LETTRES A LA RÉDACTION

SUR LA VALEUR THÉORIQUE DE L'ÉNERGIE DE L'ÉTAT FONDAMENTAL DE He*I*

Par P. PLUVINAGE,
Institut de Physique
de la Faculte des Sciences de Strasbourg.

La methode deja décrite de resolution rigoureuse de l'equation de Schrodinger des atomes a deux electrons [1, 2] a été appliquee a la recherche de la valeur propre et de la fonction d'onde de l'etat fondamental de He*I*. Treize fonctions de base u_{mnp} ont ete selectionnees comme etant les plus importantes. Ce sont

$$u_{000} = \frac{1}{2\sqrt{6}},$$

$$u_{100} = \frac{1}{\sqrt{15}}\, x\left(1 - \frac{3}{2}\rho\right),$$

$$u_{220} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\, x\left(\frac{3}{2}\tau^2 - \frac{1}{2}\rho^2\right),$$

$$u_{001} = \frac{1}{2\sqrt{30}}\,(5 - x),$$

$$u_{221} = \frac{1}{4\sqrt{3}}\, x(6 - x)\left(\frac{3}{2}\tau^2 - \frac{1}{2}\rho^2\right),$$

$$u_{002} = \frac{1}{6\sqrt{10}}\left(15 - 6x + \frac{x^2}{2}\right),$$

$$u_{200} = \frac{3}{2\sqrt{10}}\, x\left(1 - 4\rho + \frac{10}{3}\rho^2\right),$$

$$u_{101} = \frac{1}{3\sqrt{10}}\, x(6 - x)\left(1 - \frac{3}{2}\rho\right),$$

$$u_{201} = \frac{3}{4\sqrt{15}}\, x(6 - x)\left(1 - 4\rho + \frac{10}{3}\rho^2\right),$$

$$u_{320} = \sqrt{6}\, x\left(\frac{3}{2}\tau^2 - \frac{1}{2}\rho^2\right)\left(1 - \frac{7}{6}\rho\right),$$

$$u_{321} = x(6 - x)\left(\frac{3}{2}\tau^2 - \frac{1}{2}\rho^2\right)\left(1 - \frac{7}{6}\rho\right),$$

$$u_{300} = \frac{4}{\sqrt{30}}\, x\left(1 - \frac{15}{2}\rho + 15\,\rho^2 - \frac{35}{4}\rho^3\right),$$

$$u_{301} = \frac{2}{3\sqrt{5}}\, x(6 - x)\left(1 - \frac{15}{2}\rho + 15\,\rho^2 - \frac{35}{4}\rho^3\right).$$

L'equation du treizieme degre en ε a ete formee à partir des formules de recurrence etablies par G. Munschy [3] Elle a ete resolue par la methode de James et Coolidge [4] en se servant d'une machine a calculer electrique a 10 chiffres. Le resultat est, pour la valeur propre,

$$\varepsilon = 1{,}704\ 081\ 0_3$$

$$E_{\mathrm{P}} = -\,\varepsilon^2 = -\,2{,}903\ 892\ 1_5 \text{ unites atomiques,}$$

et pour les coefficients de la fonction d'onde,

$$\begin{array}{ll}
\alpha_{000} = 1, & \alpha_{101} = -\,0{,}003\ 247\ 81_3, \\
\alpha_{100} = -\,0{,}044\ 325\ 79_3, & \alpha_{201} = -\,0{,}000\ 801\ 69_7, \\
\alpha_{220} = 0{,}018\ 899\ 32_6, & \alpha_{320} = 0{,}001\ 109\ 33_4, \\
\alpha_{001} = -\,0{,}053\ 709\ 85_8, & \alpha_{321} = -\,0{,}001\ 235\ 82_6, \\
\alpha_{221} = -\,0{,}005\ 690\ 50_5, & \alpha_{300} = -\,0{,}000\ 125\ 07_6, \\
\alpha_{002} = 0{,}012\ 225\ 16_6, & \alpha_{201} = -\,0{,}000\ 081\ 48_5. \\
\alpha_{200} = -\,0{,}001\ 294\ 54_6, &
\end{array}$$

La valeur de E est inferieure a toutes celles qui ont ete obtenues par la methode de variation. Je ne citerai ici que les resultats de Kinoshita [5] et Hylleraas et Midtdal [6] qui sont les meilleurs jusqu'a present

$$E_{\mathrm{K}} = -\,2{,}903\ 7225$$

$$E_{\mathrm{HM}} = -\,2{,}903\ 728.$$

Le desaccord entre E_p et ces valeurs est relativement tres grand pour des calculs de haute precision, et les conclusions de Kinoshita [5], Chandrasekhar et Herzberg [7], Bethe et Salpeter [6], etc sur l'energie d'ionisation de He*I* devraient être revisees, sauf au cas, tres improbable, ou les modifications des corrections relativistes, de polarisation de masse et de deplacement de Lamb pourraient compenser les quelques 37 cm^{-1} d'ecart. Il faudrait chercher un effet nouveau ayant echappe jusqu'ici aux theoriciens Devant une telle situation, il est normal de soupçonner une erreur de calcul De fait, deux contradictions avec les calculs de Kinoshita, dont les fonctions d'essai sont tres voisines, ont ete relevees.

En premier lieu, la valeur trouvee pour E est inferieure de $1{,}84.10^{-5}$ unites atomiques, soit environ 4 cm^{-1}, a la borne inferieure donnee par Kinoshita.

Si l'on fait abstraction de cette divergence, on peut tenter de mettre l'ecart entre les valeurs E_{P} et E_{K} sur le compte des termes $x\rho^3$ et $x\rho\tau^2$ qui figurent dans les quatre dernieres fonctions u et ont ete rejetes par Kinoshita pour une raison qui n'est peut être pas tres convaincante Pour eclaircir ce point, j'ai repris le calcul en retenant seulement les 9 premieres fonctions u ou ne figurent pas les termes suspectes Le resultat est

$$\varepsilon = 1{,}704\ 034\ 3_4 \qquad E = -\,2{,}903\ 733\ 0_3.$$

La contradiction est beaucoup moins accusee mais elle est superieure a la marge d'approximation numerique. De plus, on remarque l'importance relative des quatre fonctions omises, dont l'absence se traduit par une perte de $1{,}59.10^{-4}$ sur l'energie

Une comparaison avec la valeur E_{HK} ne peut pas donner lieu a une discussion analogue a cause du terme logarithmique de Hylleraas et Midtdal, qui ne figure pas dans les fonctions u

Ayant d'abord adopte l'attitude sceptique mentionnee plus haut, je ne suis pas parvenu malgre de multiples verifications a deceler une erreur numerique.

Au contraire, la fonction d'onde obtenue passe mieux que celle de Kinoshita le test suivant : Si l'on substitue un developpement en serie entiere en s, ρ et τ dans l'equation de Schrodinger on voit que ses premiers termes sont, en revenant a s et r_{12},

$$1 - 2\,s + 0{,}5\,r_{12} +$$

et toute solution rigoureuse continue a l'origine doit commencer ainsi Or, en rearrangeant les termes des fonctions d'onde, on obtient

$$\psi_K = 1 - 1{,}947\,582\,s + 0{,}467\,736\,r_{12} +$$

$$\psi_P = 1 - 1{,}960\,572\,s + 0{,}507\,949\,r_{12} +$$

et l'on escompte pour ψ_P une forme encore plus satisfaisante en faisant intervenir le quatorzieme terme u_{003}

Il faudra, bien entendu, une etude plus poussee pour etablir definitivement l'exactitude des resultats avances Mais les indices deja recueillis, dont je n'ai mentionne que le plus important, autorisent a penser que cette eventualite doit être serieusement envisagee

Lettre reçue le 2 juin 1957.

BIBLIOGRAPHIE

[1] Pluvinage (P), *J. Physique Rad* , 1955, **16**, 675.
[2] Munschy (G) et Pluvinage (P), *J Physique Rad* , 1957, **18**, 157.
[3] Munschy (G), Article a paraître au *J Physique Rad.*
[4] James (H. M) et Coolidge (A S), *J. Chem. Phys.*, 1933, **1**, 825
[5] Kinoshita (T), *Phys Rev* , 1957, **105**, 1490.
[6] Hylleraas (E. A) et Midtdai (J.), *Phys. Rev* , 1956, **103**, 829
[7] Chandrasekhar (S) et Herzberg (G), *Phys Rev* , 1955, **98**, 1050 Cf aussi Hart (J. F) et Herzberg (G), *Phys Rev* , 1957, **106**, 79
[8] Bethe (H A) et Salpeter (E. E), *Handbuch der Physik* de S. Flugge, Springer, 1957, XXV, Atome I, 237.