



Calcul de l'intensité des bandes induites par la pression dans les mélanges gazeux polaires. Influence des moments quadrupolaires et des forces de dispersion

L. Galatry

► To cite this version:

L. Galatry. Calcul de l'intensité des bandes induites par la pression dans les mélanges gazeux polaires. Influence des moments quadrupolaires et des forces de dispersion. Journal de Physique et le Radium, 1958, 19 (10), pp.796-796. <10.1051/jphysrad:019580019010079601>. <jpa-00235933>

HAL Id: jpa-00235933

<https://hal.science/jpa-00235933v1>

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.



HAL Authorization

**CALCUL DE L'INTENSITÉ
DES BANDES INDUITES PAR LA PRESSION
DANS LES MÉLANGES GAZEUX POLAIRES
INFLUENCE DES MOMENTS QUADRUPOLAIRES
ET DES FORCES DE DISPERSION**

Par L. GALATRY,

Laboratoire des Hautes Pressions, Bellevue (Seine-et-Oise).

Dans les spectres infrarouges des mélanges comprimés d'un gaz polaire 1 avec un gaz non polaire 2, tous deux diatomiques, deux régions spectrales particulières sont le siège d'une absorption induite par l'augmentation de densité : celle de la fréquence fondamentale de vibration de la molécule 2 [1] et celle de la somme des fréquences fondamentales de vibration des molécules 1 et 2 [2]. Les coefficients d'absorption totaux A_1 et A_{12} de ces bandes, réduits à un amagat de chaque gaz, ont été calculés à l'aide d'un modèle proposé antérieurement [3], en considérant que

l'absorption étudiée est due aux couples de molécules (1-2) présents dans le mélange. On a négligé l'influence de la quantification des degrés de liberté d'orientation, mais on a tenu compte de l'orientation préférentielle mutuelle des deux molécules déterminée par l'anisotropie des forces de dispersion.

Les calculs ont été effectués dans le cas des mélanges HCl-H_2 et HBr-H_2 pour lesquels on possède des données expérimentales [4]. On a obtenu ($\text{cm}^{-2} \text{ am}^{-2}$) :

$$\text{HCl-H}_2 : A_2 = 2,1 \cdot 10^{-2} \quad (\text{exp. : } 2,7 \cdot 10^{-2})$$

$$A_{12} = 1,9 \cdot 10^{-4} \quad (\text{exp. : } 3,3 \cdot 10^{-4})$$

$$\text{HBr-H}_2 : A_{12} = 0,6 \cdot 10^{-4} \quad (\text{exp. : } 2 \cdot 10^{-4}).$$

L'accord peut être considéré comme assez satisfaisant, eu égard aux approximations faites et à l'imprécision des valeurs adoptées pour les dérivées des moments quadrupolaires et des polarisabilités. Les calculs montrent que l'effet des moments quadrupolaires peut contribuer au quart de la valeur des résultats finaux alors que les effets d'orientation n'entrent que pour le vingtième environ dans les mêmes résultats.

Les détails de ces calculs paraîtront prochainement dans le *Journal des Recherches du C. N. R. S.*

Lettre reçue le 30 juillet 1958.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] COULON (R.), GALATRY (L.), ROBIN (J.) et VODAR (B.), *J. Physique Rad.*, 1955, **16**, 728.
- [2] COULON (R.), ROBIN (J.) et VODAR (B.), *C. R. Acad. Sc.*, 1955, **240**, 956.
- [3] GALATRY (L.) et VODAR (B.), *C. R. Acad. Sc.*, 1955, **240**, 1072. FAHRENFORT (J.), *Chem. Weekbl.* 1954, **50**, 501.
- [4] COULON (R.), *Thèse*, Paris, 1958.