Les états 1S de l'hélium

Autor(en): **Kockel, B.**

Objekttyp: **Article**

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

Band (Jahr): **10 (1957)**

Heft 6: **Colloque Ampère**

PDF erstellt am: **29.05.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-738774

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

Les états ^1S de l'Helium

par B. Kockel
Institut de physique, Leipzig

Les états de l'atome d'Hélium forment deux groupes de séries: ^1S, ^1P, ^1D, ... ^3S, ^3P, ^3D, ...; les états fondamentaux de quelques-unes de ces séries ont été calculés.

Le tableau suivant compare entre elles les valeurs expérimentales et les valeurs calculées.

	^1S		^1P		^3S		^3P		
Mesuré	1s 2s	2,1464	1s 2p	2,1238	1s 2s	2,17524	1s 2p	2,1332	DRy
Calculé		2,1449		2,1225		2,17522		2,1308	
Mesuré	$1s^2$	2,9035	X sans correction de masse ni de relativité.						
Calculé		2,9037x							

Il est commode, pour calculer les termes supérieurs de la série ^1S d'effectuer un calcul de variations en partant d'une représentation simple dans laquelle, pour l'état 1S ns ^1S, l'électron 1s se trouve dans un champ coulombien de charge 2 et l'électron ns dans un champ coulombien de charge 1.

On partira donc de fonctions symétriques

$$\psi_n (r_1, r_2) = \psi_{1s}^{(2)} (r_1) \psi_{ns}^{(1)} (r_2) + \psi_{ns}^{(1)} (r_1) \psi_{1s}^{(2)} (r_2)$$

où les indices supérieurs se rapportent aux charges nucléaires effectives correspondantes. $\psi_{1s}^{(2)}$ est donc la fonction de l'état fondamental de l'ion hélium, les $\psi_{ns}^{(1)}$ étant les fonctions propres de l'état d'hydrogène. Il est clair que de telles fonctions ne peuvent décrire l'état fondamental de l'atome d'hélium; il sera donc nécessaire d'employer par exemple les deux premières

approximations de la méthode d'Hylleraas; cela permettra d'assurer l'orthogonalité des fonctions d'état:

$$\chi_0 = e^{-k(r_1 + r_2)} \quad \chi_1 = e^{-k(r_1 + r_2)} r_{12}$$

où r_{12} est la distance séparant les deux électrons. En posant une variation de la forme

$$\chi_0 + a\chi_1 + b\psi_1 + c\psi_2 + d\psi_3$$

on obtient

1s 3s ^{1}S	Mesuré 2,0613	Calculé 2,0598	DRy

En effectuant ces calculs, on constate un fait assez surprenant. Si l'on part de fonctions de la forme

$$\overline{\psi}_n = \psi_{1s}^{(2)}(r_1)\ \psi_{ns}^{(1)}(r_2)$$

sans s'occuper de les symétriser ou de les orthogonaliser, c'est-à-dire si l'on calcule simplement l'intégrale de l'hamiltonien:

$$E = \iint \overline{\psi}_n \, H \, \overline{\psi}_n \, dr_1 \, dr_2$$

on trouve pour l'énergie de liaison des états de la série 1s ns ^{1}S, n étant compris entre 2 et 13, des valeurs qui concordent avec les valeurs expérimentales à 1% près.

Voici quelques exemples de ces résultats:

n	2	5	8	10	12	
Mesuré . . .	2,1460	2,0212	2,00809	2,00514	2,00356	DRy
Calculé . . .	2,1465	2,0214	2,00814	2,00517	2,00357	

Ces résultats ne permettent évidemment pas de dire que les fonctions $\overline{\psi}_n$ représentent des fonctions utilisables pour représenter les états correspondants, mais ils permettent la conclusion suivante. Si on symétrise les fonctions $\overline{\psi}_n$ et si on ajoute une fonction d'état appropriée, symétrisée et orthogonalisée pour l'état fondamental, les corrections aux valeurs précédentes doivent à peu près se compenser mutuellement. Il n'est naturellement pas très

utile de calculer des états qu'on connaît déjà par l'expérience, mais ce dernier résultat nous permet de prédire les valeurs d'énergie des niveaux doublement excités $2s^2\ ^1S$, $2s\ 3s\ ^1S$, etc. qui ne sont pas connus mais qui intéressent les astrophysiciens.

Nous voudrions ici exprimer l'idée que ces états pourraient être calculés approximativement, en tous cas pour les états supérieurs à $2s\ 3s\ ^1S$, à partir de fonctions

$$\eta_n\ (r_1, r_2) = \psi_{2s}^{(2)}\ (r_1)\ \psi_{ns}^{(1)}\ (r_2)$$

Par le mot idée nous entendons ici un raisonnement moins sûr qu'une supposition. Le résultat des calculs ainsi effectués nous donne:

$2s^2\ ^1S$	$2s\ 3s\ ^1S$	$2s\ 4s\ ^1S$	$2s\ 5s\ ^1S$	$2s\ 6s\ ^1S$	
—	0,574	0,539	0,524	0,516	DRy