

Electronic energy of the N-electron atom in a space of constant curvature

This article has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text article.

1986 J. Phys. A: Math. Gen. 19 3599

(<http://iopscience.iop.org/0305-4470/19/17/023>)

View [the table of contents for this issue](#), or go to the [journal homepage](#) for more

Download details:

IP Address: 129.252.86.83

The article was downloaded on 31/05/2010 at 17:09

Please note that [terms and conditions apply](#).

Energie électronique de l'atome à N électrons dans un espace à courbure constante

R Shamseddine

Département de Physique, Faculté des Sciences de Tunis, Campus Universitaire, Belvédère, Tunis, Tunisia

Reçu 20 Novembre 1985

Résumé. La structure électronique de l'atome à plusieurs électrons dans l'espace sphérique est étudiée. Une nouvelle expression de l'intégrale de répulsion biélectronique est donnée. Les niveaux d'énergie des états fondamentaux des atomes d'hélium et de lithium sont obtenus. Une dualité paramétrique entre le rayon de courbure de l'espace R et le nombre atomique Z est mise en évidence dans le calcul de l'effet d'écran.

Abstract. The electronic structure of the many-electron atom in spherical space is investigated. A new expression of the bi-electronic repulsive integral is given. The ground state energy levels of the helium and lithium atoms are obtained. A parametric duality between the radius of curvature R and the atomic number Z is given prominence in the calculation of the screening effect.

1. Introduction

La formulation de la spectroscopie théorique dans un espace à courbure constante positive ou espace sphérique contient la formulation euclidienne comme cas limite quand le rayon de courbure de l'espace R tend vers l'infini. Certains aspects qualitatifs ou de technique de calcul de cette formulation 'courbée' peuvent présenter un intérêt. Schrödinger (1940) a déjà démontré que le continuum du spectre de l'atome d'hydrogène se remplace par un spectre discret dense dans le cas d'une courbure constante positive. Aussi, on peut imaginer que ce type de transformation via l'espace courbé puisse être envisagé comme un moyen pour effectuer commodément des calculs 'plans'. Teague (1973) a montré l'intérêt d'utiliser les méthodes d'intégration numérique finie sur l'hypersphère comme un intermédiaire pratique pour calculer l'énergie de la molécule d'hydrogène. Recemment, l'avantage technique de la formulation 'courbée' a été illustré par Horak (1982) par le calcul du développement en $1/Z$ de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hélium. Dans ce travail, nous montrons que ce modèle 'courbé' peut aussi permettre l'introduction d'un rayon de courbure local paramétrique dans le calcul de l'effet d'écran électrostatique dont la valeur sera déterminée par variation: ce faisant, nous verrons apparaître la dualité existant entre paramètre de courbure et paramètre d'écran. D'autre part la formulation 'courbée' permet de mettre en évidence les effets liés à la topologie de l'espace sur les spectres des atomes et des molécules. Ce point a été abordé recemment par Bessis *et al* (1982, 1984), Shamseddine (1986) dans leur étude du spectre de l'atome hydrogéoïde dans l'espace sphérique.

Dans ce travail, nous montrons comment peut s'effectuer un calcul de structure électronique de l'atome dans l'espace sphérique. Après l'écriture de l'équation de Schrödinger d'un atome à N électrons dans cet espace (§ 2), nous donnons une nouvelle expression de l'intégrale de répulsion biélectronique (§ 3). Dans (§ 4) nous calculons les énergies des états fondamentaux des atomes d'hélium et de lithium.

2. Equation de Schrödinger d'un atome à N électrons

Rappelons d'abord que l'espace à courbure constante positive ou espace sphérique a la géométrie simple d'une hypersphère de rayon $R = \text{constant}$ plongée dans un espace euclidien quadridimensionnel. Son élément de ligne est

$$ds^2 = R^2 d\chi^2 - R^2 \sin^2 \chi (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2) \quad (1)$$

où $0 \leq \chi \leq \pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. A la limite plane quand $R \rightarrow \infty$ et $\chi \rightarrow 0$ tel que $R\chi \rightarrow r$ fini, (1) tend vers l'élément de ligne de l'espace euclidien habituel en coordonnées sphériques (r, θ, φ)

$$ds^2 = dr^2 - r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \quad (2)$$

Nous travaillons dans le cadre du modèle à particules indépendantes où la classification habituelle en couplage (LS) du modèle plan est conservée. Pour un atome à noyau ponctuel, sans spin et fixé à l'origine des coordonnées, l'équation d'onde de Schrödinger des états stationnaires dans l'espace sphérique s'écrit (en ua)

$$\left(\sum_{i=1}^N h_i + \sum_{i < j} V_{ij}(\chi_i, \theta_i, \varphi_i, \chi_j, \theta_j, \varphi_j) \right) \psi = E\psi \quad (3)$$

où $h_i = -(\Delta_i/2 + (Z/R) \cot \chi_i)$ est l'hamiltonien hydrogénéoïde dans l'espace sphérique (Schrödinger 1940); Δ_i est le laplacien

$$\Delta_i = \frac{1}{R^2 \sin^2 \chi_i} \left[\frac{\partial}{\partial \chi_i} \left(\sin^2 \chi_i \frac{\partial}{\partial \chi_i} \right) - l_i^2 \right]$$

et $(Z/R) \cot \chi_i$ est le potentiel coulombien central dans lequel se meut l'électron ' i '. $V_{ij} = R^{-1} \cot \omega_{ij}$ est le potentiel coulombien de répulsion biélectronique, ω_{ij} étant la 'séparation angulaire' entre l'électron ' i ' et l'électron ' j '. Ce potentiel admet le développement multipolaire suivant (Bessis et Bessis 1979)

$$V_{ij} = \frac{1}{R} \cot \chi_{>} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \mathcal{F}_l(\chi_{>}) \mathcal{G}_l(\chi_{<}) Y_l^m(\theta_i, \varphi_i) Y_l^m(\theta_j, \varphi_j) \quad (4)$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_l(\chi) &= \frac{1}{R^{l+1}} \frac{1}{(2l-1)!!} F_l(\chi) & F_l(\chi) &= (\sin \chi)^l \frac{d^l(\cot \chi)}{d(\cos \chi)^l} \\ \mathcal{G}_l(\chi) &= R^l \frac{(-1)^{l+1} (2l+1)!!}{(l-1)!(l+1)!} G_l(\chi) & G_l(\chi) &= (\sin \chi)^l \frac{d^l(\chi \cot \chi)}{d(\cos \chi)^l}. \end{aligned}$$

La notation $\chi_>$ et $\chi_<$ a été introduite respectivement pour χ_i et χ_j . A la limite plane quand $R \rightarrow \infty$, les polynômes $\mathcal{F}_l(\chi)$ et $\mathcal{G}_l(\chi)$ tendent respectivement vers $1/r^{l+1}$ et r^l , et le développement (4) tend vers celui de Laplace de $1/r_{ij}$ dans l'espace plan.

La fonction d'onde électronique ψ est représentée par une combinaison linéaire de déterminants de Slater. Les orbitales de base sont les fonctions hydrogéoïdes 'courbées' (Bessis et Bessis 1979)

$$\Phi_{nlm}(\chi, \theta, \varphi) = \mathcal{N}_{nl}(\sin \chi)^{n-1} \exp(-ZR\chi/n) P_v^A(-i \cot \chi) Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{5}$$

où $A = (-n - iZR/n, -n + iZR/n)$, \mathcal{N}_{nl} est la constante de normalisation et P_v^A est un polynôme de Jacobi de degré v .

3. Intégrale de repulsion biélectronique

Comme les déterminants de Slater sont bâtis sur des spin-orbitales fonctions propres des opérateurs l^2, s^2, l_z et s_z associés au moment angulaire orbitale l et au spin s de l'électron, l'énergie électronique E de l'atome est la somme d'intégrales monoélectroniques de type $\langle nlm, m_s | h | nlm, m_s \rangle = -Z^2/2n^2 + (n^2 - 1)/2R^2$ (Schrödinger 1940) et d'intégrales biélectroniques de la forme

$$I = \left\langle n_1 l_1 m_{1s} n_2 l_2 m_{2s} \left| \frac{\cot \omega_{ij}}{R} \right| n_3 l_3 m_{3s} n_4 l_4 m_{4s} \right\rangle. \tag{6}$$

Tenant compte des expressions (4) et (5), l'intégration de (6) sur les variables θ, φ et le spin est la même que dans l'espace plan. Seulement une intégrale pseudo-radiale en χ remplace l'intégrale radial en r 'plane'. On obtient (voir appendice 1)

$$I = \delta_{m_1, m_3} \delta_{m_2, m_4} \frac{4}{\pi R} [(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)(2l_4 + 1)]^{1/2} \\ \times (-1)^{m_2 - m_3} \sum_{i=0}^{\infty} (2l + 1) \begin{pmatrix} l_1 & l & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l & l_3 \\ -m_{l_1} & m_l & m_{l_3} \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} l_2 & l & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l & l_4 \\ -m_{l_2} & m_l & m_{l_4} \end{pmatrix} \langle 13 || 24 \rangle_l \tag{7}$$

où l'intégrale pseudo-radiale en χ s'écrit

$$\langle 13 || 24 \rangle_l = \frac{\pi R^6}{4} \frac{(2l + 1)}{(l + 1)!(l - 1)!} \int_0^\pi \rho_{13}(\chi_1) \left(F_l(\chi_1) \int_0^{\chi_1} P_{24}(\chi_2) d\chi_2 \right. \\ \left. + g_l(\chi_1) \int_{\chi_1}^{\pi - \chi_1} F_l(\chi_2) \rho_{24}(\chi_2) d\chi_2 - F_l(\chi_1) \int_{\pi - \chi_1}^\pi P_{24}(\chi_2) d\chi_2 \right) d\chi_1 \tag{8}$$

où

$$\rho_{ij}(\chi) = \mathcal{S}_i(\chi) \mathcal{S}_j(\chi) \sin^2 \chi$$

$$P_{24}(\chi) = g_l(\chi) \rho_{24}(\chi) - \int F_l(\chi) \rho_{24}(\chi) d\chi.$$

$\mathcal{S}_l(\chi)$ est la partie pseudo-radiale de l'orbitale hydrogéoïde 'courbée' (5). g_l est un polynôme de degré l en $\cot \chi$. Les polynômes $F_l(\chi)$ et $G_l(\chi)$ sont définis par (4). L'expression (8) est valable pour $l \geq 1$. Pour $l = 0$, le calcul donne une autre expression qui se déduit formellement de (8) en y faisant $g_l(\chi) = 1$ et en y remplaçant $P_{24}(\chi)$ par $\int \rho_{24}(\chi) d\chi$.

L'intégrale (8) a l'avantage d'être finie et facilement calculable, en comparaison avec celle de Bessis et Bessis (1979) (voir appendice 1) qui est une série infinie difficilement utilisable. Dans les applications, l'intégration de (8) se ramène au calcul d'intégrales élémentaires de la forme $\int_a^b e^{-\beta x} \sin^p \chi \cos^q \chi \, d\chi$ données par les tables (Gradshteyn et Ryzhik 1965). p et q sont des entiers ≥ 0 et β réel positif. a et $b \in [0, \pi]$. L'expression (8) est à comparer à celle de l'intégrale biélectronique radiale 'plane'

$$\langle 13||24 \rangle_l = \int_0^\infty \rho_{13}(r_1) \left(\frac{1}{r_1^{l+1}} \int_0^{r_1} r_2^l \rho_{24}(r_2) \, dr_2 + r_1^l \int_{r_1}^\infty \frac{1}{r_2^{l+1}} \rho_{24}(r_2) \, dr_2 \right) dr_1 \quad (9)$$

où $\rho_{ij}(r) = \bar{\mathcal{F}}_i(r) \bar{\mathcal{F}}_j(r) r^2$. $\bar{\mathcal{F}}_i(r)$ est la partie radiale de l'orbitale hydrogénoïde dans l'espace plan.

4. Energies électroniques des états fondamentaux des atomes He et Li

Dans ces applications nous nous limitons au cas d'une seule configuration. Les valeurs des énergies des états considérés sont déterminées par variation en considérant un effet d'écran électrostatique. Parce que le rayon de courbure R et le nombre atomique Z apparaissent à travers le produit (ZR) dans les orbitales hydrogénoïdes 'courbées' (5), R pourra jouer le même rôle paramétrique que Z . En prenant Z comme paramètre, l'électron 'i' du cortège électronique sera supposé plongé dans un potentiel $(Z_i/R) \cot \chi$ créée par une charge 'effective' $Z_i = K_i Z$, K_i étant le paramètre variationnel. L'écriture $Z_i R = K_i Z R = Z R_i$ dans l'orbitale 'i' permettra d'utiliser R au lieu de Z comme paramètre. Tout se passe alors comme si l'électron 'i' se meut dans un potentiel $(Z/R_i) \cot \chi$ dans une région où R est modifié localement en R_i qui joue le même rôle paramétrique que Z_i . Cette dualité paramétrique est illustrée dans les applications suivantes où les expressions des énergies sont calculées dans l'espace sphérique en introduisant le paramètre R_i . En passant à la limite plane ($R \rightarrow \infty$), ces expressions tendent vers leurs homologues bien connues dans l'espace plan qui s'obtiennent d'habitude en introduisant le paramètre Z_i .

4.1. $E(^1S)$ de l'état $(1s)^2$ de l'atome He

La fonction d'onde électronique $\psi(^1S) = |1s \, 1s|$ où l'orbitale $1s = \mathcal{N}_{10} \exp(-ZR_1/\chi)$. Le paramètre R_1 est introduit pour tenir compte de l'effet d'écran. Un calcul simple utilisant les tables (Gradshteyn et Ryzhik 1965) donne

$$\begin{aligned} E(^1S) &= 2\langle 1s|h|1s \rangle + \langle 1s(1)1s(1) || 1s(2)1s(2) \rangle \\ &= \frac{a}{R} \left(\frac{a}{4R} - Z \right) + \frac{1}{16R} \left(\frac{a(5a^2-4)}{a^2+1} \coth \frac{\pi a}{2} - \frac{\pi a^2(a^2+4)}{2} \right) \\ &\quad \times \left(1 - \coth^2 \frac{\pi a}{2} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

où $a = 2ZR_1$.

A la limite plane quand $R \rightarrow \infty$, on obtient

$$E(^1S) = Z^2 K_1 (K_1 - 2) + \frac{5}{8} Z K_1 \quad (11)$$

où $K_1 = \lim R_1/R$.

L'énergie minimum de l'état fondamental est obtenue pour $K_1 = (1 - 5/16Z)$

$$E(^1S)_{\min} = -(Z - 5/16)^2 \approx -2.85 \text{ ua.} \quad (12)$$

C'est la valeur obtenue dans l'espace euclidien habituel en tenant compte de l'effet d'écran électrostatique par l'introduction du paramètre Z_1 .

4.2. $E(^2S)$ de l'état $(1s)^2 2s$ de l'atome Li

La fonction d'onde électronique approchée $\psi(^2S) = |1s \bar{1}s 2s|$, $2s = \mathcal{N}_{20}(\cos \chi - d \sin \chi) \exp(-ZR_2\chi/2)$, $d = (2R_1 + R_2)Z/6$, assure l'orthogonalité des orbitales $1s$ et $2s$. Les paramètres R_1 et R_2 sont introduits pour tenir compte de l'effet d'écran. L'expression de l'énergie s'écrit

$$\begin{aligned} E(^2S) &= 2\langle 1s|h|1s \rangle + \langle 2s|h|2s \rangle + \langle 1s(1)1s(1) || 1s(2)1s(2) \rangle \\ &\quad + 2\langle 1s(1)1s(1) || 2s(2)2s(2) \rangle - \langle 1s(1)2s(1) || 2s(2)1s(2) \rangle \\ &= \frac{a}{R} \left(\frac{a}{4R} - Z \right) - \frac{18A_1 + 3(b^2 + 16)A_2 + 12ZRA_3}{8R^2D} \\ &\quad + \frac{1}{16R} \left[\frac{a(5a^2 - 4)}{a^2 + 1} \coth \frac{\pi a}{2} - \frac{\pi a^2(a^2 + 4)}{2} \left(1 - \coth^2 \frac{\pi a}{2} \right) \right] \\ &\quad + \frac{b(b^2 + 4)(b^2 + 16)}{2R(1 - \alpha)(1 - \beta)D} \left[3[(1 - \alpha\beta)B_1 + (1 + \alpha)(1 - \beta)B_2 + (\alpha - \beta)B_3] \right. \\ &\quad \left. - \frac{a(a^2 + 4)}{16(c^2 + 1)} \left(\frac{2(1 - \alpha\beta)}{c(c^2 + 4)} + \pi(c^2 + 1) e^{-c\pi} \right) \right] \end{aligned} \quad (13)$$

où $a = 2ZR_1$, $b = ZR_2$, $c = (a + b)/2$, $\alpha = e^{-a\pi}$ et $\beta = e^{-b\pi}$. Les quantités A_i , B_i ($i = 1, 2, 3$) et D sont fonctions de a et b (voir appendice 2).

A la limite plane quand $R \rightarrow \infty$, (13) tend vers l'expression suivante

$$E(^2S) = K_1^2 F(K) - K_1 G(K)$$

où

$$F(K) = [(K^4/M) + \frac{1}{8}K^2 + 1]Z^2$$

$$G(K) = \left(\frac{K^2(2K - 1)}{2M} + \frac{K}{2} + 2 \right) Z^2 + \left(\frac{K(K + 3)(K + 1)^2 + 4K^5}{(1 + K)^5 M} + \frac{2}{(1 + K)^2} - \frac{21}{8} \right) Z$$

$$K_1 = R_1/R \quad K_2 = R_2/2R \quad K = K_2/K_1 \quad \text{et} \quad M = K^2 - K + 1.$$

Nous avons regroupé les termes cinétiques et les termes potentiels et fait apparaître le paramètre K pour faciliter le calcul.

$E(^2S)_{\min}$ est déterminée par la valeur du couple (K_1, K) vérifiant simultanément les équations $\partial E/\partial K_1 = 0$ et $\partial E/\partial K = 0$. Pour $K_1 \approx 0.8979$ et $K_2 \approx 0.2555$ nous trouvons

$$E(^2S)_{\min} \approx -7.414 \text{ ua.}$$

C'est bien la valeur obtenue dans l'espace plan en tenant compte de l'effet d'écran électrostatique par l'introduction des paramètres Z_1 et Z_2 .

5. Conclusion

Nous avons montré que le calcul, dans le cadre du modèle à particules indépendantes, des énergies électroniques des atomes dans l'espace sphérique est envisageable sans difficulté, et l'on pourrait construire un programme automatique de calcul des fonctions d'onde et des énergies. Nous avons mis en évidence une dualité paramétrique entre le rayon de courbure R et le nombre atomique Z dans le calcul de l'effet d'écran électrostatique. Ceci illustre une possible utilisation de la formulation 'courbée' pour analyser certains aspects techniques de calculs de spectroscopie dans l'espace plan.

Appendice 1. Intégrale biélectronique pseudo-radiale $\langle 13||24 \rangle_l$

Nous partons de l'expression suivante (Bessis et Bessis 1979)

$$\langle 13||24 \rangle_l = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4k^2 - 1} I_{kl}(1, 3) I_{kl}(2, 4) \tag{A1.1}$$

où

$$I_{kl}(s, t) = R^3 \int_0^{\pi} \mathcal{G}_s(\chi) \Pi_l(2k, \chi) \mathcal{G}_t(\chi) \sin^2 \chi \, d\chi$$

$$\Pi_l(2k, \chi) = \frac{(\sin \chi)^l d^{l+1}(\cos 2k\chi)}{C_l d(\cos \chi)^{l+1}}$$

$$C_l = [4k^2(4k^2 - 1)(4k^2 - 2^2) \dots (4k^2 - l^2)]^{1/2}.$$

L'inconvénient de l'expression (A1.1) est de contenir la série infinie

$$Q_l(\chi_i, \chi_j) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4k^2 - 1} \Pi_l(2k, \chi_i) \Pi_l(2k, \chi_j) \tag{A1.2}$$

qui est la partie pseudo-radiale du développement multipolaire du potentiel $(\cot \omega_{ij})/R$ utilisé par Bessis et Bessis (1979). Cette série peut être remplacée par sa somme (Bessis et Bessis 1979)

$$Q_l(\chi_i, \chi_j) = \frac{\pi R}{4(2l+1)} \mathcal{F}_l(\chi_{>}) \mathcal{G}_l(\chi_{<}). \tag{A1.3}$$

L'introduction de la somme (A1.3) revient à utiliser le développement multipolaire (4) dont la partie pseudo-radiale est cette somme. (A1.3) est calculée avec la condition $0 \leq \chi_i \leq \frac{1}{2}\pi$; $0 \leq \chi_j \leq \frac{1}{2}\pi$ et $\chi_i > \chi_j$. Pour pouvoir l'utiliser nous devons rapporter d'abord l'intégrale $I_{kl}(s, t)$ (A1.1) de l'intervalle $[0, \pi]$ à l'intervalle $[0, \pi/2]$ par le changement de variable $\chi \rightarrow (\pi - \chi)$ sur ses parties appartenant à l'intervalle $[\pi/2, \pi]$ et utiliser la propriété des fonctions de Fock $\Pi_l(2k, \pi - \chi) = (-1)^{l+1} \Pi_l(2k, \chi)$. On obtient

$$I_{kl}(s, t) = R^3 \int_0^{\pi/2} \Pi_l(2k, \chi) \Lambda_{st}(\chi) \, d\chi \tag{A1.4}$$

où

$$\Lambda_{st}(\chi) = \rho_{st}(\chi) + (-1)^{l+1} \rho_{st}(\pi - \chi) \quad \rho_{st}(\chi) = \mathcal{G}_s(\chi) \mathcal{G}_t(\chi) \sin^2 \chi.$$

L'intégrale pseudo-radiale (A1.1) s'écrit

$$\langle 13||24 \rangle_l = \frac{\pi R^6}{4} \frac{2l+1}{(l+1)!(l-1)!} \int_0^{\pi/2} \Lambda_{13}(\chi_1) \left(F_l(\chi_1) \int_0^{\chi_1} G_l(\chi_2) \Lambda_{24}(\chi_2) d\chi_2 \right. \\ \left. + G_l(\chi_1) \int_{\chi_1}^{\pi/2} F_l(\chi_2) \Lambda_{24}(\chi_2) d\chi_2 \right) d\chi_1. \tag{A1.5}$$

Les polynômes $F_l(\chi)$ et $G_l(\chi)$ sont définis dans (4).

Pour réduire les termes semblables résultant de la relation $G_l(\chi) = \chi F_l(\chi) + g_l(\chi)$ où $g_l(\chi)$ est un polynôme de degré l en $\cot \chi$, nous revenons dans l'intervalle $[0, \pi]$ en effectuant le changement de variable $(\pi - \chi) \rightarrow \chi$ sur les parties de (A1.5) où l'intégrand contient $\rho_{sr}(\pi - \chi)$ en facteur. En utilisant les propriétés $F_l(\pi - \chi) = (-1)^{l+1} F_l(\chi)$ et $G_l(\pi - \chi) = (-1)^{l+1} (\pi F_l(\chi) - G_l(\chi))$, l'intégrale (A1.5) s'écrit

$$\langle 13||24 \rangle_l = \frac{\pi R^6}{4} \frac{2l+1}{(l+1)!(l-1)!} \int_0^\pi \rho_{13}(\chi_1) \left(F_l(\chi_1) \int_0^{\chi_1} N_{24}(\chi_2) d\chi_2 \right. \\ \left. + G_l(\chi_1) \int_{\chi_1}^{\pi - \chi_1} M_{24}(\chi_2) d\chi_2 \right. \\ \left. + F_l(\chi_1) \int_{\pi - \chi_1}^\pi (\pi M_{24}(\chi_2) - N_{24}(\chi_2)) d\chi_2 \right) d\chi_1 \tag{A1.6}$$

où

$$N_{24}(\chi) = G_l(\chi) \rho_{24}(\chi) \quad M_{24}(\chi) = F_l(\chi) \rho_{24}(\chi).$$

Tenant compte de la relation $G_l(\chi) = \chi F_l(\chi) + g_l(\chi)$, les termes de (A1.6) ayant en facteur χ et π se réduisent séparément et nous obtenons l'expression finale (8).

Appendice 2. Les quantites A_i , B_i et D

$$A_1 = -2(b^2 + 12)d^2 - b^2(b - 2) - 20b + 24 \quad A_2 = 8d^2 + 8bd - b^3 - 3$$

$$A_3 = 6bd^2 - 4(b^2 + 4)d + b^3 + 10b$$

$$B_1 = -(27d^3 + 3ad^2 + 11d + a) / 12d(9d^2 + 1)(9d^2 + 4)$$

$$B_2 = 2A_3 / b(b^2 + 4)(b^2 + 16)$$

$$B_3 = 2[6(2a - e)d^2 + (4e^2 - 6ae + 16)d - e^3 + ae^2 - 16e + 4a] / e(e^2 + 4)(e^2 + 16)$$

$$D = b^2 - ab + a^2 + 12$$

où

$$a = 2ZR_1 \quad b = ZR_2 \quad d = (a + b) / 6 \quad e = b - a.$$

References

Bessis N and Bessis G 1979 *J. Phys. A: Math. Gen.* **12** 1991
 Bessis N, Bessis G et Shamseddine R 1982 *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** 3131
 — 1984 *Phys. Rev. A* **29** 2375
 Gradshteyn I S et Ryzhik I M 1965 *Tables of integrals, series and products* (New York: Academic)
 Horak Z J 1982 *Phys. Lett.* **90A** 31
 Schrödinger E 1940 *Proc. Irish Acad.* **A 46** 9
 Shamseddine R 1986 *J. Phys. A: Math. Gen.* **19** 717-24
 Teague J F 1973 *PhD Thesis* Rayleigh University, North Carolina