

Spectroscopie millimétrique de CH_3ReO_3

Thérèse Huet, Laurent Margulès, Roman Motiyenko

ANR NCPCHEM, Rennes, 5 octobre 2011



Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules
Tél. +33 (0)320 336460 | Fax. +33 (0) 320 337020
Therese.Huet@univ-lille1.fr | www.univ-lille1.fr



Revue des résultats obtenus

• Spectroscopie micro-onde à Lille

- $\text{CH}_3^{185}\text{ReO}_3$ et $\text{CH}_3^{187}\text{ReO}_3$
 - $J''=0,1,2$; Trot = 2 K. Attribution & modélisation

• Spectroscopie infrarouge à Paris

- $\text{CH}_3^{187}\text{ReO}_3$
 - $J''=0-10$; Trot = 20 K. Attribution & modélisation

• Spectroscopie infrarouge à Villetaneuse

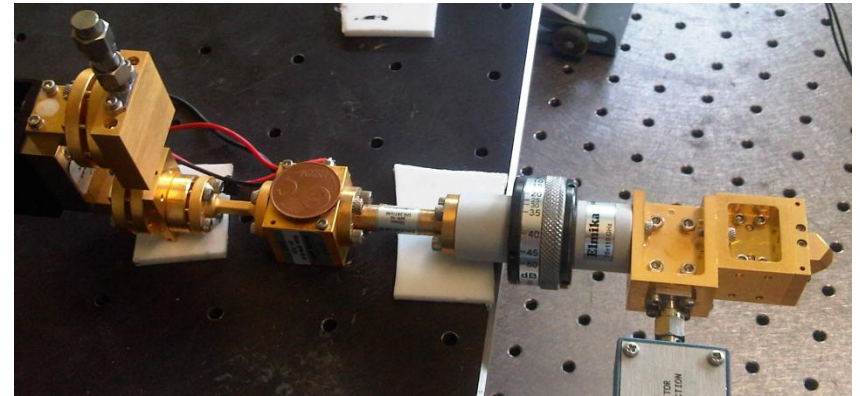
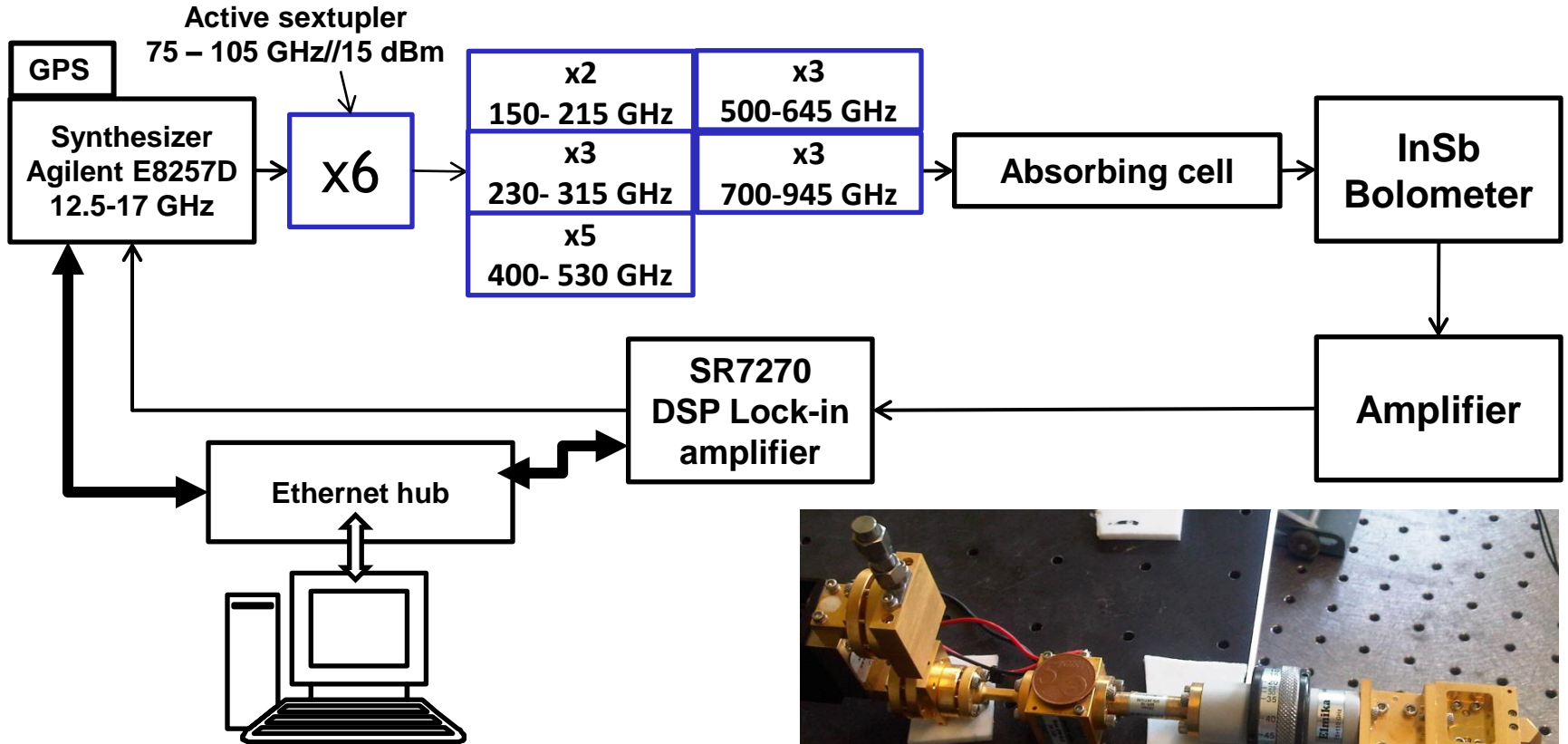
- $\text{CH}_3^{185}\text{ReO}_3$ et $\text{CH}_3^{187}\text{ReO}_3$
 - $J''=?$ Trot = 300 K et Trot = 15 K. Attribution & modélisation ?

• Objectif : Attribuer les spectres LPL

Stratégie

- Caractériser la structure de rotation / hyperfine de l'état fondamental à J, K élevés
 - $\text{CH}_3^{185}\text{ReO}_3$ et $\text{CH}_3^{187}\text{ReO}_3$
 - Spectres millimétriques de rotation pure à T = 300 K. **Ce travail.**
- ↓
- Fixer la valeur des paramètres de l'état fondamental
- ↓
- Identifier les raies IR (LPL) + modélisation
 - $\text{CH}_3^{185}\text{ReO}_3$ et $\text{CH}_3^{187}\text{ReO}_3$

Spectromètre 150 - 975 GHz « sources solides »



Conditions expérimentales

- Spectromètre large bande

- **CH₃ReO₃ : sélection de structures J, K pertinentes (10³ raies ...)**

- Enregistrement des structures ^qR(J,K=0-J) pour J = 21, 24, 28, 33, 38, 42. Gamme 150-300 GHz (deux premiers étages de multiplication de fréquences), possibilité d'atteindre 975 GHz (J élevé) si nécessaire.

- **P = 0.020 mbar ; T = 300 K**

- **Technique de modulation de phase (5 KHz, profondeur 10 KHz)**

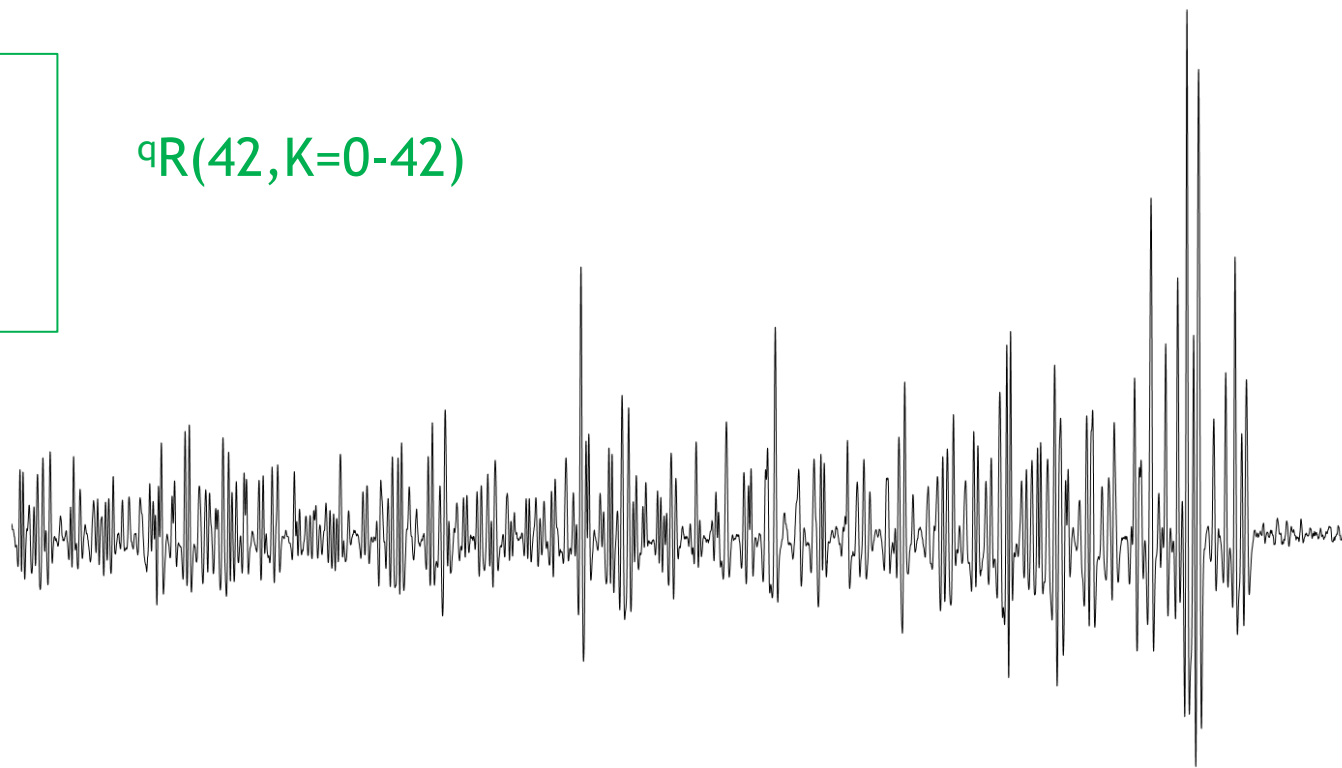
- Précision de mesure (pas en fréquence) = 18 KHz. Sensibilité : 10⁻⁶ cm⁻¹ (τ = 35 ms).

Structure observée : bandes ${}^qR(J, K=0-J)$

Figure :
200 MHz
à partir de
297 771 MHz

${}^qR(42, K=0-42)$

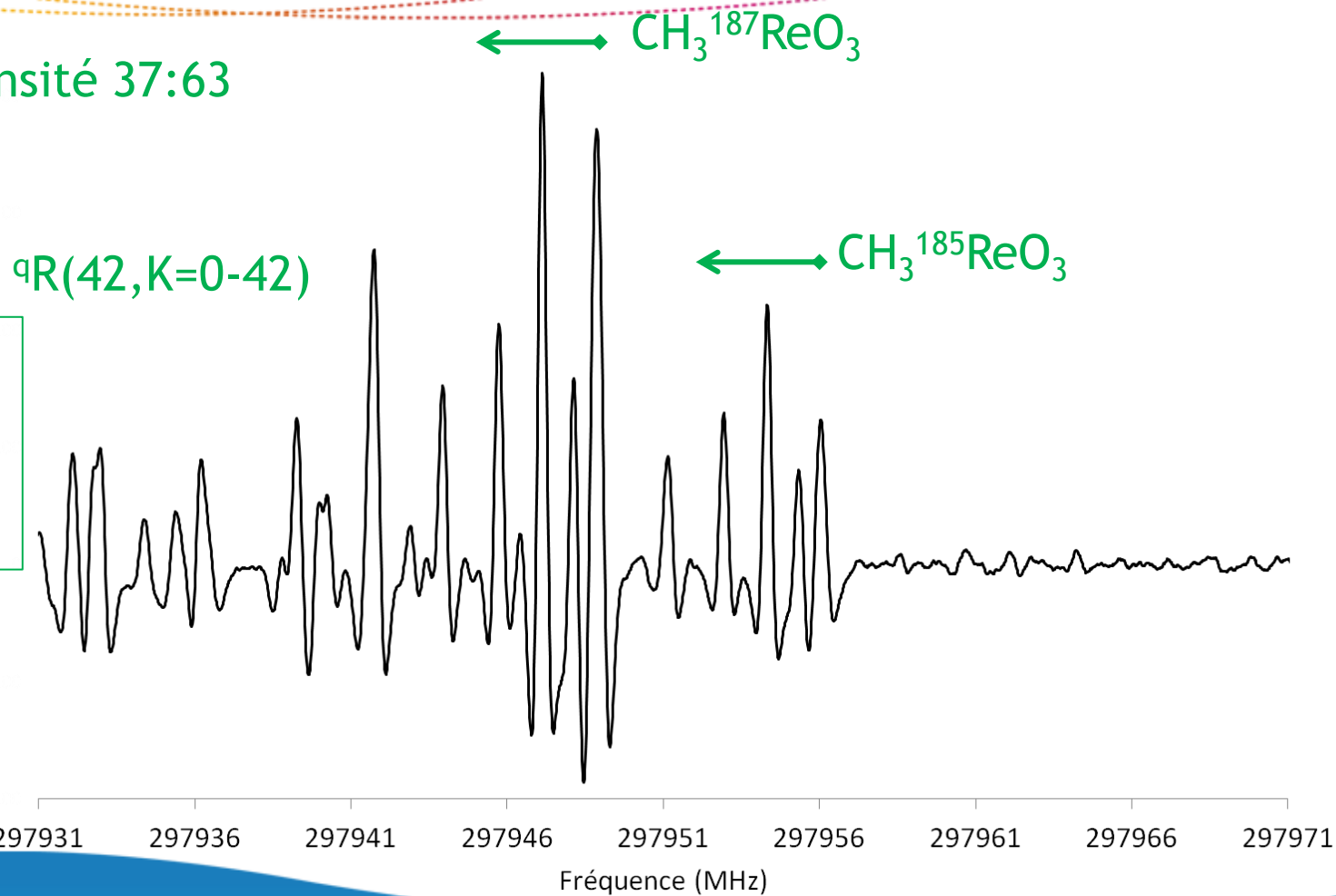
← K



297771 297791 297811 297831 297851 297871 297891 297911 297931 297951 297971
Fréquence (MHz)

Structures des 2 isotopologues : superposées

Rapport d'intensité 37:63

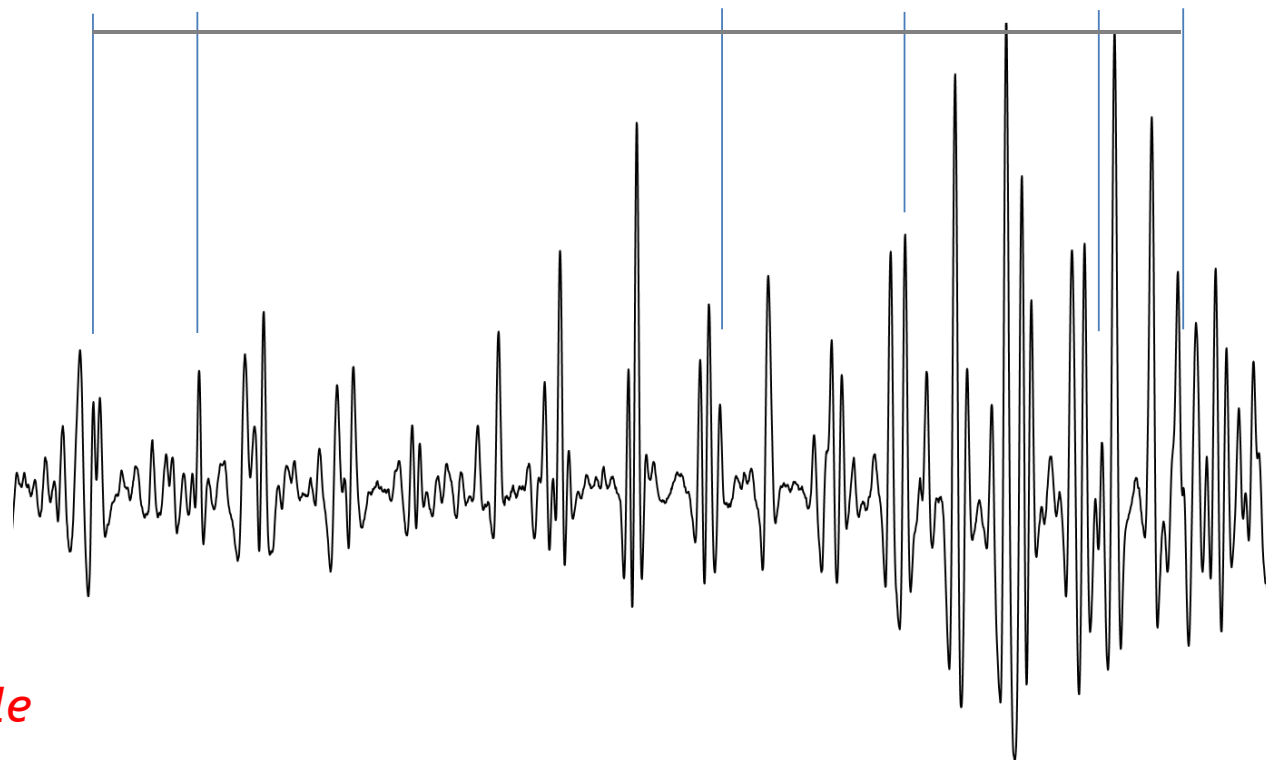


Structures de rotation & hyperfine superposées

${}^a\text{R}(21,21), \Delta F=+1$

18.5 23.5 19.5 22.5 20.5 21.5 F''

Figure :
50 MHz
à partir de
152 445 MHz



Attribution non triviale

152445 152450 152455 152460 152465 152470 152475 152480 152485 152490 152495



Université
Lille1
Sciences et Technologies

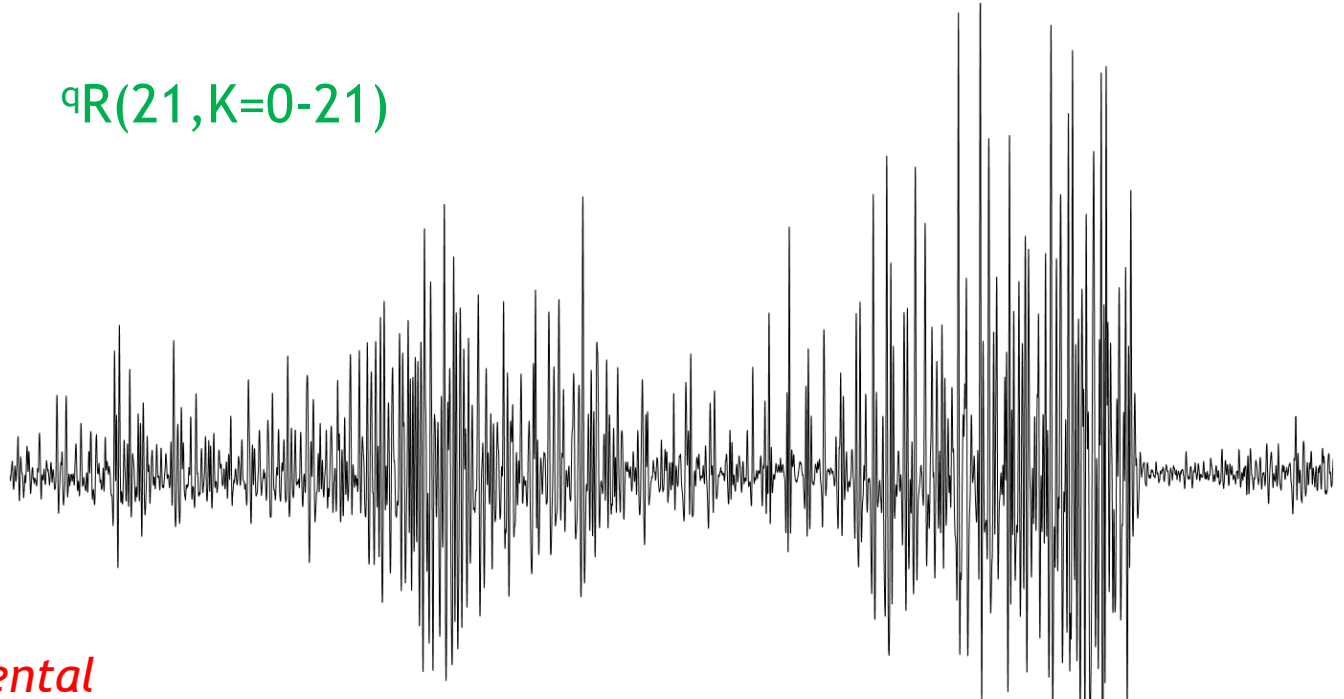


Etats excités observés

Figure :
200 MHz
à partir de
152 352 MHz



$\nu_R(21, K=0-21)$



*Seul l'état fondamental
est analysé*

Etat excité ($\nu_{36} = 1 ?$)

Etat fondamental

152352 152372 152392 152412 152432 152452 152472 152492 152512 152532 152552

Analyse Etat Fondamental

Bilan au 3 octobre 2011	Spectres Micro-ondes & Millimétriques
Valeurs (J, K)	J = 0 - 42, K = 0 - 42
Structure hyperfine	$\Delta F = +1$ (6 composantes intenses par raie rotationnelle)
Raies identifiées	> 900 pour chaque isotopologue
Déviations standard	40 KHz (quelques raies superposées)
Paramètres moléculaires	B, D_J , D_{JK} , eQq, C_{aa} , C_{bb}
Nouveaux paramètres	H_J , H_{JK} , eQq _J
Isotopologues	CH ₃ ¹⁸⁵ ReO ₃ et CH ₃ ¹⁸⁷ ReO ₃

Prospective

- Rappel Objectif : analyse des spectres LPL
- Points positifs
 - Structure de rotation caractérisée pour l'état fondamental (**J, K élevés**) à la précision millimétrique
 - Structure hyperfine : (idem) + **prise en compte d'une correction en rotation**
 - eQq_J est de l'ordre de 10 KHz (non négligeable, même pour les spectres froids)
- Ne pas ignorer
 - Bandes chaudes sur spectres IR ? Estimer intensité à T_{jet}
- Conclusion : l'analyse des spectres LPL peut être tentée

Merci de votre attention !
Thérèse



Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules
Tél. +33 (0)320 336460 | Fax. +33 (0) 320 337020
Therese.Huet@univ-lille1.fr | www.univ-lille1.fr

