



All. 11

~~Misc. 112~~

NI-I-N.65

G. 11. 158.

E. ABATE<sup>\*)</sup>

E. FABRI<sup>o)</sup>

CENTRO STUDI CALCOLATRICI ELETTRONICHE

UNIVERSITA' DI PISA

Impiego di una calcolatrice elettronica nella ricerca delle autofunzioni del momento angolare orbitale in accoppiamento di Russel-Saunders.

Si riferisce sull'utilizzazione della calcolatrice elettronica attualmente in funzione presso l'Università di Pisa alla costruzione di tabelle di funzioni d'onda atomiche ottenute come combinazioni di orbitali atomici antisimmetrizzati.

Il metodo usato è sostanzialmente quello degli operatori di proiezione, proposto da Fieschi e Lowdin,<sup>(\*)</sup> che consiste nell'applicazione successiva di operatori di proiezione che cancellano le componenti indesiderate della funzione d'onda iniziale.

L'interesse di questo studio consisteva, oltre che nei risultati effettivi del calcolo, nel carat-

---

<sup>\*)</sup> Temporaneamente distaccata dalla Sezione di Milano dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare.

<sup>o)</sup> Attualmente alla Sezione di Pisa dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare.

<sup>(\*)</sup>R. Fieschi, P.O. Lowdin: Atomic state wave functions generated by projection operators. Pubblicazione della Sez. di Milano dell'Istituto Nazionale di

tere particolare del problema. Al contrario di quanto accade nella maggior parte delle applicazioni di calcolatrici elettroniche, non si presentano qui calcoli numerici complicati, ma solo operazioni aritmetiche elementari. La difficoltà e l'interesse del calcolo derivano invece da due fattori: 1) la struttura logica notevolmente complessa (e che ha dovuto essere ulteriormente complicata data l'esigenza di risparmiare spazio di memoria); 2) la necessità di ottenere risultati rigorosamente esatti nonostante che nel calcolo figurino numeri irrazionali (la difficoltà si risolve osservando che tutti gli irrazionali che compaiono sono irrazionali quadratici; basta perciò lavorare sui loro quadrati per avere sempre numeri razionali).

A causa delle limitazioni della macchina utilizzata è stata studiata solo la costruzione di autofunzioni del momento angolare orbitale nello schema di Russel-Saunders a partire da orbitali relativi ad elettroni equivalenti.

Nonostante queste semplificazioni, non è stato possibile calcolare tutte le autofunzioni interessanti, essenzialmente per due ragioni: 1) la scarsità di memoria a disposizione impedisce lo studio dei casi nei quali intervengono un gran numero di orbitali atomici; 2) l'impossibilità di rappresentare nella macchina, senza eccessive complicazioni, numeri interi maggiori in modulo di  $2^{17} = 131.072$  crea serie difficoltà nei casi più complicati (che sono naturalmente i più interessanti) a causa dei coefficienti elevati che si presentano nei passaggi intermedi.

Rimane come risultato concreto di questa prova la verifica delle tabelle fornite da Fieschi e Lowdin;

si può inoltre considerare provato che anche per problemi di questa particolare natura l'impiego di una calcolatrice elettronica può portare ad un notevole risparmio di tempo e ad una maggiore sicurezza da errori.

Le ricerche qui esposte verranno continuate nel senso di programmare il calcolo per la CEUP, e di estendere il programma ai casi più generali finora non considerati.

\*\*\*\*\*