Détermination du moment quadrupolaire nucléaire de N14

Autor(en): **Bassompierre, André**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Archives des sciences [1948-1980]**

Band (Jahr): **9 (1956)**

Heft 5: **Colloque Ampère**

PDF erstellt am: **28.05.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-739030

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.
Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.
Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Ein Dienst der *ETH-Bibliothek*
ETH Zürich, Rämistrasse 101, 8092 Zürich, Schweiz, www.library.ethz.ch

http://www.e-periodica.ch

Détermination du moment quadrupolaire nucléaire de N^{14}

par André Bassompierre

Laboratoire d'électronique et de radioélectricité de l'Université de Paris, Fontenay-aux-Roses (Seine).

Simmon, Anderson & Gordy [1] ont observé un triplet de structure fine dans la raie $J = 0 \longrightarrow 1$ du spectre hertzien de rotation de la molécule HCN. Ce triplet est dû au couplage du moment quadrupolaire nucléaire Q de N^{14} avec les charges de la molécule qui créent un potentiel électrique V inhomogène au voisinage du noyau. La molécule est linéaire et la constante de couplage quadrupolaire $e\,Q \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}$ (Oz dirigé suivant l'axe de la molécule) est égale à $-4{,}58$ MHz. Nous avons utilisé ce résultat pour essayer de calculer le moment quadrupolaire [2], qui est mal connu en raison de la grande difficulté qu'il y a à déterminer les gradients de champ électrique.

Nous avons déterminé une fonction d'onde antisymétrique pour les quatorze électrons de la molécule à l'aide de la méthode des champs « self-consistent » (3). Cette fonction est de la forme

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{(14)\,!}} \sum_{P} (-1)^p \, P \, (\varphi_1 \, \alpha)^1 \, (\varphi_2 \, \beta)^2 \ldots (\varphi_7 \, \beta)^{14} \tag{1}$$

Les fonctions φ_i sont des fonctions d'espace orthonormées et α, β les deux fonctions de spin. P est un opérateur permutant les électrons désignés par les indices supérieurs et p sa parité. Nous développons les fonctions φ_i suivant un système de fonctions χ_p formant un sous-espace χ, soit

$$\varphi_i = \sum_p \chi_p \, C_{pi} \tag{2}$$

La détermination des fonctions φ_i est ainsi ramenée à celle des paramètres C_{pi}. Ceux-ci, écrits sous forme de matrices colonnes, sont donnés par l'équation

$$F\,C_i = \varepsilon_i \, S\,C_i \tag{3}$$

où F est la représentative de l'opérateur de Fock dans la base χ. S est la matrice $\int \chi_p \chi_q d\nu$. Les scalaires $-\varepsilon_i$ sont les énergies d'ionisation verticale des états correspondants.

Nous avons pris pour base un système de fonctions d'onde atomique. L'intérêt qu'il y a à utiliser de telles fonctions est que l'on peut obtenir un espace χ suffisamment complet avec un petit nombre de ces fonctions. Nous avons utilisé les onze fonctions suivantes:

$$(1s)_C,\ (1s)_N,\ (1s)_H,\ (2s)_C,\ (2p_z)_C,\ (2s)_N,\ (2p_z)_N,\ (2p_x)_C,\ (2p_x)_N,\ (2p_y)_C,\ (2p_y)_N$$

Les fonctions d'onde atomique que nous avons utilisées sont celles de Duncanson & Coulson [4].

L'introduction de ces fonctions dans les équations conduit d'abord à évaluer de nombreuses intégrales dont le calcul est d'autant plus pénible que la molécule est hétéronucléaire.

L'équation (3) a la forme d'une équation aux vecteurs propres du onzième ordre, dont l'opérateur $S^{-1}F$ est une fonction quadratique de certains des vecteurs C_i (seulement ceux correspondant aux états occupés).

L'ordre de l'équation peut être réduit par considérations de symétrie. On obtient ainsi une équation du septième ordre et deux du deuxième ordre. Les états $(1s)$ se combinant très peu aux autres états, l'équation du septième ordre se réduit à des équations d'ordre 1, 1, 5.

Nous avons résolu l'équation (3) par itération, en utilisant la méthode de Mayot [5] pour résoudre les équations du cinquième ordre. Le champ est devenu « self consistent » à la dixième itération. Les valeurs que nous avons obtenues pour ε_i sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Avec les notations précédentes, le gradient de champ électrique $\frac{\partial^2 V_e}{\partial z^2}$ créé par les électrons peut s'écrire:

$$\frac{\partial^2 V_e}{\partial z^2} = -2e \sum_i C_i^* L C_i$$

où L est la représentative de $\frac{3\cos^2\theta - 1}{r^3}$ dans la base χ (les coordonnées sphériques étant centrées sur le noyau N). Le calcul de L nous a montré que des termes souvent omis dans l'évaluation des gradients ne sont pas négligeables.

En introduisant d'autre part le gradient de champ électrique créé par les noyaux H et C, nous obtenons $\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = -(2{,}729)\, e$ (nous avons utilisé le premier rayon de Bohr pour unité de longueur).

Nous en déduisons

$$Q = 0{,}0071 . 10^{-24} \text{ cm}^2 .$$

Cette valeur étant très petite, elle confirme le fait que les moments quadrupolaires sont petits au voisinage des nombres magiques. Elle apporte aussi une confirmation de l'intérêt du modèle des couches pour l'étude de la structure de N^{14}.

En effet, suivant ce modèle, sous sa forme la plus simple, les sept protons et les sept neutrons seraient dans les états $(1s_{1/2})^2$ $(1p_{3/2})^4$, $(1p_{1/2})^2$ et le moment quadrupolaire serait nul. La valeur que nous proposons étant très petite, elle peut être justifiée simplement par une faible rupture du couplage $j\ j$, des nucléons $1p_{1/2}$ due à l'intéraction tensorielle.

RÉFÉRENCES

1. Simmon, Anderson et Gordy, *Phys. Rev.*, 1950, *77*, 77.
2. Bassompierre, J. C. *Chim. Phys.*, 1954, *51*, 614; *C. R.*, 1954, *239*, 1298; *C.R.*, 1955, *240*, 285.
3. Roothaan, *Rev. Modern. Phys.*, 1950, *23*, 69.
4. Duncanson et Coulson, *Proc. Roy. Soc. Edin.*, 1944, *62*, 37.
5. Mayot, *Ann. Astrophys.*, 1950, *13*, 282.