



HAL
open science

Fonctions d'onde atomiques et paramètres de hartree-fock des atomes Xe I et Xe II

C. Foglia

► **To cite this version:**

C. Foglia. Fonctions d'onde atomiques et paramètres de hartree-fock des atomes Xe I et Xe II. Journal de Physique, 1967, 28 (10), pp.783-784. 10.1051/jphys:019670028010078300 . jpa-00206581

HAL Id: jpa-00206581

<https://hal.science/jpa-00206581>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

FONCTIONS D'ONDE ATOMIQUES ET PARAMÈTRES DE HARTREE-FOCK DES ATOMES Xe I ET Xe II

Par C. FOGLIA,

Istituto di Fisica dell' Università, Parma (Italie).

Résumé. — On a calculé et assemblé en tableau des solutions des équations de Hartree-Fock pour Xe I et Xe II. On a obtenu de plus un certain nombre de paramètres intéressants, c'est-à-dire les paramètres spin-spin, spin-orbite, etc.

Abstract. — Solutions of the Hartree-Fock equations have been obtained and tabulated for the ground state configurations of Xe I and Xe II. Spin-spin, spin-orbit and some other parameters calculated from the Hartree-Fock wave functions are also tabulated.

Introduction. — Les fonctions d'onde atomiques sont d'un intérêt considérable non seulement pour la solution des problèmes relatifs aux atomes libres, mais aussi pour l'étude des agrégats moléculaires ou cristallins. Dans le cours d'études sur la scintillation du xénon, on a dû déterminer les fonctions d'onde de l'atome libre et ionisé ; puisqu'il y a un renouveau d'intérêt pour l'analyse de plusieurs propriétés des gaz rares, on juge convenable de faire connaître aussi ces résultats intermédiaires.

Les fonctions d'onde ont été calculées à l'approximation du champ self-consistent de Hartree-Fock, qui est le modèle à un électron par excellence, au moins au sens variationnel, et qui donne de bons résultats.

En addition aux valeurs numériques des fonctions d'onde des couches les plus extérieures et aux énergies des niveaux, on donne aussi un certain nombre de paramètres intéressants, c'est-à-dire l'énergie totale, les paramètres d'écran, les paramètres spin-spin et spin-orbite et les valeurs moyennes $\langle r \rangle$ et $\langle r^2 \rangle$.

Fonctions d'onde atomiques. — Les fonctions d'onde atomiques, dans le schème de Hartree-Fock, sont des solutions d'un système d'équations différentielles non linéaires avec des coefficients fonctions de la solution de chaque équation ; puisqu'il y a une fonction associée à chaque couche d'électrons caractérisés par les nombres quantiques principal n et azimutal l , dans le cas examiné ici du Xe I ($5p^6, 1S$) et Xe II ($5p^5, 2P$), on doit intégrer un système de onze équations du type [1] :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} Y(nl; r) - \varepsilon_{nl, nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] P(nl; r) = X(nl; r) + \sum_{n' \neq n} \varepsilon_{nl, n'l} P(n'l; r) \quad (1)$$

avec les conditions

$$P(0) = P(\infty) = 0$$

et

$$\int_0^\infty P^2(nl; r) dr = 1, \quad \int_0^\infty P(nl; r) P(n'l; r) dr = 0.$$

Dans l'équation (1) on a posé, pour alléger l'écriture :

$$Y(nl; r) = Y(r) + \sum_k \alpha_{lk} Y_k(nl, nl; r)$$

où

$$Y(r) = Z - \sum_{nl} q(nl) Y_0(nl, nl; r)$$

$$\alpha_{l0} = 1, \quad \alpha_{lk} = 2A_{lk}/q(nl)$$

pour $k \neq 0$

et

$$X(nl; r) = - \left(\frac{2}{r} \right) \sum'_{n'l'k} \beta_{lk} Y_k(nl, n'l'; r) P(n'l'; r)$$

où

$$\beta_{lk} = B_{lk}/q(nl)$$

\sum' désigne la somme pour les valeurs $(n'l') \neq (nl)$; A_{lk} et B_{lk} sont des sommes de coefficients de Slater [2] qui proviennent des intégrations angulaires et de spin, et ont été calculées par Shortley [3]; Z est la charge nucléaire et $q(nl)$ le nombre des électrons dans la couche caractérisée par les valeurs (nl) des nombres quantiques. La fonction $Y_k(nl, n'l', r)$ enfin est définie par l'équation :

$$Y_k(nl, n'l'; r) = r \int_0^\infty \mathcal{U}_k(r, s) P(nl; s) P(n'l'; s) ds$$

$$\mathcal{U}_k(r, s) = \begin{cases} r^k/s^{k+1}, & r < s \\ s^k/r^{k+1}, & r > s. \end{cases}$$

Résultats. — Les équations de Hartree-Fock pour Xe I ($5p^6, 1S$) et Xe II ($5p^5, 2P$) ont été intégrées suivant une méthode décrite par C. Froëse [4, 5] et en employant le calculateur IBM 7090 du CNUCE-PISA; pour fonctions d'essai on a pris des fonctions hydrogénoïdes avec écran.

Les résultats numériques sont présentés dans les tableaux I, II et III (1).

TABLEAU I

r	Xe I (1S)		Xe II (2P)	
	$P(5s^2)$	$P(5p^6)$	$P(5s^2)$	$P(5p^5)$
0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
0,0009	0,0159	0,0002	0,0164	0,0002
0,0013	0,0214	0,0004	0,0221	0,0004
0,0017	0,0285	0,0007	0,0294	0,0007
0,0023	0,0376	0,0012	0,0388	0,0013
0,0032	0,0489	0,0022	0,0505	0,0024
0,0044	0,0626	0,0041	0,0645	0,0043
0,0060	0,0778	0,0073	0,0801	0,0078
0,0082	0,0929	0,0128	0,0958	0,0137
0,0112	0,1046	0,0220	0,1078	0,0235
0,0153	0,1069	0,0367	0,1102	0,0392
0,0209	0,0915	0,0587	0,0943	0,0626
0,0287	0,0497	0,0882	0,0512	0,0940
0,0392	-0,0217	0,1212	-0,0224	0,1292
0,0536	-0,1095	0,1452	-0,1129	0,1547
0,0732	-0,1733	0,1369	-0,1787	0,1458
0,1001	-0,1517	0,0700	-0,1562	0,0743
0,1368	-0,0079	-0,0581	-0,0076	-0,0624
0,1870	0,1921	-0,1891	0,1985	-0,2018
0,2556	0,2600	-0,2042	0,2676	-0,2170
0,3494	0,0472	-0,0236	0,0469	-0,0237
0,4776	-0,3039	0,2490	-0,3145	0,2662
0,6528	-0,3866	0,3384	-0,3968	0,3592
0,8923	0,0021	0,0754	0,0063	0,0774
1,2196	0,5595	-0,3808	0,5789	-0,4061
1,6670	0,8270	-0,7012	0,8441	-0,7361
2,2785	0,6783	-0,7026	0,6740	-0,7149
3,1143	0,3561	-0,4760	0,3325	-0,4502
4,2568	0,1181	-0,2237	0,0969	-0,1819
5,8183	0,0224	-0,0686	0,0145	-0,0424
7,9527	0,0021	-0,0121	0,0009	-0,0048
10,8701	0,0000	-0,0010	0,0000	-0,0002
$\epsilon_{nl, nl}$	1,8866	0,9135	2,5230	1,5720

(1) On a toujours employé les unités atomiques, à l'exception des paramètres spin-spin et spin-orbite qui ont été mesurés en cm^{-1} .

TABLEAU II

	Xe I	Xe II
$F^0(5s, 5s)$	0,4547	0,4662
$F^0(5s, 5p)$	0,4158	0,4323
$F^0(5p, 5p)$	0,3862	0,4057
$F^2(5p, 5p)$	0,2060	0,2190
$G^1(5s, 5p)$	0,2794	0,2937

TABLEAU III

	Xe I	Xe II
E	-7 226,085	-7 208,579
σ_{5s}	35,090	34,594
σ_{5p}	38,407	37,580
ζ_{5p}	—	5 910,42
$M_{5p, 5p}^0$	—	0,148
$\langle r_{5s} \rangle$	1,983	1,932
$\langle r_{5p} \rangle$	2,341	2,223
$\langle r_{5s}^2 \rangle$	4,450	4,202
$\langle r_{5p}^2 \rangle$	6,291	5,608

Dans le premier tableau, on donne un résumé des fonctions d'onde les plus extérieures, avec les valeurs propres de l'énergie.

Le tableau II résume les intégrales de Slater calculées par les fonctions du tableau I.

D'autres résultats enfin, obtenus par les calculs de Hartree-Fock, sont rassemblés dans le tableau III, et précisément :

- L'énergie totale E ;
- Les paramètres d'écran de Hartree [1] définis par l'équation :

$$\sigma_{nl} = Z - (\langle r_{nl}^H \rangle / \langle r_{nl} \rangle);$$

- Les paramètres spin-spin $M_{nl, nl}^0$ et spin-orbite ζ_{nl} [6];
- Les valeurs moyennes $\langle r \rangle$ et $\langle r^2 \rangle$.

Remerciements. — Je remercie vivement Mme le Professeur C. Froëse pour plusieurs conseils et pour m'avoir fait connaître son programme de calcul des fonctions d'onde atomiques de Hartree-Fock.

Manuscrit reçu le 17 avril 1967.

BIBLIOGRAPHIE

- HARTREE (D. R.), The calculation of atomic structures, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1957.
- CONDON (E. U.), SHORTLEY (G. H.), The theory of atomic spectra, Cambridge University Press, New York, 1953.
- SHORTLEY (G. H.), *Phys. Rev.*, 1936, **50**, 1072.
- FROËSE (C.), *Can. J. Phys.*, 1963, **41**, 1895.
- FROËSE (C.), *Phys. Rev.*, 1965, **137** A, 1644.
- BLUME (M.), WATSON (R. E.), *Proc. Roy. Soc.*, 1962, **A 270**, 127.