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

Herausgeber: Société de Physique et d'Histoire Naturelle de Genève

**Band:** 10 (1957)

**Heft:** 6: Colloque Ampère

**Artikel:** Les états 1S de l'hélium

Autor: Kockel, B.

**DOI:** https://doi.org/10.5169/seals-738774

## 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:** 15.12.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

## Les états <sup>1</sup>S de l'Helium

par B. Kockel.
Institut de physique, Leipzig

Les états de l'atome d'Hélium forment deux groupes de séries: <sup>1</sup>S, <sup>1</sup>P, <sup>1</sup>D, ... <sup>3</sup>S, <sup>3</sup>P, <sup>3</sup>D, ...; 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		1Р		<sup>3</sup> S		3 P		
Mesuré	1 2 2 2	2,1464	10.95	2,1238	40.00	2,17524	40.00	2,1332	DE.
Calculé	1s 2s	2,1449	1s 2p	2,1225	1s 2s	2,17522	1s 2p	2,1308	DRy
Mesuré	1s <sup>2</sup>	2,9035							
Calculé	15-	2,9037x	X sans correction de masse ni de relativité.						

Il est commode, pour calculer les termes supérieurs de la série <sup>1</sup>S d'effectuer un calcul de variations en partant d'une représentation simple dans laquelle, pour l'état 1S ns <sup>1</sup>S, 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:

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

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 ¹S	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:

$$\mathbf{E} = \int \! \int \! \overline{\psi}_n \, \mathbf{H} \, \overline{\psi}_n \, dr_1 \, dr_2$$

on trouve pour l'énergie de liaison des états de la série 1s ns <sup>1</sup>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	DKy

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 2s² 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:

282 1S	2s 3s 1S	2s 4s 1S	2s 5s 1S	2s 6s 1S	
_	0,574	0,539	0,524	0,516	DRy