	7 A2u	1	1	100%	2.338140	0.172458E-05
628.478920	4.25E-07	R	6 A2g	1	1	100%	7 A2u	2	1	100%	2.338140	0.172458E-05
627.544551	4.22E-07	Q	7 A2g	1	1	100%	7 A2u	1	1	100%	3.117520	0.198122E-05
627.699540	4.79E-03	Q	7 A2g	1	1	100%	7 A2u	2	1	100%	3.117520	0.198122E-05
628.323738	3.85E-03	R	6 E g	1	1	100%	7 E u	1	1	100%	2.338140	0.137967E-05
628.477989	1.29E-07	R	6 E g	1	1	100%	7 E u	2	1	100%	2.338140	0.137967E-05
628.654475	3.95E-09	R	6 E g	1	1	100%	7 E u	3	1	100%	2.338140	0.137967E-05
628.656803	6.92E-08	R	6 E g	1	1	100%	7 E u	4	1	100%	2.338140	0.137967E-05
627.544358	1.30E-07	Q	7 E g	1	1	100%	7 E u	1	1	100%	3.117520	0.158498E-05
627.698609	3.83E-03	Q	7 E g	1	1	100%	7 E u	2	1	100%	3.117520	0.158498E-05
627.875095	3.78E-08	Q	7 E g	1	1	100%	7 E u	3	1	100%	3.117520	0.158498E-05
627.877423	1.55E-07	Q	7 E g	1	1	100%	7 E u	4	1	100%	3.117520	0.158498E-05
626.653638	3.83E-09	P	8 E g	1	1	100%	7 E u	1	1	100%	4.008240	0.178736E-05
626.653638	6.70E-08	P	8 E g	2	1	100%	7 E u	1	1	100%	4.008240	0.178736E-05
626.807889	3.80E-08	P	8 E g	1	1	100%	7 E u	2	1	100%	4.008240	0.178736E-05
626.807889	1.55E-07	P	8 E g	2	1	100%	7 E u	2	1	100%	4.008240	0.178736E-05
626.984375	3.81E-03	P	8 E g	1	1	100%	7 E u	3	1	100%	4.008240	0.178736E-05
626.984375	1.76E-08	P	8 E g	2	1	100%	7 E u	3	1	100%	4.008240	0.178736E-05
626.986703	1.72E-08	P	8 E g	1	1	100%	7 E u	4	1	100%	4.008240	0.178736E-05
626.986703	3.81E-03	P	8 E g	2	1	100%	7 E u	4	1	100%	4.008240	0.178736E-05
628.324596	2.89E-03	R	6 F1g	1	1	100%	7 F1u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.477500	2.66E-08	R	6 F1g	1	1	100%	7 F1u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.480695	9.86E-09	R	6 F1g	1	1	100%	7 F1u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.654424	9.35E-09	R	6 F1g	1	1	100%	7 F1u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.656358	1.23E-08	R	6 F1g	1	1	100%	7 F1u	5	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.545216	2.66E-08	Q	7 F1g	1	1	100%	7 F1u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.545216	9.53E-09	Q	7 F1g	2	1	100%	7 F1u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.698120	2.87E-03	Q	7 F1g	1	1	100%	7 F1u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.698120	4.11E-09	Q	7 F1g	2	1	100%	7 F1u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.701315	4.19E-09	Q	7 F1g	1	1	100%	7 F1u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.701315	2.87E-03	Q	7 F1g	2	1	100%	7 F1u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.875044	1.30E-08	Q	7 F1g	1	1	100%	7 F1u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.875044	7.18E-09	Q	7 F1g	2	1	100%	7 F1u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.876978	6.33E-09	Q	7 F1g	1	1	100%	7 F1u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.876978	2.38E-07	Q	7 F1g	2	1	100%	7 F1u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.654496	9.24E-09	P	8 F1g	1	1	100%	7 F1u	1	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.654496	1.23E-08	P	8 F1g	2	1	100%	7 F1u	1	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.807400	1.31E-08	P	8 F1g	1	1	100%	7 F1u	2	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.807400	6.39E-09	P	8 F1g	2	1	100%	7 F1u	2	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.810595	7.27E-09	P	8 F1g	1	1	100%	7 F1u	3	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.810595	2.36E-07	P	8 F1g	2	1	100%	7 F1u	3	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.984324	2.86E-03	P	8 F1g	1	1	100%	7 F1u	4	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.984324	1.45E-08	P	8 F1g	2	1	100%	7 F1u	4	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.986258	1.42E-08	P	8 F1g	1	1	100%	7 F1u	5	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.986258	2.86E-03	P	8 F1g	2	1	100%	7 F1u	5	1	100%	4.008240	0.134052E-05
628.323786	2.89E-03	R	6 F2g	1	1	100%	7 F2u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.323786	1.19E-08	R	6 F2g	2	1	100%	7 F2u	1	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.324457	1.21E-08	R	6 F2g	1	1	100%	7 F2u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.324457	2.89E-03	R	6 F2g	2	1	100%	7 F2u	2	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.478312	1.17E-07	R	6 F2g	1	1	100%	7 F2u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.478312	3.50E-08	R	6 F2g	2	1	100%	7 F2u	3	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.480486	1.01E-08	R	6 F2g	1	1	100%	7 F2u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.480486	1.28E-08	R	6 F2g	2	1	100%	7 F2u	4	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.655864	7.03E-09	R	6 F2g	1	1	100%	7 F2u	5	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.655864	6.79E-09	R	6 F2g	2	1	100%	7 F2u	5	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.656933	3.72E-08	R	6 F2g	1	1	100%	7 F2u	6	1	100%	2.338140	0.103475E-05
628.656933	2.43E-08	R	6 F2g	2	1	100%	7 F2u	6	1	100%	2.338140	0.103475E-05
627.544406	1.18E-07	Q	7 F2g	1	1	100%	7 F2u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.544406	9.55E-09	Q	7 F2g	2	1	100%	7 F2u	1	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.545077	3.47E-08	Q	7 F2g	1	1	100%	7 F2u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.545077	1.22E-08	Q	7 F2g	2	1	100%	7 F2u	2	1	100%	3.117520	0.118873E-05

### Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes $\nu_3$ et $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$

627.698932	2.87E-03	Q	7	F2g	1	1	100%	7	F2u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.698932	1.06E-07	Q	7	F2g	2	1	100%	7	F2u	3	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.701106	1.07E-07	Q	7	F2g	1	1	100%	7	F2u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.701106	2.87E-03	Q	7	F2g	2	1	100%	7	F2u	4	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.876484	1.00E-07	Q	7	F2g	1	1	100%	7	F2u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.876484	3.39E-07	Q	7	F2g	2	1	100%	7	F2u	5	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.877553	3.84E-08	Q	7	F2g	1	1	100%	7	F2u	6	1	100%	3.117520	0.118873E-05
627.877553	6.58E-09	Q	7	F2g	2	1	100%	7	F2u	6	1	100%	3.117520	0.118873E-05
626.653686	6.85E-09	P	8	F2g	1	1	100%	7	F2u	1	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.653686	3.60E-08	P	8	F2g	2	1	100%	7	F2u	1	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.654357	6.66E-09	P	8	F2g	1	1	100%	7	F2u	2	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.654357	2.44E-08	P	8	F2g	2	1	100%	7	F2u	2	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.808212	1.02E-07	P	8	F2g	1	1	100%	7	F2u	3	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.808212	3.81E-08	P	8	F2g	2	1	100%	7	F2u	3	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.810386	3.34E-07	P	8	F2g	1	1	100%	7	F2u	4	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.810386	6.85E-09	P	8	F2g	2	1	100%	7	F2u	4	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.985764	2.86E-03	P	8	F2g	1	1	100%	7	F2u	5	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.985764	4.23E-09	P	8	F2g	2	1	100%	7	F2u	5	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.986833	4.19E-09	P	8	F2g	1	1	100%	7	F2u	6	1	100%	4.008240	0.134052E-05
626.986833	2.86E-03	P	8	F2g	2	1	100%	7	F2u	6	1	100%	4.008240	0.134052E-05

### III-3-3 Les niveaux d'énergies réduits de la bande $\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$

Ces niveaux réduits sont calculés par la formule :

$$E_{\text{réd}} = E - B_0 J(J + 1) \quad (\text{III -1})$$

$B_0$  Est la valeur du paramètre qui correspond à  $i=1$  dans le tableau (III.1) :

$$t_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) a_1 \Gamma_{1\chi} a_2 \Gamma_{2\chi}} = B_0 \quad (\text{III -2})$$

$$t_{\{0\}\{0\}}^{2(0, 0A_{1g}) A_{1g} A_{1g}} = 0.556700000000E - 01 \quad (\text{III -3})$$

Ces niveaux sont répartis suivant trois branches **P**, **Q**, **R**, selon les règles de sélection rovibrationnelles  $\Delta J = -1, 0, +1$  respectivement.

La figure, ci-dessous, illustre le diagramme des niveaux d'énergie rovibrationnels de la bande  $\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  pour la valeur de  $J_{\text{max}} = 74$ .

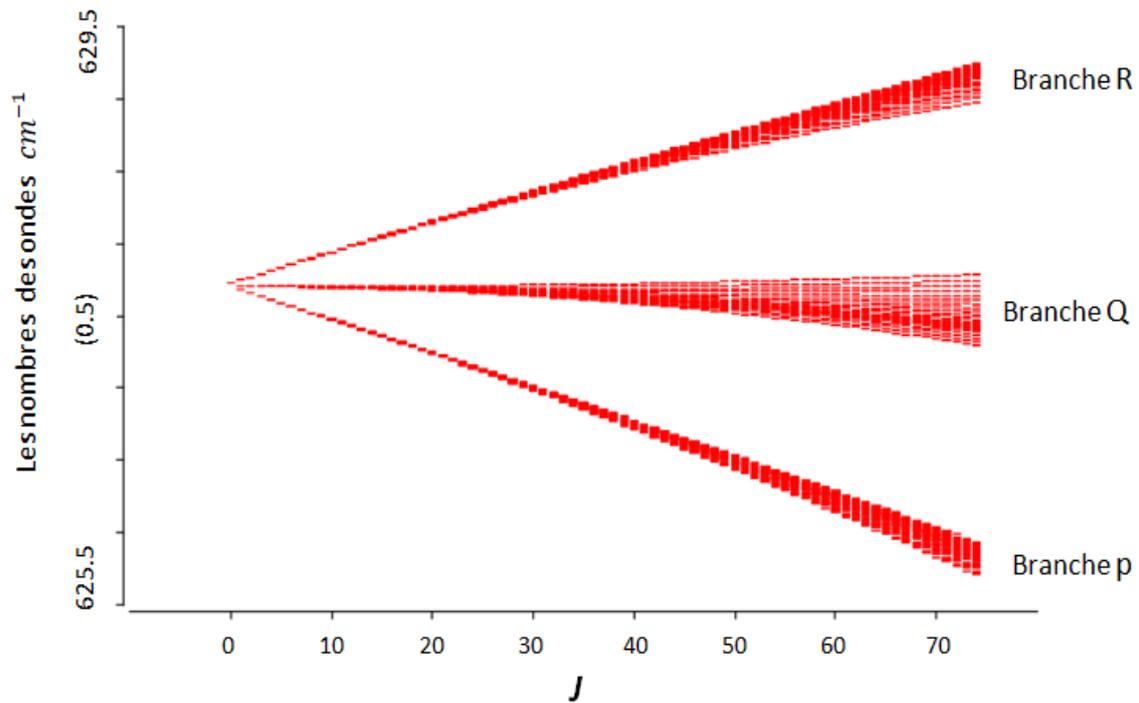


Figure III -3: Répartitions des niveaux d'énergies réduits de niveau  $\nu_3$  de la Molécule  $^{238}\text{UF}_6$

### III -4- Analyse de la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$

nous allons calculer et prédire le spectre complet des transitions rovibrationnelles entre le niveau  $3\nu_3$  et le niveau de base  $GS$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ .

Dans le calcul du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  on utilise :

❖ États vibrationnels supérieurs :

#	v1	v2	v3	v4	v5	v6	Cv
1	[[[[[ 0(0,0A1g)* 0(0,0A1g)* 3(1,0F1u)]F1u* 0(0,0A1g)]F1u* 0(0,0A1g)]F1u* 0(0,0A1g)]F1u >						
2	[[[[[ 0(0,0A1g)* 0(0,0A1g)* 3(3,0A2u)]A2u* 0(0,0A1g)]A2u* 0(0,0A1g)]A2u* 0(0,0A1g)]A2u >						
3	[[[[[ 0(0,0A1g)* 0(0,0A1g)* 3(3,0F1u)]F1u* 0(0,0A1g)]F1u* 0(0,0A1g)]F1u* 0(0,0A1g)]F1u >						
4	[[[[[ 0(0,0A1g)* 0(0,0A1g)* 3(3,0F2u)]F2u* 0(0,0A1g)]F2u* 0(0,0A1g)]F2u* 0(0,0A1g)]F2u >						

❖ États vibrationnels inférieurs :

#	v1	v2	v3	v4	v5	v6	Cv
1	[[[[[ 0(0,0A1g)* 0(0,0A1g)* 0(0,0A1g)]A1g* 0(0,0A1g)]A1g* 0(0,0A1g)]A1g* 0(0,0A1g)]A1g >						

III -4-1 Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à de la bande  $3\nu_3$  de molécule



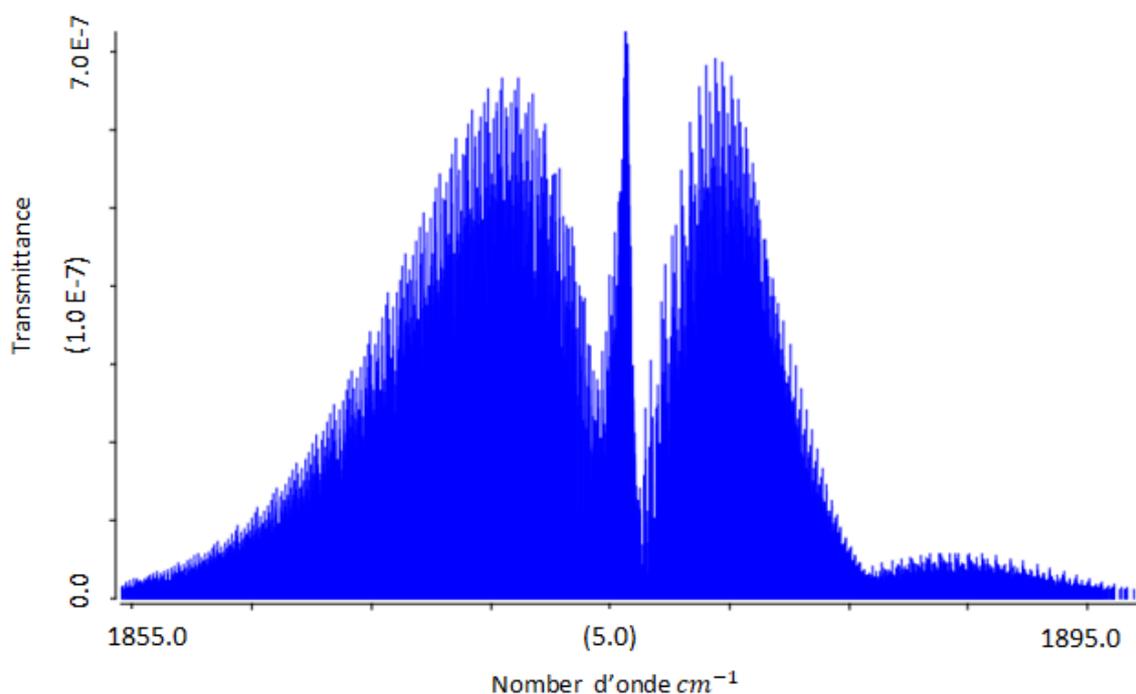
L'analyse complète du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ , se fait par l'utilisation de 16 paramètres relatifs à la bande  $3\nu_3$ , dont 1 relatifs au niveau de base  $GS$  et 15 relatifs au niveau  $\nu_3$ .

La forme et les valeurs de ces paramètres sont regroupées dans le tableau ci-dessous :

**Tableau III -4 :** Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$

<b>i</b>	<b><math>\Omega(k, n\Gamma)</math></b>	<b><math>n_s \Gamma_1</math></b>	<b><math>m_s \Gamma_2</math></b>	<b><math>\Gamma</math></b>	<b>Hmn</b>	<b>Value / cm -1</b>	<b>St.Dev / cm -1</b>
1	2(0,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	02	0 0.55670000000E-01	0.0000000E+00
2	0(0,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	20	0 0.62772387000E+03	0.0000000E+00
3	1(1,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	21	0 0.46881179593E-01	0.0000000E+00
4	2(0,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	22	0 -0.38930000000E-04	0.0000000E+00
5	2(2,0E g)	001000F1u	001000F1u	E g	22	0 -0.43958944871E-04	0.0000000E+00
6	2(2,0F2g)	001000F1u	001000F1u	F2g	22	0 0.40743944871E-04	0.0000000E+00
7	3(1,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	23	0 0.00000000000E+00	0.0000000E+00
8	3(3,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	23	0 -0.88892297895E-08	0.0000000E+00
9	0(0,0A1g)	002000A1g	002000A1g	A1g	40	0 -0.23577400000E+01	0.0000000E+00
10	0(0,0A1g)	002000Eg	002000 Eg	A1g	40	0 -0.26077400000E+01	0.0000000E+00
11	0(0,0A1g)	002000F2g	002000F2g	A1g	40	0 0.21226000000E+00	0.0000000E+00
12	0(0,0A1g)	003000F1u	003000F1u	A1g	60	0 0.52192017630E-01	0.0000000E+00
13	0(0,0A1g)	003000F1u	003000F1u	A1g	60	0 0.00000000000E+00	0.0000000E+00
14	0(0,0A1g)	003000A2u	003000A2u	A1g	60	0 -0.83900000000E-02	0.0000000E+00
15	0(0,0A1g)	003000F1u	003000F1u	A1g	60	0 -0.45642017930E-01	0.0000000E+00
16	0(0,0A1g)	003000F2u	003000F2u	A1g	60	0 -0.83900000000E-02	0.0000000E+00

L'utilisation de l'ensemble de paramètres reportés au tableau (III - 4), nous a permis de calculer et de prédire le spectre infrarouge de la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$ , on a obtenu un spectre transitions rovibrationnelles, illustrées dans la figure ci-dessous :



**Fig III -4 :** Spectres des transitions rovibrationnelles de la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$

Après le calcul du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  on peut tirer les informations regroupées dans le tableau ci-dessous :

**Tableau III - 5 :** Informations sur le spectre IR de la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$

Nombre de transition calculées	51609
première transition	1854.521631 1.26E-08 P 121 F2g
Transition la plus intense	1875.6655347.25E-07 Q 38 A2g
Dernière transition	1897.166802 1.16E-08 R 110 A2g
<i>J</i> max	1884.453601 3.51E-08 R 120 A2g
Intensité sommet	0.32E-02

### III -4-2 Prédiction du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande $3\nu_3$ de la molécule $^{238}\text{UF}_6$

Dans ce tableau, chaque ligne explique l'origine les détails sur la transition calculée. Par exemple et pour la cinquième ligne, la raie de fréquence  $1875.601720\text{ cm}^{-1}$  résulte d'une transition de niveau inférieur caractérisé par  $J = 2$  de symétrie  $E_g$  au niveau supérieur caractérisé par  $J = 2$  de symétrie  $E_u$ , donc la raie appartient à la branche **Q** parce que  $\Delta j = 0$ .

Tableau III - 6 : Prédiction du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande  $3\nu_3$  de la

molécule  $^{238}\text{UF}_6$

Fréquence	Intensité		J"C" n"	J C n	Energie inf	Population inf
1875.373843	3.67E-08	P	2 E g 1 1 100%	1 Eu 1 1 55%	0.334020	0.536640E-06
1875.602047	2.76E-08	Q	1 F1g 1 1 100%	1 F1u 1 1 56%	0.111340	0.241790E-06
1875.374403	2.75E-08	P	2 F2g 1 1 100%	1 F2u 1 1 55%	0.334020	0.402480E-06
1875.260285	7.64E-08	P	3 A2g 1 1 100%	2 A2u 1 1 55%	0.668040	0.937363E-06
1875.601720	6.11E-08	Q	2 E g 1 1 100%	2 E u 1 1 56%	0.334020	0.536640E-06
1875.827556	4.58E-08	R	1 F1g 1 1 100%	2 F1u 2 1 57%	0.111340	0.241790E-06
1875.258247	4.58E-08	P	3 F1g 1 1 100%	2 F1u 1 1 55%	0.668040	0.562418E-06
1875.601246	4.54E-08	Q	2 F2g 1 1 100%	2 F2u 2 1 56%	0.334020	0.402480E-06
1875.259079	4.54E-08	P	3 F2g 1 1 100%	2 F2u 1 1 55%	0.668040	0.562418E-06
1875.141198	2.13E-08	P	4 A1g 1 1 100%	3 A1u 1 1 54%	1.113400	0.240435E-06
1875.598750	1.07E-07	Q	3 A2g 1 1 100%	3 A2u 1 1 56%	0.668040	0.937363E-06
1875.938997	8.51E-08	R	2 E g 1 1 100%	3 E u 2 1 57%	0.334020	0.536640E-06
1875.142595	8.50E-08	P	4 E g 1 1 100%	3 E u 1 1 54%	1.113400	0.961739E-06
1875.601314	6.37E-08	Q	3 F1g 1 1 100%	3 F1u 2 1 56%	0.668040	0.562418E-06
1875.141967	6.36E-08	P	4 F1g 1 1 100%	3 F1u 1 1 54%	1.113400	0.721304E-06
1875.939136	6.36E-08	R	2 F2g 1 1 100%	3 F2u 3 1 57%	0.334020	0.402480E-06
1875.600338	6.22E-08	Q	3 F2g 1 1 100%	3 F2u 2 1 56%	0.668040	0.562418E-06
1875.144229	6.25E-08	P	4 F2g 1 1 100%	3 F2u 1 1 54%	1.113400	0.721304E-06
1875.601402	2.74E-08	Q	4 A1g 1 1 100%	4 A1u 1 1 56%	1.113400	0.240435E-06
1876.050293	1.37E-07	R	3 A2g 1 1 100%	4 A2u 1 1 58%	0.668040	0.937363E-06
1875.600030	1.05E-07	Q	4 E g 1 1 100%	4 E u 2 1 56%	1.113400	0.961739E-06
1875.027092	1.05E-07	P	5 E g 1 1 100%	4 E u 1 1 54%	1.670100	0.117179E-05
1876.049763	7.98E-08	R	3 F1g 1 1 100%	4 F1u 4 1 58%	0.668040	0.562418E-06
1875.600527	7.87E-08	Q	4 F1g 1 1 100%	4 F1u 3 1 56%	1.113400	0.721304E-06
1875.023871	8.15E-08	P	5 F1g 2 1 100%	4 F1u 1 1 53%	1.670100	0.878845E-06
1875.027772	7.99E-08	P	5 F1g 1 1 100%	4 F1u 2 1 54%	1.670100	0.878845E-06
1876.050050	8.04E-08	R	3 F2g 1 1 100%	4 F2u 3 1 58%	0.668040	0.562418E-06
1875.596805	8.05E-08	Q	4 F2g 1 1 100%	4 F2u 2 1 56%	1.113400	0.721304E-06
1875.024960	8.18E-08	P	5 F2g 1 1 100%	4 F2u 1 1 53%	1.670100	0.878845E-06
1876.159518	3.26E-08	R	4 A1g 1 1 100%	5 A1u 2 1 58%	1.113400	0.240435E-06
1874.911259	3.25E-08	P	6 A1g 1 1 100%	5 A1u 1 1 53%	2.338140	0.344917E-06
1874.906766	1.67E-07	P	6 A2g 1 1 100%	5 A2u 1 1 53%	2.338140	0.172458E-05
1876.160349	1.24E-07	R	4 E g 1 1 100%	5 E u 3 1 58%	1.113400	0.961739E-06
1875.594603	1.24E-07	Q	5 E g 1 1 100%	5 E u 2 1 56%	1.670100	0.117179E-05
1874.905335	1.32E-07	P	6 E g 1 1 100%	5 E u 1 1 53%	2.338140	0.137967E-05
1876.160109	9.03E-08	R	4 F1g 1 1 100%	5 F1u 4 1 58%	1.113400	0.721304E-06
1875.594231	9.59E-08	Q	5 F1g 1 1 100%	5 F1u 2 1 56%	1.670100	0.878845E-06
1875.600653	9.18E-08	Q	5 F1g 2 1 100%	5 F1u 3 1 56%	1.670100	0.878845E-06
1874.910287	9.67E-08	P	6 F1g 1 1 100%	5 F1u 1 1 53%	2.338140	0.103475E-05
1876.160628	9.94E-08	R	4 F2g 1 1 100%	5 F2u 4 1 58%	1.113400	0.721304E-06
1875.599973	9.54E-08	Q	5 F2g 1 1 100%	5 F2u 3 1 56%	1.670100	0.878845E-06
1874.905622	9.86E-08	P	6 F2g 1 1 100%	5 F2u 1 1 53%	2.338140	0.103475E-05
1874.909232	9.54E-08	P	6 F2g 2 1 100%	5 F2u 2 1 53%	2.338140	0.103475E-05
1875.590509	3.93E-08	Q	6 A1g 1 1 100%	6 A1u 1 1 56%	2.338140	0.344917E-06
1875.568149	1.07E-08	Q	6 A2g 1 1 100%	6 A2u 1 1 53%	2.338140	0.172458E-05
1875.599802	1.86E-07	Q	6 A2g 1 1 100%	6 A2u 2 1 56%	2.338140	0.172458E-05
1874.788769	1.85E-07	P	7 A2g 1 1 100%	6 A2u 1 1 53%	3.117520	0.198122E-05
1874.820422	1.08E-08	P	7 A2g 1 1 100%	6 A2u 2 1 56%	3.117520	0.198122E-05
1876.268503	1.58E-08	R	5 E g 1 1 100%	6 E u 2 1 56%	1.670100	0.117179E-05
1876.270431	1.40E-07	R	5 E g 1 1 100%	6 E u 3 1 58%	1.670100	0.117179E-05
1875.600463	1.36E-07	Q	6 E g 1 1 100%	6 E u 2 1 56%	2.338140	0.137967E-05
1875.602391	1.71E-08	Q	6 E g 1 1 100%	6 E u 3 1 58%	2.338140	0.137967E-05
1874.791786	1.51E-07	P	7 E g 1 1 100%	6 E u 1 1 53%	3.117520	0.158498E-05
1876.269264	1.06E-07	R	5 F1g 2 1 100%	6 F1u 4 1 58%	1.670100	0.878845E-06
1876.270470	1.14E-07	R	5 F1g 1 1 100%	6 F1u 5 1 59%	1.670100	0.878845E-06

Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule 238 UF 6

1875.591261	1.08E-07	Q	6	F1g	1	1	100%	6	F1u	3	1	56%	2.338140	0.103475E-05
1874.785749	1.17E-07	P	7	F1g	2	1	100%	6	F1u	1	1	52%	3.117520	0.118873E-05
1874.793082	1.13E-07	P	7	F1g	1	1	100%	6	F1u	2	1	53%	3.117520	0.118873E-05
1876.259941	1.70E-08	R	5	F2g	1	1	100%	6	F2u	3	1	56%	1.670100	0.878845E-06
1876.270319	9.06E-08	R	5	F2g	1	1	100%	6	F2u	5	1	58%	1.670100	0.878845E-06
1875.591901	9.88E-08	Q	6	F2g	2	1	100%	6	F2u	3	1	56%	2.338140	0.103475E-05
1875.600206	9.79E-08	Q	6	F2g	1	1	100%	6	F2u	4	1	56%	2.338140	0.103475E-05
1875.602279	1.51E-08	Q	6	F2g	1	1	100%	6	F2u	5	1	58%	2.338140	0.103475E-05
1875.602279	1.20E-08	Q	6	F2g	2	1	100%	6	F2u	5	1	58%	2.338140	0.103475E-05
1874.786262	1.16E-07	P	7	F2g	2	1	100%	6	F2u	1	1	52%	3.117520	0.118873E-05
1874.790799	1.12E-07	P	7	F2g	1	1	100%	6	F2u	2	1	53%	3.117520	0.118873E-05
1876.379765	4.49E-08	R	6	A1g	1	1	100%	7	A1u	2	1	59%	2.338140	0.344917E-06
1874.664897	4.47E-08	P	8	A1g	1	1	100%	7	A1u	1	1	52%	4.008240	0.446839E-06
1876.368323	6.81E-08	R	6	A2g	1	1	100%	7	A2u	1	1	57%	2.338140	0.172458E-05
1876.380270	1.57E-07	R	6	A2g	1	1	100%	7	A2u	2	1	58%	2.338140	0.172458E-05
1875.588943	1.57E-07	Q	7	A2g	1	1	100%	7	A2u	1	1	57%	3.117520	0.198122E-05
1875.600890	6.82E-08	Q	7	A2g	1	1	100%	7	A2u	2	1	58%	3.117520	0.198122E-05
1876.367346	3.13E-08	R	6	E g	1	1	100%	7	E u	3	1	56%	2.338140	0.137967E-05
1876.378724	1.45E-07	R	6	E g	1	1	100%	7	E u	4	1	58%	2.338140	0.137967E-05
1875.587966	1.47E-07	Q	7	E g	1	1	100%	7	E u	3	1	56%	3.117520	0.158498E-05
1875.599344	2.78E-08	Q	7	E g	1	1	100%	7	E u	4	1	58%	3.117520	0.158498E-05
1874.665522	1.78E-07	P	8	E g	1	1	100%	7	E u	1	1	52%	4.008240	0.178736E-05
1874.673740	1.71E-07	P	8	E g	2	1	100%	7	E u	2	1	52%	4.008240	0.178736E-05
1876.379350	9.00E-08	R	6	F1g	1	1	100%	7	F1u	4	1	58%	2.338140	0.103475E-05
1876.380401	4.13E-08	R	6	F1g	1	1	100%	7	F1u	5	1	57%	2.338140	0.103475E-05
1875.586907	1.32E-07	Q	7	F1g	1	1	100%	7	F1u	3	1	56%	3.117520	0.118873E-05
1875.599970	3.91E-08	Q	7	F1g	2	1	100%	7	F1u	4	1	58%	3.117520	0.118873E-05
1875.601021	9.21E-08	Q	7	F1g	2	1	100%	7	F1u	5	1	57%	3.117520	0.118873E-05
1874.665277	1.34E-07	P	8	F1g	1	1	100%	7	F1u	1	1	52%	4.008240	0.134052E-05
1874.672089	1.30E-07	P	8	F1g	2	1	100%	7	F1u	2	1	52%	4.008240	0.134052E-05
1876.367759	2.64E-08	R	6	F2g	1	1	100%	7	F2u	3	1	56%	2.338140	0.103475E-05
1876.378710	8.33E-08	R	6	F2g	1	1	100%	7	F2u	4	1	59%	2.338140	0.103475E-05
1876.378710	3.43E-08	R	6	F2g	2	1	100%	7	F2u	4	1	59%	2.338140	0.103475E-05
1876.379149	5.09E-08	R	6	F2g	2	1	100%	7	F2u	5	1	57%	2.338140	0.103475E-05
1876.380404	1.66E-08	R	6	F2g	1	1	100%	7	F2u	6	1	57%	2.338140	0.103475E-05
1876.380404	4.40E-08	R	6	F2g	2	1	100%	7	F2u	6	1	57%	2.338140	0.103475E-05
1875.588379	1.03E-07	Q	7	F2g	1	1	100%	7	F2u	3	1	56%	3.117520	0.118873E-05
1875.599330	1.17E-08	Q	7	F2g	1	1	100%	7	F2u	4	1	59%	3.117520	0.118873E-05
1875.599769	1.20E-08	Q	7	F2g	1	1	100%	7	F2u	5	1	57%	3.117520	0.118873E-05
1875.599769	5.98E-08	Q	7	F2g	2	1	100%	7	F2u	5	1	57%	3.117520	0.118873E-05
1875.601024	6.82E-08	Q	7	F2g	2	1	100%	7	F2u	6	1	57%	3.117520	0.118873E-05
1874.669097	1.27E-07	P	8	F2g	1	1	100%	7	F2u	1	1	52%	4.008240	0.134052E-05
1874.674495	1.30E-07	P	8	F2g	2	1	100%	7	F2u	2	1	52%	4.008240	0.134052E-05
1875.600995	4.93E-08	Q	8	A1g	1	1	100%	8	A1u	2	1	56%	4.008240	0.446839E-06
1874.552213	4.91E-08	P	9	A1g	1	1	100%	8	A1u	1	1	51%	5.010300	0.496609E-06
1876.448466	1.10E-08	R	7	A2g	1	1	100%	8	A2u	1	1	52%	3.117520	0.198122E-05
1876.487448	2.43E-07	R	7	A2g	1	1	100%	8	A2u	2	1	59%	3.117520	0.198122E-05
1874.555686	2.43E-07	P	9	A2g	1	1	100%	8	A2u	1	1	52%	5.010300	0.248305E-05
1874.594668	1.11E-08	P	9	A2g	1	1	100%	8	A2u	2	1	59%	5.010300	0.248305E-05
1876.473644	1.55E-08	R	7	E g	1	1	100%	8	E u	2	1	56%	3.117520	0.158498E-05
1876.488471	1.77E-07	R	7	E g	1	1	100%	8	E u	3	1	59%	3.117520	0.158498E-05
1875.582924	1.86E-07	Q	8	E g	2	1	100%	8	E u	2	1	56%	4.008240	0.178736E-05
1875.597751	1.51E-08	Q	8	E g	2	1	100%	8	E u	3	1	59%	4.008240	0.178736E-05
1875.600833	1.88E-07	Q	8	E g	1	1	100%	8	E u	4	1	56%	4.008240	0.178736E-05
1874.548113	1.91E-07	P	9	E g	1	1	100%	8	E u	1	1	52%	5.010300	0.198644E-05
1876.474727	4.82E-08	R	7	F1g	2	1	100%	8	F1u	4	1	57%	3.117520	0.118873E-05
1876.488062	5.62E-08	R	7	F1g	1	1	100%	8	F1u	5	1	59%	3.117520	0.118873E-05
1876.488062	6.64E-08	R	7	F1g	2	1	100%	8	F1u	5	1	59%	3.117520	0.118873E-05
1876.488482	9.10E-08	R	7	F1g	1	1	100%	8	F1u	6	1	59%	3.117520	0.118873E-05
1876.488482	3.38E-08	R	7	F1g	2	1	100%	8	F1u	6	1	59%	3.117520	0.118873E-05
1875.584007	1.02E-07	Q	8	F1g	2	1	100%	8	F1u	4	1	57%	4.008240	0.134052E-05
1875.597342	2.33E-08	Q	8	F1g	2	1	100%	8	F1u	5	1	59%	4.008240	0.134052E-05

Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule 238 UF 6

1875.597762	2.07E-08	Q	8	F1g	2	1	100%	8	F1u	6	1	59%	4.008240	0.134052E-05
1875.600892	1.44E-07	Q	8	F1g	1	1	100%	8	F1u	7	1	56%	4.008240	0.134052E-05
1874.543333	1.51E-07	P	9	F1g	3	1	100%	8	F1u	1	1	51%	5.010300	0.148983E-05
1874.548684	1.41E-07	P	9	F1g	2	1	100%	8	F1u	2	1	52%	5.010300	0.148983E-05
1874.553865	1.43E-07	P	9	F1g	1	1	100%	8	F1u	3	1	52%	5.010300	0.148983E-05
1876.475345	5.36E-08	R	7	F2g	2	1	100%	8	F2u	4	1	57%	3.117520	0.118873E-05
1876.487729	9.53E-08	R	7	F2g	1	1	100%	8	F2u	5	1	59%	3.117520	0.118873E-05
1876.487729	4.11E-08	R	7	F2g	2	1	100%	8	F2u	5	1	59%	3.117520	0.118873E-05
1876.489777	4.34E-08	R	7	F2g	1	1	100%	8	F2u	6	1	58%	3.117520	0.118873E-05
1876.489777	5.43E-08	R	7	F2g	2	1	100%	8	F2u	6	1	58%	3.117520	0.118873E-05
1875.582608	1.46E-07	Q	8	F2g	2	1	100%	8	F2u	3	1	56%	4.008240	0.134052E-05
1875.584625	9.21E-08	Q	8	F2g	1	1	100%	8	F2u	4	1	57%	4.008240	0.134052E-05
1875.599057	5.42E-08	Q	8	F2g	1	1	100%	8	F2u	6	1	58%	4.008240	0.134052E-05
1874.543697	1.51E-07	P	9	F2g	2	1	100%	8	F2u	1	1	51%	5.010300	0.148983E-05
1874.554866	1.45E-07	P	9	F2g	1	1	100%	8	F2u	2	1	52%	5.010300	0.148983E-05
1876.580918	2.50E-08	R	8	A1g	1	1	100%	9	A1u	2	1	57%	4.008240	0.446839E-06
1876.597685	3.03E-08	R	8	A1g	1	1	100%	9	A1u	3	1	58%	4.008240	0.446839E-06
1875.578858	3.10E-08	Q	9	A1g	1	1	100%	9	A1u	2	1	57%	5.010300	0.496609E-06
1875.595625	2.20E-08	Q	9	A1g	1	1	100%	9	A1u	3	1	58%	5.010300	0.496609E-06
1874.429005	5.17E-08	P	10	A1g	1	1	100%	9	A1u	1	1	51%	6.123700	0.545466E-06
1875.577498	2.81E-07	Q	9	A2g	1	1	100%	9	A2u	2	1	56%	5.010300	0.248305E-05
1874.420942	2.80E-07	P	10	A2g	1	1	100%	9	A2u	1	1	51%	6.123700	0.272733E-05
1876.581605	1.11E-07	R	8	E g	1	1	100%	9	E u	3	1	58%	4.008240	0.178736E-05
1876.596175	2.16E-08	R	8	E g	1	1	100%	9	E u	4	1	60%	4.008240	0.178736E-05
1876.596175	1.94E-07	R	8	E g	2	1	100%	9	E u	4	1	60%	4.008240	0.178736E-05
1876.599313	9.00E-08	R	8	E g	1	1	100%	9	E u	5	1	58%	4.008240	0.178736E-05
1876.599313	2.41E-08	R	8	E g	2	1	100%	9	E u	5	1	58%	4.008240	0.178736E-05
1875.579545	1.11E-07	Q	9	E g	1	1	100%	9	E u	3	1	58%	5.010300	0.198644E-05
1875.597253	1.08E-07	Q	9	E g	1	1	100%	9	E u	5	1	58%	5.010300	0.198644E-05
1874.420520	2.23E-07	P	10	E g	1	1	100%	9	E u	1	1	51%	6.123700	0.218187E-05
1874.434419	2.14E-07	P	10	E g	2	1	100%	9	E u	2	1	51%	6.123700	0.218187E-05
1876.580264	1.80E-08	R	8	F1g	2	1	100%	9	F1u	3	1	56%	4.008240	0.134052E-05
1876.581504	7.02E-08	R	8	F1g	1	1	100%	9	F1u	4	1	58%	4.008240	0.134052E-05
1876.581504	1.04E-08	R	8	F1g	2	1	100%	9	F1u	4	1	58%	4.008240	0.134052E-05
1876.596832	3.15E-08	R	8	F1g	1	1	100%	9	F1u	5	1	59%	4.008240	0.134052E-05
1876.596832	1.03E-07	R	8	F1g	2	1	100%	9	F1u	5	1	59%	4.008240	0.134052E-05
1876.599082	5.50E-08	R	8	F1g	1	1	100%	9	F1u	6	1	58%	4.008240	0.134052E-05
1876.599082	3.69E-08	R	8	F1g	2	1	100%	9	F1u	6	1	58%	4.008240	0.134052E-05
1875.578204	1.41E-07	Q	9	F1g	1	1	100%	9	F1u	3	1	56%	5.010300	0.148983E-05
1875.579444	8.78E-08	Q	9	F1g	2	1	100%	9	F1u	4	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1875.594772	2.44E-08	Q	9	F1g	1	1	100%	9	F1u	5	1	59%	5.010300	0.148983E-05
1875.597022	7.45E-08	Q	9	F1g	2	1	100%	9	F1u	6	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1875.601274	1.63E-07	Q	9	F1g	3	1	100%	9	F1u	7	1	56%	5.010300	0.148983E-05
1874.427143	1.56E-07	P	10	F1g	1	1	100%	9	F1u	1	1	51%	6.123700	0.163640E-05
1874.433476	1.57E-07	P	10	F1g	2	1	100%	9	F1u	2	1	51%	6.123700	0.163640E-05
1876.595884	1.39E-07	R	8	F2g	1	1	100%	9	F2u	5	1	60%	4.008240	0.134052E-05
1876.595884	1.68E-08	R	8	F2g	2	1	100%	9	F2u	5	1	60%	4.008240	0.134052E-05
1876.596627	1.32E-08	R	8	F2g	1	1	100%	9	F2u	6	1	60%	4.008240	0.134052E-05
1876.596627	1.47E-07	R	8	F2g	2	1	100%	9	F2u	6	1	60%	4.008240	0.134052E-05
1875.577831	1.56E-07	Q	9	F2g	1	1	100%	9	F2u	4	1	56%	5.010300	0.148983E-05
1875.601195	1.62E-07	Q	9	F2g	2	1	100%	9	F2u	7	1	56%	5.010300	0.148983E-05
1874.420645	1.67E-07	P	10	F2g	1	1	100%	9	F2u	1	1	51%	6.123700	0.163640E-05
1874.426082	1.59E-07	P	10	F2g	2	1	100%	9	F2u	2	1	51%	6.123700	0.163640E-05
1874.435366	1.60E-07	P	10	F2g	3	1	100%	9	F2u	3	1	51%	6.123700	0.163640E-05
1876.686857	1.82E-08	R	9	A1g	1	1	100%	10	A1u	1	1	57%	5.010300	0.496609E-06
1876.706746	4.38E-08	R	9	A1g	1	1	100%	10	A1u	2	1	59%	5.010300	0.496609E-06
1875.573457	4.37E-08	Q	10	A1g	1	1	100%	10	A1u	1	1	57%	6.123700	0.545466E-06
1875.593346	1.83E-08	Q	10	A1g	1	1	100%	10	A1u	2	1	59%	6.123700	0.545466E-06
1876.704098	3.04E-07	R	9	A2g	1	1	100%	10	A2u	2	1	60%	5.010300	0.248305E-05
1875.527053	1.29E-08	Q	10	A2g	1	1	100%	10	A2u	1	1	50%	6.123700	0.272733E-05
1875.601704	2.97E-07	Q	10	A2g	1	1	100%	10	A2u	3	1	56%	6.123700	0.272733E-05
1874.302313	2.91E-07	P	11	A2g	1	1	100%	10	A2u	1	1	50%	7.348440	0.296663E-05

Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule 238 UF 6

1874.376964	1.22E-08	P	11	A2g	1	1	100%	10	A2u	3	1	56%	7.348440	0.296663E-05
1876.685788	3.72E-08	R	9	E g	1	1	100%	10	E u	3	1	56%	5.010300	0.198644E-05
1876.704372	1.99E-07	R	9	E g	1	1	100%	10	E u	4	1	59%	5.010300	0.198644E-05
1875.572388	2.08E-07	Q	10	E g	2	1	100%	10	E u	3	1	56%	6.123700	0.218187E-05
1875.590972	3.25E-08	Q	10	E g	2	1	100%	10	E u	4	1	59%	6.123700	0.218187E-05
1875.601774	2.39E-07	Q	10	E g	1	1	100%	10	E u	5	1	56%	6.123700	0.218187E-05
1874.304063	2.31E-07	P	11	E g	2	1	100%	10	E u	1	1	50%	7.348440	0.237330E-05
1874.313998	2.31E-07	P	11	E g	1	1	100%	10	E u	2	1	51%	7.348440	0.237330E-05
1874.366232	1.36E-08	P	11	E g	1	1	100%	10	E u	4	1	59%	7.348440	0.237330E-05
1876.685912	1.51E-08	R	9	F1g	2	1	100%	10	F1u	4	1	57%	5.010300	0.148983E-05
1876.685912	3.65E-08	R	9	F1g	3	1	100%	10	F1u	4	1	57%	5.010300	0.148983E-05
1876.686868	1.33E-08	R	9	F1g	2	1	100%	10	F1u	5	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1876.686868	6.95E-08	R	9	F1g	3	1	100%	10	F1u	5	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1876.703601	9.76E-08	R	9	F1g	1	1	100%	10	F1u	6	1	60%	5.010300	0.148983E-05
1876.703601	7.73E-08	R	9	F1g	2	1	100%	10	F1u	6	1	60%	5.010300	0.148983E-05
1876.705214	6.01E-08	R	9	F1g	1	1	100%	10	F1u	7	1	59%	5.010300	0.148983E-05
1876.705214	6.66E-08	R	9	F1g	2	1	100%	10	F1u	7	1	59%	5.010300	0.148983E-05
1876.705214	1.52E-08	R	9	F1g	3	1	100%	10	F1u	7	1	59%	5.010300	0.148983E-05
1876.708695	1.19E-08	R	9	F1g	1	1	100%	10	F1u	8	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1876.708695	6.09E-08	R	9	F1g	3	1	100%	10	F1u	8	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1875.572512	1.26E-07	Q	10	F1g	2	1	100%	10	F1u	4	1	57%	6.123700	0.163640E-05
1875.573468	7.71E-08	Q	10	F1g	1	1	100%	10	F1u	5	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1875.573468	1.69E-08	Q	10	F1g	2	1	100%	10	F1u	5	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1875.591814	3.55E-08	Q	10	F1g	2	1	100%	10	F1u	7	1	59%	6.123700	0.163640E-05
1875.595295	9.92E-08	Q	10	F1g	1	1	100%	10	F1u	8	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1874.296603	1.84E-07	P	11	F1g	3	1	100%	10	F1u	1	3	50%	7.348440	0.177998E-05
1874.306872	1.69E-07	P	11	F1g	2	1	100%	10	F1u	2	1	51%	7.348440	0.177998E-05
1874.314664	1.75E-07	P	11	F1g	1	1	100%	10	F1u	3	1	51%	7.348440	0.177998E-05
1876.686915	1.09E-07	R	9	F2g	2	1	100%	10	F2u	5	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1876.704154	1.70E-07	R	9	F2g	1	1	100%	10	F2u	6	1	60%	5.010300	0.148983E-05
1876.709168	6.66E-08	R	9	F2g	2	1	100%	10	F2u	7	1	58%	5.010300	0.148983E-05
1875.572190	1.79E-07	Q	10	F2g	3	1	100%	10	F2u	4	1	56%	6.123700	0.163640E-05
1875.573515	7.37E-08	Q	10	F2g	2	1	100%	10	F2u	5	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1875.595768	1.07E-07	Q	10	F2g	2	1	100%	10	F2u	7	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1875.601751	1.79E-07	Q	10	F2g	1	1	100%	10	F2u	8	1	56%	6.123700	0.163640E-05
1874.296797	1.84E-07	P	11	F2g	3	1	100%	10	F2u	1	3	50%	7.348440	0.177998E-05
1874.303354	1.73E-07	P	11	F2g	2	1	100%	10	F2u	2	1	50%	7.348440	0.177998E-05
1874.312954	1.76E-07	P	11	F2g	1	1	100%	10	F2u	3	1	51%	7.348440	0.177998E-05
1876.810684	6.31E-08	R	10	A1g	1	1	100%	11	A1u	3	1	60%	6.123700	0.545466E-06
1874.171505	6.65E-08	P	12	A1g	1	1	100%	11	A1u	1	3	50%	8.684520	0.640103E-06
1874.193600	6.30E-08	P	12	A1g	2	1	100%	11	A1u	2	1	50%	8.684520	0.640103E-06
1876.791333	2.29E-07	R	10	A2g	1	1	100%	11	A2u	2	1	59%	6.123700	0.272733E-05
1876.819543	1.03E-07	R	10	A2g	1	1	100%	11	A2u	3	1	57%	6.123700	0.272733E-05
1875.566593	1.08E-07	Q	11	A2g	1	1	100%	11	A2u	2	1	59%	7.348440	0.296663E-05
1875.594803	2.21E-07	Q	11	A2g	1	1	100%	11	A2u	3	1	57%	7.348440	0.296663E-05
1874.191385	3.22E-07	P	12	A2g	1	1	100%	11	A2u	1	3	50%	8.684520	0.320052E-05
1874.258723	1.41E-08	P	12	A2g	1	1	100%	11	A2u	3	1	57%	8.684520	0.320052E-05
1876.790586	1.07E-07	R	10	E g	1	1	100%	11	E u	3	1	58%	6.123700	0.218187E-05
1876.791543	6.99E-08	R	10	E g	1	1	100%	11	E u	4	1	57%	6.123700	0.218187E-05
1876.791543	2.28E-08	R	10	E g	2	1	100%	11	E u	4	1	57%	6.123700	0.218187E-05
1876.811808	2.32E-07	R	10	E g	2	1	100%	11	E u	5	1	60%	6.123700	0.218187E-05
1876.819013	7.94E-08	R	10	E g	1	1	100%	11	E u	6	1	57%	6.123700	0.218187E-05
1875.519439	1.08E-08	Q	11	E g	2	1	100%	11	E u	2	1	50%	7.348440	0.237330E-05
1875.565846	1.27E-07	Q	11	E g	1	1	100%	11	E u	3	1	58%	7.348440	0.237330E-05
1875.565846	3.05E-08	Q	11	E g	2	1	100%	11	E u	3	1	58%	7.348440	0.237330E-05
1875.566803	1.15E-07	Q	11	E g	1	1	100%	11	E u	4	1	57%	7.348440	0.237330E-05
1875.566803	6.12E-08	Q	11	E g	2	1	100%	11	E u	4	1	57%	7.348440	0.237330E-05
1875.587068	2.09E-08	Q	11	E g	1	1	100%	11	E u	5	1	60%	7.348440	0.237330E-05
1875.594273	1.67E-07	Q	11	E g	2	1	100%	11	E u	6	1	57%	7.348440	0.237330E-05
1874.171720	2.67E-07	P	12	E g	1	1	100%	11	E u	1	3	50%	8.684520	0.256041E-05
1874.183359	2.45E-07	P	12	E g	2	1	100%	11	E u	2	1	50%	8.684520	0.256041E-05
1874.258193	1.40E-08	P	12	E g	2	1	100%	11	E u	6	1	57%	8.684520	0.256041E-05

Chapitre III : Prédiction du spectre infrarouge des deux bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule 238 UF 6

1876.791915	4.63E-08	R	10	F1g	1	1	100%	11	F1u	5	1	57%	6.123700	0.163640E-05
1876.791915	2.33E-08	R	10	F1g	2	1	100%	11	F1u	5	1	57%	6.123700	0.163640E-05
1876.811113	6.34E-08	R	10	F1g	1	1	100%	11	F1u	6	1	60%	6.123700	0.163640E-05
1876.811113	1.21E-07	R	10	F1g	2	1	100%	11	F1u	6	1	60%	6.123700	0.163640E-05
1876.815002	7.72E-08	R	10	F1g	1	1	100%	11	F1u	7	1	59%	6.123700	0.163640E-05
1876.815002	5.26E-08	R	10	F1g	2	1	100%	11	F1u	7	1	59%	6.123700	0.163640E-05
1875.566173	1.89E-07	Q	11	F1g	1	1	100%	11	F1u	4	1	56%	7.348440	0.177998E-05
1875.567175	1.29E-07	Q	11	F1g	2	1	100%	11	F1u	5	1	57%	7.348440	0.177998E-05
1875.590262	7.02E-08	Q	11	F1g	2	1	100%	11	F1u	7	1	59%	7.348440	0.177998E-05
1875.602420	1.95E-07	Q	11	F1g	3	1	100%	11	F1u	8	1	56%	7.348440	0.177998E-05
1874.171645	2.00E-07	P	12	F1g	1	1	100%	11	F1u	1	3	50%	8.684520	0.192031E-05
1874.179732	1.89E-07	P	12	F1g	2	1	100%	11	F1u	2	3	50%	8.684520	0.192031E-05
1874.193001	1.89E-07	P	12	F1g	3	1	100%	11	F1u	3	3	50%	8.684520	0.192031E-05
1876.790586	5.57E-08	R	10	F2g	1	1	100%	11	F2u	4	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1876.790586	2.63E-08	R	10	F2g	2	1	100%	11	F2u	4	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1876.791428	7.84E-08	R	10	F2g	1	1	100%	11	F2u	5	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1876.791428	2.58E-08	R	10	F2g	2	1	100%	11	F2u	5	1	58%	6.123700	0.163640E-05
1876.811073	1.86E-07	R	10	F2g	3	1	100%	11	F2u	6	1	61%	6.123700	0.163640E-05
1876.812987	1.31E-07	R	10	F2g	2	1	100%	11	F2u	7	1	59%	6.123700	0.163640E-05
1876.819210	5.96E-08	R	10	F2g	1	1	100%	11	F2u	8	1	57%	6.123700	0.163640E-05
1875.565846	1.07E-07	Q	11	F2g	1	1	100%	11	F2u	4	1	58%	7.348440	0.177998E-05
1875.565846	1.18E-08	Q	11	F2g	2	1	100%	11	F2u	4	1	58%	7.348440	0.177998E-05
1875.566688	3.94E-08	Q	11	F2g	1	1	100%	11	F2u	5	1	58%	7.348440	0.177998E-05
1875.566688	5.56E-08	Q	11	F2g	2	1	100%	11	F2u	5	1	58%	7.348440	0.177998E-05
1875.588247	4.58E-08	Q	11	F2g	1	1	100%	11	F2u	7	1	59%	7.348440	0.177998E-05
1875.594470	1.28E-07	Q	11	F2g	2	1	100%	11	F2u	8	1	57%	7.348440	0.177998E-05
1875.602394	1.94E-07	Q	11	F2g	3	1	100%	11	F2u	9	1	56%	7.348440	0.177998E-05
1874.178437	1.89E-07	P	12	F2g	1	1	100%	11	F2u	1	3	50%	8.684520	0.192031E-05
1874.184141	1.81E-07	P	12	F2g	2	1	100%	11	F2u	2	1	50%	8.684520	0.192031E-05
1874.192294	1.87E-07	P	12	F2g	3	1	100%	11	F2u	3	3	50%	8.684520	0.192031E-05
1875.559696	7.15E-08	Q	12	A1g	2	1	100%	12	A1u	2	1	55%	8.684520	0.640103E-06
1875.603207	7.00E-08	Q	12	A1g	1	1	100%	12	A1u	3	1	56%	8.684520	0.640103E-06
1874.054792	6.86E-08	P	13	A1g	1	1	100%	12	A1u	1	3	50%	10.131940	0.685721E-06
1876.845173	1.59E-08	R	11	A2g	1	1	100%	12	A2u	1	3	50%	7.348440	0.296663E-05
1876.894676	1.26E-07	R	11	A2g	1	1	100%	12	A2u	2	1	57%	7.348440	0.296663E-05
1876.921329	2.22E-07	R	11	A2g	1	1	100%	12	A2u	3	1	59%	7.348440	0.296663E-05
1875.509093	2.16E-08	Q	12	A2g	1	1	100%	12	A2u	1	3	50%	8.684520	0.320052E-05
1875.558596	2.35E-07	Q	12	A2g	1	1	100%	12	A2u	2	1	57%	8.684520	0.320052E-05
1875.585249	1.06E-07	Q	12	A2g	1	1	100%	12	A2u	3	1	59%	8.684520	0.320052E-05
1874.061673	3.24E-07	P	13	A2g	1	1	100%	12	A2u	1	3	50%	10.131940	0.342861E-05
1874.137829	3.57E-08	P	13	A2g	1	1	100%	12	A2u	3	1	59%	10.131940	0.342861E-05
1876.896107	1.40E-08	R	11	E g	1	1	100%	12	E u	3	1	58%	7.348440	0.237330E-05
1876.896107	1.12E-07	R	11	E g	2	1	100%	12	E u	3	1	58%	7.348440	0.237330E-05
1876.917571	2.43E-07	R	11	E g	1	1	100%	12	E u	4	1	61%	7.348440	0.237330E-05
1876.917571	3.48E-08	R	11	E g	2	1	100%	12	E u	4	1	61%	7.348440	0.237330E-05
1876.923637	2.68E-08	R	11	E g	1	1	100%	12	E u	5	1	59%	7.348440	0.237330E-05
1876.923637	1.33E-07	R	11	E g	2	1	100%	12	E u	5	1	59%	7.348440	0.237330E-05
1875.500542	1.08E-08	Q	12	E g	1	1	100%	12	E u	1	3	50%	8.684520	0.256041E-05
1875.560027	1.64E-07	Q	12	E g	2	1	100%	12	E u	3	1	58%	8.684520	0.256041E-05
1875.587557	1.23E-07	Q	12	E g	2	1	100%	12	E u	5	1	59%	8.684520	0.256041E-05
1875.603185	2.80E-07	Q	12	E g	1	1	100%	12	E u	6	1	56%	8.684520	0.256041E-05
1874.053122	2.71E-07	P	13	E g	2	1	100%	12	E u	1	3	50%	10.131940	0.274289E-05
1874.070682	2.71E-07	P	13	E g	1	1	100%	12	E u	2	3	50%	10.131940	0.274289E-05
1874.155765	1.11E-08	P	13	E g	2	1	100%	12	E u	6	1	56%	10.131940	0.274289E-05

III -4-3 Les niveaux d'énergies réduits de la bande  $3\nu_3$  de molécule  $^{238}\text{UF}_6$

Les niveaux d'énergies réduits sont obtenus en utilisant la formule :

$$E_{red} = E - B_0J(J + 1) \quad \text{(III -4)}$$

$B_0$  est la valeur du paramètre qui correspond à  $i=1$  dans le tableau (III - 4) :

$$t_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)a_1\Gamma_{1\chi}a_2\Gamma_{2\chi}} = B_0 \quad \text{(III -5)}$$

$$t_{\{0\}\{0\}}^{2(0,0A1g)A_{1g}A_{1g}} = 0.55670000000E - 01 \quad \text{(III -6)}$$

La figure, ci-dessous, illustre le diagramme des niveaux d'énergie rovibrationnels de la bande  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  pour la valeur de  $J$  max= 120.

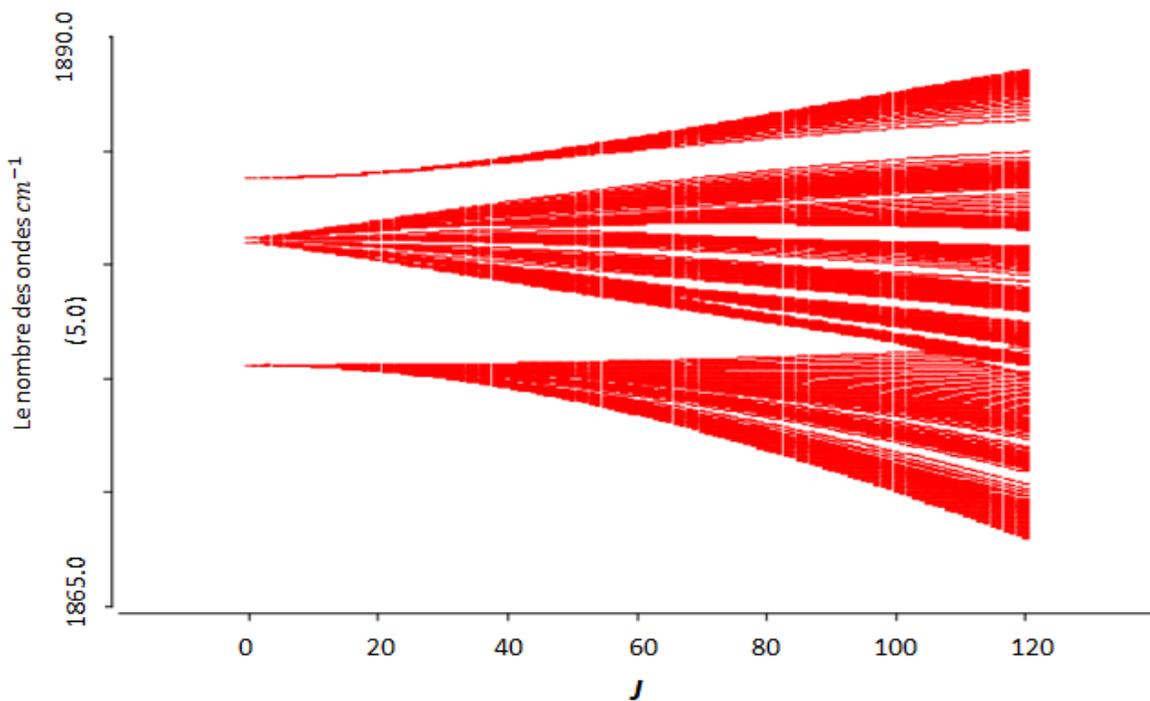


Fig III - 5 : Répartitions des niveaux d'énergies réduits de niveau  $3\nu_3$  de molécule  $^{238}\text{UF}_6$

*Conclusion*  
*général*

## Conclusion général

Dans ce travail, on s'est proposé d'étudier les fréquences de la bande  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  ; en utilisant une forme tensorielle de l'Hamiltonien des molécules octaédrique.

Pour ce faire, il est nécessaire d'utiliser la notion de symétrie moléculaire et la théorie de groupes, que nous permet de déterminer les modes normaux de vibration de ce type de molécule.

L'Hamiltonien utilisé est développé à l'ordre :

- Pour la bande  $\nu_3$  - GS : l'ordre de développement de l'Hamiltonien est 3 ; contenant 8 paramètres dont 01 est relatif au niveau GS.
- Pour la bande  $3\nu_3$  - GS : l'ordre de développement de l'Hamiltonien est 3.

Ce jeu de paramètres nous a permis de calculer les deux spectres en utilisant le logiciel XTDS dans des fenêtres ( $620\text{cm}^{-1}$ –  $634\text{cm}^{-1}$ ) et ( $1854\text{cm}^{-1}$ -  $1897\text{cm}^{-1}$ ) pour les bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  respectivement.

Enfin, Ce travail présente un guide pour ceux qui veulent étudier la spectroscopie Infrarouge à haute résolution.

***Références***

***Bibliographiques***

### Références Bibliographiques

- [1] [http://www.biophysique.sitew.com/fs/Root/d5cfeSPECTROSCOPIE\\_MOLECULAIRE.pdf](http://www.biophysique.sitew.com/fs/Root/d5cfeSPECTROSCOPIE_MOLECULAIRE.pdf)
- [2] [https://www.mediachimie.org/sites/default/files/NAT-1reG\\_D5SpectroscopieIR.pdf](https://www.mediachimie.org/sites/default/files/NAT-1reG_D5SpectroscopieIR.pdf).
- [3] D. S. Scholland, «La symétrie moléculaire » ; collection "Enseignement de Chimie" GOULLIER VILARS.
- [4] M. Rotger, V. Boudon et M. Loëte, "Spectroscopy of XY<sub>2</sub>Z<sub>2</sub> (C<sub>2v</sub>) Molecules: A Tensorial Formalism Adapted to the O(3) ⊃ Td ⊃ C<sub>2v</sub> Chain. Application to the Ground State of SO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>", J.Mol. Spectrosc. 216, 297-307, (2002).
- [5] M. Rotger, V. Boudon and M. Loëte, "Spectroscopy of XY<sub>5</sub>Z (C<sub>4v</sub>) Molecules: A Tensorial Formalism Adapted to the O(3) ⊃ Oh ⊃ C<sub>4v</sub> Chain", Journal of Molecular Spectroscopy 200, 123-130 (2000).
- [6] A. El Hilali, V. Boudon and M. Loëte, "Spectroscopy of XY<sub>3</sub>Z (C<sub>3v</sub>) Molecules: A Tensorial Formalism Adapted to the O(3) ⊃ C<sub>∞v</sub> ⊃ C<sub>3v</sub> Group Chain", J. Mol. Spectrosc. Article accepté (2005).
- [7] Ch. Wenger, V. Boudon, J.-P. Champion and G. Pierre, "Highly-spherical Top Data System (HTDS) software for spectrum simulation of octahedral XY<sub>6</sub> molecules", J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 66, 1-16 (2000).
- [8] Ch. Wenger, M. Rotger et V. Boudon, "C<sub>4v</sub> Top Data System (C<sub>4v</sub> TDS) software for infrared spectrum simulation of XY<sub>5</sub>Z symmetric molecules", J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 74, 621-636 (2002).
- [9] Ch. Wenger et J.-P. Champion, "Spherical top data system (STDS) software for the simulation of spherical top spectra", J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 59, 471-480 (1998).
- [10] P. Barchwitz, « Spectroscopie atomique et moléculaire ». Edition Masson (1971)
- [11] D. S. Scholland, «La symétrie moléculaire » ; collection "Enseignement de chimie" GOULLIER VILARS
- [12] Symétrie moléculaire, théorie des groupes Applications aux petites molécules, Hubert Klein, 2008 [https://cdn-cms.f-static.com/uploads/181234/normal\\_584b85aa3b85e.pdf](https://cdn-cms.f-static.com/uploads/181234/normal_584b85aa3b85e.pdf)
- [13] D. S. Scholland. La symétrie moléculaire. collection, Enseignement de chimie.
- [14] M. Meskine, Thèse de DOCTORAT, Université de SAIDA, Janvier (2015). <http://rdoc.univ-sba.dz/handle/123456789/1547>
- [15] Spectroscopie infrarouge. exposé de C.A.D.D. O.DOUNET ; M. RECHACHE
- [16] C. MEYER, " Spectroscopie Infrarouge et Raman ", Faculté de sciences, Orsay, 1994.
- [17] " Spectroscopie Infra rouge, UV-Visible et Résonance Magnétique Nucléaire ", Faculté de Science, Orsay, 1994.
- [18] D.R. BROWNING. Méthodes spectroscopiques. Masson et C<sup>ie</sup> Editeurs, Paris : 1974, p49 .
- [19] Born, M., Oppenheimer Ann, J.R. Physik. 84, 457, (1927).
- [20] H. Pickett. J. Mol. Spectrosc, 148 :371-377, (1991).
- [21] Jahn. Van Velck. Phys. Rev, 33 :467, (1929).
- [22] N. Cheblal, M. Loëte, and V. Boudon. J. Mol. Spectrosc, 197 :222-231, (2003).
- [23] J. Moret-Bailly, Cah. Phys. 15, 334 (1965).
- [24] W. H. Shaffer, H. H. Nielsen, and L. H. Thomas. Phys. Rev, 56 :895, (1939).
- [25] B. I. Zhilinskii. Opt. Spectrosc. USSR, 56 :474, (1981).
- [26] Jean Paul Champion. PhD thesis, université de Bourgogne, Dijon, France, (1978).

## Références Bibliographiques

---

- [27] N. Cheblal, M. Loete, and V. Boudon. *J. Mol. Spectrosc.*, 197 :222–231, (2003).
- [28] M. Loete. *Can. J. Phys.*, 61 :1242, (1983).
- [29] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, (1982).
- [30] A. J. Stone. *Mol. Phys.*, 29 :1461–1471, (1995).
- [31] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, (1982)
- [32] C. Wenger, J.-P. Champion, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 59(3–5) (1998) 471–480.
- [33] C. Wenger, V. Boudon, J.-P. Champion, G. Pierre, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 66 (1) (2000) 1–16.
- [34] J.-P. Champion, M. Loete, G. Pierre, Spherical top spectra, in: K.N.Rao, A. Weber (Eds.), *Spectroscopy of the Earth's Atmosphere and Interstellar Medium*, Academic Press, San Diego, 1992, pp. 339–422.
- [35] V. Boudon, J.-P. Champion, T. Gabard, M. Loete, F. Michelot, G. Pierre, M. Rotger, C. Wenger, M. Rey, *J. Mol. Spectrosc.* 228 (2004)620–634.
- [36] M. Loete, Thèse d'état, Université de Bourgogne, Dijon, France, (1961).
- [37] Ch. Wenger, V. Boudon, J.-P. Champion and G. Pierre, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Volume 66, Issue 1, p: 1-16 (2000)  
[https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(99\)00161-2](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(99)00161-2)
- [38] Ch. Wenger and J.-P. Champion, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Volume 59, Issues 3–5, p:471-480 (1998).[https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(97\)00106-4](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(97)00106-4)
- [39] Ch. Wenger, W. Raballand, M. Rotger and V. Boudon, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Volume 95, Issue 4, p: 521-538 (2005).<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2004.11.012>
- [40] Ch. Wenger, M. Rotger and V. Boudon, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Volume 74, Issue 5, p :621-636 (2002).[https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(01\)00275-8](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00275-8)
- [41] Ch. Wenger, M. Rotger and V. Boudon, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Volume 93, Issue 4, p:429-446 (2005)<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2004.08.039>.

### ملخص:

في هذا العمل شرعنا في دراسة ترددات النطاقين  $\nu_3$  و  $3\nu_3$  لجزيء  $^{238}\text{UF}_6$  ؛ استخدام شكل موتر من جزيئات هاملموني ثماني السطوح. للقيام بذلك ، من الضروري استخدام مفهوم التناظر الجزيئي ونظرية المجموعات ، مما يسمح لنا بتحديد الأوضاع الطبيعية للاهتزاز لهذا النوع من الجزيئات.

يتم توسيع معامل هاملتون المستخدم إلى الترتيب:

❖ بالنسبة إلى نطاق GS:  $\nu_3$  - ترتيب التمدد في معامل هاملتون 3 ؛ تحتوي على 8 معاملات منها 01 نسبي أو مستوى GS.

بالنسبة إلى نطاق GS -  $3\nu_3$  : ترتيب تطوير معامل هاملتون هو 3. سمحت لنا هذه المجموعة من المعاملات بحساب الطيفين باستخدام برنامج XTDS في النوافذ (  $620\text{ cm}^{-1} - 634\text{ cm}^{-1}$  ) و (  $1854\text{ cm}^{-1} - 1897\text{ cm}^{-1}$  ) للنطاقين  $\nu_3$  و  $3\nu_3$  على التوالي. أخيراً ، يقدم هذا العمل دليلاً لأولئك الذين يرغبون في دراسة التحليل الطيفي عالي الدقة بالأشعة تحت الحمراء.

**الكلمات المفتاحية :**  $^{238}\text{UF}_6$  . الطيف بالأشعة تحت الحمراء . شكلية ثماني السطوح . تحليل خط الاهتزازات . SPVW . XTDS .

**Résumé :** Dans ce travail, on s'est proposé d'étudier les fréquences de la bande  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  de la molécule  $^{238}\text{UF}_6$  ; en utilisant une forme tensorielle de l'Hamiltonien des molécules octaédrique. Pour ce faire, il est nécessaire d'utiliser la notion de symétrie moléculaire et la théorie de groupes, que nous permet de déterminer les modes normaux de vibration de ce types de molécule.

L'Hamiltonien utilisé est développé à l'ordre :

- Pour la bande  $\nu_3$  - GS : l'ordre de développement de L'Hamiltonien est 3 ; contenant 8 paramètres dont 01 est relatif ou niveau GS .
- Pour la bande  $3\nu_3$  -GS : l'ordre de développement de L'Hamiltonien est 3

Ce jeu de paramètre nous a permet de calculer les deux spectres en utilisant le logiciel XTDS dans des fenêtres (  $620\text{ cm}^{-1} - 634\text{ cm}^{-1}$  ) et (  $1854\text{ cm}^{-1} - 1897\text{ cm}^{-1}$  ) pour les bandes  $\nu_3$  et  $3\nu_3$  respectivement.

**Mots clés :**  $^{238}\text{UF}_6$  , Spectre infrarouge haute résolution. Forme octaédrique. Analyse de ligne de vibration XTDS et SPVIEW

**Abstract :** In this work we set out to study the frequencies of band  $\nu_3$  and  $3\nu_3$  of the  $^{238}\text{UF}_6$  molecule; use a tensor form of the Hamiltonian of octahedral molecules. To do this, it is necessary to use the notion of molecular symmetry and the theory of groups, which allows us to determine the normal modes of vibration of this type of molecule. The Hamiltonian used is expanded to the order:

- For the bund  $\nu_3$  - GS: the order of expansion of the Hamiltonian is 3; containing 8 parameters of which 01 is relative or GS level.
- For the  $3\nu_3$  - GS bund: the order of development of the Hamiltonian is 3.

This set of parameters allowed us to calculate the two spectra using the XTDS software in windows (  $620\text{ cm}^{-1} - 634\text{ cm}^{-1}$  ) et (  $1854\text{ cm}^{-1} - 1897\text{ cm}^{-1}$  ) for the bands  $\nu_3$  and  $3\nu_3$  respectively.

Finally, This work presents a guide for those who want to study high resolution infrared spectroscopy.

**Key words :**  $^{238}\text{UF}_6$  , high-resolution infrared spectra, octaedral tensorial formalism, RMS, XTDS