Zeitschrift: Archives des sciences [1948-1980]
Herausgeber: Société de Physique et d'Histoire Naturelle de Genève
Band: 9 (1956)
Heft: 5: Colloque Ampère

Artikel: Détermination du moment quadrupolaire nucléaire de N14
Autor: Bassompierre, André
DOI: https://doi.org/10.5169/seals-739030

Nutzungsbedingungen
Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation
L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use
The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 10.07.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://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.