Laboratoire de Physique Quantique

Code du LR /UR/USCR : 99 UR/13-17

Année de création : 1999

Domaine d'activité :

- Physique quantique des molécules et des agrégats.
- Physique statistique quantique appliqué au phénomène d'adsorption.

Responsable : OUJIA Brahim
Nombre de chercheurs : 23
Nombre d'encadreurs : 9 (3 professeurs+ 6 maîtres assistants)
Nombre de chercheurs confirmés avec thèses : 10
Nombre de thésards : 7
Nombre de mastères : 6

Espace occupé en m2 : 50 m2

Budget annuel moyen depuis la création : 15 000 Dinars

Thématiques de recherches
Principales thématiques avec un cours du résumé :

L'unité de recherche de physique quantique UR/13-17 regroupe une quinzaine d'enseignants-chercheurs et de thésards. Les thématiques de recherche développées sont à la frontière de la physique et de la chimie. Cette équipe de théoriciens se consacre à développer des modèles et des moyens de calculs permettant de mieux comprendre la structure électronique des atomes et des molécules.

L'activité de l'UR/13-17 recouvre un spectre assez large de thèmes de recherche tels que la spectroscopie fine, la modélisation des liaisons hydrogène et la modélisation des phénomènes d'adsorption. On traite à la fois la structure électronique des molécules diatomiques et celle des systèmes étendus telles que les macromolécules ou les capteurs biologiques. On utilise à la fois des calculs théoriques très sophistiqués (basés sur la mécanique quantique) qui s'approchent de la précision expérimentale et des modèles statistiques basés sur la mécanique statistique quantique.

Thématique 1 : Spectroscopie fine

Cet axe de recherche porte sur les propriétés structurales et électroniques de systèmes moléculaires et ce en utilisant des calculs exact (ab-initio) à la précision de l'expérimental. Il s'agit d'étudier des systèmes moléculaires en utilisant les méthodes de pseudo-potentiels qui nous permet de réaliser des calculs très poussés. Nous déterminons par exemple les surfaces d'énergie potentielle, les constantes spectroscopiques, les niveaux de vibrations et les durées de vie radiative et non radiative … Les études réalisées concernant non seulement l'état fondamentale mais aussi les états les plus excités. L'intérêt potentiel de cet axe de recherche réside dans la prévision et l'explication de nombreux phénomènes expérimentaux tels que les mécanismes réactionnels et la stabilité des différents composés. Parmi les autres intérêts on peut citer l'astrophysique où la spectroscopie joue un rôle primordial.

Thématique 2 : Etude et modélisation des phénomènes d'adsorption

L'axe de recherche portant sur l'étude des phénomènes de surfaces est consacré à la modélisation des phénomènes d'adsorption en phase gazeuse en se basant sur un traitement de physique statistique. Divers applications (domaine textile, gustation et olfaction) ont été étudiées et les modèles développés par notre équipe de recherche se révélant intéressants vu l'importance de contribution dans l'interprétation du mécanisme physique à l'échelle microscopique moyennant des données macroscopiques. Dans le but d'élargir le champ d'investigation dans ce thème de recherche, des manipulations ont été mises en place afin de réaliser des isothermes expérimentales en vue de concevoir des capteurs biologiques modélisant les sens d'olfaction et de gustation.

Thématique 3 : La liaison hydrogène

Cet axe de recherche porte sur la reconstitution théorique des profils infrarouge de l'élongation de vibration X-H dans le cadre conjoint de la théorie de réponse linéaire de Kubo et de la théorie quantique du couplage anharmonique fort de Witkowski et de Maréchal. Nous avons étudiés en particulier le rôle respective de l'anharmonicité des modes de vibration et des relaxations tant directe qu'indirecte. Nous envisagerons à moyen terme de rendre accessible à la communauté scientifique et notamment aux expérimentateurs, un outil informatique théorique souple et à usage simple de modélisation des spectres, dont la mise au point est envisagée par la donnée d'une théorie quantique complète et générale de la densité spectrale infrarouge de l' élongation de vibration X-H qui unifie les différentes théories et les niveaux des approximations, mais qui soit le plus convivial et le plus élémentaire dans son utilisation, et ce afin de permettre le va-et-vient entre la théorie et l'expérience.

Principaux résultats de recherche

Nombre d'institutions au doctorat :

Nombre de thèses soutenues : 5

Nombre de mastères soutenus : 16

Nombre d'articles: 22

Nombre de communications : 30

Contrats de recherches :

- **2 projets (contrats) avec l'Espagne Responsables Pr Ben Lamine Abdelmottaleb, Pr Oujia Brahim).**
- **Un contrat CNRS-DGRST.**

Equipements / Prototypes développés :12 PC / 4 imprimantes / 1 microbalance à quartz.