

TD n° 3 - Moments multipolaires "statiques" et emission Gamma

Les moments multipolaires permettent d'étudier l'interaction entre la distribution de charge que forme le noyau et le champ électromagnétique. Dans ce premier TD, nous étudions simplement l'énergie de cette distribution de charge avant de voir l'interaction avec le champ dans le TD 5. Cette interaction est particulièrement importante car la spectroscopie nucléaire permet de remonter aux propriétés (spin et parité) des différents niveaux.

Nous commencerons par raisonner en coordonnées cartésiennes et généraliserons nos conclusions dans le cadre des coordonnées sphériques qui est en fait le cadre "naturel" de l'expression des moments multipolaires.

1 Moments multipolaires électriques d'une distribution de charges

A une distribution de charge $\rho(\vec{r})$ plongée dans un champ électrique extérieur de potentiel $V(\vec{r})$ est associée une énergie coulombienne dont la formule générale est :

$$W = \int \rho(\vec{r})V(\vec{r})d^3\vec{r}$$

C'est une situation naturelle pour un noyau où les électrons du milieu environnant (cristal par exemple) créent un champ électrique.

Pour expliciter ce terme d'interaction coulombienne, nous allons, en coordonnées cartésiennes, développer le potentiel en série de Taylor au voisinage du noyau (où on a situé l'origine du repère) :

$$V(\vec{r}) = V_0 + \sum_{i=1}^3 x_i \left(\frac{\partial V}{\partial x_i} \right)_0 + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} x_i x_j \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 + \dots$$

On injecte cette formule dans l'énergie d'interaction ce qui permet de mettre en évidence, dans les termes correspondant à chacun des ordres, les composantes du développement multipolaire de la distribution de charge $\rho(\vec{r})$ ¹ :

- ordre 0, le **monopôle** électrique : $q = \int \rho(\vec{r})d^3\vec{r}$
- ordre 1, les trois composantes du **dipôle** : $p_i = \int x_i \rho(\vec{r})d^3\vec{r}$
- ordre 2, les cinq composantes indépendantes du **quadrupôle** : $Q_{ij} = \int (3x_i x_j - \delta_{i,j} r^2) \rho(\vec{r})d^3\vec{r}$

1- Montrez, en utilisant ces expressions ainsi que celle du champ électrique ($E_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i}$), qu'on a

$$W = q.V_0 - \vec{p} \cdot \vec{E} - \frac{1}{6} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial E_j}{\partial x_i} \right) Q_{ij} + \dots$$

Pour le terme d'ordre 2, quadrupolaire, il faut utiliser le fait que la divergence du champ électrique *externe* (ou le laplacien du potentiel associé) est nulle² (si on ne prend pas en compte le champ créé par les électrons de la couche K , cf II.2.5).

2- Expérimentalement, le **moment dipolaire électrique d'un noyau est toujours nul**. Comment pouvez-vous le justifier ?

¹Ce sont les termes qui apparaissent lorsqu'on développe en série de Taylor le potentiel du champ électrique créé par la distribution de charge : $\Phi(\vec{R}) = \int \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{R}-\vec{r}|} d^3\vec{r} = \frac{q}{R} + \sum_{i=1}^3 p_i \frac{x_i}{R^3} + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} Q_{ij} \frac{x_i x_j}{R^5} + \dots$

²Si $i = j$: $-\frac{1}{6} \sum_i \left(\frac{\partial E_i}{\partial x_i} \right)_0 Q_{ii} = \frac{1}{2!} \sum_i \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i^2} \right)_0 \int (x_i^2 + \frac{r^2}{3}) \rho(\vec{r})d^3\vec{r}$. Le deuxième terme de l'intégrale se met en facteur et donne : $\frac{1}{2!} \left(\sum_i \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i^2} \right)_0 \right) \int \frac{r^2}{3} \rho(\vec{r})d^3\vec{r} = 0$.

2 Moment quadrupolaire électrique

On a décomposé l'énergie d'interaction de la manière suivante : $W = W_0 + W_1 + W_2 + \dots$, W_2 étant le terme d'interaction quadrupolaire.

Si on choisit judicieusement notre système d'axes (axes principaux du gradient de champ), on élimine les dérivées croisées et il reste :

$$W_2 = \frac{1}{6} \left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right)_0 Q_{xx} + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right)_0 Q_{yy} + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 Q_{zz} \right] \quad (1)$$

Si ensuite, pour simplifier, on se limite au cas d'un gradient de champ ayant une symétrie axiale autour de l'axe Oz , et en utilisant $(\Delta V)_0 = 0$, on peut montrer qu'on se ramène à :

$$W_2 = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 Q_{zz} \quad (2)$$

Cependant, $Q_{zz} = \int (3z^2 - r^2) \rho(\vec{r}) d^3\vec{r}$ est calculé dans le système d'axes privilégiés du champ. Ce système n'est pas, *a priori*, celui le plus adapté au noyau. Pour passer d'un système d'axe à un autre, il suffit de faire un changement de variables dans l'intégrale. On montre alors, que pour passer d'un système (Ox', Oy', Oz') à un système (Ox, Oy, Oz) , où Oz' et Oz font un angle α , on a la relation :

$$Q_{zz} = \frac{3 \cos^2(\alpha) - 1}{2} Q_{z'z'} \quad (3)$$

Si les axes (Ox', Oy', Oz') sont les axes de symétrie du noyau, dits axes intrinsèques, on appelle alors le moment quadrupolaire dans ce repère, le moment quadrupolaire intrinsèque :

$$Q_{int} = \int (3z'^2 - r'^2) \rho(\vec{r}') d^3\vec{r}' = \langle \rho(\vec{r}') (3z'^2 - r'^2) \rangle \quad (4)$$

Pour les noyaux en forme de ballon de rugby ou bien encore en forme de soucoupe, il y a toujours un axe Oz' intrinsèque privilégié.

Pourquoi les noyaux sphériques ont-ils un moment quadrupolaire électrique nul ?

2.1 Modèle simple de noyau doublement magique ± 1 nucléon

Considérons un noyau doublement magique auquel on ajoute un proton. Les noyaux magiques ont tous des moments quadrupolaires nuls, ce qu'on interprète en disant que ces noyaux sont sphériques.

- 1- En supposant que j (norme du moment cinétique) et m (projection de \vec{j} sur l'axe Oz du gradient de champ) caractérise le noyau, que pouvez-vous dire du moment cinétique de l'extra proton et de sa projection sur l'axe Oz ?
- 2- Si on se représente le noyau comme un cœur sphérique auquel on ajoute un extra proton qui tourne dans un plan donné, montrez qu'une formulation "semi-classique" de la relation reliant Q_{zz} à Q_{int} donne :

$$Q(j, m) = \frac{3m^2 - j(j+1)}{2j(j+1)} Q_{int} \quad (5)$$

- 3- Montrez alors que quantiquement, en définissant l'opérateur "moment quadrupolaire électrique" $\hat{Q} = q(3z^2 - r^2)$, on obtient :

$$Q(j, m) = \int \phi_{j,m}^*(\vec{r}) [q(3z^2 - r^2)] \phi_{j,m}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (6)$$

où $\phi_{j,m}$ est la fonction d'onde individuelle du nucléon considéré.

- 4- Montrez que pour un j donné, $Q(j, m)$ se déduit de $Q(j, j)$.
- 5- Enfin, montrez que pour un noyau quelconque ayant un nombre de nucléons A et possédant un moment cinétique total J , la généralisation du raisonnement précédent conduit à la formule suivante :

$$Q \equiv Q(J, J) = \sum_{\alpha=1}^A e_{\alpha} \int \psi_{J,J}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) (3z_{\alpha} - r_{\alpha}) \psi_{J,J}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_A$$

où e_{α} vaut 0 pour un neutron et e pour un proton, et où $\psi_{J,J}$ est la fonction d'onde *globale* du noyau.

Cette formule très générale n'est pas tellement exploitable mais elle va nous permettre d'introduire le moment quadrupolaire électrique en coordonnées sphériques et d'en déduire certaines règles générales.

2.2 Lien entre les moments multipolaires et les harmoniques sphériques

Les harmoniques sphériques sont la base naturelle pour décrire les fonctions de θ et ϕ . Elles apparaissent, par exemple, comme états propres des potentiels en $1/r$.

On rappelle les expressions de quelques harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ \mathcal{Y}_1^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} & \mathcal{Y}_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ \mathcal{Y}_2^{\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} & \mathcal{Y}_2^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\pm\phi} & \mathcal{Y}_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{aligned}$$

On considère l'expression

$$Q_{l,m} \equiv \int \rho(\vec{r}) r^l \mathcal{Y}_l^{m*} d^3 \vec{r}$$

- 1- Exprimer $Q_{0,0}$ en fonction du monopôle électrique.
- 2- Même question pour $Q_{1,0}$ et le dipôle électrique et $Q_{2,0}$ et le quadrupôle.

De manière générale, on peut trouver un lien entre les $2l + 1$ fonctions $Q_{l,m}$ correspondant à une valeur de l fixée et les $2l + 1$ composantes du tenseur d'ordre l décrivant le moment multipolaire d'ordre l .

3 Moments multipolaires électriques en coordonnées sphériques

Pour un noyau quelconque, de nombre atomique A , dans un état caractérisé par un moment cinétique total J de projection M , on généralise la formule précédente à l'aide de celle du paragraphe II.1.6 :

$$Q_{l,m}(J, M) \equiv \sum_{\alpha=1}^A e_{\alpha} \int \psi_{J,M}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) r_{\alpha}^l \mathcal{Y}_l^{m*}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) \psi_{J,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \dots d^3 \vec{r}_A \quad (7)$$

A partir de cette formule qui donne le moment multipolaire d'ordre l pour un noyau quelconque, retrouvez les règles générales suivantes.

- 1- Montrez qu'il n'y a pas de moments électriques d'ordres impairs en vous rappelant que la parité des fonction \mathcal{Y}_l^m est $(-1)^l$ et que l'opérateur parité change (r, θ, ϕ) en $(r, \pi - \theta, \phi + \pi)$.
- 2- Montrez qu'il ne peut y avoir de moment électrique d'ordre l pour les états $J < l/2$. Pour cela, vous traiterez $r_{\alpha}^l \mathcal{Y}_l^{m*}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha})$ comme une fonction d'onde, et vous développerez $\Psi_{\alpha}^* = \psi_{J,M}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) r_{\alpha}^l \mathcal{Y}_l^{m*}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha})$ sur la base commune aux opérateurs $I^2 = (J + l)^2$ et $I_z = J_z + l_z$.

L'émission γ

L'émission γ est un moyen d'investigation de choix pour l'étude des noyaux et en particulier de la structure des niveaux. Nous voyons ici quelques propriétés de cette émission.

4 Approximation dipolaire électrique

Le rayonnement est dû au déplacement des charges dans la source. Ce déplacement induit une densité de courant, \vec{J} . On peut montrer que la puissance moyenne en fonction de $\vec{J} = e\vec{v} = \frac{e}{m}\vec{p}$ et de l'angle solide sous lequel est vu le détecteur depuis la source s'écrit

$$dP \propto \left| \vec{n} \cdot \int \vec{J} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} d^3 \vec{r}' \right|^2 d\Omega. \quad (8)$$

La probabilité par unité de temps qu'un photon soit émis dans l'angle solide $d\Omega$ est donnée par $d\lambda = \frac{dP}{\hbar\omega}$.

On se place de plus dans le cadre de l'approximation dipolaire électrique pour laquelle $\vec{k} \cdot \vec{r}' \ll 1$. C'est le cas par exemple pour une transition nucléaire de 100 keV où

$$kr' = \frac{\omega}{c} r' = \frac{\hbar\omega}{\hbar c} r' = \frac{100 \times 10^{-3}}{200 \times 10^{-6}} \times 10 = 5 \times 10^{-3}$$

Quantiquement, l'émission d'un rayonnement est accompagnée d'un changement d'état du proton considéré. On considère un proton émetteur dans l'état initial $|\varphi_i\rangle$ et l'état final $|\varphi_f\rangle$. Le principe de correspondance permet d'écrire

$$\int \vec{p} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} d^3\vec{r}' \iff \langle \varphi_f | \hat{p} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} | \varphi_i \rangle \approx \langle \varphi_f | \hat{p} | \varphi_i \rangle$$

D'où

$$d\lambda \propto \left| \vec{n} \cdot \langle \varphi_f | \frac{\hat{p}}{m} | \varphi_i \rangle \right|^2 d\Omega$$

L'énergie du photon est donnée par la relation $E_i - E_f = pc = \hbar kc$. Grace au théorème d'Ehrenfest

$$\langle \varphi_i | \frac{\hat{p}}{m} | \varphi_f \rangle = \frac{d}{dt} \langle \varphi_i | \hat{r}' | \varphi_f \rangle = \frac{E_i - E_f}{i\hbar} \langle \varphi_i | \hat{r}' | \varphi_f \rangle = i\omega \langle \varphi_i | \hat{r}' | \varphi_f \rangle$$

Considerant que $\hat{n} \cdot \hat{r} = r \sin\theta$ et que $\int_{4\pi} \sin^2\theta d\Omega = \frac{8\pi}{3}$ on obtient finalement pour la probabilité de transition dipolaire électrique

$$\lambda \propto |\langle \varphi_f | \hat{r}' | \varphi_i \rangle|^2$$

En utilisant l'identité $|r|^2 = \frac{1}{2}(|x+iy|^2 + |x-iy|^2 + |z|^2)$ et le lien entre les opérateurs $\hat{Q}_{1,i}$ avec $i=-1,0,+1$ et les coordonnées de l'opérateur position :

$$\hat{Q}_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e(\hat{x} + i\hat{y}), \quad \hat{Q}_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} e\hat{z}, \quad \hat{Q}_{1,+1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e(\hat{x} - i\hat{y})$$

on arrive l'expression suivante pour la probabilité de transition dans tout l'espace :

$$\lambda \propto \left| \langle \varphi_f | \sum_{m=-1}^{+1} \hat{Q}_{1,m} | \varphi_i \rangle \right|^2$$

1- En déduire les règles de sélection de l'émission dipolaire électrique ($l=1$).

2- On se place de nouveau dans le **cas général sans approximation**.

Les propriétés de parité des termes des développements multipolaires électrique et magnétique sont les suivants :

Les moments multipolaires électrique de l pair et magnétiques de l impair sont pairs alors que les autres sont impairs.

a) En déduire les règles de sélection de l'émission 2^l polaire électrique ($l=1, 2, 3, \dots$ pour E1, E2, E3..)

b) idem pour l'émission 2^l polaire magnétique (M1, M2, M3..)

5 Quelques exemples

1- Quelles sont les transitions envisageables pour la désexcitation du premier niveau excité d'un pair-pair vers son fondamental ?

2- Quelles sont les transitions envisageables pour la désexcitation d'un état $5/2^+$ vers un $3/2^+$?

3- Dites pourquoi on observe au voisinage des nombres magiques (par exemples dans les noyaux impairs avec un nombre de protons entre 39 et 49) des transitions de type M4 ? On appelle les états subissant ces transitions avec des vies moyennes élevées des **états isomériques**.

4- Pourquoi les transitions de type E1 (majoritaires dans la désexcitation des électrons) sont presque absentes dans le cas des noyaux ?

5- Les premiers états du spectre de ^{59}Ni sont : $(0; 3/2^-)$, $(0, 34; 5/2^-)$, $(0, 46; 1/2^-)$, $(0, 88; 3/2^-)$, $(1, 19; 5/2^-)$, $(1, 3; 1/2^-)$, $(1, 34; 7/2^-)$. Si ^{59}Ni est peuplé dans son état excité situé à 1,34 MeV, par quels types de transitions γ se désexcitera-t-il de façon majoritaire ? Même question pour l'état situé à 1,3 MeV.

6 Estimation des probabilités de transition

Dans le cas d'une transition 2^l polaire, on donne l'expression de la probabilité de transition en fonction des opérateurs moments multipolaires électriques ou magnétiques $\hat{O}_{l,m}$:

$$\lambda = \frac{8\pi(l+1)}{l[(2l+1)!!]^2} \frac{\omega k^{2l}}{\hbar c} \sum_{m=-l}^{+l} |\langle \varphi_f | \hat{O}_{l,m} | \varphi_i \rangle|^2$$

A partir de la figure suivante, déduire qu'on peut à partir de la durée de vie d'une transition donnée en fonction de l'énergie de la transition discriminer de manière efficace entre différents types de transitions.

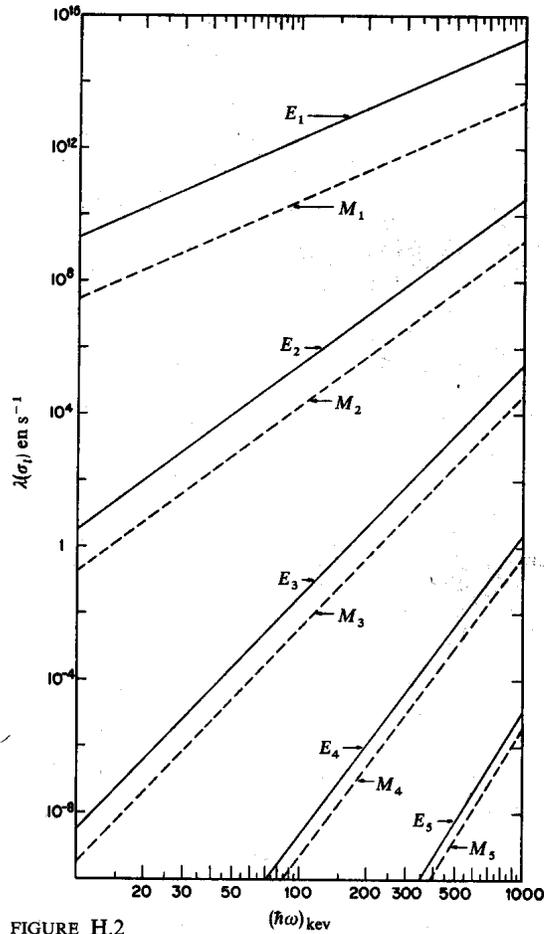


FIGURE H.2