
La polarisabilité électronique en séries isoélectroniques

Volker Koch¹ and Dirk Andrae*²

¹Fakultät für Chemie, Universität Bielefeld – Postfach 100131, D-33501 Bielefeld, Allemagne

²Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universität Berlin – Takustraße 3, D-14195 Berlin, Allemagne

Résumé

La polarisabilité électronique $\alpha_d(Z,N)$ d'un atome ou d'un ion atomique — avec nombre de charge nucléaire Z et N électrons — est une quantité d'importance en plusieurs domaines de recherche [1]. En expérience, les ions atomiques de n'importe quel degré d'ionisation se laissent produire facilement pour utilisation soit en science fondamentale, soit en science appliquée ou en technologie avancée. Des données précises de la polarisabilité électronique, au contraire, ne sont connues que pour valeurs faibles du nombre de charge totale $Q = Z - N$ (anion, atome neutre, mono- et di-cation). Récemment, l'étude de la polarisabilité électronique en plusieurs séries isoélectroniques (jusqu'à $Q = 90$) [2] a permis d'exprimer cette quantité par fonctions rationnelles de Q . Les formules obtenues correspondent au résultat dit "classique" $\alpha_d(Z,1) = (9/2)/Z^4 = (9/2)/(Q+1)^4$, valide pour les membres de la série hydrogénoïde en leurs états fondamentaux 2S . En plus, les données précises maintenant disponibles (à six chiffres) se laissent utiliser, par exemple, comme données de référence en études d'effets relativistes.

(a) G. Maroulis (ed.), *Atoms, Molecules and Clusters in Electric Fields*, Imperial College Press, London, 2006; (b) J. Mitroy, M. S. Safronova, C. W. Clark, *J. Phys. B* **43** (2010) 202001.

(a) V. Koch, D. Andrae, *Int. J. Quantum Chem.* **111** (2011) 891; (b) V. Koch, D. Andrae, *Eur. Phys. J. D* **67** (2013) 139.

Mots-Clés: Polarisation électronique, série isoélectronique

*Intervenant