Etude spectroscopique d'un polluant atmosphérique: le bromure de méthyle

Adina Ceausu-Velcescu*†[1] and Fridolin Kwabia Tchana[2]

[1]Université de Perpignan – Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique – France

[2]Université Paris-Est Créteil (LISA) – Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS – France

Résumé

CH3Br (bromure de méthyle) est un halogénométhane ayant à la fois des sources naturelles (il est produit naturellement dans les océans) et anthropogéniques. Il a été utilisé notamment en tant que biocide et synthétisé industriellement par la réaction du méthanol avec l'acide bromhydrique. Sa production a certes diminué, comme le prévoit le Protocole de Montréal, mais reste toutefois un sujet sensible: certains pays, comme les Etats-Unis, ont en effet trouvé le moyen de contourner les directives du Protocole par un "usage contrôlé" de ce produit. De plus, ses sources naturelles sont encore insuffisamment connues et quantifiées.
Les bases de données spectroscopiques telles que GEISA ou HITRAN ont déjà inclus le bromure de méthyle, mais la région spectrale concernée est relativement étroite, de 700 à 1700 cm-1 seulement. Aussi, aucune bande harmonique ou de combinaison n'est incluse à ce jour, même si l'intensité de telles bandes peut être importante. Ces bandes sont en effet d'une importance cruciale dans la modélisation satisfaisante du spectre d'absorption dans le moyen et proche infrarouge.
Nous proposons ici une étude complète de la poyade vibrationnelle v6=2/v2=v3=1/v3=v5=1, avec la description précise des interactions anharmoniques et de Coriolis et l'attribution, pour la première fois, de transitions de vibration-rotation appartenant à la bande v3+v5. La reproduction de l'ensemble des données (nombres d'ondes des transitions) est d'une précision comparable à la précision expérimentale.

*Intervenant

†Auteur correspondant: adina@univ-perp.fr