

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. 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. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

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. [Voir Informations légales.](#)

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. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 16.03.2025

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

Les états 1S de l'Helium

par B. KOCKEL

Institut de physique, Leipzig

Les états de l'atome d'Helium 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

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

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

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

on trouve pour l'énergie de liaison des états de la série 1s ns ¹S, 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 $\bar{\psi}_n$ représentent des fonctions utilisables pour représenter les états correspondants, mais ils permettent la conclusion suivante. Si on symétrise les fonctions $\bar{\psi}_n$ 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