

Complément à l'article « Le CO₂ humain exhalé : analyse par IR-TF d'un rotateur non rigide », Alain Adenier, Pierre Fellmann et Christine Cordier (L'Act. Chim., 2010, 344, p. 10)

Tableau A - Nombre d'onde des raies ro-vibrationnelles associées au sous-spectre donné figure 1a ; $\sigma_{3 \text{ exp}}$ en fonction de J'' et de l'index m.

Branche P			Branche R		
J''	m	$\sigma_{3 \text{ exp}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	J''	m	$\sigma_{3 \text{ exp}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
40	- 40	2 313,13	0	1	2 349,85
38	- 38	2 315,15	2	3	2 351,39
36	- 36	2 317,12	4	5	2 352,9
34	- 34	2 319,09	6	7	2 354,39
32	- 32	2 321,08	8	9	2 355,85
30	- 30	2 323,03	10	11	2 357,28
28	- 28	2 324,93	12	13	2 358,67
26	- 26	2 326,79	14	15	2 360,04
24	- 24	2 328,66	16	17	2 361,42
22	- 22	2 330,51	18	19	2 362,73
20	- 20	2 332,3	20	21	2 364,06
18	- 18	2 334,11	22	23	2 365,32
16	- 16	2 335,87	24	25	2 366,57
14	- 14	2 337,59	26	27	2 367,81
12	- 12	2 339,3	28	29	2 369,02
10	- 10	2 341	30	31	2 370,2
8	- 8	2 342,66	32	33	2 371,35
6	- 6	2 344,31	34	35	2 372,5
4	- 4	2 345,94	36	37	2 373,6
2	- 2	2 347,51	38	39	2 374,69

Tableau B - Résultats des calculs dans l'hypothèse i) que la molécule est un rotateur rigide (polynôme d'ordre 2) et ii) que la distorsion centrifuge perturbe la rotation du CO₂ (polynôme d'ordre 4).

N	20	40
Polynôme d'ordre 2		
$\sigma_3 = \sigma_{03} + (B' + B'')m + (B' - B'')m^2$		
$\sigma_0 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	2 349,087 ± 0,004	2 349,085 ± 0,004
$B' \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	0,38717 ± 0,00011	0,38682 ± 0,00005
$B'' \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	0,39026 ± 0,00011	0,3899 ± 0,00005
χ^2	0,00013	0,00023
Polynôme d'ordre 4		
$\sigma_3 = \sigma_{03} + (B' + B'')m + (B' - B'' - D' + D'')m^2 + 2(D' + D'')m^3 - (D' - D'')m^4$		
$\sigma_0 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	2 349,085 ± 0,005	2 349,0890 ± 0,0001
$B' \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	0,38771 ± 0,00026	0,38719 ± 0,00011
$B'' \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	0,39074 ± 0,00025	0,39029 ± 0,00011
$D' \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	1,130 10 ⁻⁶ ± 4,93 10 ⁻⁷	1,853 10 ⁻⁷ ± 5,06 10 ⁻⁸
$D'' \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	9,64 10 ⁻⁷ ± 4,57 10 ⁻⁷	2,016 10 ⁻⁷ ± 4,96 10 ⁻⁸
χ^2	0,00011	0,00016