



**HAL**  
open science

## Détermination des paramètres du potentiel intermoléculaire pour le système Ar-H<sub>2</sub> par des expériences de diffusion

D. Pasquerault, J.-P. Treguier, M. Hagene

► **To cite this version:**

D. Pasquerault, J.-P. Treguier, M. Hagene. Détermination des paramètres du potentiel intermoléculaire pour le système Ar-H<sub>2</sub> par des expériences de diffusion. *Journal de Physique*, 1971, 32 (8-9), pp.595-601. 10.1051/jphys:01971003208-9059500 . jpa-00207115

**HAL Id: jpa-00207115**

**<https://hal.science/jpa-00207115>**

Submitted on 4 Feb 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification  
*Physics Abstracts* :  
 13.37

## DÉTERMINATION DES PARAMÈTRES DU POTENTIEL INTERMOLECULAIRE POUR LE SYSTÈME Ar-H<sub>2</sub> PAR DES EXPÉRIENCES DE DIFFUSION

D. PASQUERAULT, J.-P. TREGUIER et M. HAGENE

Laboratoire de Physique Moléculaire, Faculté des Sciences, Rennes, 35

(Reçu le 25 septembre 1970, révisé le 18 décembre 1970)

**Résumé.** — Nous avons déterminé les sections efficaces effectives du système Ar-H<sub>2</sub> en fonction de la vitesse en atténuant un faisceau moléculaire supersonique par passage à travers une chambre de diffusion. Les valeurs obtenues sont corrigées à l'aide de fonctions  $H(6, M, y)$  que nous avons calculées et qui tiennent compte des fonctions de distribution des vitesses dans la chambre de diffusion et dans le faisceau supersonique. Les valeurs expérimentales obtenues sont comparées aux valeurs théoriques que nous avons calculées dans l'approximation semi-classique et pour un potentiel de Lennard-Jones (12, 6). Nous en déduisons les valeurs  $\varepsilon$  et  $r_m$ .

**Abstract.** — We have determined the effective cross-sections of the Ar-H<sub>2</sub> system in terms of the velocity from the attenuation of a supersonic molecular beam that passes through a diffusion chamber. The obtained values are corrected with the  $H(6, M, y)$  functions, which take into account the distribution of velocities in the diffusion chamber and in the supersonic beam. The experimentally obtained values are compared to the theoretical ones, calculated in the semi-classical approximation and for a Lennard-Jones potential (12, 6). From this, we infer the  $\varepsilon$  and  $r_m$  values.

**Introduction.** — Une méthode très intéressante pour déterminer les paramètres du potentiel intermoléculaire consiste à mesurer les sections efficaces totales élastiques en atténuant un faisceau moléculaire par passage à travers un volume de gaz-cible. Jusqu'à présent, les expérimentateurs ont surtout utilisé des faisceaux de four, en faisant varier la vitesse avec la température du gaz [1] ou avec un sélecteur de vitesse [2]. Ces faisceaux ont une large distribution de vitesse et nécessitent l'utilisation d'un sélecteur de vitesses, ce qui augmente les difficultés de détection. Aussi avons-nous préféré utiliser un faisceau moléculaire supersonique [3] qui a le double avantage d'avoir une distribution de vitesse étroite et une intensité beaucoup plus grande. De plus, nous avons mis à profit, pour faire varier la vitesse du faisceau, l'intéressante technique des mélanges de gaz qui nous a permis d'atteindre des vitesses nettement supérieures à celles utilisées par les autres auteurs.

1. **Techniques expérimentales.** — 1.1 APPAREIL-  
 LAGE. — Rappelons brièvement que le faisceau moléculaire est produit par détente du gaz (présentement, l'argon) à travers une buse convergente de section rectangulaire. Le gaz subit une transition du flux continu au flux moléculaire à une distance de la buse qui dépend des dimensions de celle-ci et de la pression en amont. Le centre du flux est extrait à l'aide d'une fente dite « éplucheur » de forme appropriée, située en aval de la surface de transition. Une fente collimatrice achève de définir les dimensions du faisceau.

La chambre de collision a une longueur de 86 mm ; sa fente d'entrée (1 × 30 mm) est située à 7 cm de la fente du collimateur. La fente de sortie a 3 × 30 mm. L'alignement de ces deux fentes avec le système de production du faisceau a été réalisé optiquement. L'évacuation de la chambre est obtenue par un groupe de pompage secondaire indépendant. Le gaz est admis à la température ambiante, par deux ouvertures placées en opposition et devant lesquelles sont fixées des plaques de déflexion. La mesure de la pression est effectuée par une jauge à ionisation étalonnée à l'aide d'un manomètre à capacité ; elle est placée de façon d'une part à éviter de perturber les molécules de la chambre et du faisceau et d'autre part à mesurer la pression approchant au mieux celle existant réellement au centre de la chambre.

Le faisceau est détecté à 40 cm du collimateur par un système constitué de deux ensembles identiques parallèles comprenant chacun une jauge à ionisation munie d'un tube à compression. L'une de ces jauges est située sur l'axe du faisceau, et l'autre en dehors, de façon à tenir compte de l'augmentation non uniforme de la pression résiduelle due aux molécules du gaz-cible provenant de la chambre de collision.

1.2 TECHNIQUE DES MÉLANGES DE GAZ. — Si, à travers une buse convergente, on détend un mélange de gaz, les deux gaz s'entraînent mutuellement jusqu'à la surface de transition où ils acquièrent dans le cas idéal la même vitesse.

$$\bar{U} = \bar{M} \left( \frac{\bar{\gamma} R T_0}{\bar{m}} \right)^{1/2}$$

$\bar{M}$  étant le nombre de Mach terminal moyen défini en 1<sup>re</sup> approximation par

$$\bar{M} = \chi_1 M_1 + \chi_2 M_2$$

$\chi_1, \chi_2$  et  $M_1, M_2$  étant respectivement les proportions et les nombres de Mach de chacun des gaz dans le mélange ;  $\bar{\gamma}$  et  $\bar{m}$  étant respectivement le rapport moyen des chaleurs spécifiques à pression et à volume constants et la masse moléculaire moyenne du mélange, définis de la même manière que  $\bar{M}$ .

La vitesse moyenne  $\bar{U}$  dépend principalement du rapport des masses moléculaires des deux gaz ; on a donc intérêt à utiliser le plus grand rapport possible. En faisant varier  $\chi_1$  et  $\chi_2$ , la vitesse variera alors dans un large domaine.

En outre, la température des deux gaz étant la même, la vitesse moyenne d'agitation thermique est plus grande pour le gaz léger, d'où une plus grande diffusion de celui-ci, et un enrichissement du faisceau en gaz lourd d'autant plus important que le rapport des masses est plus grand.

Pour ces deux raisons, nous avons choisi d'accélérer l'argon par l'hydrogène.

A l'aide d'un spectromètre de masse (l'ioniseur étant muni d'un tube à compression), nous avons étudié la composition du faisceau et la variation de l'intensité d' $\text{Ar}^+$  en fonction de celle du mélange initial et nous avons mis en évidence les deux propriétés importantes suivantes :

— Pour un mélange initial contenant 4 % d'argon, le faisceau en contient 50 % (Fig. 1) alors qu'au-dessus de 25 % d'argon dans le mélange initial, la proportion d'hydrogène dans le faisceau est négligeable. Par la suite, nous tiendrons compte de cette étude pour la détermination des sections efficaces.

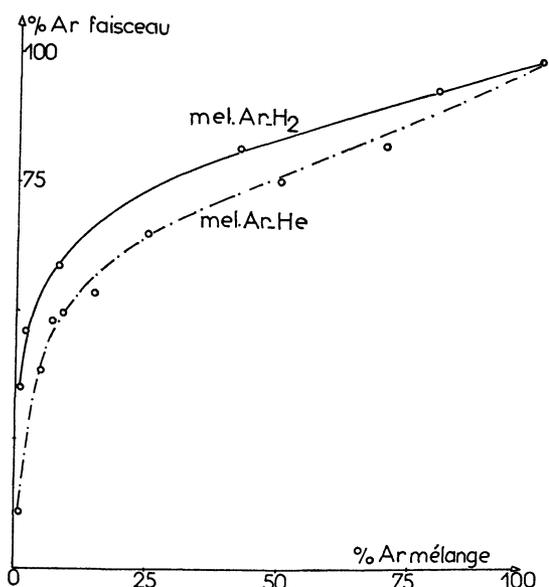


FIG. 1. — Variation du pourcentage d'argon dans le faisceau en fonction du pourcentage d'argon dans le mélange.

— En se plaçant dans les conditions optimales [3] l'intensité est supérieure à celle obtenue avec un faisceau d'argon pur (Fig. 2) ; le gain est particulièrement important pour les mélanges contenant peu d'argon. Cette propriété est très intéressante car elle facilite la détection.

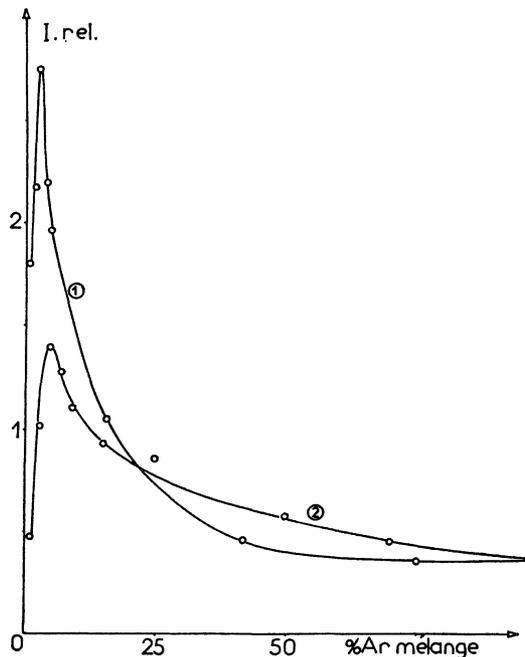


FIG. 2. — Variation de l'intensité relative de l'argon dans le faisceau final en fonction du pourcentage d'argon dans le mélange.

1. Mélange Ar - H<sub>2</sub>
2. Mélange Ar - He.

Le faisceau supersonique ayant une distribution de vitesse étroite, nous n'avons pas sélectionné les vitesses mais nous tiendrons compte dans la détermination des sections efficaces du fait que les molécules ne sont pas tout à fait monocinétiques. Nous avons calculé la vitesse théorique des molécules.

**2. Détermination des sections efficaces expérimentales.** — Dans ce paragraphe, nous montrerons comment relier les sections efficaces à l'intensité d'un faisceau moléculaire, atténuée par passage à travers un volume de diffusion. Ces sections efficaces « effectives » seront corrigées pour obtenir les sections efficaces totales. Nous calculerons les fonctions de correction pour un faisceau supersonique. Nous effectuerons ensuite les corrections nécessitées par la présence du gaz léger dans le faisceau et nous donnerons enfin les résultats expérimentaux corrigés.

**2.1 SECTIONS EFFICACES EFFECTIVES ET FONCTIONS DE CORRECTION.** — Supposons, dans le cas idéal, qu'un courant de particules, de vitesse constante  $v_1$  et d'intensité  $I = nv_1$ , tombe sur un élément de volume  $dL$  contenant  $N$  particules cibles au repos. Le nombre

de particules du faisceau qui sont déviées, en supposant qu'il n'y a pas de collisions multiples (étant donné la pression sous laquelle nous travaillons) est :

$$dI = I \cdot N \cdot dL \cdot Q(v_1) \quad (1)$$

$Q(v_1)$  étant la section efficace totale à la vitesse  $v_1$ . En intégrant sur toute la longueur de la chambre on obtient :

$$I = I_0 \exp(-Q(v_1) \cdot N \cdot L). \quad (2)$$

Les expériences ne sont pas effectuées dans ce cas idéal ; nous étudierons successivement l'effet de la distribution des vitesses dans la chambre de diffusion et dans le faisceau.

2.1.1 *Effet de la distribution dans la chambre de diffusion.* — Supposons que le faisceau ait une vitesse constante  $v_1$  et que les particules-cibles aient une fonction de distribution de vitesse :  $f(v_2) dv_2$  ; l'équation (1) s'écrit alors :

$$dI = \int_{v_2} ng dLNf(v_2) dv_2 Q(g) \quad (3)$$

où  $g$  est la vitesse relative des deux particules.

En intégrant, on obtient alors :

$$I = I_0 \exp \left[ -NL \int_{v_2} \frac{g}{v_1} f(v_2) dv_2 Q(g) \right] \quad (4)$$

$\int_{v_2} \frac{g}{v_1} f(v_2) dv_2 Q(g)$  représente la section efficace

« effective » :  $Q_{\text{eff}}(v_1)$ . Nous montrerons dans l'étude théorique que la section efficace totale  $Q(g)$  est proportionnelle à  $g^{-2/s-1}$  ( $s \geq 6$ ). On peut encore écrire :

$$Q_{\text{eff}}(v_1) = Q(v_1) \int_{v_2} \frac{g}{v_1} f(v_2) dv_2 \left( \frac{g}{v_1} \right)^{2/(1-s)}. \quad (5)$$

La fonction de distribution des vitesses dans le volume de diffusion est de la forme :

$$f(v_2) dv_2 = \frac{1}{\pi^{3/2} v_{2p}^3} \exp \left[ - \left( \frac{v_2}{v_{2p}} \right)^2 \right] dv_2 \quad (6)$$

où  $v_{2p}$  est la vitesse la plus probable des particules cibles. La section efficace effective s'écrit :

$$Q_{\text{eff}}(v_1) = Q(v_1) Fa_0(s, x) \quad (7)$$

où  $x = v_1/v_{2p}$ .

Les fonctions  $Fa_0(s, x)$  ont été calculées et tabulées en fonction de  $x$  par Berkling et ses collaborateurs [4] pour  $s = 6$  (modèle de Van der Waals) et  $s = \infty$  (modèle des sphères rigides).

2.1.2 *Effet de la distribution des vitesses dans le faisceau supersonique.* — Si on considère que la vitesse du faisceau n'est pas uniforme, il faut aussi intégrer sur la vitesse du faisceau primaire. L'équation (4) s'écrit alors :

$$I = I_0 \exp \left[ -NL \int_{v_1} f(v_1) dv_1 \int_{v_2} \frac{g}{v_1} f(v_2) dv_2 Q(g) \right]. \quad (8)$$

L'expression

$$\int_{v_1} f(v_1) dv_1 \int_{v_2} \frac{g}{v_1} f(v_2) dv_2 Q(g)$$

est la moyenne de la section efficace effective :  $\overline{Q_{\text{eff}}(v_1)}$ .

D'après le paragraphe 2.1.1, ceci peut encore s'écrire :

$$\overline{Q_{\text{eff}}(v_1)} = Q(v_{1p}) \int_{v_1} \left( \frac{v_{1p}}{v_1} \right)^{2/(s-1)} \times f(v_1) dv_1 Fa_0(s, x) \quad (9)$$

où  $v_{1p}$  est la vitesse la plus probable dans le faisceau.

Berkling et ses collaborateurs ont calculé et tabulé cette intégrale, en fonction de  $y = v_{1p}/v_{2p}$ , pour les distributions de vitesse d'un faisceau de four. Aucun calcul n'ayant été fait pour les faisceaux supersoniques, nous nous sommes attachés à ce travail.

Comme nous utilisons un détecteur à ionisation, la fonction de distribution des vitesses que nous devons utiliser est celle relative à la densité des particules.

$$f(v_1) dv_1 = K v_1^2 \exp \left( - \frac{\bar{m}}{2 RT_0} (v_1 - \bar{U})^2 \right) dv_1. \quad (10)$$

$K$  étant la constante de normalisation. On en déduit la vitesse la plus probable :

$$v_{1p} = \left( \frac{\bar{\gamma} RT_0}{\bar{m}} \right)^{1/2} \left( \frac{\bar{M}^2}{1 + \frac{\bar{\gamma} - 1}{2} \bar{M}^2} \right)^{1/2} \times \left[ \frac{1 + \left( 1 + \frac{8}{\bar{\gamma} \bar{M}^2} \right)^{1/2}}{2} \right]. \quad (11)$$

En posant

$$B = \frac{\bar{\gamma} \bar{M}^2}{2}, \quad A = \left[ 1 + \left( 1 + \frac{2}{B} \right)^{1/2} \right] / 2$$

et  $C$  étant la nouvelle constante de normalisation, l'équation (9) s'écrit :

$$\overline{Q_{\text{eff}}(v_1)} = Q(v_{1p}) \int_x \left( \frac{y}{x} \right)^{2/(s-1)} CA^3 \frac{x^2}{y^3} \times \exp \left[ -B \left( A \frac{x}{y} - 1 \right)^2 \right] dx Fa_0(s, x) = Q(v_{1p}) H(s, M, y). \quad (12)$$

Utilisant par la suite un potentiel de Lennard-Jones (12, 6), nous avons calculé et tabulé les fonctions  $H(6, M, y)$  pour des nombres de Mach variant de

3,2 à 7,2 et pour des valeurs de  $\gamma$  variant de 0,35 à 7,00 (tableau). La comparaison des fonctions  $H(6, M, \gamma)$  aux fonctions  $Fa_0(6, x)$  montre que l'écart entre les deux fonctions diminue quand le nombre de Mach augmente. L'utilisation des fonctions  $Fa_0(6, x)$  conduit à une erreur de 4 % sur la section efficace totale pour  $M = 3,2$  et de 1 % pour  $M = 7,2$ .

2.2 CORRECTIONS DUES A LA PRÉSENCE DE GAZ LÉGER. — Comme le montrent les résultats expérimentaux du paragraphe 1.2, le faisceau peut contenir une quantité importante d'hydrogène dont il faudra tenir compte dans le calcul des sections efficaces expérimentales.

Si  $Q_{\text{eff}}(v_1)$  est la section efficace effective, la relation :

$$I = I_0 \exp(-\overline{Q_{\text{eff}}(v_1)} NL) \quad (13)$$

doit être remplacée par :

$$I = I_{0(\text{Ar})} \exp(-\overline{Q_{\text{eff}}(\text{Ar})}(v_1) NL) + I_{0(\text{H}_2)} \times \exp(-\overline{Q_{\text{eff}}(\text{H}_2)}(v_1) NL) \quad (14)$$

où  $I$ ,  $I_0$ ,  $I_{0(\text{Ar})}$ ,  $I_{0(\text{H}_2)}$ , sont les intensités mesurées.  $\overline{Q_{\text{eff}}(\text{H}_2)}$  est déterminée en utilisant les résultats de Harrison [5]. On peut alors écrire en égalant les équations (13) et (14) :

$$1 - \frac{I_{0(\text{Ar})}}{I_0} \exp[-(\overline{Q_{\text{eff}}(\text{Ar})}(v_1) - \overline{Q_{\text{eff}}(v_1)}) NL] = \frac{I_{0(\text{H}_2)}}{I_0} \exp[-(\overline{Q_{\text{eff}}(\text{H}_2)}(v_1) - \overline{Q_{\text{eff}}(v_1)}) NL]. \quad (15)$$

On trouve que les valeurs des sections efficaces effectives  $Q'$ , déterminées en première approximation en négligeant le gaz léger, sont trop faibles de  $15 \text{ \AA}^2$  pour un mélange à 20 % d'Ar et de  $64 \text{ \AA}^2$  pour un mélange à 2 % d'Ar. La correction à apporter sur  $Q'$  varie linéairement entre ces deux pourcentages.

2.3 RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX. — Pour une vitesse donnée du faisceau, l'intensité atténuée  $I$  est mesurée pour différentes valeurs de la pression  $p$  dans la chambre de diffusion ( $p$  varie de  $1,6 \times 10^{-5}$  à  $1,6 \times 10^{-4}$  torr). La variation de  $I$  en fonction de  $p$  (Fig. 3) vérifie la relation (13). La pente de la droite  $\log I = f(p)$  nous permet de calculer  $\overline{Q_{\text{eff}}(v_1)}$ . Les mesures ont été effectuées pour plusieurs valeurs de  $v_1$  et répétées plusieurs fois.

Nous avons appliqué les fonctions  $H(6, M, \gamma)$  tabulées aux sections efficaces effectives pour obtenir  $Q(v_{1p})$  (Fig. 4). Cette méthode est valable, en première approximation, pour le système utilisé, la demi-largeur de la distribution des vitesses dans la chambre de collision étant de l'ordre de grandeur de la distance entre deux extréma. Pour des vitesses supérieures à  $1000 \text{ ms}^{-1}$ , nous avons fait les corrections dues à la présence du gaz léger dans le faisceau.

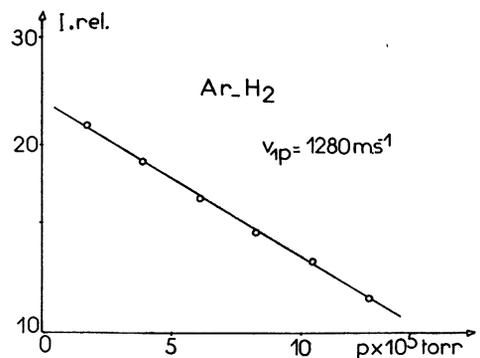


FIG. 3. — Variation de l'intensité relative du faisceau en fonction de la pression dans la chambre de diffusion.

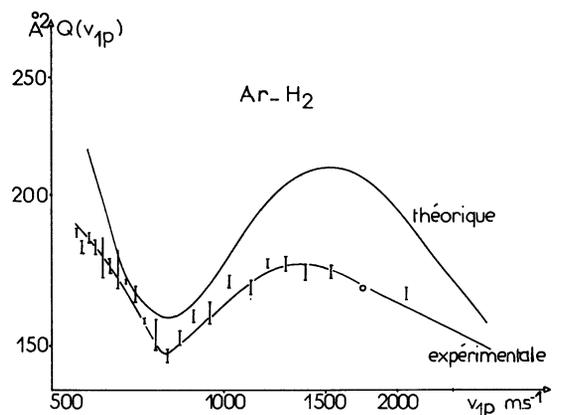


FIG. 4. — Variations des sections efficaces théorique et expérimentale en fonction de la vitesse pour la diffusion d'atomes d'argon par des molécules d'hydrogène.

Les valeurs de  $Q(v_{1p})$  ne tiennent pas compte de l'erreur due à la résolution de l'appareillage. Cette erreur est de l'ordre de 10 à 15 % par défaut, suivant que l'on considère comme angle de résolution l'angle de  $9'$  sous lequel le détecteur est vu du centre de la chambre de diffusion ou celui de  $18'$  calculé d'après la définition de Kusch [6] qui tient compte également des dimensions de faisceau.

3. Interprétation des résultats. Détermination des paramètres  $\varepsilon$  et  $r_m$  du potentiel intermoléculaire. — Pour interpréter nos résultats expérimentaux, nous avons calculé les sections efficaces théoriques après avoir choisi un modèle d'énergie potentielle intermoléculaire.

3.1 ENERGIE POTENTIELLE INTERMOLÉCULAIRE. — Les molécules que nous étudions sont des molécules isotropes sphériques et non polaires. La contribution la plus importante à l'énergie potentielle intermoléculaire vient des forces à longues distances (forces attractives).

Nous avons choisi le modèle de Lennard-Jones (12, 6), qui, dans le cas étudié, donne une bonne représentation du potentiel. Sa forme est :

$$V(r) = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_m}{r} \right)^6 \right] \quad (16)$$

$\varepsilon$  et  $r_m$  étant les coordonnées du minimum de  $V(r)$ . Le terme en  $r^{-12}$  représente les forces de répulsion à courtes distances. Le terme en  $r^{-6}$  représente la contribution de dispersion (potentiel de Van der Waals dont l'expression courante est  $-C^{(6)}/r^6$ , avec  $C^{(6)} = 2\varepsilon r_m^6$ ) dans laquelle on a négligé les termes en  $r^{-8}$  et  $r^{-10}$ ; on commet ainsi une erreur d'environ 2 %.

3.2. CALCUL THÉORIQUE DES SECTIONS EFFICACES TOTALES ÉLASTIQUES. — La section efficace élastique totale obtenue par la mécanique quantique [7], [8], [9], [10], [11], est de la forme :

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta(l). \quad (17)$$

Pour calculer l'expression (17), on utilise des méthodes d'approximation qui sont caractérisées par les deux rapports  $r_m/\lambda$  et  $r_m/\delta$  où  $\lambda$  est la longueur d'onde réduite et  $\delta$  l'incertitude sur la position de la particule. Dans le domaine des énergies thermiques, ces rapports prennent les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned} r_m/\lambda &\neq 100 \text{ et } r_m/\delta \neq 15 \text{ pour les systèmes lourds} \\ r_m/\lambda &\neq 10 \text{ et } r_m/\delta \neq 5 \text{ pour les systèmes légers.} \end{aligned}$$

L'approximation semi-classique étant applicable dans les cas où  $r_m/\lambda \gg 1$  et  $r_m/\delta$  quelconque, peut être utilisée pour étudier les systèmes lourds et dans une bonne approximation les systèmes légers.

Dans cette approximation :

- la différence de phase  $\eta(l)$  est remplacée par sa valeur dans l'approximation JWKB (H. Jeffreys, L. Brillouin, H. A. Kramers et G. Wentzel) ;
- la sommation de l'équation (17) est remplacée par une intégrale (Landau, Lifchitz).

Pour un potentiel réel (par exemple du type Lennard-Jones) le calcul de cette intégrale nécessite l'utilisation de la méthode des phases stationnaires.

La section efficace totale est alors la somme de deux termes  $Q_1$  et  $Q_2$

$$Q_1 = -4\beta_m \pi r_m^2 \left[ \frac{2\pi}{-\Theta'(\beta_m) A} \right]^{\frac{1}{2}} \times \cos \left( 2\eta^*(\beta_m) A - \frac{\pi}{4} \right) \quad (18)$$

$A = kr_m$  ( $k = 2\pi mv/h$  : nombre d'onde) ;  $\beta_m = b_m/r_m$  ( $b_m$  est le paramètre de choc correspondant au passage par le zéro de la fonction de variation classique :  $\theta = f(b)$ ).

$$\Theta'(\beta_m) = r_m \theta'(b_m)$$

$\eta^*(\beta_m) = \eta(b_m)/A$  (différence de phase maximale réduite, dans l'approximation semi-classique).

Düren et Pauly [12], [13] ont tabulé les quantités  $\Theta'(\beta_m)$  et  $\eta^*(\beta_m)$  en fonction de l'énergie réduite  $K = E/\varepsilon$

$$Q_2 = \frac{\pi^2}{k^2} (2a_6)^{2/5} \left( \sin \left( \frac{\pi}{5} \right) \cdot \Gamma \frac{2}{5} \right). \quad (19)$$

On remarque que  $Q_2$  est proportionnel à  $g^{-2/5}$ .

En se fixant  $\varepsilon$  et  $r_m$  et en utilisant les valeurs tabulées [12] et [13], nous avons tous les éléments pour calculer numériquement la section efficace théorique en fonction de la vitesse (Fig. 4).

3.3 INTERPRÉTATION DES RÉSULTATS. DÉTERMINATION DES PARAMÈTRES  $\varepsilon$  ET  $r_m$ . — La courbe expérimentale  $Q(v_{1p})$  (Fig. 4) présente la structure oscillatoire prévue théoriquement, superposée à une décroissance linéaire de la forme :

$$\overline{Q(v_{1p})} = 8,085(C^{(6)}/(\hbar v_{1p}))^{2/5}. \quad (20)$$

Ceci nous permet de déterminer la constante du potentiel de Van der Waals

$$C^{(6)} = 33 \pm 5 \cdot 10^{-60} \text{ erg cm}^6.$$

Cette valeur  $C^{(6)}$  est nettement supérieure à la valeur donnée précédemment [14] et obtenue en utilisant seulement la section efficace pour une valeur donnée de la vitesse ( $560 \text{ ms}^{-1}$ ) et en négligeant le comportement oscillatoire, ce qui est justifié pour les systèmes lourds mais l'est beaucoup moins pour les systèmes légers. La nouvelle valeur de  $C^{(6)}$  est en bon accord avec les valeurs aussi bien théoriques ( $31 \times 10^{-60} \text{ erg cm}^6$ ) qu'expérimentales ( $27 \times 10^{-60} \text{ erg cm}^6$ ) obtenues par Feltgen et ses collaborateurs [15].

En faisant varier  $\varepsilon$  et  $r_m$  de façon que  $C^{(6)} = 2\varepsilon r_m^6$ , nous avons déterminé, par une méthode itérative, la courbe théorique coïncidant au mieux avec la courbe expérimentale (Fig. 4). Le maximum de la courbe expérimentale se trouve, sur cette figure, à une vitesse inférieure à celle du maximum théorique. La vitesse considérée est obtenue par accélération d'une faible quantité d'argon et nous pensons que la vitesse réelle de l'argon dans le faisceau s'écarte alors davantage de la vitesse théorique d'entraînement des deux gaz. Nous espérons mesurer la vitesse réelle de l'argon dans le faisceau dans un proche avenir. L'écart entre les valeurs absolues théoriques et expérimentales de  $Q(v_{1p})$  provient de l'erreur due à la résolution de l'appareillage, d'une insuffisance probable dans les corrections nécessitées par la présence d'hydrogène dans le faisceau (aux vitesses supérieures à  $1000 \text{ ms}^{-1}$ ) et de la méthode appliquée pour corriger  $Q_{\text{eff}}$ .

Nous avons déterminé les paramètres  $\varepsilon$  et  $r_m$

$$\varepsilon = 1,55 \pm 0,1 \times 10^{-21} \text{ J}$$

$$r_m = 3,25 \pm 0,05 \times 10^{-10} \text{ m}.$$

TABLEAU  
Fonctions  $H(6, M, y)$

$\begin{array}{l} M \\ y \end{array}$	3,200 0	3,600 0	4,000 0	4,400 0	4,800 0	5,200 0	5,600 0	6,000 0	6,400 0	6,800 0	7,200 0
0,350 0	2,113 3	2,098 5	2,086 5	2,076 9	2,069 6	2,063 0	2,058 4	2,054 4	2,049 6	2,047 5	2,045 4
0,400 0	1,962 6	1,949 1	1,938 3	1,929 4	1,922 1	1,916 9	1,912 4	1,908 2	1,905 3	1,902 7	1,899 1
0,450 0	1,841 6	1,829 2	1,819 1	1,811 0	1,804 4	1,799 4	1,794 9	1,791 5	1,787 8	1,785 8	1,783 9
0,500 0	1,742 5	1,730 9	1,721 4	1,714 0	1,707 8	1,702 8	1,699 0	1,695 3	1,692 8	1,690 6	1,688 1
0,550 0	1,660 5	1,649 0	1,640 1	1,633 0	1,627 3	1,622 6	1,618 6	1,615 8	1,613 2	1,610 8	1,609 1
0,600 0	1,590 2	1,579 8	1,571 3	1,564 7	1,559 3	1,554 9	1,551 3	1,548 4	1,545 9	1,543 9	1,541 8
0,650 0	1,530 7	1,520 8	1,512 7	1,506 4	1,501 2	1,497 2	1,493 7	1,490 9	1,488 6	1,486 5	1,484 9
0,700 0	1,479 4	1,470 0	1,462 3	1,456 2	1,451 3	1,447 4	1,444 0	1,441 5	1,439 0	1,437 3	1,435 6
0,750 0	1,434 9	1,425 9	1,418 5	1,412 6	1,408 1	1,404 3	1,401 2	1,398 4	1,396 4	1,394 6	1,393 1
0,800 0	1,396 5	1,387 4	1,380 3	1,374 7	1,370 3	1,366 6	1,363 7	1,361 3	1,359 1	1,357 5	1,355 7
0,850 0	1,362 3	1,353 6	1,346 8	1,341 5	1,337 2	1,333 7	1,330 9	1,328 5	1,326 5	1,324 7	1,323 4
0,900 0	1,332 2	1,323 8	1,317 3	1,312 2	1,308 1	1,304 7	1,302 0	1,299 7	1,297 6	1,296 2	1,294 8
0,950 0	1,305 4	1,297 4	1,291 2	1,286 3	1,282 2	1,279 1	1,276 5	1,274 3	1,272 5	1,270 8	1,269 6
1,000 0	1,281 7	1,274 0	1,268 0	1,263 2	1,259 3	1,256 3	1,253 7	1,251 7	1,250 0	1,248 5	1,247 1
1,100 0	1,229 4	1,234 3	1,228 7	1,224 2	1,220 7	1,217 8	1,215 5	1,213 5	1,211 9	1,210 6	1,209 4
1,200 0	1,208 9	1,202 3	1,197 0	1,192 9	1,189 5	1,186 9	1,184 7	1,182 9	1,181 4	1,180 1	1,179 0
1,300 0	1,182 3	1,176 1	1,171 2	1,167 3	1,164 2	1,161 7	1,159 7	1,158 0	1,156 5	1,155 4	1,154 4
1,400 0	1,160 6	1,154 7	1,150 0	1,146 4	1,143 5	1,141 1	1,139 2	1,137 6	1,136 3	1,135 1	1,134 2
1,500 0	1,142 4	1,136 8	1,132 5	1,129 1	1,126 3	1,124 1	1,122 3	1,120 8	1,119 5	1,118 5	1,117 6
1,600 0	1,127 2	1,121 9	1,117 8	1,114 6	1,112 0	1,109 9	1,108 2	1,106 8	1,105 6	1,104 6	1,103 8
1,700 0	1,114 2	1,109 4	1,105 5	1,102 4	1,100 0	1,098 0	1,096 5	1,095 1	1,093 9	1,093 0	1,092 3
1,800 0	1,103 3	1,098 7	1,095 1	1,092 1	1,089 8	1,088 0	1,086 5	1,085 2	1,084 1	1,083 2	1,082 6
1,900 0	1,094 2	1,089 6	1,086 2	1,083 4	1,081 2	1,079 4	1,078 0	1,076 8	1,075 8	1,074 9	1,074 3
2,000 0	1,086 2	1,081 9	1,078 5	1,075 9	1,073 8	1,072 1	1,070 8	1,069 7	1,068 7	1,067 9	1,067 2
2,100 0	1,079 2	1,075 1	1,071 9	1,069 4	1,067 4	1,065 8	1,064 6	1,063 5	1,062 6	1,061 8	1,061 2
2,200 0	1,073 2	1,069 3	1,066 2	1,063 8	1,061 9	1,060 4	1,059 2	1,058 1	1,057 3	1,056 5	1,055 9
2,300 0	1,067 9	1,064 2	1,061 3	1,058 9	1,057 1	1,055 6	1,054 5	1,053 5	1,052 6	1,051 9	1,051 3
2,400 0	1,063 2	1,059 7	1,056 9	1,054 6	1,052 9	1,051 4	1,050 3	1,049 4	1,048 6	1,047 9	1,047 3
2,500 0	1,059 1	1,055 7	1,053 0	1,050 9	1,049 2	1,047 8	1,046 7	1,045 8	1,045 0	1,044 4	1,043 8
2,600 0	1,055 5	1,052 2	1,049 6	1,047 5	1,045 9	1,044 5	1,043 5	1,042 6	1,041 9	1,041 2	1,040 7
2,700 0	1,052 2	1,049 1	1,046 5	1,044 5	1,043 0	1,041 6	1,040 6	1,039 8	1,039 0	1,038 4	1,037 9
2,800 0	1,049 3	1,046 3	1,043 8	1,041 9	1,040 3	1,039 1	1,038 1	1,037 2	1,036 5	1,035 9	1,035 4
2,900 0	1,046 8	1,043 8	1,041 4	1,039 5	1,038 0	1,036 7	1,035 8	1,035 0	1,034 3	1,033 7	1,033 2
3,000 0	1,044 5	1,041 5	1,039 2	1,037 3	1,035 9	1,034 7	1,033 8	1,032 9	1,032 3	1,031 7	1,031 2
3,200 0	1,040 4	1,037 6	1,035 4	1,033 6	1,032 2	1,031 1	1,030 2	1,029 4	1,028 8	1,028 2	1,027 8
3,400 0	1,036 9	1,034 4	1,032 3	1,030 6	1,029 2	1,028 1	1,027 3	1,026 5	1,025 9	1,025 4	1,024 9
3,600 0	1,034 3	1,031 7	1,029 6	1,028 0	1,026 7	1,025 6	1,024 8	1,024 1	1,023 5	1,023 0	1,022 5
3,800 0	1,031 9	1,029 4	1,027 4	1,025 8	1,024 5	1,023 6	1,022 7	1,022 0	1,021 4	1,020 9	1,020 5
4,000 0	1,029 8	1,027 5	1,025 5	1,024 0	1,022 7	1,021 8	1,021 0	1,020 3	1,019 7	1,019 2	1,018 8
4,200 0	1,028 0	1,025 8	1,023 9	1,022 4	1,021 2	1,020 2	1,019 5	1,018 8	1,018 2	1,017 7	1,017 3
4,400 0	1,026 6	1,024 3	1,022 5	1,021 0	1,019 8	1,018 9	1,018 1	1,017 5	1,016 9	1,016 4	1,016 0
4,600 0	1,025 3	1,023 1	1,021 3	1,019 8	1,018 7	1,017 7	1,017 0	1,016 3	1,015 8	1,015 3	1,014 9
4,800 0	1,024 1	1,022 0	1,020 2	1,018 8	1,017 6	1,016 7	1,016 0	1,015 3	1,014 8	1,014 3	1,013 9
5,000 0	1,023 2	1,021 0	1,019 3	1,017 9	1,016 7	1,015 8	1,015 1	1,014 5	1,013 9	1,013 5	1,013 1
5,200 0	1,022 3	1,020 1	1,018 4	1,017 0	1,015 9	1,015 0	1,014 3	1,013 7	1,013 2	1,012 7	1,012 3
5,400 0	1,021 4	1,019 4	1,017 7	1,016 3	1,015 2	1,014 3	1,013 6	1,013 0	1,012 5	1,012 0	1,011 7
5,600 0	1,020 8	1,018 8	1,017 1	1,015 7	1,014 6	1,013 7	1,013 0	1,012 4	1,011 9	1,011 4	1,011 0
5,800 0	1,020 2	1,018 1	1,016 5	1,015 1	1,014 1	1,013 1	1,012 4	1,011 8	1,011 3	1,010 9	1,010 5
6,000 0	1,019 6	1,017 6	1,015 9	1,014 6	1,013 5	1,012 6	1,011 9	1,011 3	1,010 8	1,010 4	1,010 0
6,500 0	1,018 4	1,016 4	1,014 8	1,013 5	1,012 5	1,011 6	1,010 9	1,010 3	1,009 8	1,009 3	1,009 0
7,000 0	1,017 4	1,015 5	1,013 9	1,012 6	1,011 6	1,010 7	1,010 0	1,009 4	1,008 9	1,008 5	1,008 2

Helbing et ses collaborateurs [2], utilisant un faisceau de four d'hydrogène avec un sélecteur de vitesse ont obtenu :

$$\varepsilon = 1,01 \times 10^{-21} \text{ J et } r_m = 3,34 \times 10^{-10} \text{ m.}$$

Les valeurs trouvées à partir de la cinétique des gaz et des règles de combinaison [7] sont

$$\varepsilon = 0,9 \times 10^{-21} \text{ J et } r_m = 3,6 \times 10^{-10} \text{ m.}$$

Les causes d'erreurs citées ci-dessus semblent influencer principalement  $\varepsilon$ .

#### Bibliographie

- [1] BEIER (H. J.), *Z. Physik*, 1966, **196**, 185.
  - [2] HELBING (R.), GAIDE (W.) et PAULY (H.), *Z. Physik*, 1968, **208**, 215.
  - [3] TREGUIER (J. P.), HAGENE (M.) et PASQUERAULT (D.), *Revue Phys. Appl.*, 1970, **5**, 343.
  - [4] BERKLING (K.), HELBING (R.), KRAMER (K.), PAULY (H.), SCHLIER (C. H.) et TOSCHEK (P.), *Z. Physik*, 1962, **166**, 406.
  - [5] HARRISON (H.), *J. Chem. Phys.*, 1962, **37**, 1164.
  - [6] KUSCH (P.), *J. Chem. Phys.*, 1964, **40**, n° 1, 1.
  - [7] HIRSCHFELDER (J. O.), CURTISS (C. F.) et BIRD (R. B.), *Molecular theory of gases and liquids*, Wiley, New York, 1954.
  - [8] LANDAU (L.) et LIFCHITZ (E.), *Mécanique quantique*, Mir, Moscou, 1967.
  - [9] MASSEY (H. S. W.), *Handbuch der Physik*, Springer Berlin 1956, **36**, 232.
  - [10] PAULY (H.) et TOENNIES (J. P.), *Advances in atomic and molecular physics*, Acad. Press, New York, 1965, **I**, 227.
  - [11] BERNSTEIN (R. B.), *Advances in chemical physics*, 1966, **X**, 75.
  - [12] DÜREN (R.) et PAULY (H.), *Z. Physik*, 1963, **175**, 227.
  - [13] DÜREN (R.) et PAULY (H.), *Z. Physik*, 1964, **177**, 146.
  - [14] HAGENE (M.), PASQUERAULT (D.) et TREGUIER (J.-P.), *C. R. Acad. Sci.*, Paris, 1970, **271**, 34.
  - [15] FELTGEN (R.), GAIDE (W.), HELBING (R.) et PAULY (H.), *Phys. Letters*, 1966, **20**, 501.
-