
**REACTIVITE DE HCl AVEC
LA SURFACE DE LA GLACE**

CHAPITRE V

REACTIVITE DE HCl AVEC LA SURFACE DE LA GLACE

V.1 Introduction : motivation du sujet

L'impact des activités humaines qui perturbent la couche d'ozone est de plus en plus évident au regard des 20 dernières années, surtout depuis la première hypothèse de la communauté scientifique que le rejet des chloro-fluoro-carbures (CFC) dans l'atmosphère pourrait réduire la quantité d'ozone au-dessus de nos têtes.

La présence des produits (composés chlorés) résultant de la décomposition de ces gaz a été détectée dans la stratosphère. Après la découverte du trou d'ozone, le lien fut rapidement établi avec l'augmentation de ces composés chlorés. Cette perte d'ozone n'est pas uniquement restreinte au continent antarctique, à peu près à la même époque fut également démontré que l'ozone diminuait aux moyennes latitudes de l'hémisphère Nord (30-60°N), région à très forte densité de population. Mais, contrairement à la brusque et quasi-totale destruction de l'ozone à certaines altitudes en Antarctique, la perte d'ozone aux moyennes latitudes est beaucoup moins forte et plus lente, "seulement" moins de 1 % par an. Néanmoins, cette tendance est très préoccupante et fait actuellement l'objet de nombreuses et intenses recherches scientifiques.

Nous allons décrire maintenant les principaux facteurs agissant dans la destruction de la couche de l'ozone.

Les caractéristiques spéciales de la météorologie aux pôles

Durant la nuit polaire australe, la lumière solaire ne peut éclairer le pôle Sud. Un vent violent circumpolaire se développe alors dans la moyenne et basse stratosphère. Ce vent est connu sous le nom de "tourbillon polaire" ou encore de "vortex polaire". Il a pour effet d'isoler l'air situé aux latitudes polaires du reste de l'atmosphère terrestre. Tant que l'obscurité demeure, l'air à l'intérieur du tourbillon polaire peut y devenir très froid. Si froid que des nuages spéciaux peuvent alors se former si la température descend en-dessous d'environ -80° C. Ces nuages sont appelés nuages stratosphériques polaires (PSC)

pour Polar Stratospheric Clouds) mais ce ne sont pas des nuages comme on en voit communément dans le ciel, car ces derniers sont composés essentiellement de gouttes d'eau. Dans un premier temps, les PSC se forment d'abord avec des particules d'acide nitrique tri-hydratés (NAT). Mais si la température continue à décroître, peuvent alors se former de plus grosses particules de glace avec de l'acide nitrique dissous à l'intérieur de ces particules. Malgré tout, la composition exacte de ces particules est toujours l'objet d'intenses investigations scientifiques. La présence de ces PSC est cruciale pour qu'une destruction d'ozone puisse avoir lieu.

Les processus chimiques menant à la destruction de l'ozone au-dessus des pôles

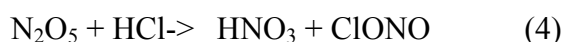
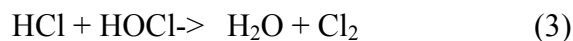
Il est maintenant reconnu que la présence de composés chlorés et bromés dans l'atmosphère est à l'origine de la destruction observée de l'ozone lors des phénomènes de trous d'ozone en Antarctique et au-dessus du pôle Nord. Néanmoins, l'importance relative des composés chlorés et bromés causant la destruction de l'ozone dans différentes régions de l'atmosphère n'a pas encore été clairement déterminée. La totalité des espèces chlorées et environ la moitié des espèces bromées proviennent des activités humaines.

Les principaux vecteurs pour les espèces inorganiques à longue durée de vie, appelées espèces réservoirs de chlore sont l'acide chlorhydrique (HCl) et le nitrate de chlore (ClONO₂). Ils se forment à partir des produits de décomposition des CFC. Le pentoxyde d'azote (N₂O₅) est une espèce réservoir des oxydes d'azote, mais joue également un rôle important dans la chimie stratosphérique. L'acide nitrique (HNO₃) est important car il maintient des niveaux élevés de composés chlorés actifs, comme nous le verrons par la suite.

La production des radicaux chlorés

Un des points les plus importants à propos de la chimie du trou d'ozone et dont il faut bien se rendre compte, est que les réactions chimiques clés sont inhabituelles. Elles ne peuvent pas se dérouler dans l'atmosphère en dehors de la présence de certaines conditions. Le point central de cette chimie inhabituelle est le fait que les réservoirs HCl et ClONO₂ (ainsi que leurs pendants parmi les espèces bromées) sont convertis sous des formes chlorées beaucoup plus réactives **à la surface des cristaux de glace des nuages**

stratosphériques polaires. Les réactions les plus importantes pour la destruction de l'ozone sont :



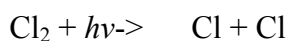
Il est important de noter que ces réactions **ne peuvent avoir lieu qu'à** la surface des cristaux de glace des nuages stratosphériques polaires, et qu'elles y sont très rapides. Ceci est la raison pour laquelle la découverte du trou d'ozone causa une telle surprise : les processus de chimie hétérogène (ceux qui se déroulent sur des surfaces solides) étaient négligés en chimie atmosphérique (du moins pour la stratosphère) avant la découverte du trou d'ozone. Ces réactions de chimie hétérogène permettent aux espèces réservoirs du chlore et du brome de se convertir très rapidement sous des formes beaucoup plus réactives [1].

L'acide nitrique (HNO_3) formé par les précédentes réactions demeure parmi les particules des PSC, donc les concentrations des oxydes d'azote en phase gazeuse s'en trouvent réduites. Cette réduction (**dénoxification**) est très importante car elle ralentit la disparition de ClO (dont la rôle est expliqué plus loin) qui autrement, aurait lieu au moyen de la réaction :



Dans un premier temps, seul le chlore moléculaire (Cl_2) a été formé à partir des réactions **(1)-(5)**. La destruction d'ozone requiert quant à elle l'existence de chlore atomique.

Lorsque le soleil éclaire à nouveau les régions polaires au printemps austral (soit l'automne au même moment dans l'hémisphère Nord), la molécule de chlore Cl_2 est rapidement photodissociée en atomes de chlore qui conduisent à la destruction rapide et soudaine de l'ozone (voir plus loin).



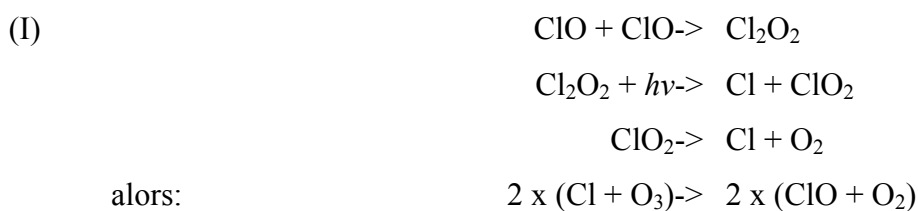
Cette succession de processus est confirmée par des mesures avant, pendant et après le trou d'ozone.

Cycle catalytique de destruction de l'ozone par le chlore atomique

Les observations des espèces chimiques effectuées au-dessus du pôle montrent des niveaux élevés des formes réactives du chlore pour les raisons que nous avons décrites ci-dessus. Néanmoins, il existe beaucoup plus de molécules d'ozone que de chlore actif. Comment est-il alors possible de détruire la quasi-totalité de l'ozone ?

La réponse à cette question réside dans ce qui est connu en chimie sous le terme de « *cycles catalytiques* ». Un cycle catalytique est tel qu'une seule molécule change significativement ou rend possible un cycle de réactions chimiques sans que cette molécule ne soit elle-même affectée par ce cycle.

La production des formes actives des espèces chlorées nécessite de la lumière. Donc, la présence de lumière solaire contrôle les cycles catalytiques suivants qui sont les cycles principaux incluant les espèces chlorées et bromées et détruisant l'ozone [2,3]:



et



La forme dimérique (Cl_2O_2) du monoxyde de chlore présente dans le cycle (I) est thermiquement instable et le cycle est d'autant plus efficace que la température est basse. Donc, une fois encore, les très basses températures à l'intérieur du tourbillon polaire pendant l'hiver sont importantes à la réalisation de ces cycles. On pense qu'ils sont

responsables à hauteur de 70 % de la destruction d'ozone en Antarctique [4]. En Arctique, moins froid que l'Antarctique, une partie plus importante de la destruction de l'ozone serait due au cycle (II).

A la suite de la découverte de ces réactions hétérogènes mises en jeu dans la destruction de l'ozone stratosphérique, beaucoup d'études de laboratoire concernant l'adsorption de HCl sur la glace ont été menées autour de 195 K [5, 11]. La plupart, réalisées dans des tubes à écoulement couplés de spectromètres de masse, ne permettent pas d'accéder à la **structure** et aux **propriétés de surface** de la glace qui influencent particulièrement les capacités d'adsorption. Ainsi il existe des disparités majeures entre les différentes études menées jusqu'à présent. Les travaux de Leu *et al.* [11] montrent que les quantités de HCl adsorbées sur la glace peuvent varier de manière très importante suivant le type de surface de glace considérée. De plus ces erreurs se répercutent sur d'autres paramètres essentiels dans l'étude des réactions hétérogènes : les constantes de vitesse et les probabilités de ces réactions [12]. Enfin, l'hypothèse de la présence d'une **couche quasi-liquide** à la surface de la glace permettant de solvater et d'incorporer HCl plus facilement. (Molina *et al.* [13]) fait toujours l'objet de débats controversés.

Pour essayer d'apporter de nouvelles idées à ce débat nous nous sommes employés à étudier l'effet de l'adsorption de HCl sur la **structure** et la **dynamique** de films de glace bien caractérisés (chapitre IV), dont les **propriétés de surface** sont connues (*cf.* V.3.1).

Ce chapitre est composé d'une première partie qui traite de l'interaction de HCl avec la monocouche d'eau p(3x2) adsorbée sur monocristal de MgO (001) à $T = 190$ K. Cette étude par diffraction d'électrons lents montre l'effet de HCl sur la structure du film de glace. La seconde partie traite de l'interaction de HCl sur des films de glace plus épais (5 couches), de structure hexagonale, plus proches des cristaux de glace rencontrés dans la stratosphère [14]. La structure et la dynamique du système HCl/glace est étudiée en fonction de la température et du degré de recouvrement par diffraction et diffusion quasiélastique de neutrons sur poudres de MgO (001).

V.2 Interaction de HCl avec la monocouche d'eau p(3x2) adsorbée sur MgO (001)

L'expérience consiste à adsorber une monocouche d'eau à la surface d'un monocristal de MgO fraîchement clivé (sous ultra-vide), dans les conditions de température et de pression de formation de la phase p(3x2) (ici $P_{\text{H}_2\text{O}} = 4.10^{-9}$ Torr, $T = 190$ K). La diffraction d'électrons lents permet de contrôler la cinétique d'adsorption de la couche, elle montre que la phase est ordonnée et a une symétrie p(3x2) [15] (figure V.1.a).

Une fois la monocouche formée on introduit dans l'enceinte une pression partielle de 1.10^{-8} Torr de HCl. Pour suivre la cinétique de la réaction HCl/glace on trace la variation au cours du temps de l'intensité des tâches de diffraction (1 0) du substrat et (2/3 0) de la couche d'eau (figure V.2).

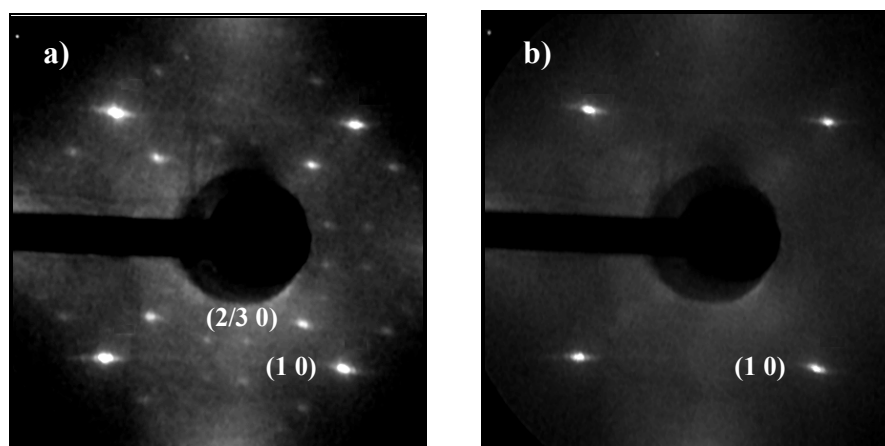


Figure V.1 : Diagrammes de diffraction obtenus à $T = 190$ K pour $E = 123,35$ eV. a) phase p(3x2) avant introduction de HCl, correspond au point $t = 0$ sur l'isotherme de la figure V.2. b) après exposition de HCl pendant 150 s à $P_{\text{HCl}} = 1 \cdot 10^{-8}$ Torr.

Après exposition de HCl pendant 150 s toutes les taches correspondant à la phase p(3x2) ont disparus (figure V.1.b)), il subsiste les taches (1 0) venant du substrat.

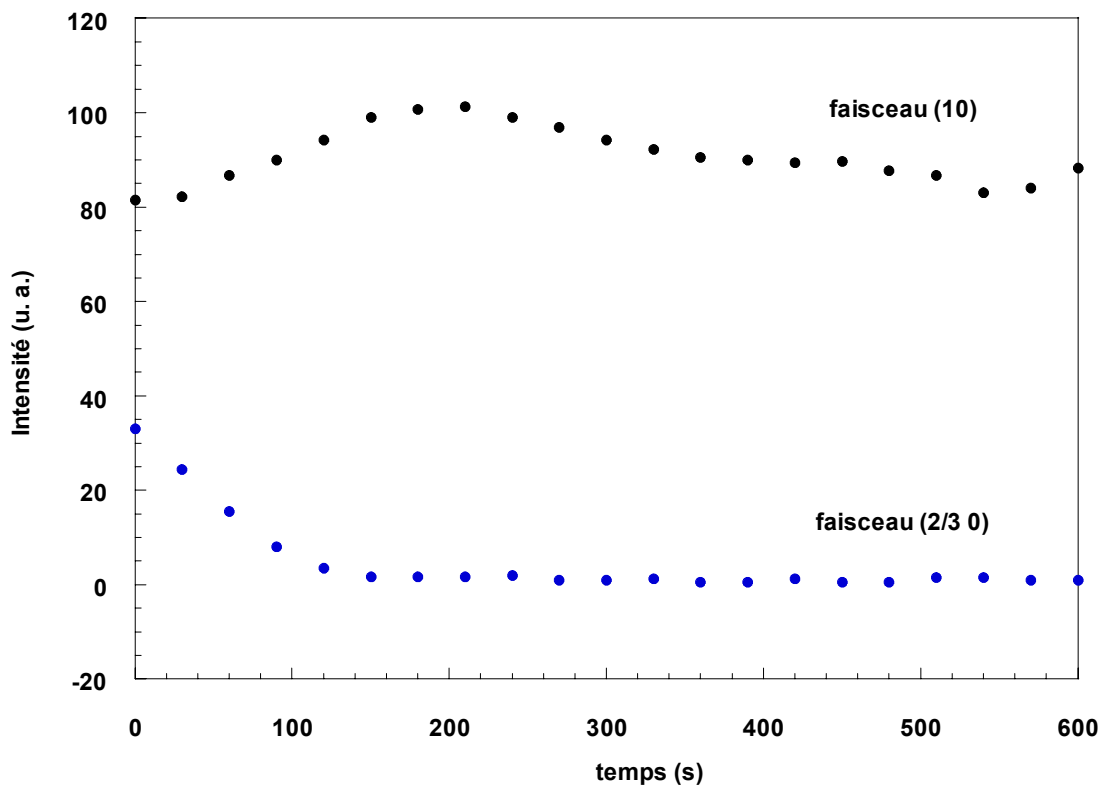


Figure V.2 : Isotherme cinétique LEED obtenue à partir de la mesure de la variation au cours du temps de l'intensité des taches (1 0) et (2/3 0). L'énergie des électrons est de 123,35 eV. $P_{HCl} = 1 \cdot 10^{-8}$ Torr et $T = 190$ K.

Cette isotherme cinétique montre une évolution assez bien corrélée dans le temps de l'augmentation de l'intensité du faisceau (1 0) et de la diminution du faisceau (2/3 0). HCl détruit ainsi assez rapidement (environ 200 s) la structure p(3x2) du film de glace. L'augmentation de l'intensité de la tache (1 0) signifie probablement qu'il y a désorption de molécules à la surface du MgO (001). Une étude par spectroscopie Auger montre qu'il n'y a pas de chlore ni d'autre contaminant adsorbé sur la surface après la première introduction de HCl à $T = 190$ K. Toutefois HCl perturbe fortement la surface du MgO puisque il nous est impossible de condenser à nouveau la monocouche p(3x2) lors des expériences suivantes. Les isothermes cinétiques montrent alors qu'une couche d'eau se forme sur MgO (001) mais qu'aucune surstructure n'est visible en diffraction d'électrons lents. Ainsi pour s'assurer de la reproductibilité de ces résultats nous avons refait cette expérience sur d'autres monocristaux fraîchement clivés. Nous retrouvons une cinétique de disparition de la phase ordonnée identique, *i.e.* une disparition des taches (2/3 0) au bout d'environ $t \approx 200$ s et une légère augmentation de l'intensité des taches du substrat.

L'interaction de HCl avec la phase p(3x2) adsorbée sur MgO (001) est très forte, le chlorure d'hydrogène détruit en effet la structure de la couche et perturbe de manière irréversible la surface de l'oxyde de magnésium.

Cette étude est très intéressante d'un point de vue fondamental, de plus le faible nombre de molécules impliquées dans ce système permet d'envisager une approche théorique. Toutefois ce film de glace d'une monocouche est trop mince pour pouvoir négliger l'influence du substrat sur l'adsorption de HCl. Ainsi nous avons entrepris une étude de l'interaction HCl/glace sur des films plus épais (≈ 5 MC) qui s'apparentent mieux aux cristaux de glace rencontrés dans les nuages stratosphériques polaires.

V.3 Interaction de HCl avec un film épais de glace

L'adsorption de HCl par la glace constitue une étape clé de la chimie hétérogène qui se déroule à la surface des particules de glace des PSCs, elle conduit à la destruction de l'ozone stratosphérique polaire (cf Introduction).

De nombreux travaux [16, 22] sur les interactions HCl/glace ont été effectués (spectroscopie IR, désorption thermique...). Voici les principales conclusions :

- HCl est totalement ionisé par la glace au dessus de 110 K [18,19]
- l'interaction est généralement confinée à la surface de la glace sous forme d'un solide $\text{HCl}\cdot n\text{H}_2\text{O}$; elle s'étend au volume pour $T \geq 150$ K [18]
- la formation de l'hexahydrate a été observé dans des conditions de pression de HCl et de température correspondant à son domaine de phase [16]; pour les autres solides formés il est généralement difficile de conclure quant à la phase thermodynamique attendue dans les conditions de pression partielle de HCl et de température correspondant à l'expérience (les limites des domaines de phase des hydrates étant mal ou non connues dans ces conditions).
- en dessous de 150 K, tous les solides $\text{HCl}\cdot n\text{H}_2\text{O}$ formés par exposition directe de HCl à la glace sont amorphes [18,19]
- enfin, on ne dispose pas de résultats dans les conditions stratosphériques (température $T \approx 190$ K et degré de recouvrement en HCl $0,1 < \theta_{\text{HCl}} < 3$ MC [6,7,9,20])

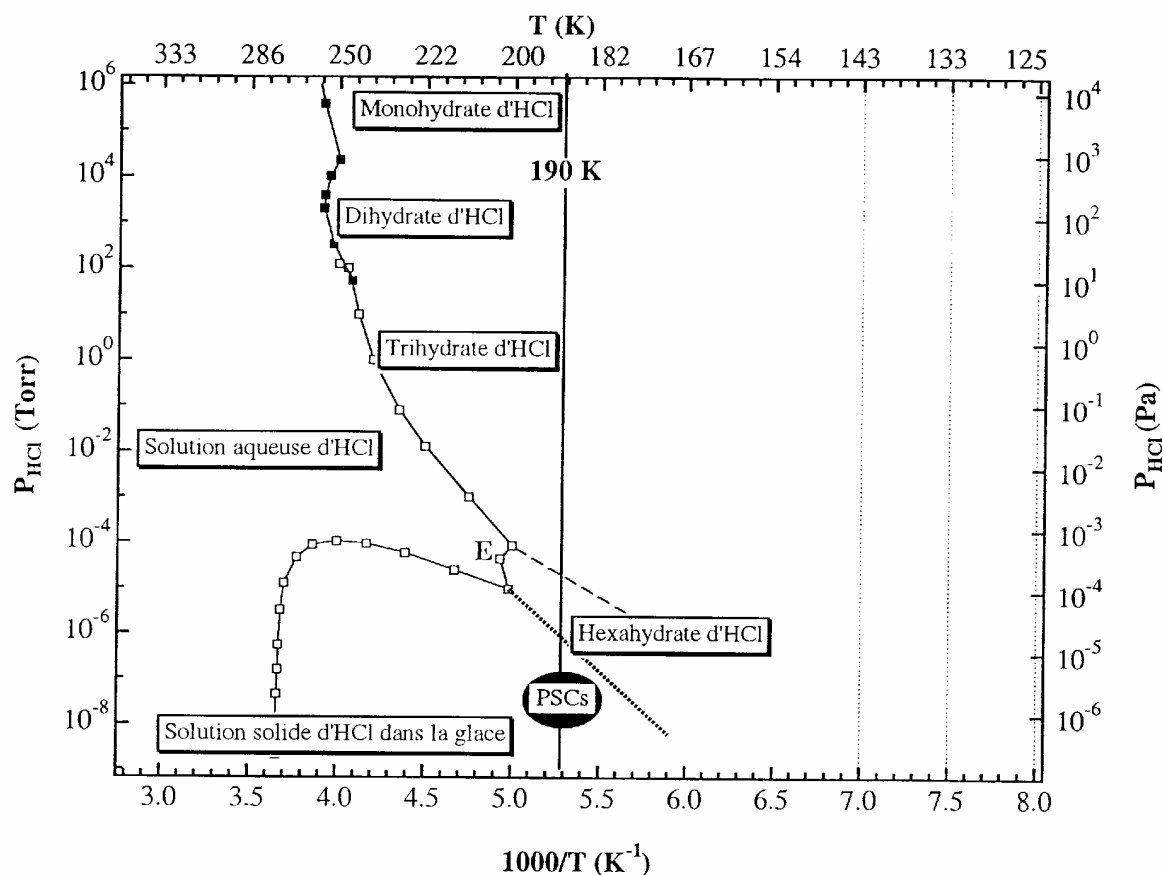


Figure V.3 : Diagramme de phases pression partielle de HCl/température du système HCl/H₂O en phase solide montrant le domaine d'existence des nuages stratosphériques polaires (PSCs). D'après la référence [23].

Les structures des différents hydrates de la figure V.3 ont été déterminées par divers auteurs (monohydrate [24], dihydrate [25], trihydrate [26], et hexahydrate [27]).

Dans ce travail notre démarche est de mesurer directement, par diffraction neutronique, l'évolution de la structure d'un film de **glace bien caractérisé** (voir chapitre IV) en fonction de la température et du degré de recouvrement en HCl. Cette étude est corrélée à une analyse dynamique réalisée par diffusion quasiélastique de neutrons.

V.3.1 Analyse structurale du système HCl /glace par diffraction de neutrons

Nous avons entrepris des expériences de diffraction de neutrons, le substrat choisi est le film de glace de 5 couches d'eau déjà décrit au § IV.1.3.3. La première étape consiste à étudier les propriétés de surface de l'échantillon par volumétrie isotherme d'adsorption.

Calibration de l'échantillon par volumétrie isotherme d'adsorption

Avant d'entreprendre ces expériences il nous a paru souhaitable de mesurer l'aire spécifique de notre échantillon de glace (*cf* introduction). Deux isothermes de calibration au méthane ont ainsi été mesurées à $T = 77,35$ K (figure V.4), la première sur un échantillon de MgO vierge, la seconde sur le même échantillon après adsorption de 5 couches d'eau à $T = 273$ K (température du mélange eau + glace).

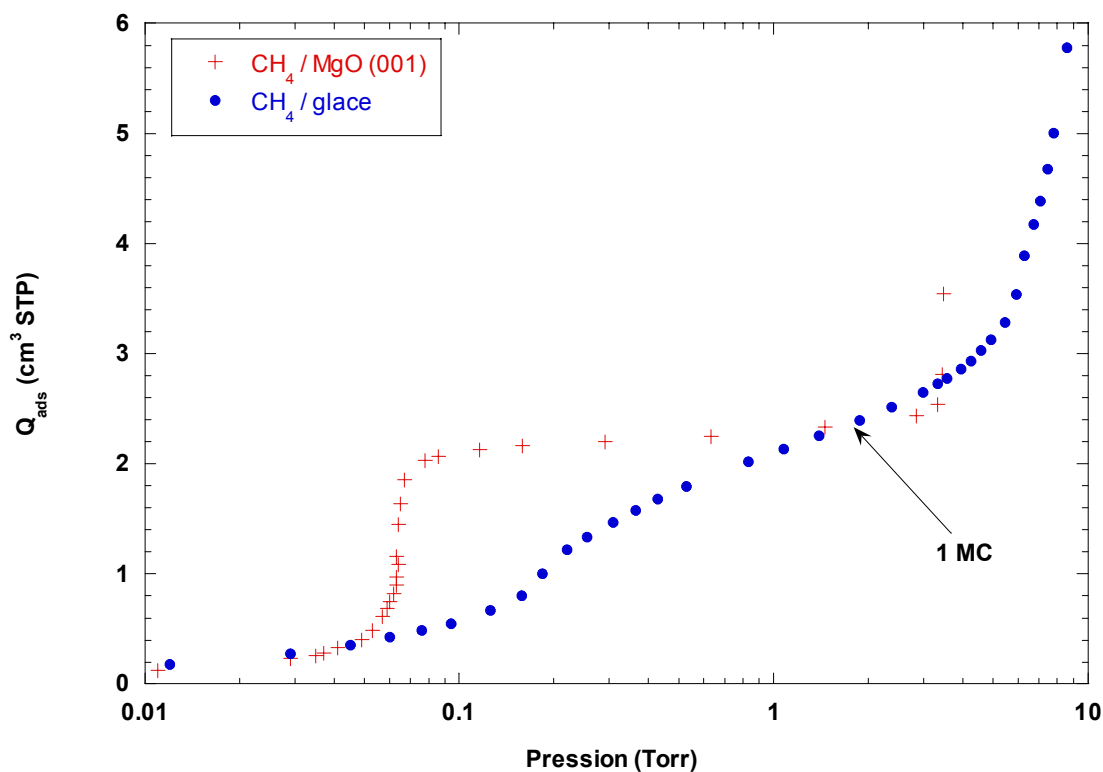


Figure V.4 : Isothermes d'adsorption de méthane sur un échantillon de MgO (001) avant et après adsorption du film de glace de 5 couches d'eau.

L'isotherme de CH_4 / MgO (001) (croix) de la figure V.4 montre que l'échantillon de MgO choisi est de bonne qualité (verticalité des marches, peu de sites actifs). Après adsorption du film de glace la forme de l'isotherme de méthane (points) est sensiblement modifiée, la première marche est toujours visible mais décalée et inclinée. Néanmoins le volume adsorbé correspondant à une monocouche (point d'inflexion indiqué par une flèche) de

méthane adsorbée sur le MgO nu ou sur le film de glace est quasiment identique (environ 2.35 cm^3 d'après la figure V.4). On en déduit que l'aire spécifique de notre échantillon de glace de 5 couches d'eau est très proche de celle du MgO ($\approx 10 \text{ m}^2 / \text{g}$). Ce résultat montre que l'on a formé probablement un film de glace uniforme sur le MgO plutôt que des cristallites 3D qui modifieraient la surface spécifique de l'échantillon. Cette étude montre donc que le film mouille la totalité de la surface du MgO.

Adsorption de HCl, étude structurale de l'interaction HCl - glace

Le degré de recouvrement en HCl (θ_{HCl}) est déterminé de la même façon que celui de l'eau, *i.e.* on suppose qu'une molécule de HCl est adsorbée par site de surface du MgO (Mg ou O). Le gaz est introduit dans la cellule porte-échantillon à $T = 190 \text{ K}$. Les températures et degrés de recouvrement étudiés lors de cette expérience intéressent directement les problèmes de la chimie atmosphérique puisque T est comprise entre 190 et 250 K et θ_{HCl} entre 0,3 et 1 MC.

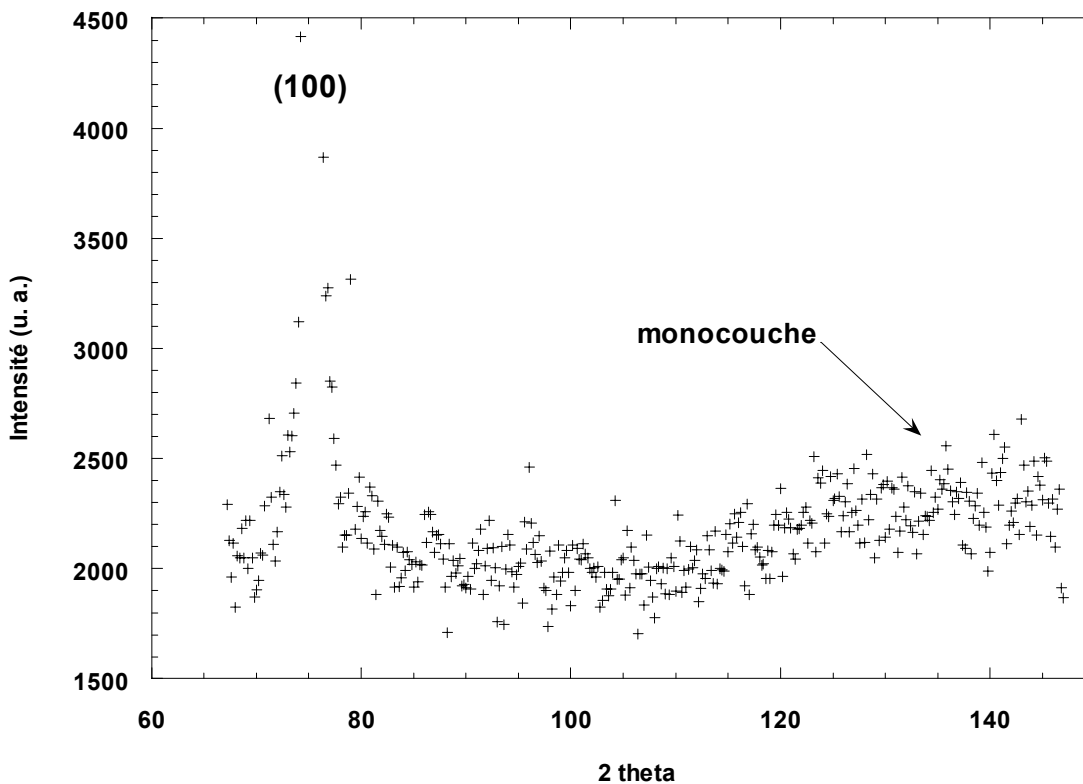


Figure V.5 : *Diffractogramme mesuré à $T = 190 \text{ K}$, il correspond au film de glace constitué de 5 couches d'eau adsorbées sur la poudre de MgO (001).*

Avant adsorption on enregistre à $T = 190$ K le diffractogramme du film de glace (figure V.5), il diffère sensiblement de celui montré sur la figure IV.18. Le pic (100) à $2\theta = 75,2^\circ$ ($Q = 1,618 \text{ \AA}^{-1}$) est en effet très intense, les pics (002), (101) et (102) sont inexistantes (ou dans le bruit). En revanche, on note toujours la présence de la bosse large située à $2\theta \approx 135^\circ$ ($Q \approx 2,450 \text{ \AA}^{-1}$) qui correspond à la phase $p(3 \times 2)$ décrite au chapitre précédent. L'effet d'anisotropie de croissance déjà rencontré au chapitre précédent semble être accentué. Le pic (002) est probablement très large, sa contribution ne sort pas du bruit de fond. Nous pensons que les cristallites ont un plan basal (0001) fortement développé (par rapport aux faces prismatiques) et sont ultra minces dans la direction [001] (quelques \AA).

Pour pouvoir suivre l'évolution de l'interaction de HCl avec ce film de glace, nous avons tracé sur la figure V.6 l'évolution de l'aire intégrée du pic (100) en fonction de la température et du degré de recouvrement (θ_{HCl}).

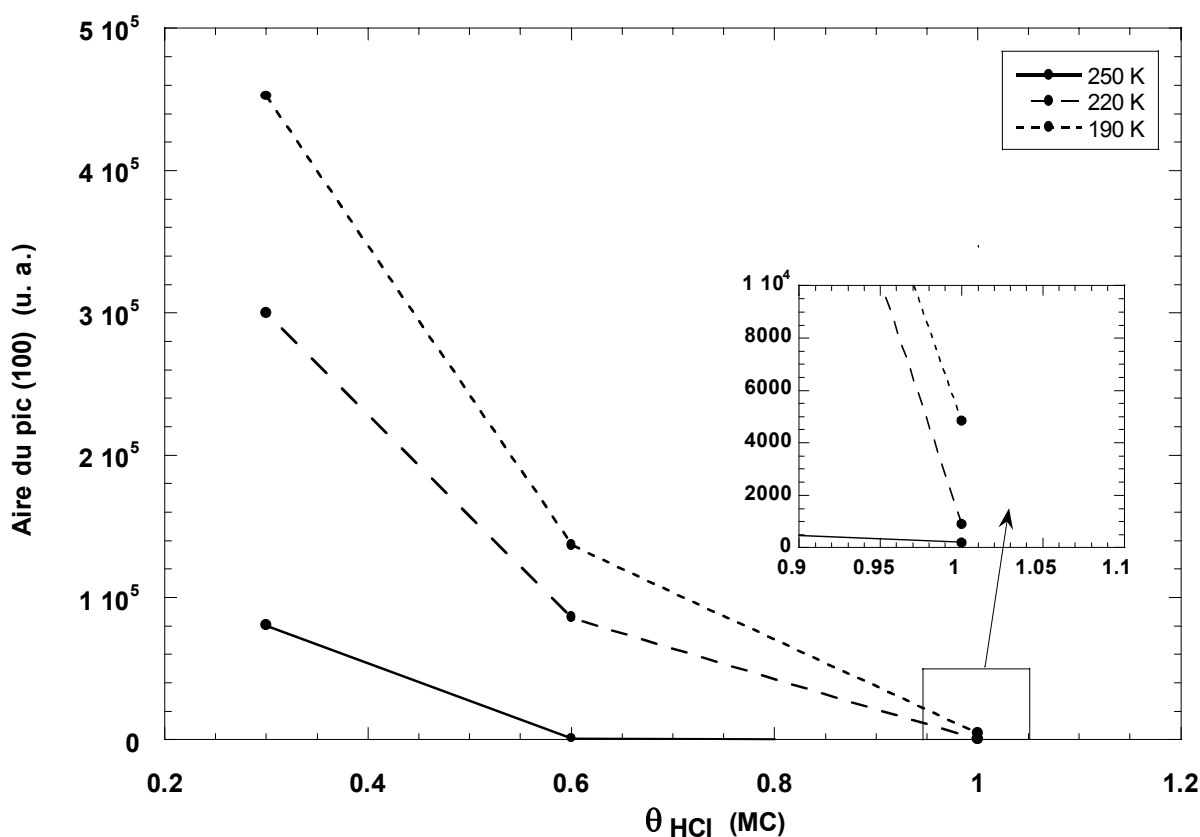


Figure V.6 : Evolution de l'aire intégrée du pic (100) de la glace I_h en fonction de la température et du degré de recouvrement θ_{HCl} .

L'aire du pic (100) diminue en fonction de la température et du degré de recouvrement, elle chute considérablement pour $\theta_{\text{HCl}} = 1$ MC où elle devient quasiment nulle à $T = 250$ K. Ce résultat montre que HCl amorphise peu à peu le film de glace. Nous présentons sur les figures V.7, V.8 et V.9 les diffractogrammes enregistrés à $T = 250$ K pour $\theta_{\text{HCl}} = 0,3$ MC, $\theta_{\text{HCl}} = 0,6$ MC et $\theta_{\text{HCl}} = 1$ MC respectivement. A cette température, pour $\theta_{\text{HCl}} = 0,3$ et $0,6$ MC une bosse large située vers $2\theta = 95^\circ$ ($Q = 1,955 \text{ \AA}^{-1}$) coexiste avec le pic (100) de la phase I_h . A fort taux de recouvrement en HCl (1 MC) une autre bosse apparaît vers $2\theta = 125^\circ$ ($Q \approx 2,352 \text{ \AA}^{-1}$) et le pic (100) disparaît complètement. On suppose alors qu'il n'y a plus de glace cristallisée dans notre échantillon. Rappelons que la bosse large dont le maximum se situe vers $2\theta = 135^\circ$ ($Q \approx 2,450 \text{ \AA}^{-1}$) est due à la monocouche $p(3 \times 2)$ déjà décrite au chapitre précédent.

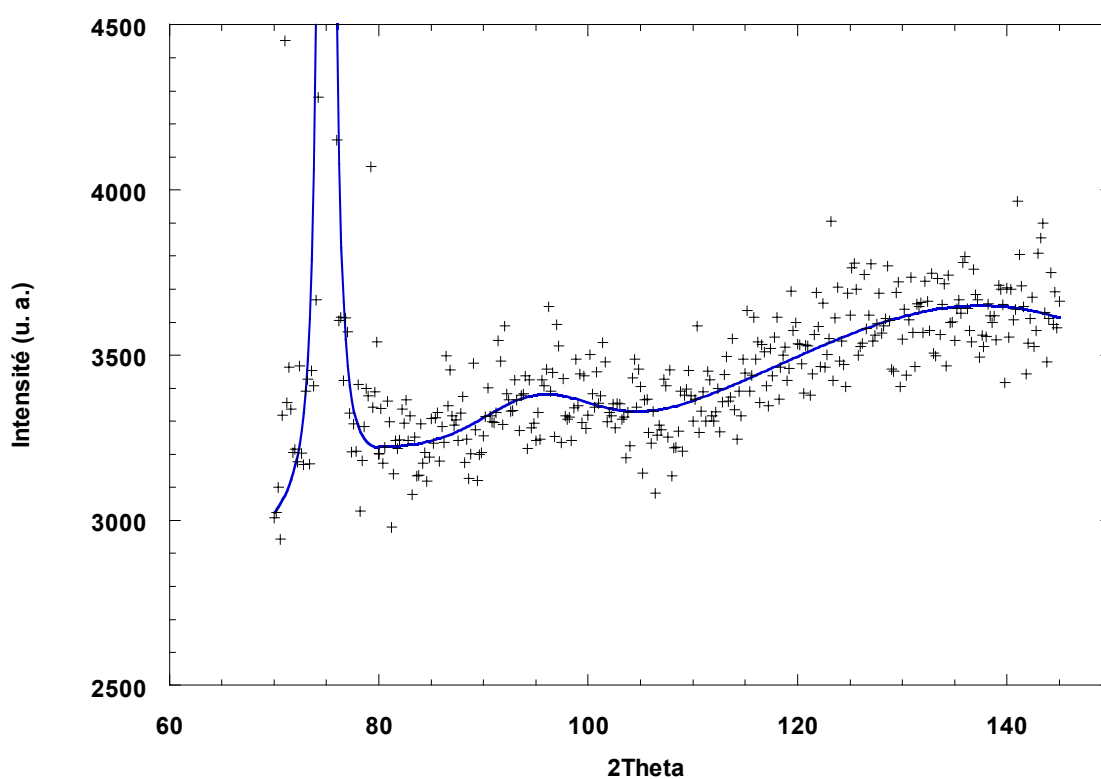


Figure V.7 : Diffractogramme mesuré à $T = 250$ K pour $\theta_{\text{HCl}} = 0,3$ MC adsorbée sur le film de glace de 5 MC. L'ajustement est réalisé à partir de fonctions gaussiennes.

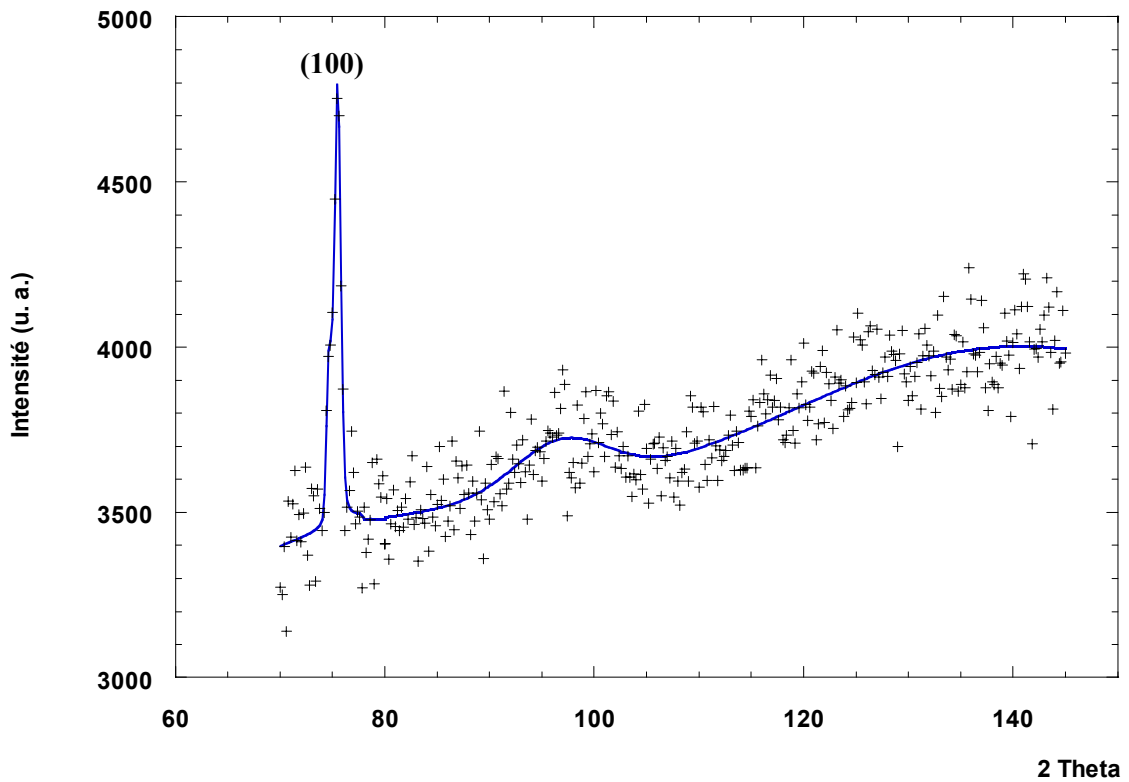


Figure V.8 : Diffractogramme mesuré à $T = 250$ K pour $\theta_{\text{HCl}} = 0,6$ MC adsorbée sur le film de glace de 5 MC. L'ajustement est réalisé à partir de fonctions gaussiennes.

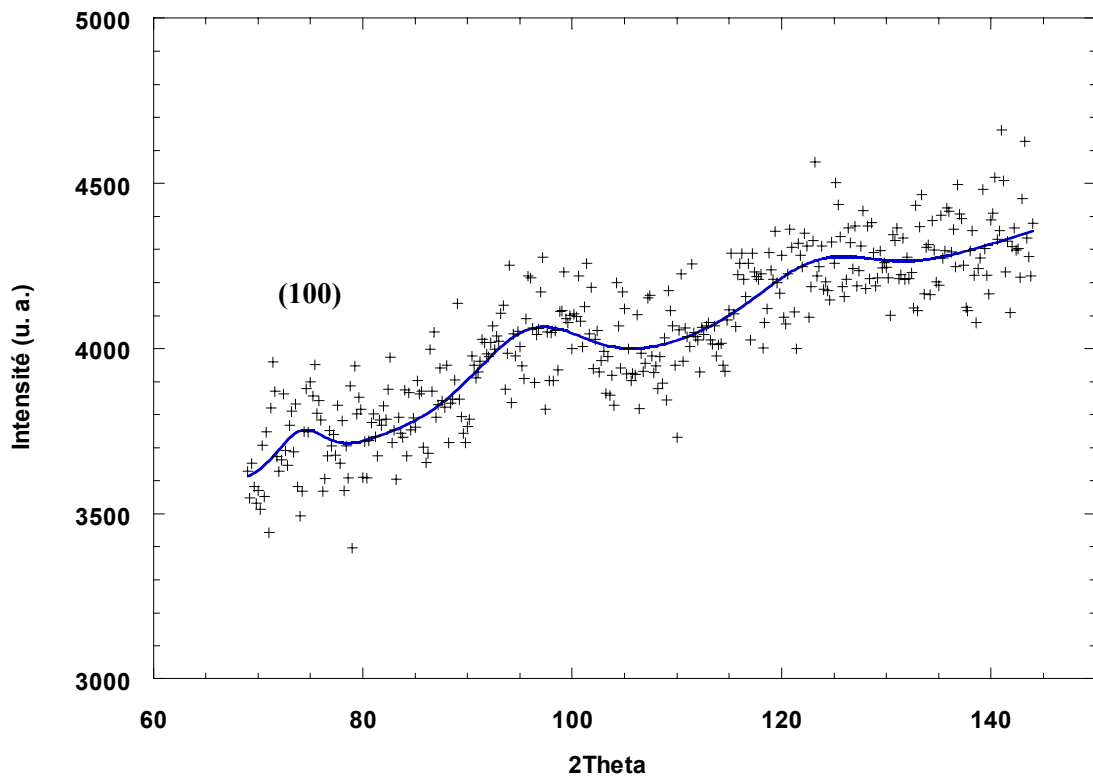


Figure V.9 : Diffractogramme mesuré à $T = 250$ K pour $\theta_{\text{HCl}} = 1$ MC adsorbée sur le film de glace de 5 MC. L'ajustement est réalisé à partir de fonctions gaussiennes.

Pour un degré de recouvrement en HCl donné nous mesurons des diffractogrammes à trois températures différentes (190, 220 et 250 K), puis refroidissons l'échantillon à $T = 190$ K pour introduire à nouveau du gaz HCl afin d'augmenter le degré de recouvrement θ_{HCl} . En réalité ce « recuit » joue sur la cristallinité de notre échantillon puisqu'avant d'introduire $\theta_{\text{HCl}} = 0,6$ MC un diffractogramme enregistré pendant une heure à $T = 195$ K et $\theta_{\text{HCl}} = 0,3$ MC montre que les pics (002), (101) et (102) de la glace I_h réapparaissent. Comme le montre la figure V.10 l'intensité de ces pics reste toutefois négligeable devant celle du (100).

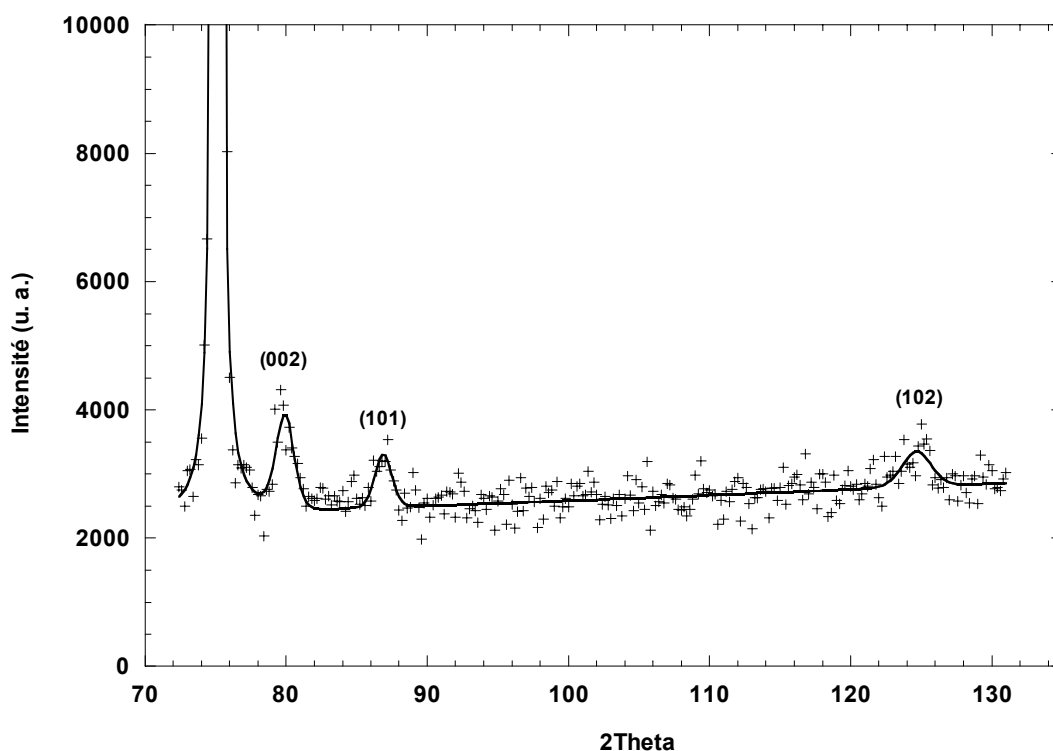


Figure V.10 : Diffractogramme mesuré à $T = 195$ K pour $\theta_{\text{HCl}} = 0,3$ MC adsorbée sur le film de glace de 5 MC. La mesure est effectuée après « recuit » de l'échantillon à $T = 250$ K. L'ajustement est réalisé à partir de fonctions gaussiennes.

C'est à fort taux de recouvrement en HCl ($\theta_{\text{HCl}} = 1$ MC) que l'évolution en température est la plus spectaculaire. A $T = 190$ K le diffractogramme de la figure V.11 s'identifie bien à celui de la glace hexagonale, un pic de faible intensité apparaît néanmoins vers $2\theta = 92^\circ$ ($Q = 1,908 \text{ \AA}^{-1}$). A $T = 220$ K de nouveaux pics apparaissent sur la figure V.12, certains correspondent à ceux d'une phase hydrate; le dihydrate de chlore [21]. Enfin à $T = 250$ K (figure V.9) tous les pics de diffraction disparaissent au profit de l'apparition de bosses larges (amorphe, liquide). Le film est alors complètement désordonné, le pic (100) disparaît complètement.

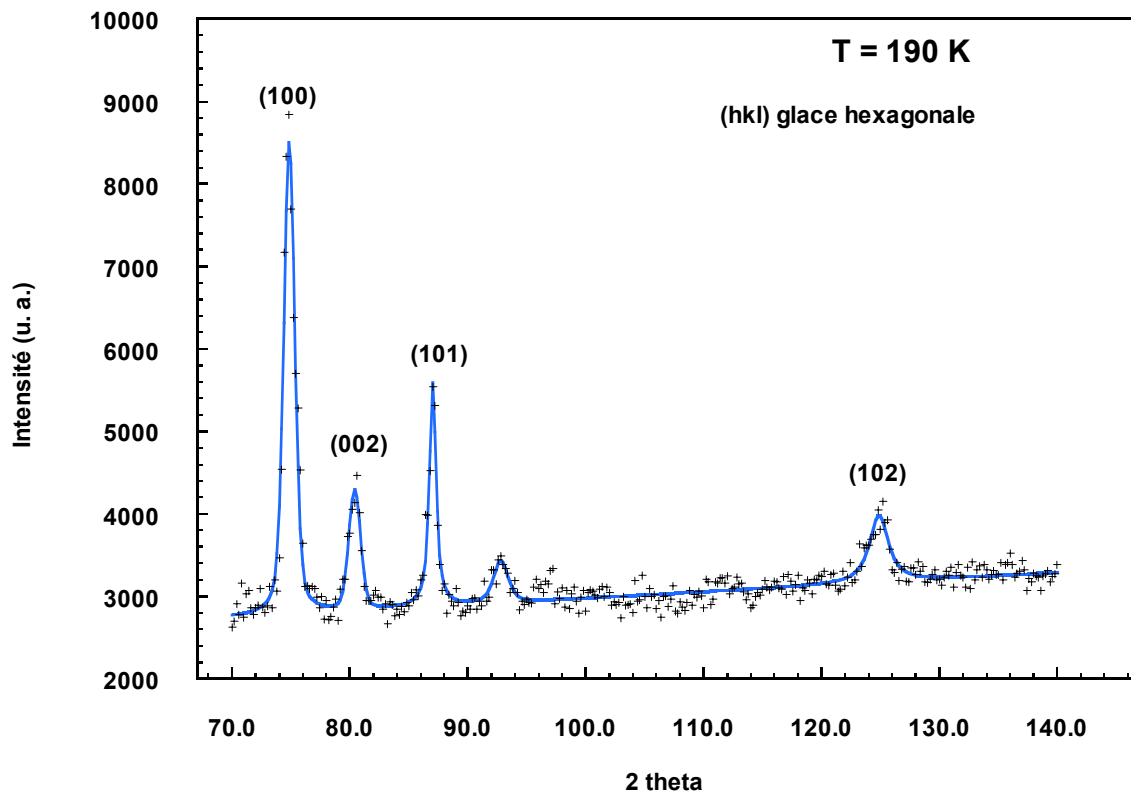


Figure V.11 : Diffractogramme mesuré à $T = 190\text{ K}$ pour $\theta_{\text{HCl}} = 1\text{ MC}$ adsorbée sur le film de glace de 5 MC . L'ajustement est réalisé à partir de fonctions gaussiennes.

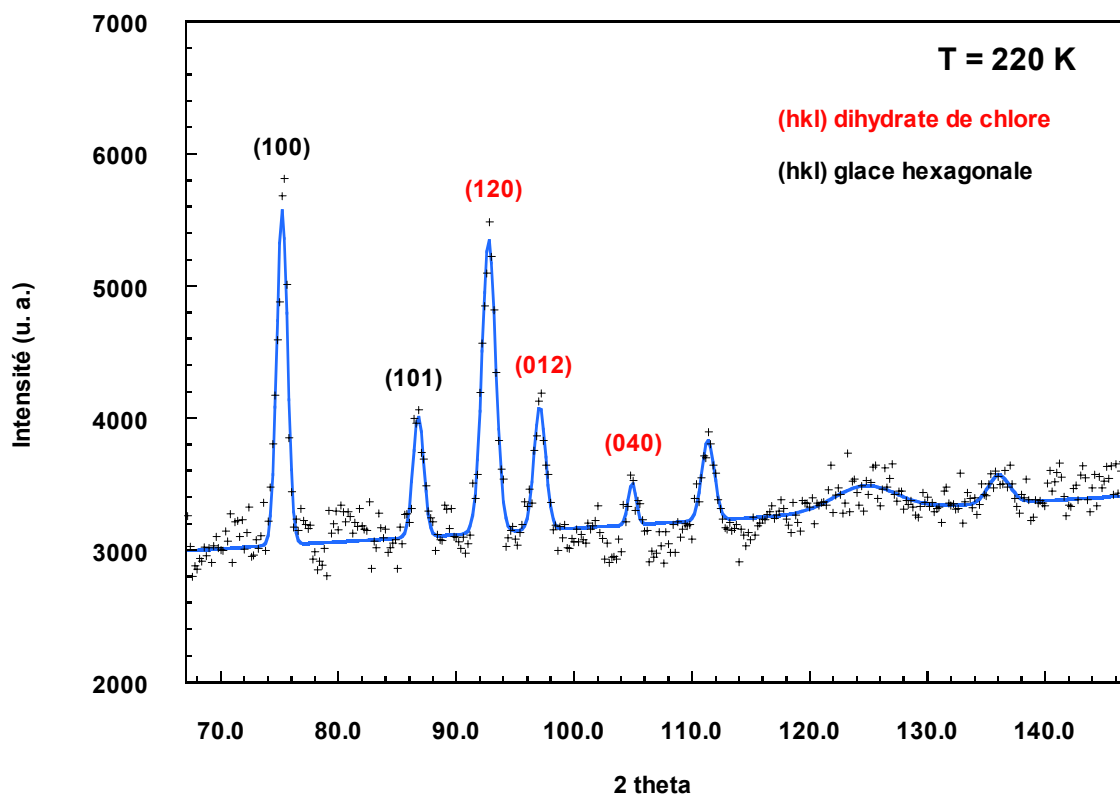


Figure V.12 : Diffractogramme mesuré à $T = 220\text{ K}$ pour $\theta_{\text{HCl}} = 1\text{ MC}$ adsorbée sur le film de glace de 5 MC . L'ajustement est réalisé à partir de fonctions gaussiennes.

V.3.2 Analyse dynamique du système HCl / glace par diffusion quasiélastique de neutrons

Adsorption de 0,3 couche de HCl

On effectue un comptage du signal correspondant à 0,3 MC de HCl adsorbée sur le film de glace de 5 MC pendant 16 heures à $T = 190$ K, on ne décèle alors aucune « aile quasiélastique » sur le pic élastique. En chauffant notre échantillon à $T = 220$ K toujours aucun changement n'est observé, par contre à $T = 250$ K les spectres de la figure V.13 montrent clairement l'apparition d'une mobilité.

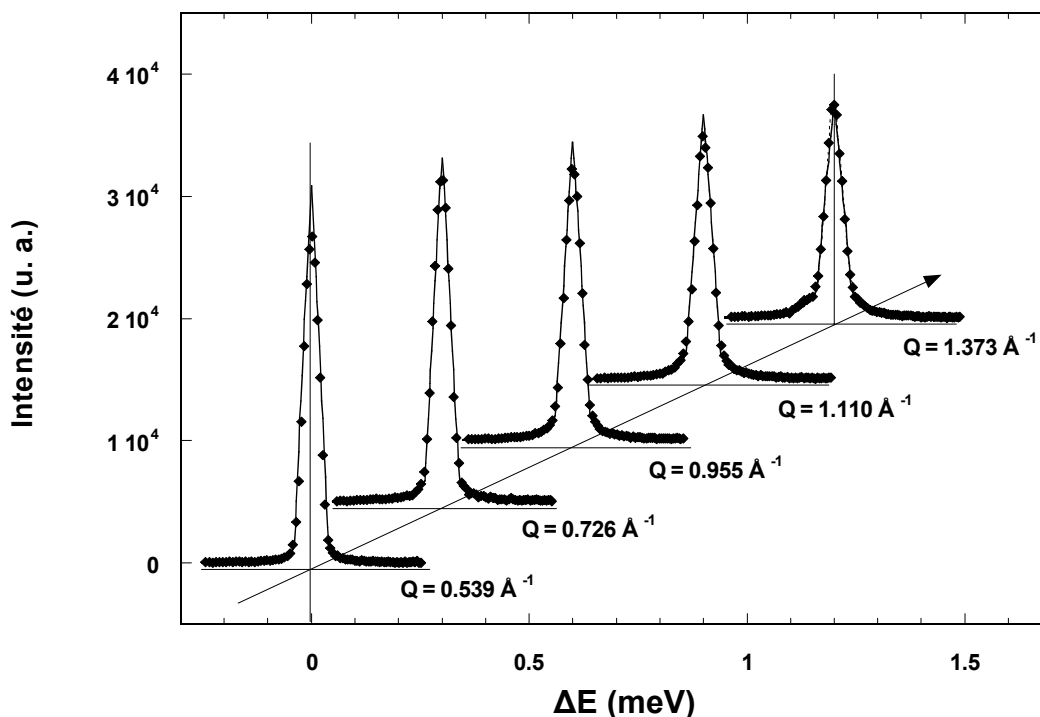


Figure V.13: Evolution du signal quasiélastique en fonction de Q . La mesure est effectuée à $T = 250$ K pour $\theta_{\text{HCl}} = 0,3$ MC adsorbée sur le film de glace de 5 monocouches d'eau. Les résultats expérimentaux sont représentés par des points, l'ajustement est calculé à partir d'un modèle convoluant la translation et la rotation

Ces courbes montrent un élargissement du pic élastique en fonction du vecteur de diffusion Q . La loi de diffusion choisie pour l'ajustement des courbes est donnée par l'équation (18) du chapitre III. Nous supposons des mouvements de translation de type Brownien et une diffusion rotatoire isotrope des molécules. La convolution avec la résolution expérimentale est réalisée.