

# Moments dipolaires électriques et polarisabilités des agrégats de sodium et de fluor ayant un électron excédentaire.

Expérience:

M. Broyer, R. Antoine, Ph. Dugourd et D. Rayane, LASIM Lyon

P. Labastie, J.-M. L’Hermite et A. Le Padellec, Laboratoire CAR, IRSAMC Toulouse

Théorie:

A.R. Allouche, LASIM Lyon

**F. Spiegelman**, F. Calvo et G. Durand, Laboratoire de Physique Quantique, IRSAMC Toulouse

Le travail présenté ici concrétise une collaboration entre des équipes d’expérimentateurs et de théoriciens, du LASIM à Lyon et de l’IRSAMC à Toulouse.

Les moments dipolaires électriques des agrégats  $\text{Na}_n\text{F}_{n-1}$  ont été mesurés par déflexion d’un faisceau moléculaire dans un champ électrique inhomogène. On peut montrer que la déviation des agrégats sous l’action du champ est proportionnelle à la valeur moyenne dans le temps de la composante du moment dipolaire dans la direction du champ. On peut définir une susceptibilité pour chaque agrégat  $\text{Na}_n\text{F}_{n-1}$ . Les valeurs expérimentales dépendent fortement de la taille des agrégats et sont maximales pour  $n=9, 10, 14$  et  $18$ . Pour une taille donnée, les susceptibilités expérimentales dépendent de la température  $T$ .

D’un point de vue théorique, les agrégats  $\text{Na}_n\text{F}_{n-1}$  sont équivalents à un électron placé dans le champ de  $n$  ions  $\text{Na}^+$  et de  $n-1$  ions  $\text{F}^-$ . L’électron est traité quantiquement par des techniques de pseudopotentiels électron- $\text{Na}^+$  et électron- $\text{F}^-$ , les ions étant traités classiquement. De plus, les effets de polarisation et de corrélation *électron actif-électrons passifs* sont également représentés par des opérateurs de polarisation.

Nous avons calculé les moments dipolaires et les polarisabilités anisotropiques des agrégats libres. La comparaison aux résultats expérimentaux montre que la susceptibilité dipolaire des agrégats  $\text{Na}_n\text{F}_{n-1}$  est reliée au moment dipolaire  $\bar{\mu}$  plutôt qu’à la polarisabilité électrique  $\alpha$ . Cette corrélation semble prendre la forme d’une loi de type Langevin pour laquelle une bonne interpolation des résultats expérimentaux est obtenue avec  $\alpha + \mu^2/3kT$ . La loi de Langevin repose sur un modèle boltzmannien de la fluctuation d’un dipôle. Or, selon les types de défauts et de localisation électronique, les comportements des dipôles diffèrent. La justification théorique du comportement de la susceptibilité en fonction de la température selon une loi de Langevin reste à trouver. <sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>D. Rayane, I. Compagnon, R. Antoine, M. Broyer, Ph. Dugourd, P. Labastie, J.-M. L’Hermite, A. Le Padellec, G. Durand, F. Calvo, F. Spiegelman, and A.R. Allouche, J. Chem. Phys. sous presse (01/08/2002)