

THÈSE

présentée à la
Faculté des Sciences de l'Université de Paris

pour obtenir

le Grade de Docteur 3 ème Cycle
Spectroscopie

par

Yves BORDARIER

Contribution à l'étude théorique du spectre d'arc du thulium
réalisée au point d'un programme de calcul fonctionnant sur CAB 500.

Soutenue le 1964 devant la Commission d'Examen

M.Président

MM. } Examineurs

.....Invité

PARIS 1964

II - METHODES :

Les méthodes classiques de E.U. CONDON et G.H. SHORTLEY (7) ainsi que les travaux de G.RACAH (8) sur les opérateurs tensoriels forment maintenant un outil très puissant pour l'étude théorique des spectres complexes. Un premier exemple en fut donné par RACAH lui-même dans son étude sur le thorium (9). Le livre de B.R. JUDD (10), qui contient un exposé très clair de ces nouvelles méthodes, nous a fourni une aide considérable pour ce travail.

Rappelons maintenant les grandes lignes de cette méthode.

Les niveaux d'énergie de l'atome sont donnés par les valeurs propres de l'hamiltonien H :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{L}_i \cdot \vec{S}_i$$

où N est le nombre d'électrons, r_i la distance du ième électron au noyau, r_{ij} la distance entre le ième et le jème électron, où enfin le dernier terme représente l'énergie de spin-orbite. Les deux derniers termes sont trop importants relativement aux deux premiers pour constituer une perturbation. Aussi considère-t-on un nouveau terme arbitraire $U(r_i)$ tel que l'hamiltonien.

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} + U(r_i) \right]$$

puisse être considéré comme hamiltonien principal. Les valeurs propres de H_0 représentent les énergies des configurations électroniques caractérisées par les nombres quantiques n et l de chaque électron.

Au premier ordre de la théorie des perturbations on néglige les interactions entre configurations. On diagonalise donc la matrice de l'hamiltonien :

.../...

$$H' = \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{2r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \left[\sum (z_i) \vec{L}_i \cdot \vec{S}_i - U(z_i) \right]$$

constituée sur les états d'une seule configuration.

Ces états sont ceux d'un couplage limite choisi à priori (par exemple, le couplage L S). Il peut être quelconque; toutefois on le choisit souvent le plus proche possible du couplage réel. Chacun des états de ce couplage est caractérisé par un certain jeu de nombres quantiques dont le plus important est le nombre J qui donne la valeur du moment angulaire total de l'atome. Les éléments de matrice :

$$a_{uv} = (u J M_J | H' | v J' M_J')$$

ne sont différents de zéro que si $J = J'$ et $M_J = M_J'$ et sont alors indépendants de M_J . La matrice de H' se décompose en autant de sous-matrices qu'il existe de valeurs de J dans la configuration.

D'autre part, lorsqu'on développe les éléments a_{uv} , les parties angulaires et radiales des fonctions d'onde et de l'hamiltonien se séparent. On obtient des intégrales radiales telles que les intégrales de Slater :

$$R^k(ab, cd) = e^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{z^k}{z^{k+1}} \Psi_a \Psi_b' \Psi_c \Psi_d' dz, dz_2 ; G^k(a, b) = R^k(ab, ba) ; F^k(ab) = R^k(ab, ab)$$

où les Ψ sont les parties radiales des fonctions d'onde; ou encore l'intégrale de structure fine :

$$\sum_p = \int_0^\infty \Psi_p \sum(z) \Psi_p dz$$

Si on désigne par R_k les différentes intégrales, les éléments de la matrice de H' s'écrivent :

$$a_{uv} = \sum_k c_{uv}^k P_k$$

.../...

Le calcul direct des P_k est encore peu précis. On préfère donc les considérer comme des paramètres ajustables. Au contraire, grâce aux théories de RACAH, les coefficients C_{uv}^k peuvent être exprimés par des formules explicites et leurs valeurs peuvent être déterminées de manière rigoureuse.

Après la diagonalisation des différentes matrices, leurs valeurs propres sont comparées aux valeurs expérimentales. Si l'identification des niveaux expérimentaux est possible, un ajustage des paramètres a lieu de façon à obtenir le meilleur accord possible entre la théorie et l'expérience.

Cette identification peut éventuellement être facilitée par certaines expériences. Le déplacement isotopique, bien qu'encore mal expliqué, permet un premier classement des niveaux en configurations. Un certain nombre de calculs auxiliaires peuvent aussi être utiles : le calcul des intensités des raies, des structures hyperfines et des facteurs de Landé.

Le calcul de l'intensité des transitions, de la structure hyperfine et des facteurs de Landé commence par la détermination de formules explicites semblables à celles donnant les coefficients C_{uv}^k . Toutes ces formules sont écrites dans le cas du couplage limite qui a servi à calculer les coefficients C_{uv}^k . On tient compte ensuite de la composition des états de la diagonalisation de H' . Autrement dit, on ne diagonalise pas les matrices de structure hyperfine.

On peut classer ces trois calculs auxiliaires par ordre d'efficacité croissante :

- le calcul des intensités fait intervenir trop de paramètres expérimentaux.

.../...

I - INTRODUCTION

La classification et l'interprétation théorique des spectres des atomes complexes constituent une des activités du laboratoire Aimé Cotton.

C'est dans le cadre de ces travaux que le spectre d'arc du thulium, de la série des lanthanides, a retenu plus particulièrement notre attention.

La méthode que nous avons employée a été décrite par R.E. TREES et coll. (1). Afin d'en permettre une application plus rapide, nous avons mis au point deux programmes, fonctionnant sur la calculatrice CAB 500 des laboratoires de Bellevue.

Grâce à ce travail nous avons pu pousser assez loin la compréhension du spectre de Tm I, en étudiant les deux configurations excitées $4f^{13} 6s 7s$ et $4f^{13} 6s 6p$. Par ailleurs nous avons appliqué la même méthode à l'étude des trois configurations paires profondes du spectre d'arc de l'osmium :

$$5d^6 6s^2, 5d^7 6s \text{ et } 5d^8 \quad (2)$$

Enfin d'autres chercheurs du laboratoire ont appliqué nos programmes à différents travaux :

- le traitement partiel de certaines configurations de Pu I et Pu II : $5f^5 6d 7s^2$ (3), $5f^6 7s$ (4) et $5f^5 6d 7s$.
- l'étude de la configuration $4f^7 (^8S)$ $6s 6p$ de Eu I (5) et de la configuration $4f^7 (^8S)$ $6p$ de EU II.
- enfin l'étude de l'interaction de configurations et de la structure hyperfine dans les configurations excitées de Ba I : $6s 6p$, $6s 7p$ et $5d 6p$ (6).

Tableau I

Suite des opérations nécessaires à l'étude d'une
configuration électronique

	- Choix d'un couplage limite approprié	
	- Ecriture des formules donnant les C_{UV}^k et éventuellement les facteurs de Landé, les structures hyperfines et les intensités des transitions	
	- Détermination des valeurs numériques des coefficients donnés par ces formules	*
	- Estimation des valeurs des paramètres P_k	
s'il y	- Construction et diagonalisation des matrices de l'hamiltonien H'	**
	- Eventuellement, calcul des facteurs de Landé et des structures hyperfines	**
a	- Interprétation des données expérimentales	
lieu	- Ajustage des paramètres	**

Effectué par : * Programme A * * Programme 39 bis

- le calcul des structures hyperfines fait intervenir de nouvelles intégrales radiales, qui seront aussi considérées comme des paramètres. Toutefois une vérification grossière de leurs valeurs est possible.

- le calcul des facteurs de Landé, immédiatement réalisable après chaque diagonalisation.

Nous avons rassemblé dans le tableau I la suite des opérations que nous venons de décrire.

III - PROGRAMMES :

La calculatrice dont nous disposons est la SEPSEA CAB 500 appartenant aux laboratoires de Bellevue.

La CAB 500 est une calculatrice digitale comprenant 16 mémoires rapides et un tambour magnétique d'accès plus lent (10 ms en moyenne) contenant 16 384 mémoires, chacune de 33 bits. Les opérations les plus simples (addition et soustraction des nombres entiers, décalages, transferts, etc....) sont câblées; les autres opérations (multiplication ou division des nombres entiers, opérations en virgule flottante, calculs trigonométriques, etc...) sont microprogrammées. Ces microprogrammes occupent une moitié du tambour, réduisant d'autant les mémoires disponibles pour l'utilisateur.

La sortie de la machine est constituée ici par une machine à écrire à bandes perforées du type Flexowriter dont la cadence est de 10 caractères par seconde.

1°) Programme des Formules (ou programme A) :

Les formules donnant les coefficients C_{jk} ainsi que celles donnant les facteurs de Landé, les structures hyperfines, etc... sont en général très compliquées. Le découplage ou le recouplage des moments angulaires, par exemple, qui sont des opérations courantes pour l'établissement de ces formules, font intervenir des coefficients numériques complexes: les coefficients $6-j$ et $9-j$.

Les coefficients donnés par ces formules prennent un grand nombre de valeurs numériques en fonction des nombres quantiques des états de la configuration étudiée. Le calcul à la main est souvent très long et fastidieux bien que l'on puisse utiliser des tables de coefficients telles que celles de ROTENBERG et coll. (11). Ce calcul n'est pas non plus à l'abri des erreurs.

C'est pourquoi nous avons mis au point le programme A qui donne de manière rigoureuse toutes les valeurs possibles de ces formules. Il a fallu tenir compte en outre de certaines règles qui lient les variables entre elles; par exemple, la relation triangulaire liant trois moments angulaires dont un résulte du couplage des deux autres :

$$|S - L| \leq J \leq S + L$$

a) Choix de la formule :

Dans les limites des possibilités de la machine nous avons choisi la formule la plus générale :

$$X(J_1, J_2, \dots, J_n) = \pi_0^{\alpha} \left[\sum_{J_1', J_2', \dots, J_n'} \pi_1 + \sum_{J_1'', J_2'', \dots} \pi_2 + \dots \right] \quad (K \text{ fois})$$

où X représente par exemple un coefficient C_{uv}^k dont on cherche la valeur numérique, où

$$\pi_i = \delta(A_1, A_2) \delta(A_3, A_4) \dots (k_i \text{ fois}) \times (-1)^{J_{a_1} + J_{a_2} + \dots + J_{a_n} + \beta}$$

$$\times \left\{ [J_{c_1}] [J_{c_2}] \dots [J_{c_n}] \right\}^{\delta} \times \left\{ [J_{c_1}] [J_{c_2}] \dots [J_{c_n}] \right\}^{1/2}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} A_5 & A_6 & A_7 \\ A_8 & A_9 & A_{10} \end{matrix} \right\} \dots (k_2 \text{ fois}) \times \left\{ \begin{matrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{14} & A_{15} & A_{16} \\ A_{17} & A_{18} & A_{19} \end{matrix} \right\} \dots (k_3 \text{ fois})$$

$$\times a \sqrt{b} / c \sqrt{d} \times [[J_{d_1}]]^{\delta} \times \text{Table} \times \text{Table} \dots (k_4 \text{ fois})$$

.../...

- les J_i représentent les variables ou nombres quantiques dont dépend explicitement le coefficient calculé. Les J'_i , J''_i , etc... représente au contraire des variables muettes. Enfin les A_i sont soit des nombres purs, soit des variables explicites ou muettes.

- les sommes notées \sum portent sur toutes les valeurs des variables compatibles avec les relations triangulaires incluses. Cette règle s'étend aux formules que nous verrons plus loin donnant les coefficients 6-j et 9-j.

- les crochets ont la signification classique (10) :

$$[J] \equiv 2J + 1$$

le double crochet signifie :

$$[[J]] \equiv J(J+1)(2J+1)$$

- les accolades contenant 6 et 9 nombres ou variables sont les représentations classiques des coefficients 6-j et 9-j.

- α représente la puissance à laquelle le facteur \prod_0 doit être élevé. α peut prendre les valeurs 0, 1 et 2.

- β peut prendre les valeurs 0, 1/2, 1, 3/2

- γ et δ peuvent prendre les valeurs - 1, - 1/2, 0, 1/2, 1

- K peut varier de 0 à 3.

- k_1, k_2, k_3, k_4 , ainsi que n, n', n'' ne sont pas limités.

- a, b, c, d sont des nombres entiers strictement positifs.

- Enfin les tables sont des listes de valeurs numériques par lesquelles il faut multiplier à tour de rôle la formule. Ces valeurs sont des fonctions d'une ou plusieurs variables (9 au maximum), fonctions soit entières : $\pm n$, soit irrationnelles : $a\sqrt{b}/c\sqrt{d}$.

.../...

Ces tables donnent une grande souplesse d'utilisation au programme. Elles permettent en particulier l'emploi de résultats déjà existants ; les tables de coefficients de parenté fractionnelle (c.f.p.), par exemple .

Plusieurs problèmes importants que nous allons étudier séparément se sont posés et ont été résolus pendant la mise au point du programme.

b) Forme des valeurs numériques en mémoire :

Tous les résultats intermédiaires ou définitifs des calculs qui nous occupent peuvent être mis sous la forme irrationnelle suivante : $a\sqrt{b}/c\sqrt{d}$
Aussi nous sommes nous imposés de conserver l'exactitude totale du calcul jusqu'au résultat final. Cela nous permet en particulier des vérifications très utiles : les coefficients diagonaux C_{uu}^k doivent être , par exemple, toujours rationnels (règle empirique, jamais démentie en spectroscopie des atomes libres).

- la CAB 500 peut introduire les valeurs numériques en mémoire sous trois formes :

- la forme entière ; on peut introduire tout entier n tel que :

$$- 2^{31} < n < 2^{31}$$

- la forme fractionnaire ; ce sont les mêmes nombres divisés par 2^{31}

- la forme flottante ; si un nombre s'écrit :

$$n = a \times 2^{\alpha} \text{ avec } 0,5 \leq a < 1$$

sont introduits dans la même mémoire :

α sous forme fractionnaire,

α sous forme entière,

a possède alors 7 ou 8 chiffres significatifs; α peut varier de - 63 à + 63.

.../...

Pour les raisons exposées ci-dessus, la forme entière a été seule retenue. Il a fallu ensuite distinguer entre les données d'une part et les résultats, intermédiaires ou définitifs, d'autre part.

Les données sont des nombres entiers ou demi-entiers, toujours petits. La forme entière est obtenue en doublant systématiquement les valeurs de toutes les données susceptibles d'être demi-entières.

La valeur numérique des formules est au contraire irrationnelle. D'autre part le grand nombre de factorielles contenues dans les coefficients $n-j$ oblige à manipuler de très grands nombres. Ceci nous a conduit à utiliser la forme employée par ROFENBERG et coll.(11) qui consiste à ne garder que les facteurs premiers du nombre : si le nombre s'écrit :

$$n = 2^{\alpha_1/2} \times 3^{\alpha_2/2} \times 5^{\alpha_3/2} \times 7^{\alpha_4/2} \times 11^{\alpha_5/2} \times 13^{\alpha_6/2} \times 17^{\alpha_7/2} \times 19^{\alpha_8/2} \times 23^{\alpha_9/2} \times 29^{\alpha_{10}/2} \times 31^{\alpha_{11}/2} \times \alpha_{12}$$

on mémorise les douze nombres α_i qui sont toujours des entiers positifs, négatifs ou nuls dans les calculs que nous considérons.

Enfin pour nommer les variables nous avons utilisé l'adressage symbolique. On attribue à chaque variable un numéro, qui repere au cours du calcul, dans plusieurs séries de mémoires, les valeurs caractéristiques de la variable: valeur instantanée, valeur minimale, maximale, etc.....

c) Coefficients 6-j et 9-j :

Comme nous l'avons vu, les coefficients 6-j et 9-j interviennent fréquemment dans nos formules le coefficient 6-j est défini par :

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} = \Delta(j_1, j_2, j_3) \Delta(j_1, l_2, l_3) \Delta(l_1, j_2, l_3) \Delta(l_1, l_2, j_3) \\ \times \sum_{\delta} \frac{(-1)^\delta (3+1)!}{[(3-j_1-j_2-j_3)! (3-j_1-l_2-l_3)! (3-l_1-j_2-l_3)! (3-l_1-l_2-j_3)! \\ (j_1+j_2+l_1+l_2-3)! (j_2+j_3+l_2+l_3)! (j_3+j_1+l_3+l_1)!]}$$

où :

$$\Delta(a, b, c) = [(a+b-c)! (a-b+c)! (b+c-a)! / (a+b+c+1)!]^{1/2}$$

Le coefficient 9-j est défini à partir des 6-j de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{matrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{matrix} \right\} = \sum_x (-1)^{2x} (2x+1) \\ \times \left\{ \begin{matrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{23} & j_{33} & x \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{12} & x & j_{32} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ x & j_{11} & j_{21} \end{matrix} \right\}$$

Deux problèmes principaux se sont posés dans le calcul de ces coefficients : celui des factorielles et celui des sommes.

La CAB 500 ne réalisant pas les programmes itératifs très rapidement, nous avons préféré tabuler les factorielles dont nous avons besoin. C'est ainsi que nous avons tabulé $n!$ pour $0 \leq n \leq 33$, les résultats étant introduits directement sous la forme de ROTENBERG.

Pour les sommes il s'agissait d'abord de réduire leur nombre de termes. Dans le coefficient 6-j ce nombre ne dépend pas de l'ordre des variables. Au contraire, dans le coefficient 9-j, l'ordre des variables intervient: les variables de la diagonale secondaire ne limitent pas la variable x . Nous ordonnons donc les variables au préalable, au moyen d'échanges de lignes ou de colonnes du 9-j entre elles, ce qui revient à multiplier le coefficient par un facteur de phase.

.../...

D'autre part une somme n'est effectuée que lorsque tous ses termes sont connus, les processus de mises en facteur, de passage sous forme entière puis sous forme de ROTENBERG étant relativement longs sur la CAB 500.

Finalement les temps réalisés sont les suivants :

6-j : 2,5 à 13 secondes

9-j : 10 à 120 secondes

exemples : $\left\{ \begin{array}{c} 888 \\ 888 \end{array} \right\} = -12219/965770$ en 13 secondes

$\left\{ \begin{array}{c} 444 \\ 443 \\ 433 \end{array} \right\} = 193/160083$ en 1 min. 44 secondes.

d) Relations triangulaires :

Nous savons que l'addition des moments angulaires entraîne une relation triangulaire entre les nombres quantiques correspondants :

$$|j_1 - j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2$$

Au niveau de la formule, ces relations sont présentes dans les coefficients n-j ; en effet, pour les valeurs interdites par l'inégalité triangulaire, une ou plusieurs factorielles s'appliquent à des nombres négatifs. Le coefficient n-j est alors considéré comme nul.

.../...

Ce sont les groupes de 3 nombres ou variables composant les relations triangulaires que la machine recherche dans les coefficients de la formule, avant tout calcul. Elle n'entreprend ensuite le calcul proprement dit que si les valeurs instantanées des variables satisfont à toutes ces conditions.

e) Limites :

Il fallait limiter arbitrairement les valeurs numériques des variables des coefficients $n-j$. La valeur 8 adoptée par ROTENBERG et coll. nous a paru suffisante. Cette première limite entraîne plusieurs autres.

Seuls les facteurs premiers jusqu'à 31 doivent être explicités dans la forme de ROTENBERG. Les facteurs premiers supérieurs ou égaux à 37 ne sont élevés qu'à une puissance entière et positive ou nulle.

La table des factorielles a pu être limitée à 33 !

Enfin la place réservée aux termes des sommes des $n-j$ a pu être limitée à 9 termes.

En outre, dans la formule, nous avons limité à 100 le nombre de termes des sommes notées \sum et à 3 le nombre de sommes notées \sum .

2°) Programme de diagonalisation (ou programme 39 bis) :

Ce programme a été réalisé à l'aide des deux programmes SEPSEA 0 39 et 0 25. Il permet de construire et de diagonaliser une ou plusieurs matrices, puis de comparer les résultats des diagonalisations à l'expérience et d'en déduire de meilleures valeurs des paramètres. Il permet en outre de calculer les facteurs de LANDE g et les coefficients de structure hyperfine des niveaux en couplage intermédiaire (cf tableau I).

a) Diagonalisation :

Le procédé séquentiel utilisé pour diagonaliser les matrices est celui de POPE et TOMPKINS (méthode de Jacobi (12) : la rotation qui permet d'annuler un élément non diagonal, n'est effectuée que si cet élément est supérieur à un certain seuil H_i

N étant l'ordre de la matrice $\begin{pmatrix} a_{ij} \end{pmatrix}$ et H_0 la moyenne quadratique des éléments non diagonaux :

$$H_0 = \sqrt{\sum_{i \neq j} a_{ij}^2}$$

les seuils successifs sont depuis par la formule :

$$H_{i+1} = H_i / N$$

La diagonalisation est considérée satisfaisante à la n ème itération si tous les éléments non diagonaux sont inférieurs à $H_1 \varepsilon$ (ε : facteur de précision).

b) Données :

Les données forment 5 groupes :

- le nombre de matrices et le nombre de paramètres utilisés.
- pour chaque matrice, l'ordre et le facteur de précision ξ .
- pour chaque paramètre, la valeur numérique et une marque indiquant si ce paramètre sera ajusté ou non.
- les coefficients C_{UV}^k de toutes les matrices et de tous les paramètres.
- enfin, dans le cas où le couplage de base choisi est le couplage L S pur, les facteurs de LANDE g_{LS} .

c) Préparation de l'ajustage des paramètres :

Eventuellement, la machine calcule après chaque diagonalisation des coefficients C_{AE} qui lui permettront d'ajuster les paramètres.

Nous nous rappelons que l'hamiltonien H' est représenté par plusieurs matrices, chacune étant caractérisée par une valeur du nombre quantique J . Soient C_J ces matrices.

Soit T_J la matrice de transformation de l'espace de départ de la matrice C_J dans l'espace de ses vecteurs propres \vec{V}_e (de composantes V_{ei}) :

$$T_J \equiv \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \dots & V_{n1} \\ V_{12} & V_{22} & \dots & V_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{1n} & V_{2n} & \dots & V_{nn} \end{pmatrix}$$

où $C_J \equiv \sum_k \left(c_{uv}^k \right) P_k$ est tel que $C_J \vec{V}_e = E_e \vec{V}_e$. La
matrice C'_j transformée de C_j s'écrit :

$$C'_j = T C_j T^{-1} \equiv \begin{pmatrix} E_1 & & & \\ & E_2 & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & E_n \end{pmatrix}$$

Une petite variation dP_k des paramètres P_k se traduit par une variation de C_j et de C'_j :

$$dC_J \equiv \sum_k \left(c_{uv}^k \right) dP_k$$

$$dC'_j \equiv \sum_k T \left(c_{uv}^k \right) T^{-1} dP_k$$

Les variations d'énergie dE_e , que l'on indentifiera aux différences $\Delta E_e = E_e \text{ exp.} - E_e \text{ th.}$ sont données au premier ordre par les éléments diagonaux de cette matrice :

$$(1) \quad dE_e = \sum_k \left(\sum_{uv} V_{eu} c_{uv}^k V_{ev} \right) dP_k = \sum_k G_{ek} dP_k$$

Ces équations permettront ensuite de connaître les P_k capables de réduire les écarts théorie-expérience.

d) Calcul des g et des structures hyperfines :

Les facteurs de LANDE et les coefficients de structure hyperfine des niveaux en couplage intermédiaire sont donnés par une formule semblable à celle qui donne les coefficients g_{RL} utilisés pour l'ajustage des paramètres (formule 1). Il suffit donc d'introduire les g et les structures hyperfines comme autant de nouveaux paramètres fictifs. Une diagonalisation spéciale peut leur être réservée.

Si les états de base sont des états de couplage LS pur, la formule donnant les facteurs de LANDE se simplifie :

$$g_i = \sum_f V_{if}^2 g_i^{(LS)}$$

les g_i peuvent être dans ce cas calculés et imprimés après la diagonalisation de chaque matrice.

e) Comparaison avec l'expérience et ajustage des paramètres :

Tous les résultats obtenus jusque là permettent alors une interprétation plus ou moins complète des résultats expérimentaux. Les énergies des niveaux expérimentaux identifiés sont introduites dans la machine qui calcule les différences ΔE_{ij} de la formule (1). Ces différences sont définies à une constante additive près; en effet les énergies moyennes des configurations sont aussi considérées comme des paramètres, notés T ; dans chaque étude, un paramètre T est arbitraire car il fixe le zéro des énergies théoriques. On choisit cette constante additive de façon à ce que l'écart quadratique moyen :

.../...

$$d\overline{E}_l = \left[\sum_i^N (dE_l)^2 / N \right]^{1/2}$$

soit minimale (N : nombre de niveaux identifiés). Cela se traduit par la condition :

$$\sum_i^N d\overline{E}_l = 0$$

Les N équations (1) sont ensuite résolues à l'aide du programme SEPSEA 025 par la méthode classique des moindres carrés. Les variations ΔP_k obtenues sont chacune accompagnées par un écart-type qui renseigne sur la fiabilité des paramètres et donc sur l'intensité des perturbations dues à d'autres configurations.

Ces variations ΔP_k peuvent être utilisées pour une nouvelle diagonalisation.

.../...

3°) Utilisations pratiques et perspectives d'avenir :

On trouvera en Annexes I et II les modes d'emploi détaillés des deux programmes A et 39 bis.

Les laboratoires de Bellevue viennent d'acquérir une nouvelle machine : la PALLAS construite par la S E T I .

Les performances et les caractéristiques de cette machine (vitesse supérieure, plus grande souplesse de programmation, etc....) nous permettent d'espérer une utilisation plus simple et plus rapide de nos programmes.

On trouvera en Annexe III l'organigramme d'une version améliorée du programme A; nous y avons introduit une plus grande liberté dans la variation des variables (limites, pas d'avancement), des limites numériques plus larges, un autre coefficient : le 3-j et surtout une récursivité dans la formule qui, nous l'espérons, donnera beaucoup de souplesse dans l'utilisation du programme.

Une version améliorée du programme 39 bis est également en cours de programmation.

.../...

IV - APPLICATION AUX CONFIGURATIONS PAIRES PROFONDES DE Os I :

Les travaux de TH. A.M. VAN KLEEF et coll. (13) (14) ont permis de connaître 46 niveaux pairs profonds du spectre d'arc de l'osmium. D'autre part les travaux de G. GLUCK (2) (15) ont permis d'attribuer des configurations précises à la plupart d'entre eux. C'est pour interpréter et confirmer ces résultats expérimentaux que nous avons entrepris, en collaboration avec J. BAUCHE, l'étude théorique des trois configurations paires les plus profondes de Os I : $5d^6 6s^2$, $5d^7 6s$ et $5d^8$.

Les trois configurations sont décrites dans leur ensemble par 17 paramètres, chaque configuration possédant ses propres paramètres; nous avons tenu compte des corrections $\propto L(L+1)$ et βQ introduites respectivement par TREES (16) (17) et RACAH (18).

Après quelques itérations, les résultats sont les suivants : les 46 niveaux connus sont interprétés avec un écart quadratique moyen de 79 K qui représente 0,25 % de l'écart total des niveaux expérimentaux; les facteurs de Landé g sont calculés avec une excellente précision ($\sim 0,01$); les attributions de configurations données par GLUCK sont confirmées; enfin les résultats théoriques couvrent l'ensemble des 81 niveaux constituant les trois configurations.

.../...

V - APPLICATION AUX CONFIGURATIONS $4f^{13} 6s 7s$ ET $4f^{13} 6s 6p$ DE Tm I :

Dès 1942, W.F. MEGGERS (19) détermine la configuration fondamentale du spectre d'arc du thulium : $4f^{13} 6s^2$, ainsi qu'une quinzaine de niveaux pairs. En 1961, MEGGERS et coll. (20) publient une liste de 54 niveaux pairs dont 38 sont nouveaux. Enfin en 1963, R.VETTER (21) (22) (23) étudie la structure hyperfine de 70 raies d'arc du thulium et publie à son tour 17 niveaux pairs et 10 niveaux impairs.

Le nombre et la force des transitions entre les niveaux impairs supérieurs, les niveaux pairs profonds et le fondamental conduisent VETTER à supposer qu'on se trouve en présence d'une part de la configuration $4f^{13} 6s 7s$, d'autre part de la configuration $4f^{13} 6s 6p$. Une étude théorique de ces deux configurations était donc nécessaire.

Une première remarque s'impose concernant le couplage des électrons. Comme RACAH l'a très justement montré (24), les notations du couplage L S ne permettent pas toujours de nommer les niveaux des spectres complexes de façon satisfaisante. RACAH remarque en particulier que les configurations $f^n ll'$, dans les spectres des terres rares, sont mieux représentées par un couplage $J_1 J_2$ ou $J_1 L_2$. Les deux configurations de Tm I (fig.1) sont deux nouveaux exemples du couplage $(f^n J_1, ll' J_2) J$.

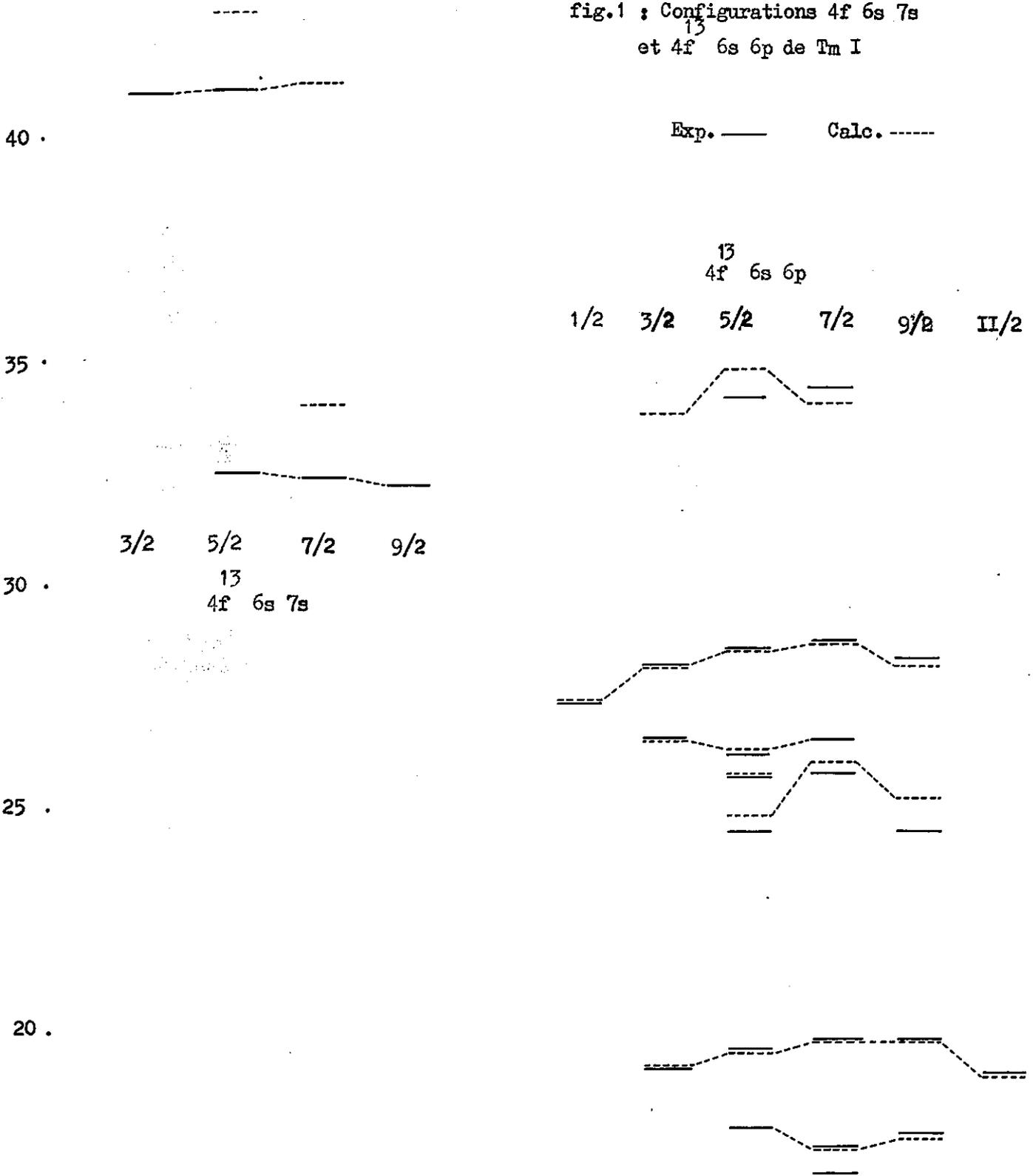
1°) Configuration $4f^{13} 6s 7s$:

La figure 1 montre clairement les deux groupes de niveaux, de grands-parents respectifs $^2F_{5/2}$ et $^2F_{7/2}$; chaque groupe se compose de trois niveaux issus de $6s 7s^3 S_1$ et du niveau issu de $6s 7s^1 S_0$.

.../...

-I
x 1000 cm

13
fig.1 : Configurations 4f 6s 7s
et 4f 6s 6p de Tm I



L'étude de la configuration $4f^{13}6s7s$ est un peu spéciale. En effet on connaît 5 niveaux expérimentaux. Or les paramètres nécessaires à la description de la configuration sont au nombre de 5 : 3 intégrales de Slater : $G_3(4f, 6s)$, $G_3(4f, 7s)$ et $G_0(6s, 7s)$; 1 intégrale de structure fine : ζ_f ; le paramètre T qui fixe l'énergie moyenne de la configuration; ce paramètre est assimilable en partie aux intégrales $F_0(4f, 6s)$, $F_0(4f, 7s)$ et $F_0(6s, 7s)$. Aussi peut-on déterminer la valeur des 5 paramètres sans ambiguïté (tableau II). Cette exactitude n'est évidemment qu'apparente puisqu'elle ne tient pas compte de l'interaction entre configurations et n'est due qu'au nombre trop faible des niveaux connus.

De même, les 3 paramètres de structure hyperfine : a_{4f} , a_{6s} et a_{7s} , sont apparemment exacts (tableau III) car ils sont calculés à partir des 3 écarts hyperfins connus.

Heureusement, tous ces paramètres peuvent être estimés par ailleurs; une vérification de l'étude sera donc possible.

a) Résultats :

L'ensemble des résultats est rassemblé dans les tableaux II, III et IV; dans ce dernier tableau, les grandeurs non primées sont expérimentales, les grandeurs primées sont calculées.

Les facteurs de Landé ont été calculés dans deux couplages purs et dans le couplage intermédiaire :

- la colonne g'_I correspond au couplage $(4f^{13} J_1, 6s 7s J_2) J$. (couplage I).

.../...

T A B L E A U II - valeurs des paramètres

Paramètres	$4f^{13}6s7s$	Evaluation	$4f^{13}6s6p$	Ecart-type
$G_3 (4f,6s)$	192,3	192	137,8	165,0
$G_3 (4f,7s)$	40,7			
$G_0 (6s,7s)$	846,6			
$G_1 (6s,6p)$		3000	3145,1	75,8
$F_2 (4f,6p)$		81	46,2	8,4
\int_f	2506,7	2506	2531,5	34,1
\int_p		1650	1575,9	127,1
T	sans intérêt		sans intérêt	114,3

T A B L E A U III - Paramètres de structure hyperfine

a_l	$4f^{13}6s7s$	$4f^{13}6s6p$	écart-type
a_{4f}	- 17,0	- 19,2	0,6
a_{6s}	-182,9	-115,7	8,2
a_{7s}	- 14,3		
a_{6p}		- 6,5	2,3

T A B L E A U IV - Niveaux de la configuration $4f^{13}6s7s$

$Nom_1 (J_1^s J_2^s) J$	E	E'	g	g' I	g' II	g' III	Ecart δW	hyperfin(1) $\delta W'$
(7/2, 1) 9/2	32 217,1	32 216,9	1,333*	1,333	1,333	1,333	-160,0	- 160,0
(7/2, 1) 7/2	32 359,3	32 359,1	1,195*	1,197	1,167	1,195	- 82,0	- 82,0
(7/2, 1) 5/2	32 479,3	32 479,4	0,89*	0,898	0,898	0,895	34,5	34,5
(7/2, 0) 7/2		34 029,4		1,143	1,173	1,143		- 43,5
(5/2, 1) 3/2	40 989,7*	40 990,3	0,40*	0,400	0,400	0,400	~ -15 *	13,5
(5/2, 1) 5/2	41 074,3*	41 073,6	0,99*	0,988	0,933	0,990		- 93,7
(5/2, 1) 7/2		41 194,8		1,184	1,184	1,185		- 179,3
(5/2, 0) 5/2		42 803,7		0,857	0,911	0,857		- 72,2

(*) Ces résultats nous ont été communiqués avant publication par J. BLAISE et P. CAMUS.

(1) Le thulium ayant un spin nucléaire $I = 1/2$ (31), les structures hyperfines des niveaux se réduisent à des doublets dont on donne ici l'écart en mK.

- la colonne g'_{II} correspond au couplage $\left[(4f^{13} J_1, 6s \ 1/2) J_2, 7s \ 1/2 \right] J$. (couplage II).

- la colonne g'_{III} correspond au couplage intermédiaire, c'est à dire aux états issus de la diagonalisation.

b) Discussion :

Comme nous l'avons dit, cherchons maintenant à estimer les divers paramètres. Deux d'entre eux, \sum_f et $G_3(4f, 6s)$, interviennent dans d'autres configurations du thulium, où nous pouvons déterminer facilement leurs valeurs :

$$\begin{aligned} 4f^{13} 6s^2 \text{ de } Tm \text{ I} & : \sum_f = 2506 \text{ K} \\ 4f^{13} 6s \text{ de } Tm \text{ II} & : \sum_f = 2506 \text{ K} ; G_3(4f, 6s) = 212 \text{ K} \end{aligned}$$

Pour \sum_f l'accord est manifestement excellent. Pour $G_3(4f, 6s)$, il est normal qu'il existe une légère différence entre les deux configurations; de plus on constate, dans le cas de Am I $5f^7 7s 8s$ - Am II $5f^7 7s$ et dans celui de Eu I $4f^7 6s 7s$ - Eu II $4f^7 6s$, que les différences homologues observées sont dans le même sens et du même ordre de grandeur que dans le thulium.

Du paramètre $G_3(4f, 7s)$ nous pouvions seulement prévoir qu'il serait d'un ordre de grandeur inférieur à $G_3(4f, 6s)$.

Le cas de $G_0(6s, 7s)$ est plus délicat. Non seulement nous ne possédons aucun moyen simple de le prévoir, mais c'est sans doute le paramètre déterminé avec le moins de précision. En effet la position des niveaux connus dépend extrêmement peu de la valeur de $G_0(6s, 7s)$, qui fixe plutôt la position des deux niveaux isolés : $(7/2, 0) 7/2$ et $(5/2, 0) 5/2$.

.../...

Nos prévisions pour ces deux niveaux sont donc certainement elles aussi peu précises.

Toutefois, le tableau IV nous montre que les facteurs de Landé de certains niveaux dépendent assez nettement du couplage, donc de la grandeur de G . ($6s$, $7s$). Or les facteurs de Landé du couplage intermédiaire obtenu (colonne g'_{III}), en excellent accord avec l'expérience, sont beaucoup plus proches des facteurs de Landé du couplage I que de ceux du couplage II. On peut donc penser que les résultats obtenus ne sont pas aussi imprécis qu'on pouvait le supposer.

2°) Configuration $4f^{13} 6s 6p$:

La figure 1 fait apparaître clairement le couplage $J_1 J_2$ de la configuration. On remarque les deux groupes provenant des deux termes $4f^{13} 2F_{5/2}$ et $4f^{13} 2F_{7/2}$, constitués chacun par un groupe de 3 niveaux provenant du terme $6s 6p 1P_1$ et trois groupes de 5, 3 et 1 niveaux respectivement provenant du terme $6s 6p 3P_{2,1,0}$.

a) Paramètres :

Les paramètres de la configuration sont au nombre de huit :

- 5 intégrales de Slater : $G_3(4f, 6s)$, $G_1(6s, 6p)$, $F_2(4f, 6p)$, $G_2(4f, 6p)$ et $G_4(4f, 6p)$.
- 2 intégrales de structure fine : λ_f et λ_p .
- le paramètre T .

Comme nous l'avons vu dans l'exposé de la méthode, nous devons évaluer ces paramètres à partir des configurations et des spectres voisins :

.../...

- les paramètres ζ_p et G_3 (4f, 6s) sont connus dans la configuration $4f^{13} 6s 7s$ que nous avons étudiée précédemment.

- le paramètre ζ_p est connu dans les configurations suivantes :

$$4f^{13} 6p \text{ de Tm II} : \zeta_p = 2086 \text{ K} \quad (25)$$

$$4f^{13} 6p \text{ de Yb III} : \zeta_p = 4020 \text{ K} \quad (26)$$

$$4f^{13} 6s 6p \text{ de Yb II} : \zeta_p = 3200 \text{ K} \quad (25)$$

Pour une première évaluation, on peut supposer que :

$$\zeta_p (f^{13} p \text{ Yb III}) / \zeta_p (f^{13} p \text{ Yb II}) \simeq \zeta_p (f^{13} p \text{ Tm II}) / \zeta_p (f^{13} p \text{ Tm I})$$

On en tire :

$$\zeta_p \simeq 1650 \text{ K}$$

- le paramètre G_1 (s p) est connu dans la configuration $4f^{13} 6s 6p$ de Yb II (25) :

$$G_1 (6s, 6p) = 3000 \text{ K}$$

N. SPECTOR utilise cette même valeur pour la configuration $4f^{12} 6s 6p$ de Tm II. On peut penser que cette valeur fournit également une bonne approximation pour la configuration $4f^{13} 6s 6p$ de Tm I.

- Enfin, les paramètres F_2 , G_2 et G_4 sont connus dans la configuration $4f^{13} 6p$ de Yb III (26) :

$$F_2 = 81,2 \text{ K} \quad G_2 = 10,34 \text{ K} \quad G_4 = 9,88 \text{ K}$$

$$G_2 / F_2 = 0,1273 \quad G_4 / F_2 = 0,1217$$

.../...

Nous avons décidé de prendre pour F_2 sa valeur dans Yb III en maintenant constants les rapports :

$$G_2 / F_2 = G_4 / F_2 = 0,125$$

On laissera ces rapports varier lorsque les autres paramètres seront considérés comme suffisamment précis .

b) Résultats :

Les résultats de la diagonalisation finale sont rassemblés dans le tableau V . Les grandeurs non primées sont expérimentales, les grandeurs primées sont calculées. Les noms des niveaux sont donnés dans le couplage $J_1 J_2$.

Les tableaux VI à IX donnent les compositions des niveaux réels en fonction des niveaux du couplage $J_1 J_2$ pur . On trouve notées entre parenthèses les valeurs des composantes des vecteurs propres correspondants.

Les valeurs des paramètres de Slater et de structure fine ainsi que leurs écarts-types sont donnés dans le tableau II .

Les paramètres de structure hyperfine ont été calculés à partir des écarts hyperfins expérimentaux indiqués dans le tableau V par la lettre a . leurs valeurs et leurs écarts-types sont donnés dans le tableau III .

.../...

T A B L E A U V

Niveaux de la configuration $4f^{13}6s6p$

Nom ($J_1 J_2$) J	E	E'	ΔE	g	g'	Ecart hyperfin (1) δW	$\delta W'$
$(7/2, {}^3P_0) 7/2$	16 742,19	16 762,7	- 20,5	1,324*	1,315	- 98 _a	- 94,5
$(7/2, {}^3P_1) 7/2$	17 343,35	17 304,5	38,9	1,022*	1,025	- 25,5	- 35,8
$(7/2, {}^3P_1) 9/2$	17 613,61	17 512,2	101,4	1,191*	1,189	-105 _a	-105,1
$(7/2, {}^3P_1) 5/2$	17 752,63	17 772,1	- 19,5	1,186*	1,162	- 24	- 33,4
$(7/2, {}^3P_2) 11/2$	18 990,39*	18 902,7	87,7	1,215*	1,273		-125,6
$(7/2, {}^3P_2) 3/2$	19 132,22*	19 179,8	- 47,6	0,88*	0,872		- 1,8
$(7/2, {}^3P_2) 5/2$	19 548,77	19 468,1	80,7	0,98*	1,015	- 33 _a *	- 28,9
$(7/2, {}^3P_2) 9/2$	19 748,51*	19 689,1	59,4	1,29*	1,282		-107,2
$(7/2, {}^3P_2) 7/2$	19 753,81	19 677,4	76,4	1,18*	1,182	-66,5 _a	- 68,6
$(7/2, {}^1P_1) 9/2$	(24 348,68)	25 098,2	- 749,5	1,12*	1,114	-58	- 49,9
$(7/2, {}^1P_1) 5/2$	(24 417,96)	24 780,1	- 362,1	1,13*	1,184	-59	- 60,7
$(5/2, {}^3P_0) 5/2$	(25 656,04)	25 717,4	- 61,4	0,724*	0,676	-60*	- 49,2

.../....

T A B L E A U V (suite)

$(7/2, {}^1P_1) 7/2$	(25 717,22)	25 936,1	-218,9	1,004*	1,131	- 76*	- 52,8
$(5/2, {}^3P_1) 5/2$	26 126,92	26 254,9	-128,0	1,100*	1,140	-115 _a *	-114,3
$(5/2, {}^3P_1) 7/2$	26 439,49	26 453,3	- 13,8	1,000*	0,999	-120 _a *	-121,2
$(5/2, {}^3P_1) 3/2$	26 488,66*	26 431,1	57,6	0,85*	0,841	- 50 _a *	- 51,0
$(5/2, {}^3P_2) 1/2$	27 314,5 *	27 391,9	- 77,2	-0,015*	0,000		- 19,5
$(5/2, {}^3P_2) 7/2$	28 023,93	28 544,5	-520,6	1,16*	1,158		-121,1
$(5/2, {}^3P_2) 3/2$	28 143,7 *	28 043,7	100,0	0,66*	0,693		- 36,2
$(5/2, {}^3P_2) 9/2$	28 257,2 *	28 060,2	197,0	1,12*	1,142		-143,5
$(5/2, {}^3P_2) 5/2$	28 448,48	28 411,1	37,4	1,00*	1,036		- 81,3
$(5/2, {}^1P_1) 3/2$		33 764,9			0,794		- 80,8
$(5/2, {}^1P_1) 5/2$	(34 085,25)	34 789,4	-704,1	0,95†*	0,872	- 62 *	- 69,3
$(5/2, {}^1P_1) 7/2$	34 297,27	33 944,1	353,2	0,93*	0,904		- 72,2
Ecartés quadratiques moyens :		$\overline{\Delta E} =$	183,7	$\overline{\Delta g} =$	0,027	$\overline{\Delta \delta W} =$	2,2

(*) et (†) : voir notes identiques dans le tableau IV.

Les résultats notés entre parenthèses sont considérés comme peu sûrs.

T A B L E A U VI

Composition des niveaux $J = 3/2$

	19 180	26 431	28 044	33 765
	19 132,22	26 488,66	28 143,7	
$7/2 \ ^3P_2 \ 3/2$	99,8 (0,9988)	0,0 (0,0110)	0,2 (-0,0372)	0,1 (0,0269)
$5/2 \ ^3P_1 \ 3/2$	0,0 (-0,0023)	85,0 (0,9216)	11,7 (0,3421)	3,3 (0,1831)
$5/2 \ ^3P_2 \ 3/2$	0,1 (-0,0389)	12,0 (0,3467)	87,8 (-0,9371)	0,0 (0,0055)
$5/2 \ ^1P_1 \ 3/2$	0,1 (-0,0267)	3,0 (-0,1739)	0,3 (-0,0574)	96,6 (0,9827)

T A B L E A U IX

Composition des niveaux $J = 9/2$

	17 512	19 689	25 098	28 060
	17 613,61	19 748,51	24 348,68	28 257,2
$7/2 \ ^3P_1 \ 9/2$	93,9 (0,9689)	3,5 (-0,1855)	2,6 (-0,1596)	0,1 (-0,0334)
$7/2 \ ^3P_2 \ 9/2$	3,5 (-0,1860)	96,5 (-0,9824)	0,0 (0,0122)	0,0 (0,0028)
$7/2 \ ^1P_1 \ 9/2$	2,6 (-0,1612)	0,0 (0,0180)	96,8 (-0,9839)	0,6 (-0,0749)
$5/2 \ ^3P_2 \ 9/2$	0,0 (0,0209)	0,0 (-0,0021)	0,6 (-0,0793)	99,3 (0,9966)

T A B L E A U VII

Composition des niveaux J = 5/2

$7/2 \ ^3P_1 \ 5/2$	17 772 (0,9469)	19 468 (0,2876)	24 780 (-0,1407)	25 717 (0,0150)	26 255 (-0,0140)	28 411 (-0,0157)	34 789 (-0,0004)
$7/2 \ ^3P_2 \ 5/2$	89,7 (0,2961)	8,3 (-0,9525)	2,0 (0,0438)	0,0 (-0,0155)	0,0 (0,0408)	0,0 (-0,0316)	0,0 (0,0093)
$7/2 \ ^1P_1 \ 5/2$	1,4 (-0,1173)	0,8 (-0,0890)	92,1 (-0,9595)	0,7 (-0,0845)	5,0 (-0,2230)	0,0 (0,0137)	0,1 (0,0208)
$5/2 \ ^3P_0 \ 5/2$	0,0 (-0,0226)	0,0 (-0,0209)	2,2 (-0,1475)	84,8 (0,9205)	10,0 (0,3168)	3,0 (0,1714)	0,0 (0,0020)
$5/2 \ ^3P_1 \ 5/2$	0,0 (-0,0143)	0,1 (0,0300)	3,0 (-0,1749)	12,7 (-0,3565)	81,4 (0,9020)	0,9 (0,0968)	1,8 (0,1347)
$5/2 \ ^3P_2 \ 5/2$	0,1 (-0,0318)	0,1 (0,0241)	0,3 (-0,0561)	1,6 (0,1245)	2,0 (0,1413)	96,0 (-0,9796)	0,0 (0,0053)
$5/2 \ ^1P_1 \ 5/2$	0,0 (0,0022)	0,0 (0,0068)	0,2 (0,0441)	0,2 (0,0478)	1,4 (-0,1197)	0,0 (-0,0082)	98,1 (0,9906)

T A B L E A U VIII

Composition des niveaux J = 7/2

	16 763	17 305	19 677	25 936	26 453	28 544	33 944
$7/2 \ ^3P_0 7/2$	16 742,19 (0,8983)	17 343,35 (-0,4070)	19 753,81 (-0,1628)	25 717,22 (0,0044)	26 439,49 (-0,0202)	28 023,93 (0,0153)	34 297,27 (0,0061)
$7/2 \ ^3P_1 7/2$	80,7 (0,3872)	16,6 (0,9047)	2,7 (-0,1230)	0,0 (0,1260)	0,0 (0,0160)	0,0 (0,0115)	0,0 (-0,0091)
$7/2 \ ^3P_2 7/2$	15,0 (0,1997)	81,9 (0,0487)	1,5 (0,9780)	1,6 (-0,0123)	0,0 (0,0256)	0,0 (0,0116)	0,0 (0,0090)
$7/2 \ ^1P_1 7/2$	4,0 (-0,0506)	0,2 (-0,1115)	95,6 (0,0299)	0,0 (0,9906)	0,1 (-0,0440)	0,0 (-0,0118)	0,1 (-0,0234)
$5/2 \ ^3P_1 7/2$	0,3 (-0,0004)	1,2 (-0,0282)	0,1 (-0,0270)	98,1 (0,0463)	0,2 (0,9681)	4,0 (0,1984)	1,9 (0,1397)
$5/2 \ ^3P_2 7/4$	0,0 (-0,0218)	0,0 (0,0001)	0,0 (-0,0020)	0,0 (0,0022)	4,2 (-0,2046)	95,7 (0,9782)	0,1 (0,0269)
$5/2 \ ^1P_1 7/2$	0,0 (-0,0043)	0,0 (0,0117)	0,0 (-0,0044)	0,1 (0,0181)	1,8 (-0,1321)	0,3 (-0,0550)	0,9 (0,9894)

c) Calcul direct des paramètres de structure hyperfine :

En utilisant les fonctions d'onde radiales calculées par F. HERMAN et S. SKILLMAN (27) par la méthode de Hartree-Fock-Slater, nous avons pu évaluer grossièrement les rapports des paramètres de structure hyperfine a_{4f} , a_{6p} et a_{6s} . Ces paramètres sont définis par les équations suivantes : (*)

$$a_{nf+u} = R \alpha^2 \frac{m}{M} g(I) \times \langle a_0^3 / r^3 \rangle$$

$$a_{ns} = R \alpha^2 \frac{m}{M} g(I) \times 8\pi/3 a_0^3 |\psi_0|^2$$

Nous avons obtenu les résultats suivants :

$$8\pi/3 a_0^3 |\psi_0|^2 = 2/3 a_0^3 \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{R_{6s}}{r} \right)^2 = 57,67$$

$$\langle a_0^3 / r^3 \rangle_{4f} = 13,25 \quad \langle a_0^3 / r^3 \rangle_{5p} = 67,25$$

Or le rapport $\int_{nl} / \langle 1/r^3 \rangle_{nl}$ dépend très peu de n si la fonction d'onde R_{nl} est suffisamment hydrogénoïde près du noyau. Si on fait cette hypothèse, connaissant la valeur de \int_{5p} donnée par HERMANN et SKILLMAN :

$$\int_{5p} = 13\ 146\ K$$

et la valeur de \int_{6p} (tableau II), on obtient :

$$\langle a_0^3 / r^3 \rangle_{6p} = 8,06$$

(*) Il faut noter en passant que dans ces formules, seul le facteur $g(I) = \mu_I / \mu_N I$ peut être négatif. En conséquence tous les paramètres de structure hyperfine doivent avoir le même signe. Les résultats du tableau III sont donc à ce point de vue satisfaisants.

On en déduit les rapports suivants :

$$a_{4f} / a_{6p} = 1,64 \qquad a_{4f} / a_{6s} = 0,230$$

à comparer aux résultats expérimentaux :

$$4f^{13} 6s 6p : a_{4f} / a_{6p} = 2,96 \qquad a_{4f} / a_{6s} = 0,166$$

$$4f^{13} 6s 7s : a_{4f} / a_{6s} = 0,093$$

Les écarts hyperfins dépendent très peu du paramètre a_{6p} , dont la valeur expérimentale est donc peu précise. Aussi l'accord entre les valeurs théorique et expérimentale du rapport a_{4f} / a_{6p} est-il satisfaisant.

Au contraire le rapport a_{4f} / a_{6s} doit être amélioré.

H. KOPFERMANN (28) montre que pour tenir compte des effets relativistes il suffit de multiplier a_{6s} par $F_r(j, Z_i)$ ($F_r = 1,7484$ dans notre cas); les facteurs $(1 - \delta)$ $(1 - \xi)$, introduisant des corrections inférieures à 5 %, sont négligeables.

Cela donne le rapport corrigé :

$$a_{4f} / a_{6s} = 0,131$$

qui correspond très bien à l'expérience.

d) Discussion :

Bien que plusieurs itérations aient été effectuées et qu'on ait tenté sans succès de faire varier les rapports G_2 / F_2 et G_4 / F_2 , les résultats ne sont pas encore aussi bons que dans certains autres travaux : l'écart quadratique moyen représente 1 % de l'écart total des niveaux expérimentaux contre 0,25 % dans l'osmium (cf. plus haut), 0,2 % dans le ruthénium (29), etc... ; de même pour les facteurs de Landé $\overline{\Delta g} = 0,027$ alors que $\overline{\Delta g} < 0,01$ dans l'osmium.

.../...

Mais ceci s'explique aisément par la perturbation certaine qu'exercent de nombreux niveaux situés très près des niveaux de $4f^{13} 6s 6p$. Nous connaissons déjà (20) (21) les deux niveaux 16957 K et 18837 K, la série des niveaux situés entre 21 000 K et 24 500 K et de nombreux niveaux au delà de 28 000 K.

La configuration $4f^{13} 5d 6p$ perturbe probablement les niveaux supérieurs de $4f^{13} 6s 6p$. On remarque en effet que la différence d'énergie correspondant au saut d'un électron de l'état 6s à l'état 5d est souvent assez faible : 6 000 K dans Yb II (24), 17 000 K dans Tm II (25), 4 000 K dans Yb III (26).

Mais les niveaux cités plus haut appartiennent probablement, en majorité, à la configuration $4f^{12} 5d 6s^2$, que nous allons étudier plus en détail.

e) Configuration $4f^{12} 5d 6s^2$:

On observe dans les spectres d'arc des lanthanides, à côté des configurations fondamentales $f^n s^2$ (n variant de 1 à 14), des configurations $f^{n-1} ds^2$ qui sont en général très basses, à tel point que, pour plusieurs éléments, on s'est longtemps demandé laquelle était la configuration fondamentale (il faut remarquer qu'elles sont de parité différente, ce qui exclut un mélange éventuel).

RACAH a appelé spectre A l'ensemble des configurations d'un spectre qui ont un ou plusieurs électrons s excités à partir de $f^{n-1} ds^2$ et spectre B l'ensemble des configurations excitées à partir de $f^n s^2$. Soit Δ la différence entre les niveaux fondamentaux des deux spectres A et B.

RACAH (30) a remarqué une certaine constance en fonction de Z de différences telles que : $\Delta_{III} - \Delta_{II}$ ou $\Delta_{II} - \Delta_I$ (les spectres I, II et III correspondent aux différents états d'ionisation de l'atome). En particulier on aurait : $\Delta_{II} - \Delta_I \simeq 5\,500\text{ K}$. Or dans Tm II, SPECTOR donne : $\Delta_{II} = 16567\text{ K}$. On en tire pour Tm I : $\Delta_I \simeq 11\,000\text{ K}$.
Soit : niveau fondamental de $4f^{12} 5d^2 6s^2 \simeq 11\,000\text{ K}$.

D'autre part la configuration $4f^{12} 6s^2$ de Tm II possède des niveaux entre 12 400 K et 50 600 K environ; si on excepte le niveau 1S_0 qui est prévu à 87 000 K.

En conséquence les 107 niveaux de $4f^{12} 5d^2 6s^2$ peuvent avoir des énergies comprises entre 11 000 K et 50 000 K.

Ainsi il est normal de considérer la configuration $4f^{12} 5d^2 6s^2$ comme la cause de la perturbation principale exercée sur la configuration $4f^{13} 6s^2 6p$.

3°) Intensités des transitions électriques dipolaires entre les configurations étudiées :

Nous avons dit précédemment que le calcul des intensités des raies apportait peu d'informations intéressantes.

Il y a à cela plusieurs raisons :

- les mesures expérimentales sont en général peu précises.

D'autre part elles dépendent souvent de facteurs expérimentaux dont l'effet sur l'intensité des raies n'est pas mesurable. Les échelles employées par les expérimentateurs traduisent quelquefois ce manque de précision; par exemple l'échelle :raie très forte (t F), forte (F),... très faible (tf).

.../...

- l'intensité d'une transition par émission dépend de la population du niveau supérieur. Or, le plus souvent, il est impossible de connaître cette population. Donc seules les transitions partant d'un même niveau peuvent être comparées entre elles.

- enfin nous avons remarqué au cours de ce travail que les intensités calculées peuvent dépendre très fortement d'une petite variation du couplage des électrons. On ne peut donc espérer un calcul vraiment correct des intensités de raies qu'avec une connaissance déjà poussée des configurations concernées.

Voyons tout de même ce que l'on peut dire des valeurs des intensités des transitions électriques dipolaires entre la configuration impaire $4f^{13} 6s 7s$ et la configuration paire $4f^{13} 6s 6p$, rassemblées dans le tableau X .

La formule 7⁴ 2 de CONDON et SHORTLEY (7) donne l'intensité I de la transition allant du niveau A au niveau B :

$$I = k N(A) \sigma^{-4} \sum_{a,b} \langle a \uparrow P \uparrow b \rangle^2$$

où a et b sont les états composant respectivement les niveaux A et B , N (A) est la population du niveau le plus élevé et P est le moment dipolaire électrique de l'atome. La somme :

$$S(A, B) = \sum_{a,b} \langle a \uparrow P \uparrow b \rangle^2$$

est aussi appelée : "force" de raie.

.../...

T A B L E A U X

Intensités des transitions entre les configurations $4f^{13}6s7s$ et $4f^{13}6s6p$

	$7/2 \ ^3s_1 \ 9/2$	$7/2 \ ^3s_1 \ 7/2$	$7/2 \ ^3s_1 \ 5/2$	$7/2 \ ^1s_0 \ 7/2$	$5/2 \ ^3s_1 \ 3/2$	$5/2 \ ^3s_1 \ 5/2$	$5/2 \ ^3s_1 \ 7/2$	$5/2 \ ^1s_0 \ 5/2$
	32 217,15	32 359,33	32 479,3		40 989,7	41 074,32		
$7/2 \ ^3P_0 \ 7/2$ 16 742,19	15 126	1,6 88	2 110	0,04		0,9	0,7	0,2
$7/2 \ ^3P_1 \ 7/2$ 17 343,35	3,5 19	2,5 0,1	7 29	2,6		0,5	0,5	0,04
$7/2 \ ^3P_1 \ 9/2$ 17 613,61	9 64	12 35		4,7			0,09	
$7/2 \ ^3P_1 \ 5/2$ 17 752,63		13 80	2 60	0,7	0,8	1,8	1,7	0,02
$7/2 \ ^3P_2 \ 11/2$ 18 990,39	20 126							
$7/2 \ ^3P_2 \ 3/2$ 19 132,22			11 42		0,3	0,5		0,6
$7/2 \ ^3P_2 \ 5/2$ 19 548,77		2,5 6,1	12 20	1,0	0,2	0,2	0,1	0,09
$7/2 \ ^3P_2 \ 9/2$ 19 748,51	14 47	8 67		0,1			0,1	
$7/2 \ ^3P_2 \ 7/2$ 19 753,81	0,5 0,9	16 30	6 8,2	0,5		0,3	0,7	0,03
$7/2 \ ^1P_1 \ 9/2$ 24 348,68	0,1	0,02		21			1,9	
$7/2 \ ^1P_1 \ 5/2$ 24 417,96		0,01	0,02	13	6,7	4,0	8,9	0,5
$5/2 \ ^3P_0 \ 5/2$ 25 656,04		0,00	0,00	0,08	1 7,3	2 33	18	0,1
$7/2 \ ^1P_1 \ 7/2$ 25 717,22		0,03	0,03	11		0,1	0,4	0,05
$5/2 \ ^3P_1 \ 5/2$ 26 126,92		0,00	0,00	0,4	1 67	24	75	2,9
$5/2 \ ^3P_1 \ 7/2$ 26 439,49		0,00	0,00	0,02	14 862,80	2,5 20	54	4,2

Dans chaque case du tableau X correspondant à une transition permise ($\Delta J = 0, \pm 1$) se trouve :

- le nombre d'onde σ en Kaysers
- l'intensité i égale à $I/N(A)$ à un facteur multiplicatif arbitraire près.
- l'intensité I' mesure expérimentalement (20).

Comme on pouvait s'y attendre, l'accord entre le calcul et l'expérience n'est pas très bon. Cependant on peut remarquer qu'à quelques exceptions près, dans chaque colonne prise séparément, ce sont les raies prévues les plus intenses qui ont été observées.

On peut donc ainsi savoir à peu près quelles raies il faut encore chercher et lesquelles il est inutile d'espérer repérer. C'est là que réside le principal intérêt d'un tableau comme celui-ci.

.../...

VI - CONCLUSION :

Résumons les différents travaux que nous avons pu mener à bien. Nous avons étudiés les trois configurations paires profondes du spectre d'arc de l'osmium : $5d^6 6s^2$, $5d^7 6s$, $5d^8$, ainsi que deux configurations excitées du spectre d'arc du thulium : $4f^{13} 6s 7s$ et $4f^{13} 6s 6p$. Pour cette étude nous avons dû mettre au point deux programmes de calcul fonctionnant sur la calculatrice CAB 500 des laboratoires de Bellevue.

En commençant ce travail, notre but était triple :

- interpréter et vérifier les données expérimentales.
- prévoir de nouveaux résultats
- enfin, déterminer les valeurs des paramètres.

Le cas de l'osmium est une réussite complète. En effet, nous avons confirmé l'ensemble des résultats de VAN KLEEF et de GLUCK; nous avons trouvé la configuration $5d^8$ et prévu la position de nombreux niveaux; enfin les paramètres ont été déterminés avec une bonne précision. Nous tenons à remercier ici le Professeur RACAH pour ses encouragements et pour nous avoir permis de vérifier la concordance entre ses résultats finaux et les nôtres.

Le cas de la configuration $4f^{13} 6s 7s$ du thulium est beaucoup moins bon. Seuls les trois niveaux inférieurs sont vraiment confirmés; la prévision des niveaux et la détermination des paramètres manquent de précision.

.../...

Enfin le cas de la configuration $4f^{13} 6s 6p$ du thulium est beaucoup plus encourageant. Presque tous les niveaux de la configuration ont été trouvés, ce qui a permis de mettre en évidence de nombreux niveaux de la configuration $4f^{12} 5d 6s^2$; la prévision des facteurs de Landé avait d'ailleurs permis l'identification et même la découverte de plusieurs niveaux de la configuration; la détermination des paramètres a été réalisée avec une précision satisfaisante.

La qualité de ces résultats montre une évolution caractéristique, manifestement en rapport direct avec les grandeurs respectives du nombre de niveaux connus et du nombre de paramètres des configurations étudiées (cf tableau ci-dessous) :

Configurations	Nb de param.	Nb de niv. connus	Résultats
$5d^6 6s^2 5d^7 6s, 5d^8$ Os	17	46	Excellents
$4f^{13} 6s 6p$ Tm	8	18	Bons
$4f^{13} 6s 7s$ Tm	5	5	Faibles

la méthode est peu efficace pour les petites configurations, meilleure pour des configurations moyennes à faible nombre de paramètres, excellente pour les grosses configurations ou les groupes de configurations, même si le nombre des paramètres est important.

Cependant l'ensemble d'une configuration n'est jamais traité de manière tout à fait identique, les niveaux supérieurs étant généralement désavantagés. Dans la configuration $4f^{13} 6s 6p$ du thulium il est très net que plus l'énergie des niveaux augmente, moins les résultats sont bons; dans l'osmium le même phénomène se remarque. Ceci s'explique très bien : en général on étudie des configurations assez profondes; les niveaux sont donc de plus en plus perturbés à mesure qu'on s'approche des configurations supérieures .

Pourtant on peut aussi avoir des ennuis avec les niveaux inférieurs d'une configuration. Prenons le cas de la configuration $4f^{13} 6s 7s$ du thulium, où nous ne pouvons pas prévoir avec précision la position des deux niveaux isolés bien que nous connaissions 5 des 6 autres niveaux de la configuration. Cela vient de ce que nous ne savons pas calculer un paramètre tel que $G_0(6s, 7s)$.

Une solution consisterait à calculer un tel paramètre par des méthodes de calculs absolus (méthode de Hartree - Fock, par exemple); mais on risque alors un autre danger; car les valeurs des paramètres obtenues à partir de l'expérience ne correspondent plus à leurs définitions mathématiques, en ce sens qu'elles sont modifiées par les perturbations, dont les calculs absolus ne tiennent pas compte.

La méthode que nous avons employée (après RACAH, TREES, etc..) s'avère utile et efficace dans de très nombreux cas. Mais elle n'est pas suffisante. Il faut souhaiter qu'une méthode nouvelle voie bientôt le jour, peut-être dans le cadre des méthodes de calculs absolus.

.../...

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur JACQUINOT, qui m'a accueilli dans son laboratoire et à Monsieur le Professeur CHABBAL dont les encouragements m'ont toujours été d'un précieux secours.

Mes remerciements s'adressent aussi au Docteur B.R. JUDD, Professeur Associé à la Faculté des Sciences, qui n'a cessé de m'aider de ses conseils ainsi qu'à Monsieur J. BLAISE, Directeur de Recherches au C.N.R.S., qui a témoigné un intérêt constant à mon travail.

Monsieur le Professeur LENNUIER, mon parrain de recherches au C.N.R.S., voudra bien trouver ici l'expression de ma reconnaissance.

Qu'il me soit permis de remercier plus particulièrement J. BAUCHE, dont l'aide constante et efficace m'a soutenu à toutes les étapes de ce travail, et P. CAMUS dont la collaboration m'a été précieuse ainsi que tous mes camarades du laboratoire Aimé Cotton.

C'est grâce à une allocation de Stagiaire de Recherches, accordée par le Centre National de la Recherche Scientifique, que ce travail a pu être mené à bien.

BIBLIOGRAPHIE

- (1) - R.E.TREES, W.F. CAHILL & P.RABINOWITZ, J. Res. NBS, 55, 335 (1955).
- (2) - G.GLUCK, Y.BORDARIER, J.BAUCHE & Th.A.M.VAN KLEEF, Physica, (à paraître).
- (3) - J.BAUCHE, J.BLAISE & M.FRED, C.R.Acad. Sc., 257, 2260 (1963).
- (4) - J.BAUCHE, J.BLAISE & M.FRED, C.R. Acad. Sc., 256, 5091 (1963).
- (5) - Y.BORDARIER, B.R.JUDD & M.KLAPISCH, Proc. Roy. Soc. (à soumettre).
- (6) - M.KLAPISCH (à paraître).
- (7) - E.U.CONDON & G.H.SHORTLEY, "The Theory of Atomic Spectra", Cambridge University Press, Cambridge (1935).
- (8) - G.RACAH, I - Phys. Rev., 61, 186 (1942).
II - Phys. Rev., 62, 438 (1942).
III - Phys. Rev., 63, 367 (1943).
IV - Phys. Rev., 76, 1352 (1949).
- (9) - G.RACAH, Physica, 16, 651 (1950).
- (10) - B.R.JUDD, "Operator Techniques in Atomic Spectroscopy", Mc Graw Hill Book C°, New York (1963).
- (11) - M.ROTENBERG, R.BIVINS, N.METROPOLIS & J.K.WOOTEN, "The 3-j and 6-j Symbols", Crosby Lockwood and Son Ltd, Londres (1959).
- (12) - E.DURAND, "Solutions numériques des équations algébriques", tome II, Masson et Cie, Paris.
- (13) - Th.A.M. VAN KLEEF, Proc. Kon. Akad. Wetensch. Amsterdam, series B, LXIII, 50 (1960).
- (14) - Th.A.M. VAN KLEEF & P.F.A.KLINKENBERG, Physica 27, 83 (1961).
- (15) - G.GLUCK, Thèse de doctorat, Paris (1964).
- (16) - R.E.TREES, Phys. Rev., 83, 756 (1951).
- (17) - G.RACAH, Phys. Rev., 85, 381 (1952).
- (18) - G.RACAH & Y.SHADMI, Phys. Rev., 119, 156 (1960).
- (19) - W.F.MEGGERS, Rev of Mod. Phys., 14, 96 (1942).
- (20) - W.F.MEGGERS, C.H.CORLISS & B.F.SCHRIBNER, "Tables of Spectral Lines Intensities", NBS, Monograph 32, Part I (1961).
- (21) - R.VETTER, Thèse de 3ème Cycle, Paris (1963).
- (22) - J.BLAISE & R.VETTER, C.R. Acad. Sc., 256, 630 (1963).

- (23) - Y. BORDARIER, R. VETTER & J. BLAISE, J. P h y s. , 24, 1107 (1963).
- (24) - G. RACAH, J. Opt. Soc. Amer. , 50, 408 (1960).
- (25) - N. SPECTOR, Thèse de doctorat, Jérusalem (1962).
- (26) - B. W. BRYANT, Thèse de doctorat, Johns Hopkins University, Baltimore (1961).
- (27) - F. HERMAN & S. SKILLMAN, "Atomic Structure Calculations", Prentice-Hall Inc. , Englewood-Cliffs, New-Jersey (1963).
- (28) - H. KOPFERMANN, "Nuclear Moments", Academic Press Inc. , New York, (1958), p. 131.
- (29) - R. E. TREES, J. Opt. Soc. Amer. , 49, 838 (1959).
- (30) - G. RACAH, Cours au Collège de France, Paris (1964) (non publié).
- (31) - H. SCHULER & Th. SCHMIDT, Naturwiss. , 22, 838 (1964).

: : : : :
 - - - - -
 : : : : :

ANNEXES I - II - III

à

la Thèse de 3 ème Cycle

de

Yves BORDARIER

1964

Puissance de Π_0	α_0
Informations sur Π_0 s'il y a lieu	{ - - - - }
Nombre de Σ	K
Informations sur Σ_1 s'il y a lieu	{ - - - - }
etc... (Σ_i)	{ - - - - }

Informations sur Σ_i :

Nombre de mémoires utilisées pour le codage	m_i
Nombre de variables muettes	N_i
Informations sur la 1 ^{ère} variable s'il y a lieu	{ - - - - }
etc... (variables)	{ - - - - }
Informations sur Π_i	{ - - - - }

Informations sur Π_i :

Nombre de \mathcal{J}	k_i
Nombre de variables de phase	n
Numéros des variables s'il y a lieu	{ - - - - }
Constante de phase doublée	2β

(à suivre)

Nombre de crochets du 1^{er} groupe n'

Numero des variables
s'il y a lieu $\left\{ \begin{array}{l} - \\ - \\ - \end{array} \right.$

Puissance doublee, s'il y a lieu 2γ

Nombre de crochets du 2^{em} groupe n''

Numero des variables
s'il y a lieu $\left\{ \begin{array}{l} - \\ - \end{array} \right.$

Double de la puissance, s'il y a lieu 1

Nombre de coefficient 6-j k_2

Composantes des 6-j
à la suite et ligne à ligne
(doublees si ce sont des nombres)
s'il y a lieu $\left\{ \begin{array}{l} - \\ - \\ - \\ - \\ - \end{array} \right.$

Nombre de coefficient 9-j k_3

Composantes des 9-j
à la suite et ligne à ligne
(doublees si ce sont des nombres)
s'il y a lieu $\left\{ \begin{array}{l} - \\ - \\ - \\ - \\ - \\ - \end{array} \right.$

Facteur numerique $\left\{ \begin{array}{l} a \\ b \\ c \\ d \end{array} \right.$

Puissance du double crochet
doublee 2δ

Numero de la variable
s'il y a lieu $\left\{ \begin{array}{l} - \\ - \end{array} \right.$

(à suivre)

Nombre de tables	k_4
Informations sur la 1 ^{ère} table s'il y a lieu	{ - - - }
etc... (Tables)	{ - - - }

Informations sur la k^{ième} variable :

Numero	(à partir de 50 inclus)
Valeur minimale doublée	$\sum j_k \min$
Valeur maximale doublée	$\sum j_k \max$

Informations sur la j^{ième} table :

Nombre de memores utilisées pour le codage	m'_j
Nombre de variables dont dépend la table	K_j
Numero des variables	{ - - - }
1 (entier) ou 4 (irrationnel)	1 ou 4
Nombre sans signification	1
Nombres d'éléments	L_j
Informations sur le 1 ^{er} élément	{ - - - }
etc... (éléments)	{ - - - }

Informations sur le i ème élément :

Valeurs des variables, doublées
(dans l'icône annoncée) $\left\{ \begin{array}{l} - \\ - \\ - \\ - \end{array} \right.$

Valeur de la table e_i ou $\left\{ \begin{array}{l} a_i \\ b_i \\ c_i \\ d_i \end{array} \right.$

Remarques: - Les variables absolues sont numérotées de S_0 à $(S_0 + N_0 - 1)$. Les variables muettes, pour chaque Σ_i , sont numérotées à partir de $(S_0 + N_0)$.

- les nombres de mémoires m_i, m'_i sont comptés ~~en~~ incluant la mémoire où ils sont placés.

- les données susceptibles de prendre des valeurs demi-entières sont systématiquement doublées.

- le nombre de mémoires total réservé aux données correspond au contenu de 8 pistes, soit 1024 mémoires.

- La machine fait d'abord varier les premières variables. Des variables importantes telles que J doivent donc être placées à la fin.

- Dans l'écriture préalable de la formule, on a intérêt à mettre le plus grand nombre d'éléments en facteur, afin qu'ils ne soient calculés qu'une fois.

- Si on desire ajouter des tests triangulaires,

on introduit :

113, 114 M	111, y M	}	relations	{	Numeros des variables Nombres doubles
A 14 V x					
A 3 V y					
X E	X E				

où x est le nombre de relations et où $y = 3x$

Cette addition est recommandée si $K \geq 2$, car alors les tests contenus dans les différents Σ ne sont pas recherchés.

Exemple de codage :

$$X = (-1)^{J+1/2} [J] \{ [L][S] \}^{1/2} \left\{ \begin{matrix} J & 1/2 & 1 \\ 2 & L & S \end{matrix} \right\} \sqrt{2} \sum_{L's} [L'] [S'] \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 2 & S \\ 1 & 2 & L \\ S' & L' & J \end{matrix} \right\} f(S')$$

$S = 3/2, 5/2 \quad L = 1, 3 \quad S' = 1/2, 3/2 \quad L' = 0, 4 \quad J = 1/2, 3/2$

$$f(S') = \begin{matrix} S' = 1/2 & -1/\sqrt{2} \\ S' = 3/2 & 3/5 \end{matrix}$$

114, 0 M

3	1	1	0	S1	2
S0	S2	2	0	S3	1
3	2	1	0	S4	-1
5	2	1	2	S2	1
S1	S0	0	S3	1	1
2	S1	0	S4	1	2
6	1	1	2	1	3
S2	1	49	0	1	3
1	S2	2	0	0	1
3	1	S3	1	1	5
1	2	1	1	16	1
0	4	3	4	1	X E
1	S1	S4	S0	S3	
S2	S0	0	2	4	
1	0	8	4	1	

Annexe II

Mode d'emploi du programme 39 bis

Implantation :

Le programme utilise les pistes 0 à 40, les données sont rangées à partir de la piste 41.

Ordres d'exécution :

Une seule matrice, sans vecteurs		34,86 E	(a)
Matrices à la chaîne, sans vecteurs		34,81 E	(b)
	avec vecteurs, sans moindres carrés, sans g	34,78 E	(c)
		avec g	34,75 E (d)
	avec moindres carrés } sans g	34,66 E	(e)
	non selectifs } avec g	34,57 E	(f)
	avec moindres carrés } sans g	34,72 E	(g)
	selectifs } avec g	34,69 E	(h)

Adresses des données :

- (a) Les éléments du triangle supérieur de la matrice, dans l'ordre, en 1,6 F
L'ordre de la matrice, en 74 M
La précision ϵ est automatiquement 0,001

(b), (c), (d), (e), (f), (g), (h)

Les coefficients des paramètres (triangle supérieur) dans l'ordre, en	41,0 F
Les ordres des matrices successives	74 M
Le nombre des matrices	28 M
Le nombre total des paramètres	26 M
Les facteurs de précision ε	94 F
Les valeurs des paramètres	114 F

(d), (f), (h)

Les g_{LS} successifs en	40,0 F
----------------------------	--------

(g), (h)

Le nombre 1 ou 0 suivant qu'on veut optimiser le paramètre ou non, en	54 M
--------------------------------------------------------------------------	------

Après "FIN", on introduit les niveaux expérimentaux en	13,54 F
et on fait :	39,44 E

On obtient la bande à rejeter pour le programme SP025 (qui simplante en ne détruisant ni l'expérience, ni les données).

Variante :

Variante allumer au départ : écriture des coefficients des paramètres

Si on l'allume pendant le 1^{er} groupe de R.C. : écriture des g_{25} donnés

Si on l'allume pendant le 2^{ème} groupe de R.C. : écriture de la matrice calculée

Si on l'allume pendant l'écriture d'un vecteur, le suivant n'est pas écrit.

Note : Si on ne veut pas écrire les vecteurs propres bien que la Variante soit éteinte, il faut modifier le programme

par : 37,91 M RV 37,114 XE

Annexe III

Comme nous l'avons vu dans le texte principal de la thèse, l'objet du programme A est de calculer les valeurs d'une formule suffisamment générale en fonction des valeurs d'un certain nombre de variables.

On trouvera successivement :

- l'expression détaillée de la formule
- une liste des conventions employées pour l'écriture de l'organigramme.
- les 21 sous-programmes, les 4 "opérations Rotenberg", les 4 tests programmés constituant l'organigramme
- enfin les listes des données, des codes variables, des sous-programmes, des tests et des haltes.

Données générales

La valeur de la formule s'exprime par :

$$X_0 = \pi_0^{\alpha_0} \left(\sum_1 \pi_1 + \sum_2 \pi_2 + \dots + \sum_K \pi_K \right).$$

Les variables dont dépend la formule sont :

$$J_1 J_2 \dots J_{N_0}.$$

On donne aussi un (Test initial)₀ qui sera testé avant le calcul de X_0 .

Pour chaque somme \sum_i , on donne les variables muettes :

$$J_{\eta_i+1}, J_{\eta_i+2} \dots J_{\eta_i+N_i} \quad \left(\eta_i = \sum_{j=0}^{i-1} N_j \right)$$

ainsi qu'un : (Test initial)_i.

Chaque produit π_i s'exprime par :

$$\pi_i \equiv \left[(-1)^{A_1+A_2+\dots+A_{k_i}+\alpha_i} \left\{ [B_1][B_2]\dots[B_{k_i}] \right\}^{\alpha_2} \right. \\ \left. \times \left\{ [C_1][C_2]\dots[C_{k_i}] \right\}^{\alpha_3} \times \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{14} & D_{15} & D_{16} \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} D_{k_i1} & D_{k_i2} & D_{k_i3} \\ D_{k_i4} & D_{k_i5} & D_{k_i6} \end{pmatrix} \right]$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} \\ E_{14} & E_{15} & E_{16} \end{matrix} \right\} \dots \left\{ \begin{matrix} E_{k_s,1} & E_{k_s,2} & E_{k_s,3} \\ E_{k_s,4} & E_{k_s,5} & E_{k_s,6} \end{matrix} \right\}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{14} & F_{15} & F_{16} \\ F_{17} & F_{18} & F_{19} \end{matrix} \right\} \dots \left\{ \begin{matrix} F_{k_c,1} & F_{k_c,2} & F_{k_c,3} \\ F_{k_c,4} & F_{k_c,5} & F_{k_c,6} \\ F_{k_c,7} & F_{k_c,8} & F_{k_c,9} \end{matrix} \right\}$$

$$\times a\sqrt{b}/c\sqrt{d} \times \left\{ \left[\left[G_1 \right] \right] \left[\left[G_2 \right] \right] \dots \left[\left[G_{k_s} \right] \right] \right\}^{\alpha_i}$$

$$\times \left[\text{Table 1} \times \text{Table 2} \times \dots \times \text{Table } k_s \times X \right]_i$$

avec les conventions suivantes :

$$[J] = 2J + 1 \quad \left[\left[J \right] \right] = J(J+1)(2J+1)$$

$$\left(\quad \right) \left\{ \quad \right\} \left\{ \quad \right\} \quad \text{coefficients } 3-j, 6-j, 9-j$$

Chaque table correspond à un tableau :

H_1, H_2, \dots, H_{k_s}	$S'' = \text{irrationnel}$ ou entier ou flottant
h_1, h_2, \dots, h_{k_s}	a^l, b^l, c^l, d^l ou e^l
$h_1^{k_s}, h_2^{k_s}, \dots, h_{k_s}^{k_s}$	ou f^l

Si $S'' = \text{flottant}$, la valeur de la table est $f^l / 10^B$

Les facteurs X_i ont la même forme que X_0 .
les sommes Σ et les produits Π de ces facteurs seront numérotés à la suite des premiers.

- Enfin pour chaque variable J_k , on donne :
- le pas de progression $p(J_k)$
 - la qualité d'entier $I(J_k)$
 - des relations linéaires $R_{k \max}$, $R_{k \min}$

Le nombre de Σ total est σ

La forme des résultats à la sortie :

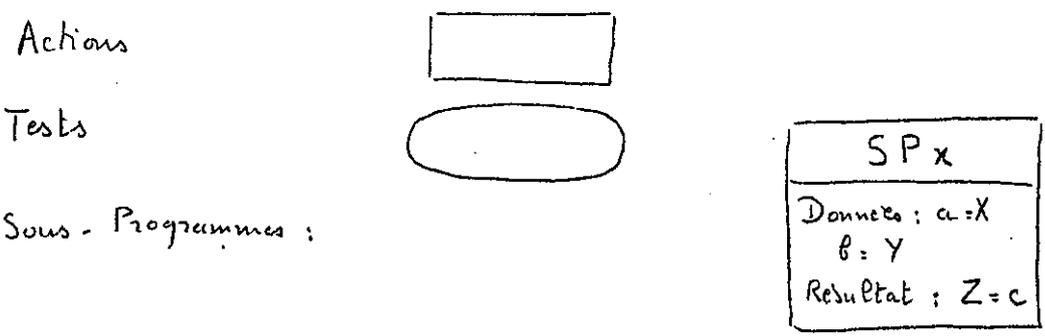
- S'_1 pour la forme Rotenberg,
- S'_2 pour la forme irrationnelle,
- S'_3 pour la forme flottante.

Conventions utilisées dans l'écriture de l'organigramme

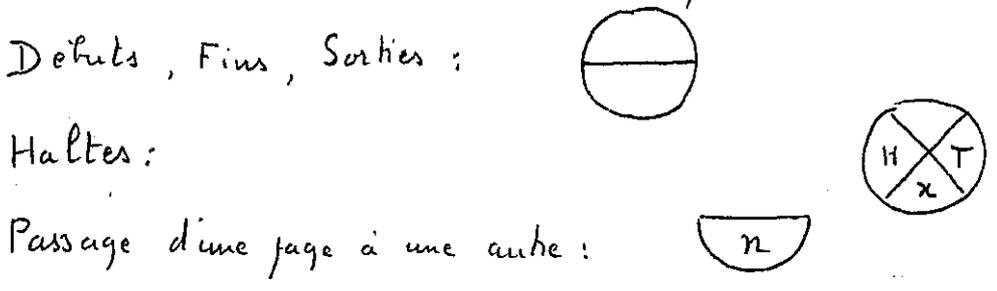
<u>Lettres:</u>	Nombre Rotenberg	→	Lettres rondes majuscules
	Composantes Rotenberg	→	Lettres grecques minuscules
	Nombres	→	lettres latines minuscules
	Indices	→	i, I, j, l, m } pouvant être
	Nombres d'objets	→	n, N, k, K } indicées ou primées
	Lettres à valeur symbolique	→	S, M

<u>Variables:</u>	Variable abstraite :	J_k
	Valeur numérique :	j_k
	Variable abstraite ou nombre :	A_i, B_i, C_i, \dots
	Valeur numérique :	$\begin{cases} a_i, b_i, c_i, \dots & \text{si c'est une variable} \\ A_i, B_i, C_i, \dots & \text{si c'est un nombre} \end{cases}$
	Qualité d'entier :	$I(J_k) = \begin{cases} \text{entier} \\ \text{demi-entier} \end{cases}$
	Pas de progression de la variable :	$p(J_k)$
	Relations linéaires d'autres variables donnant les valeurs en bornes des variables	R_k^{max} et R_k^{min}

Formes de l'organigramme :



où a, b, c, sont les variables locales du sous-programme. X, Y sont les données transmises au S.P. et Z le résultat transmis par le S.P.



Symboles : - le symbole RT est équivalent à un groupe de 3 variables ou nombres A_1, A_2, A_3 qui constituent une relation triangulaire, c'est à dire que leurs valeurs feront l'objet d'un "test triangle",

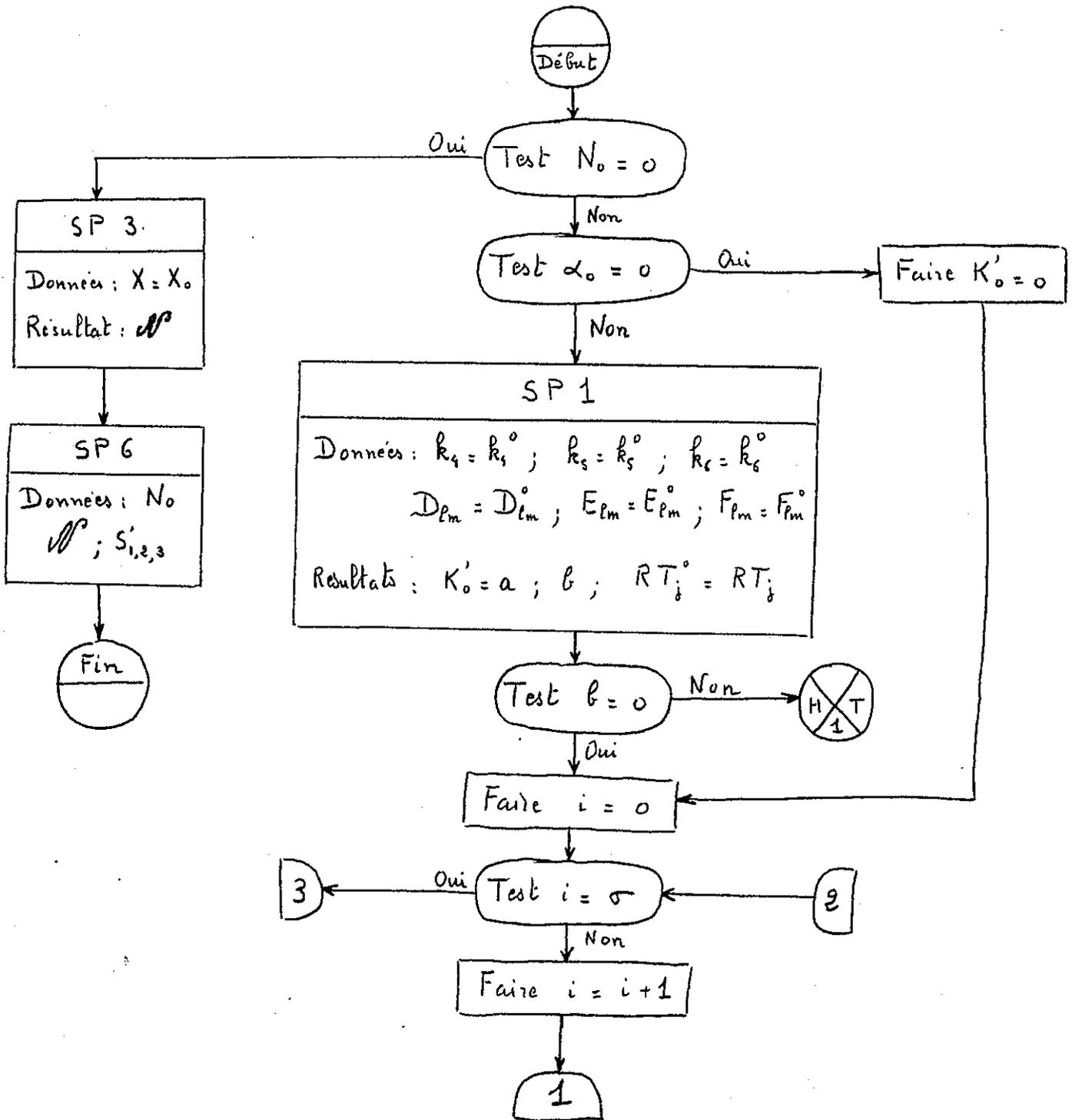
- le symbole "PE(j)" signifie : "Partie entière de j"

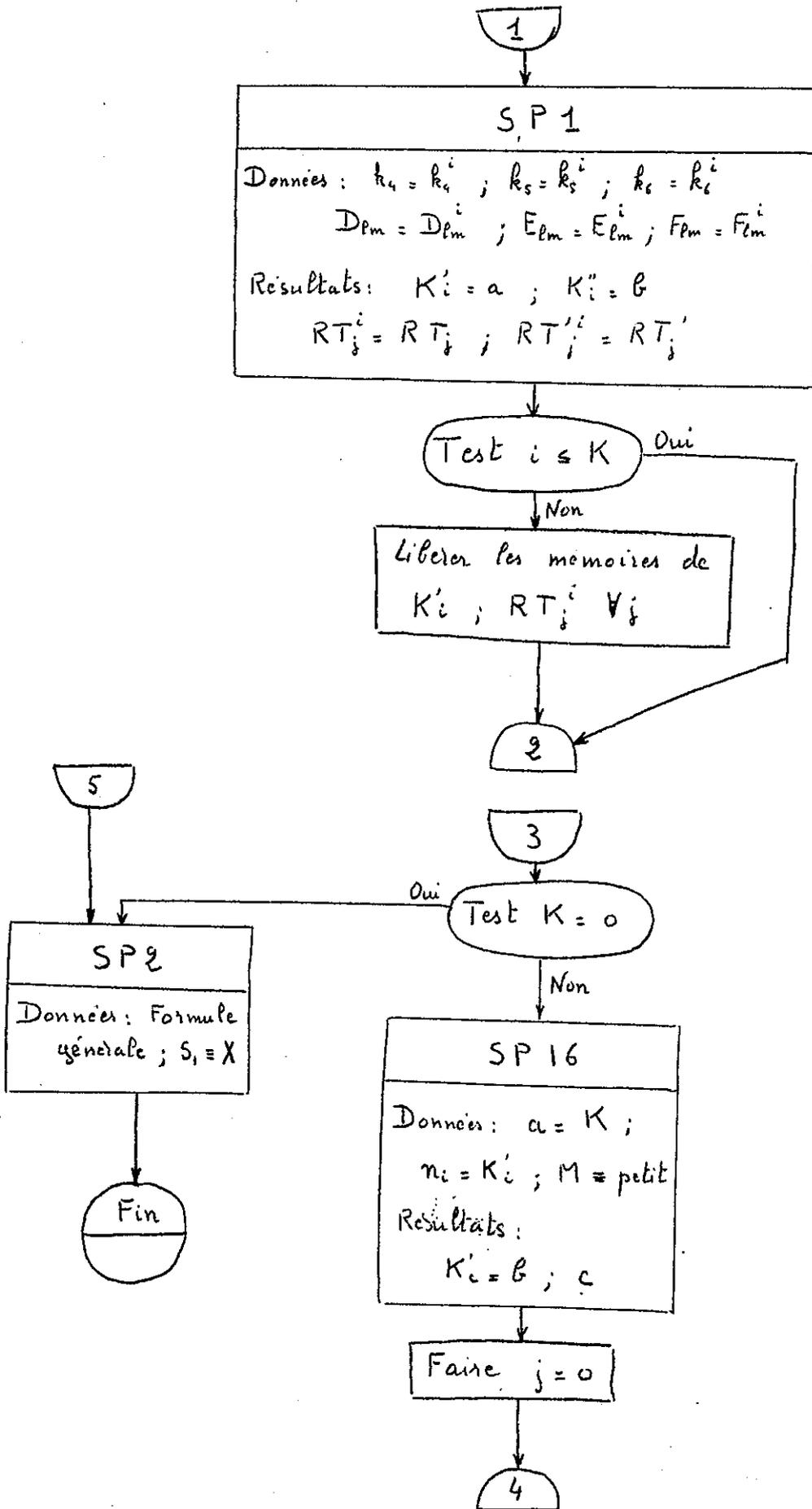
Remarque : Il sera nécessaire d'écrire un programme de codage de la formule écrite en clair pour en tirer les paramètres introduits dans les organigrammes.

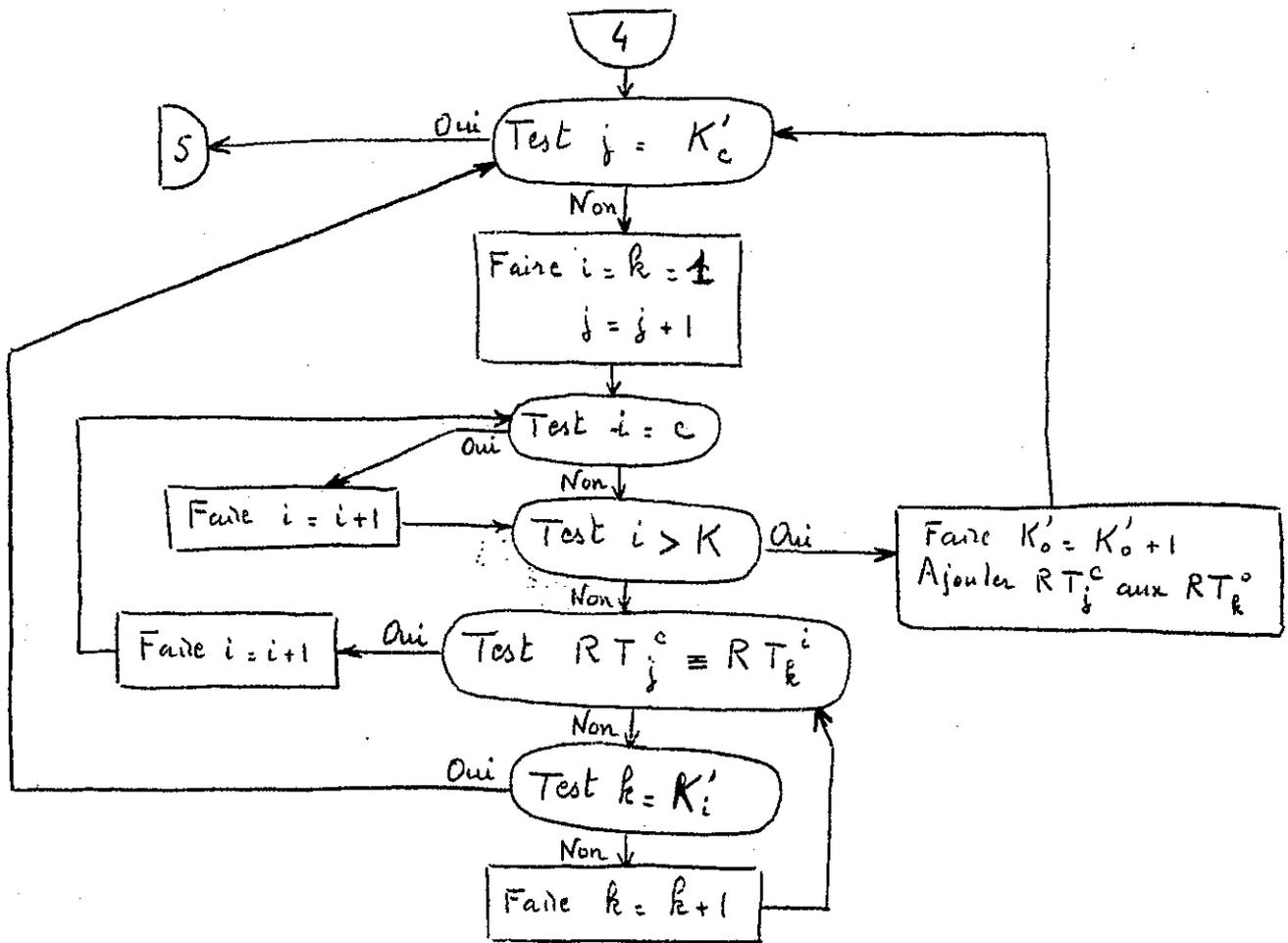
Ce programme devra également construire les "tests initiaux" de X. et des Σ_i .

Programme principal

Données : Les données générales.



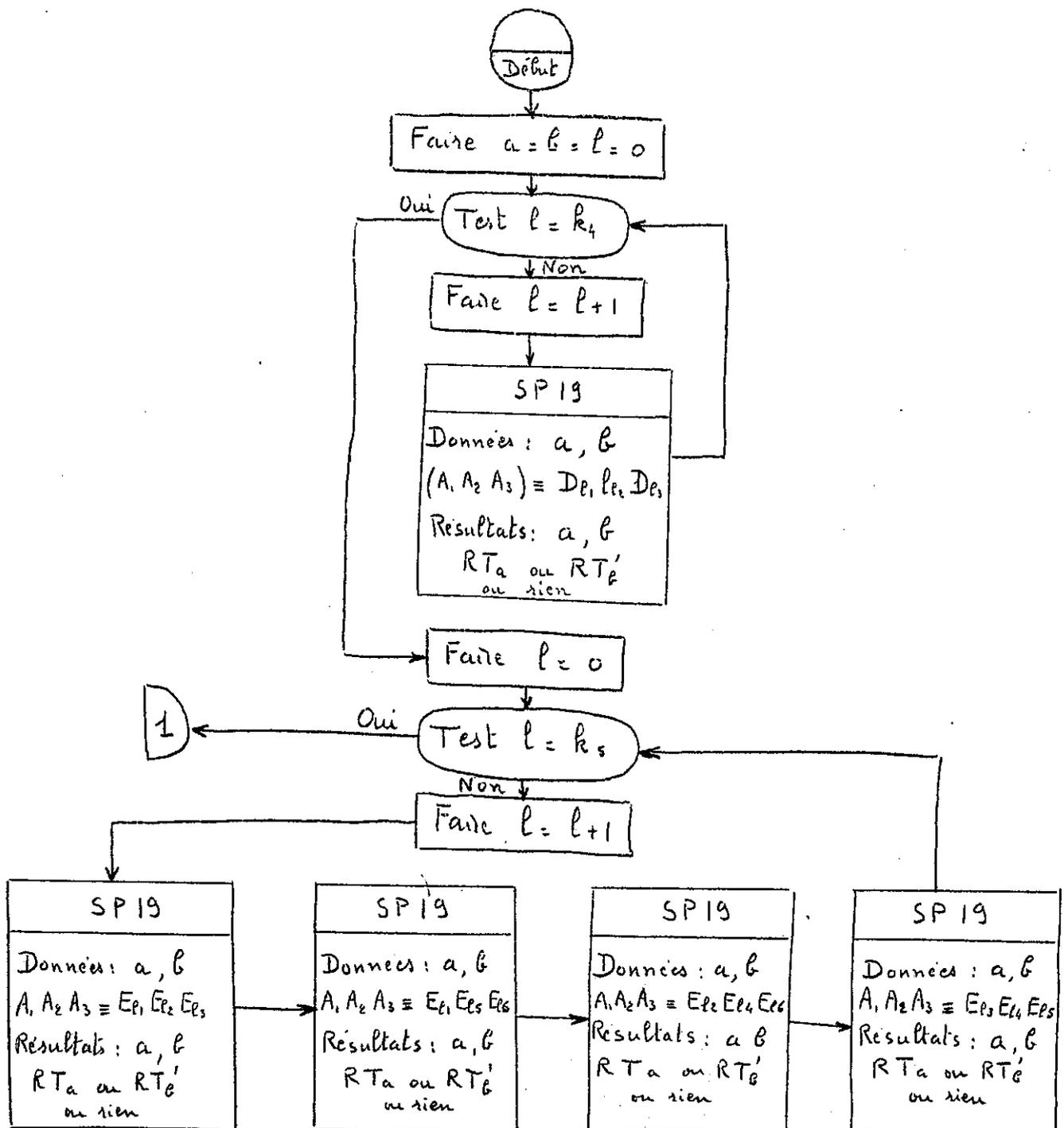


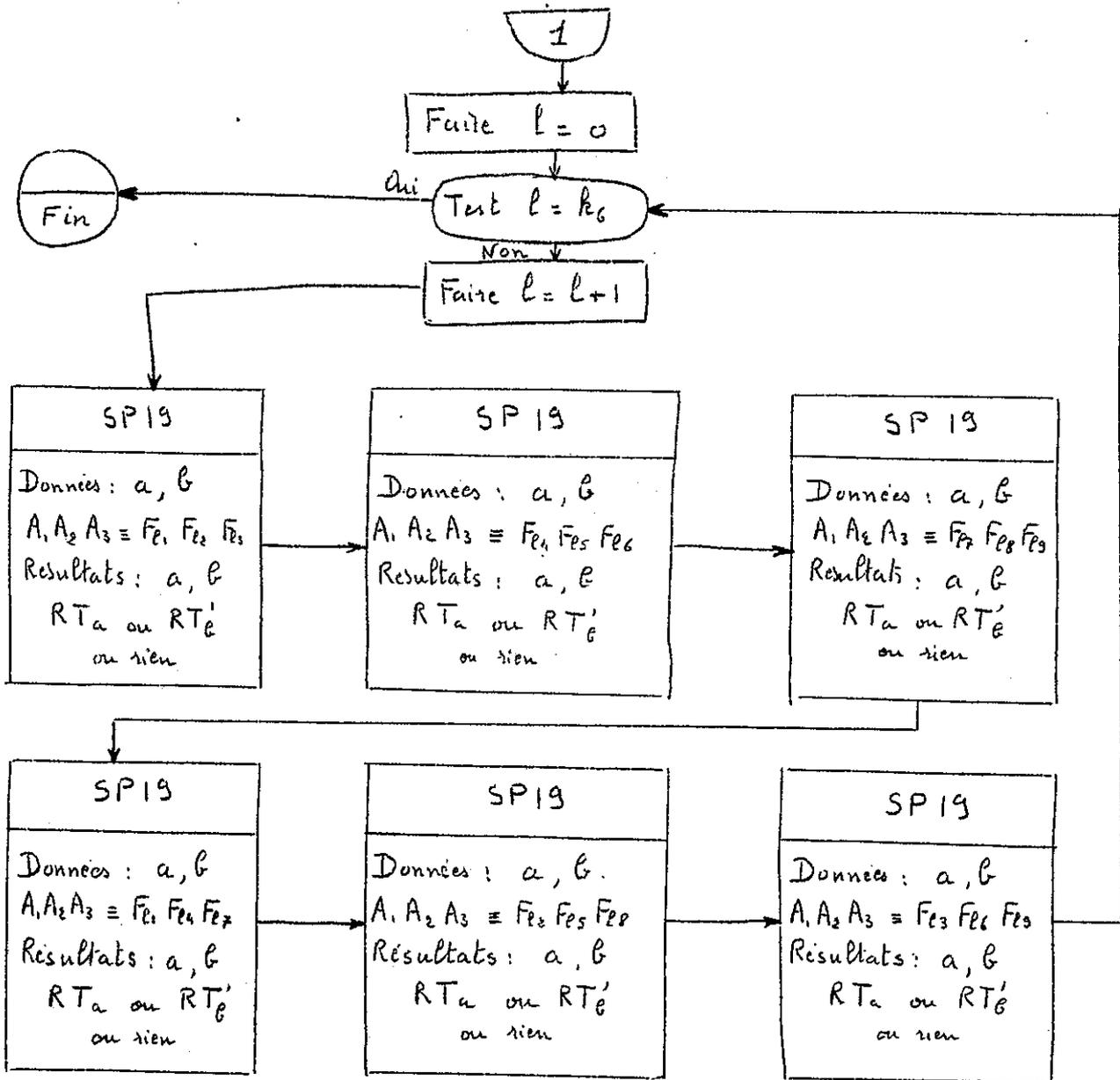


Recherche des relations triangulaires

Données : k_4, k_5, k_6 ; D_{em} ; E_{lm} ; F_{lm} : $l \leq k_4, k_5, k_6$
 $m \leq 3, 6, 9$

Résultats : a, b, RT_j, RT'_j ; $j \leq a, b$

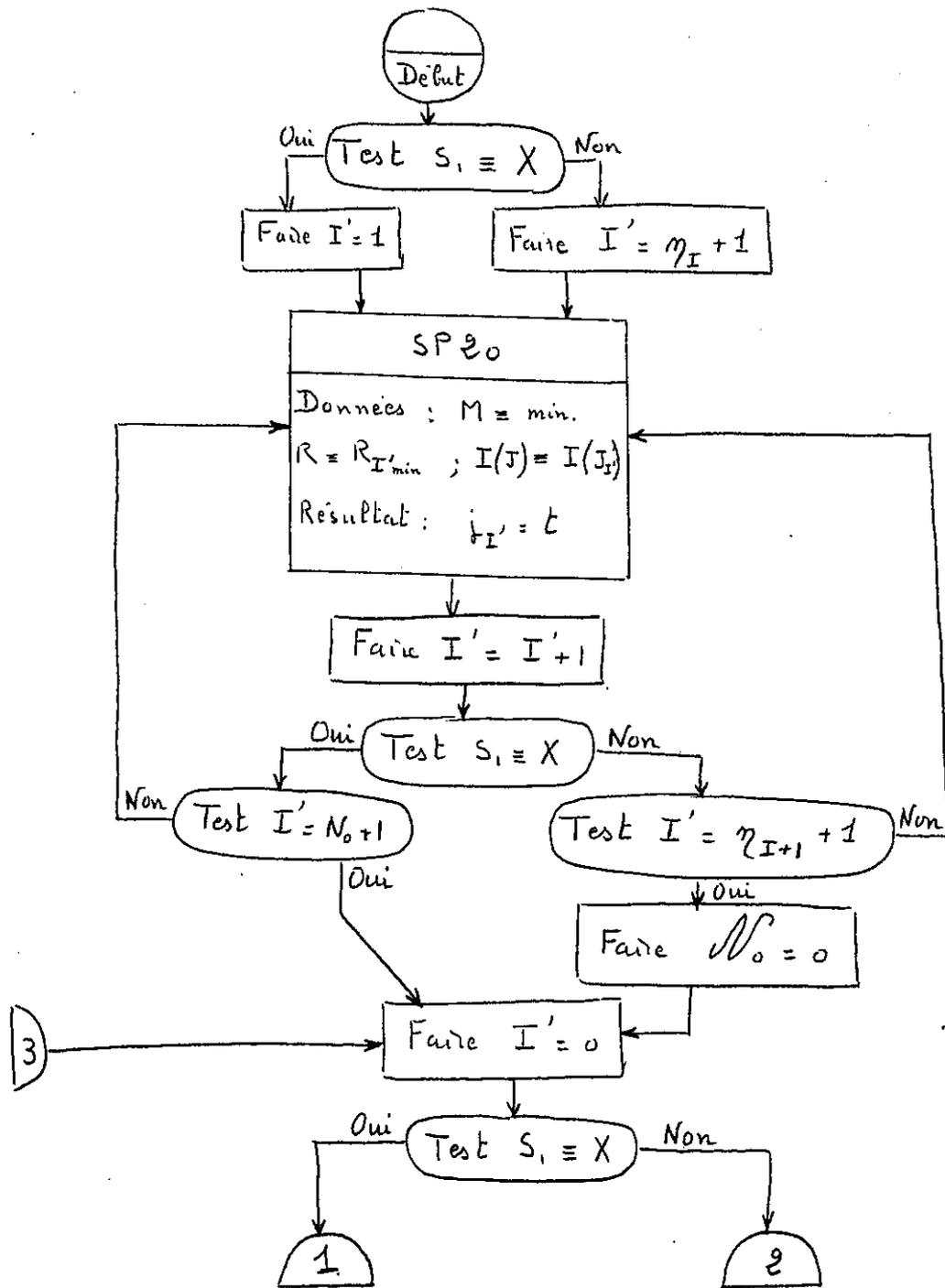


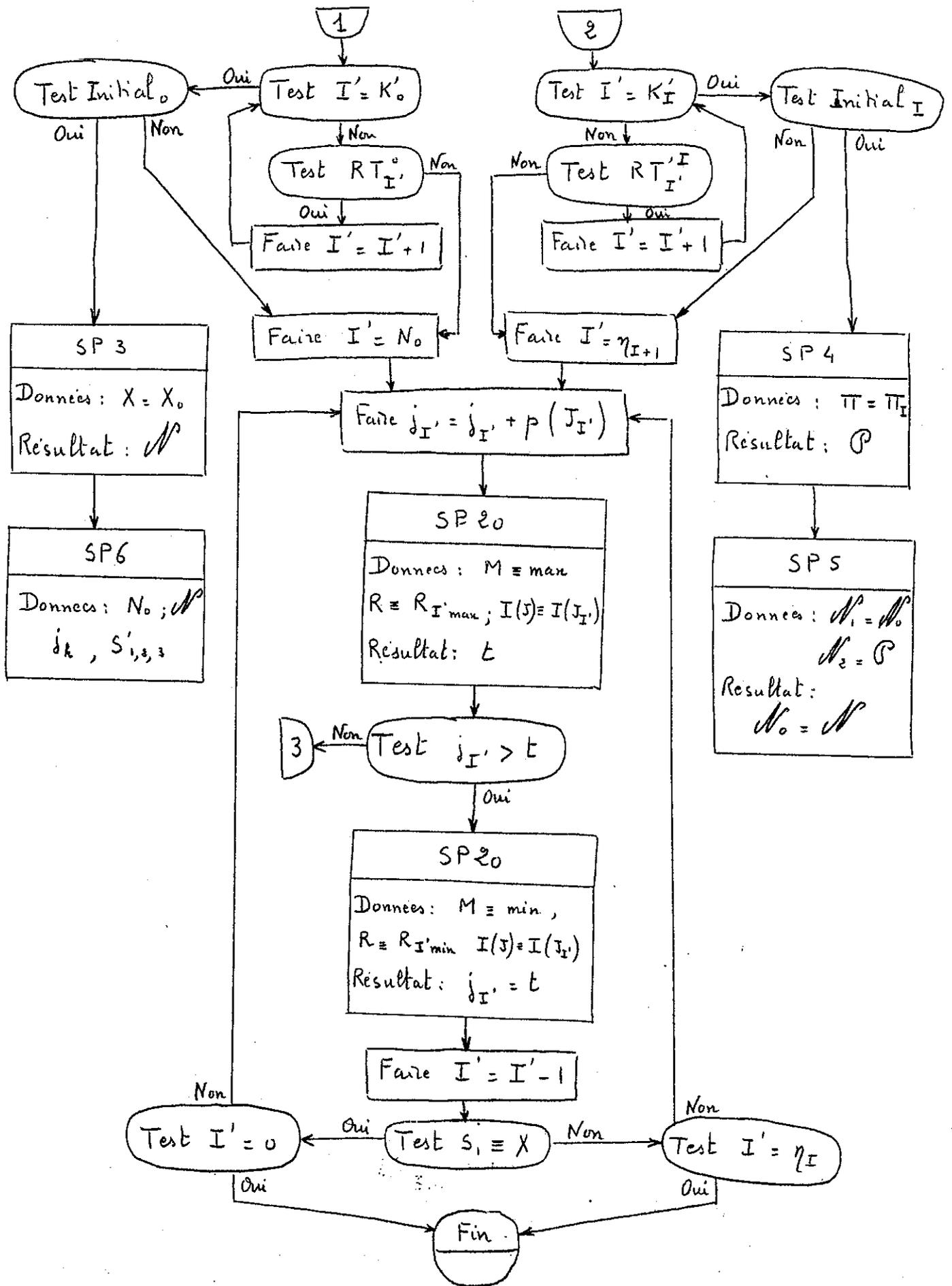


Avancement des variables

Données : Les données générales et $S_i \equiv X$ ou Σ ; I

Résultats : $S_i \equiv X$: Néant ; $S_i \equiv \Sigma$: \mathcal{N}_0

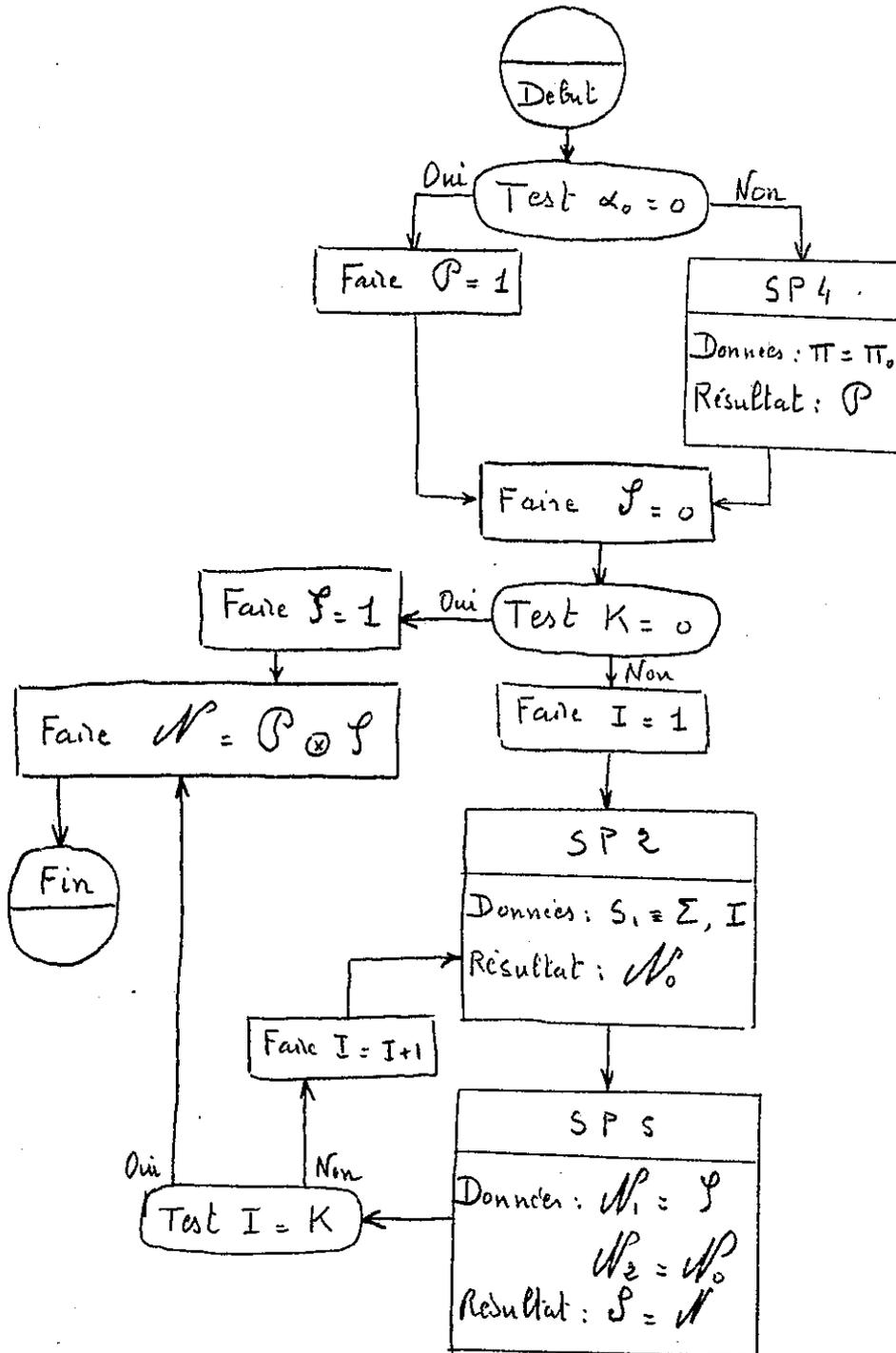




Calcul de X

Données: un X dont on spécifiera l'indice

Résultats: \mathcal{N}

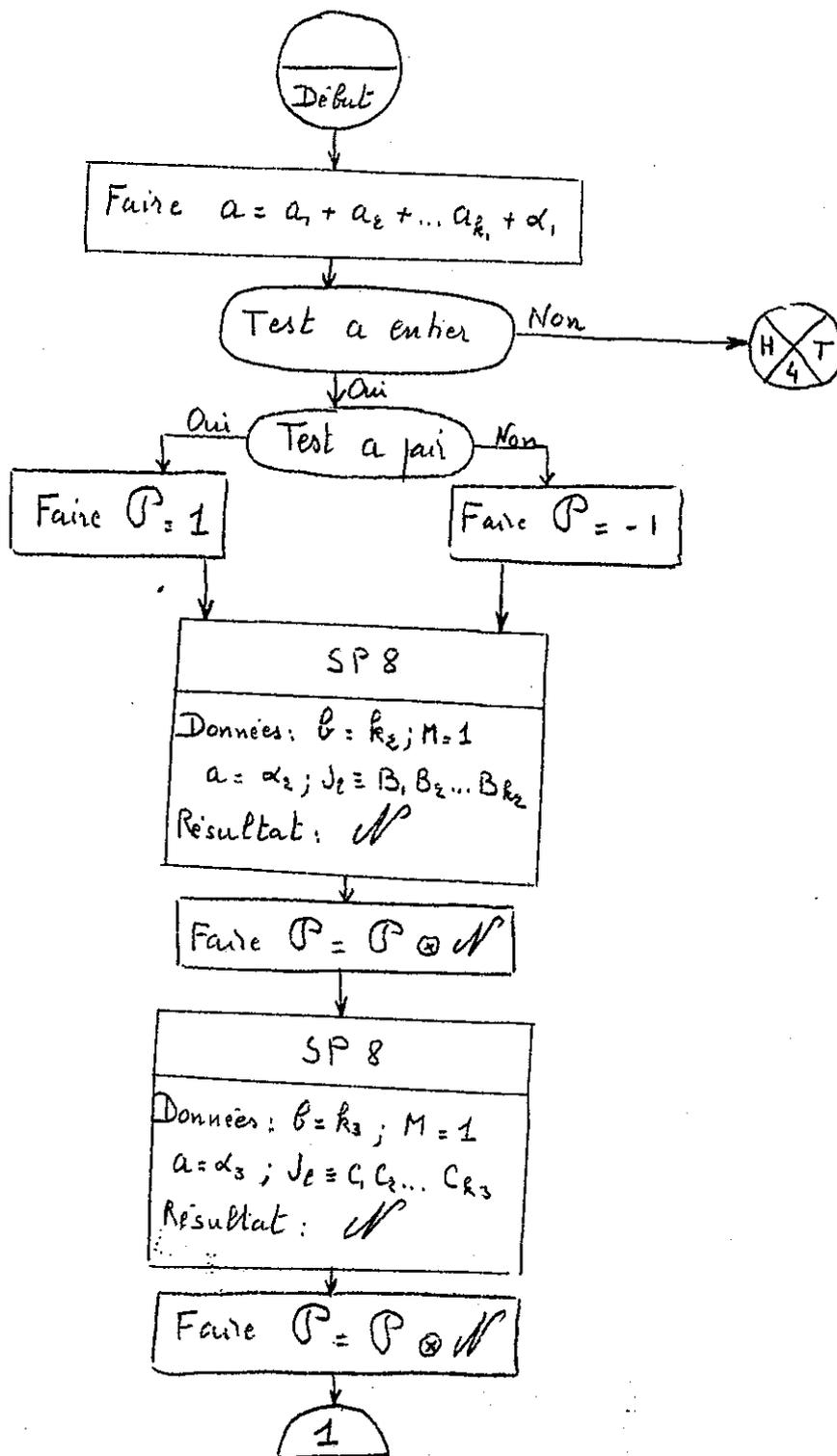


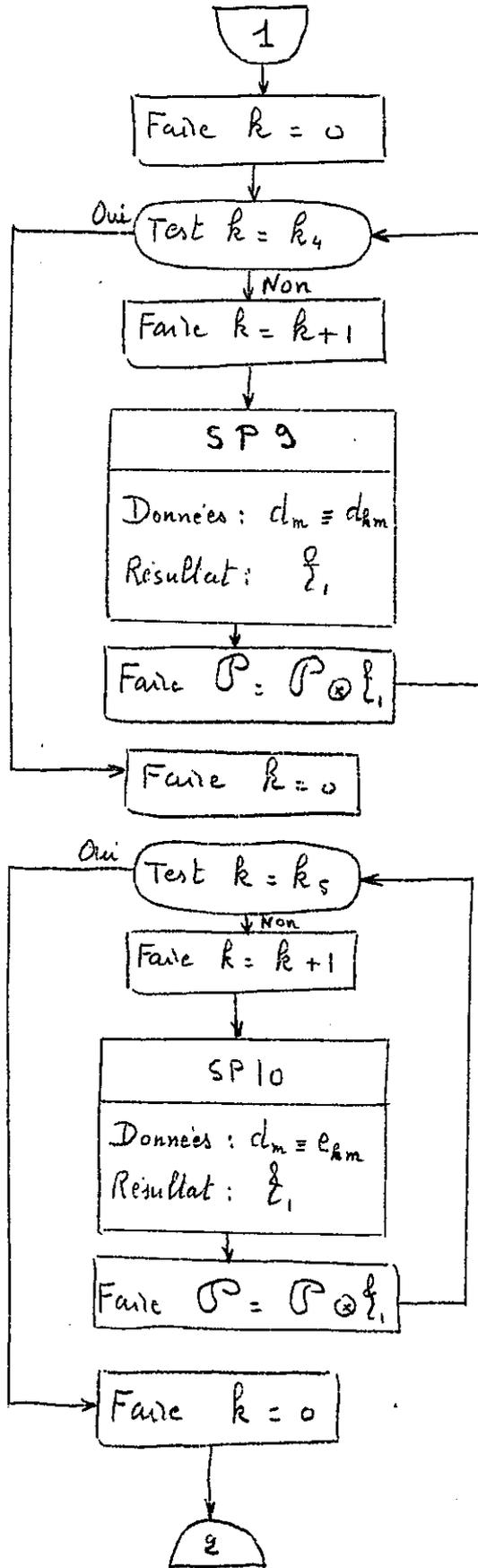
Calcul de Π

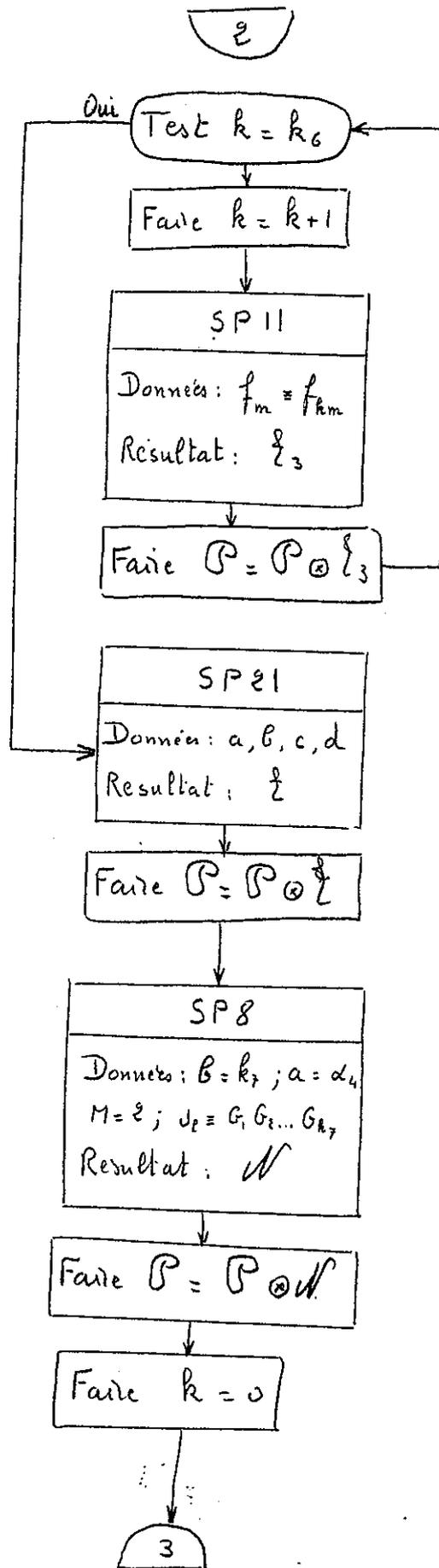
SP4 - 1

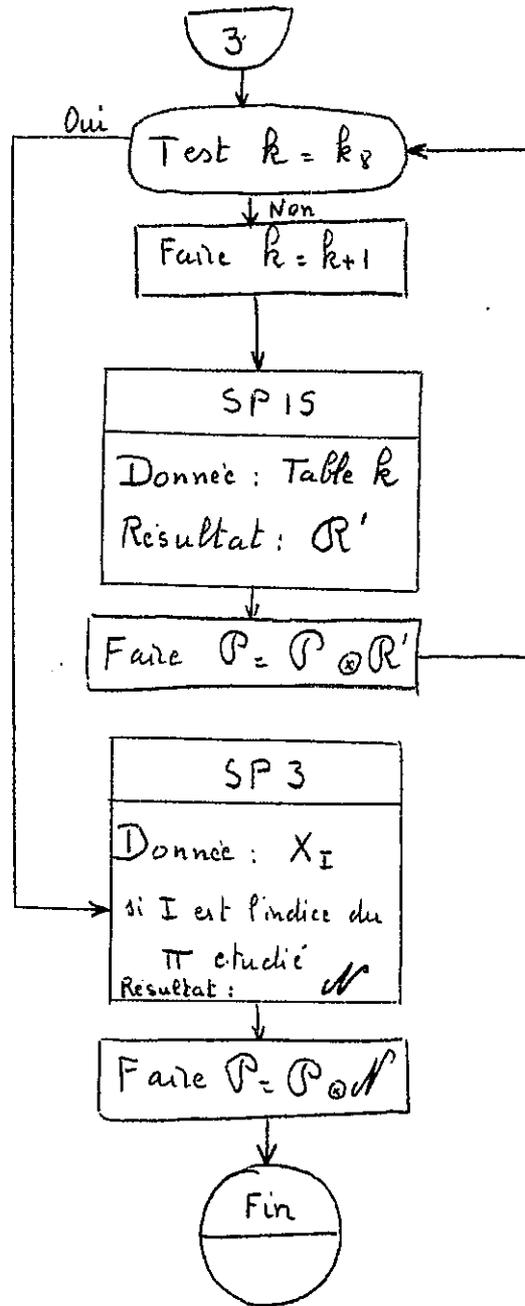
Données: un Π dont on spécifiera l'indice

Résultat: \mathcal{P}





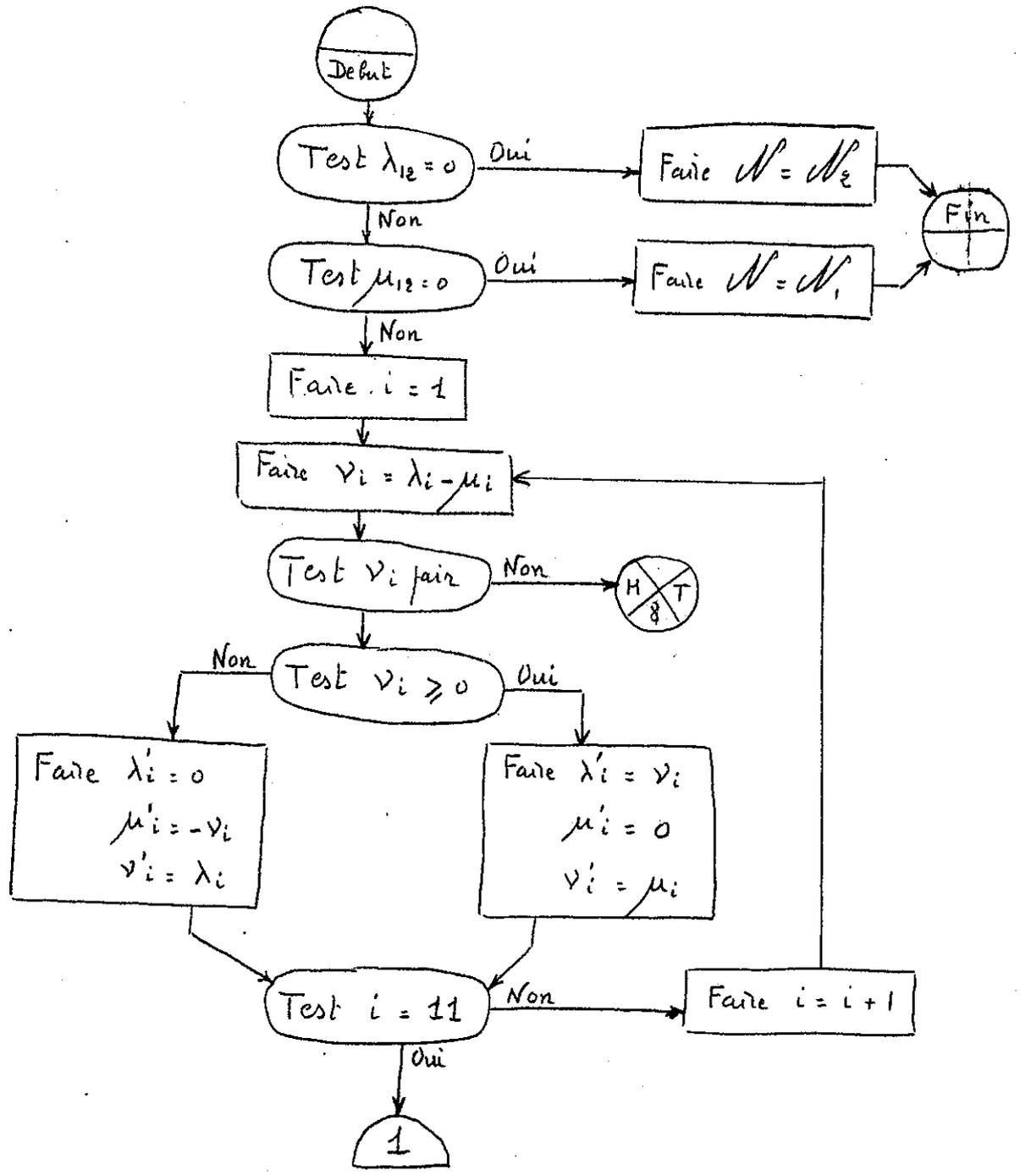


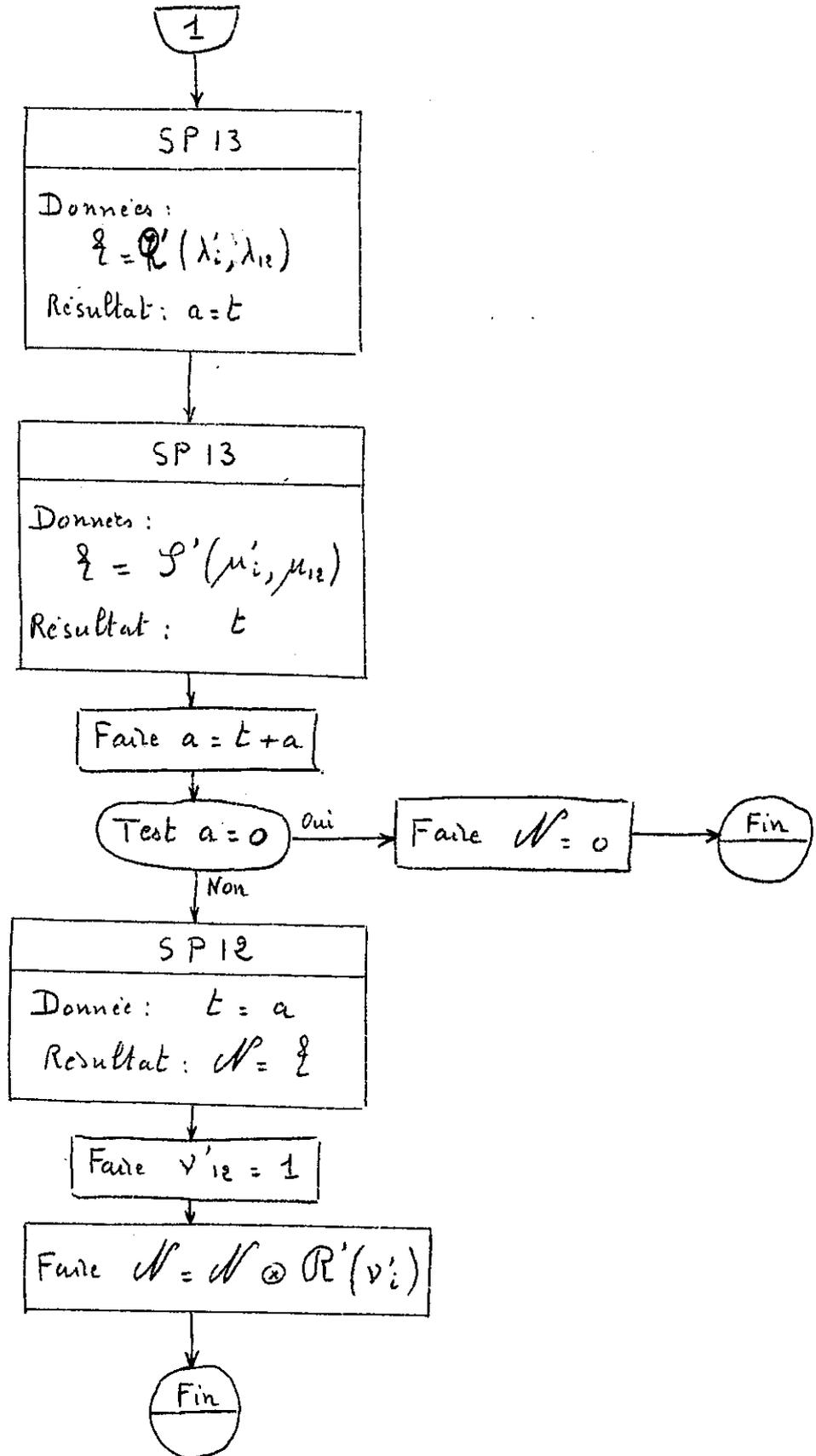


Somme de deux nombres "Rotenberg"

Données : $N_1 (\lambda_i)$ $N_2 (\mu_i)$

Résultat : $N (\nu_i)$

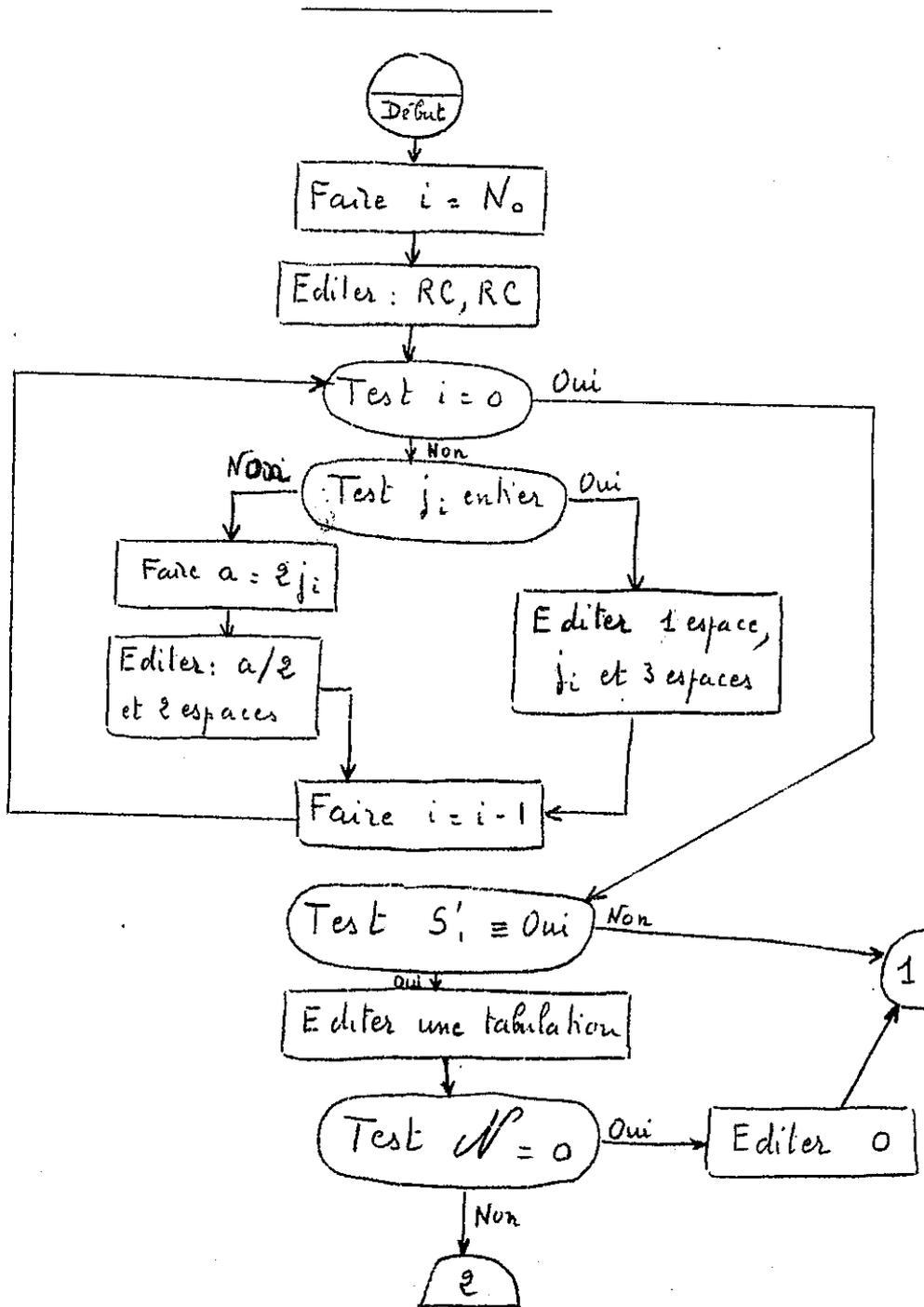


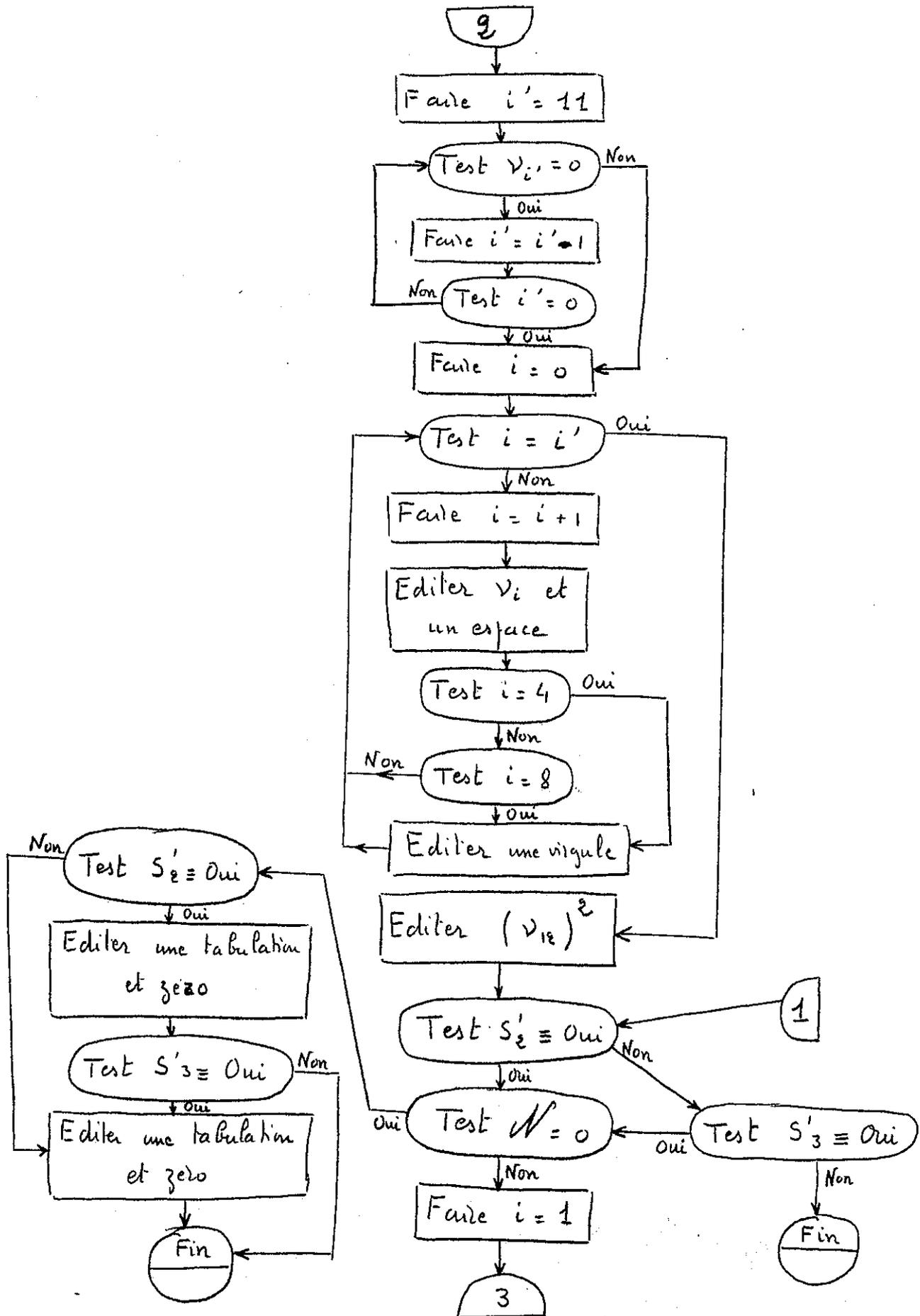


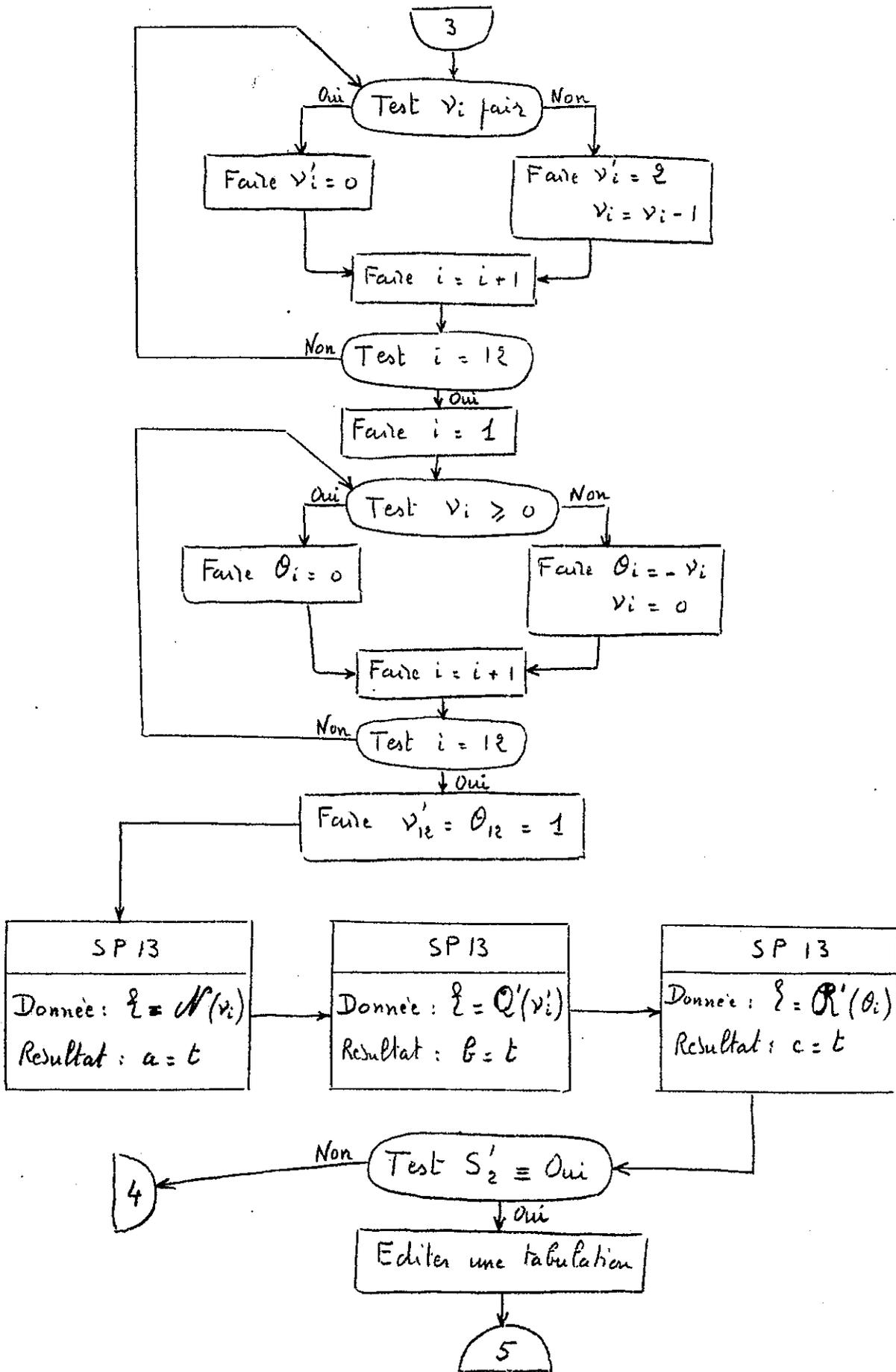
Edition

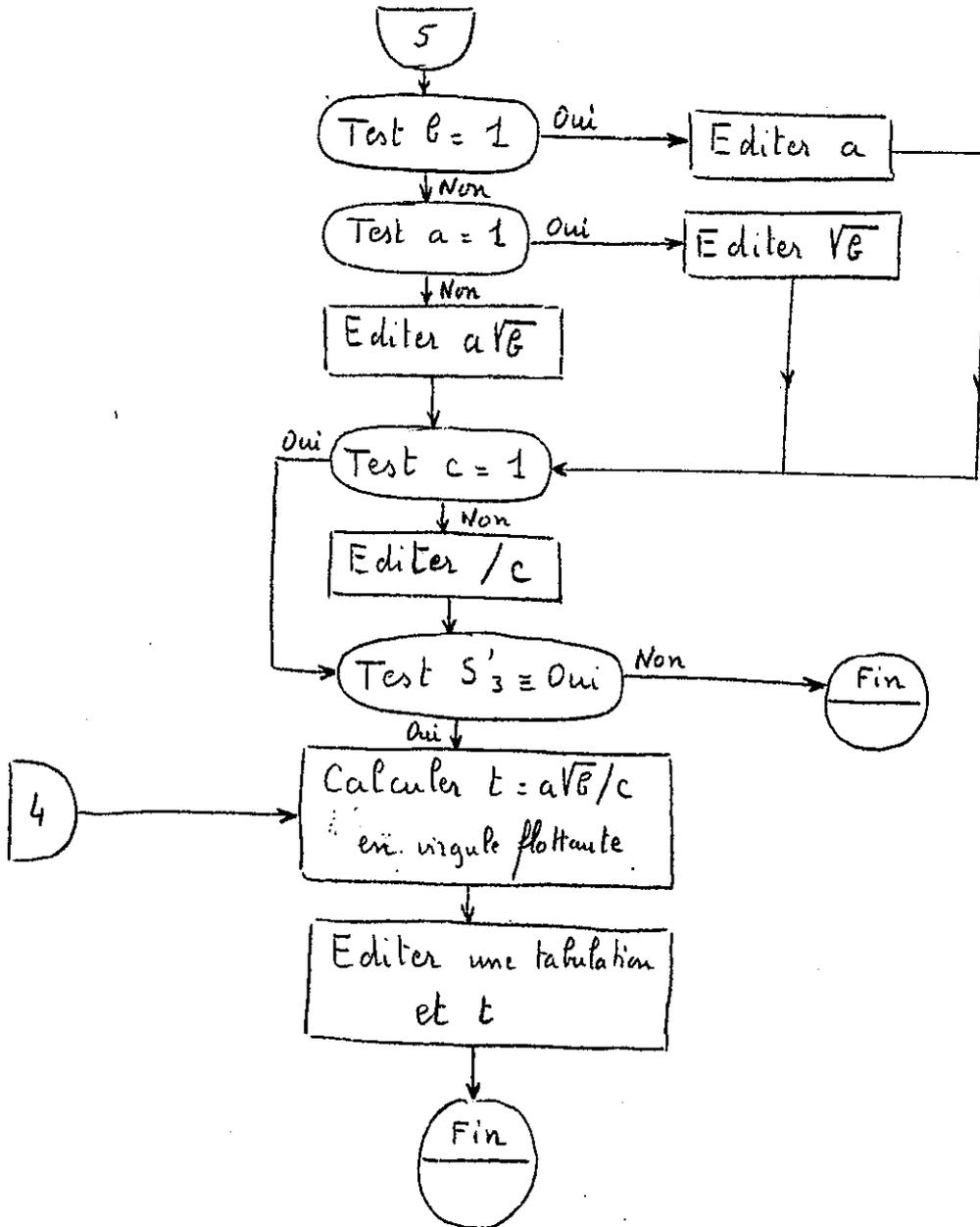
Données : N_0 ; j_i ; $\mathcal{N}(v_i)$; S_1 ; S_2 ; S_3

Resultat : Néant





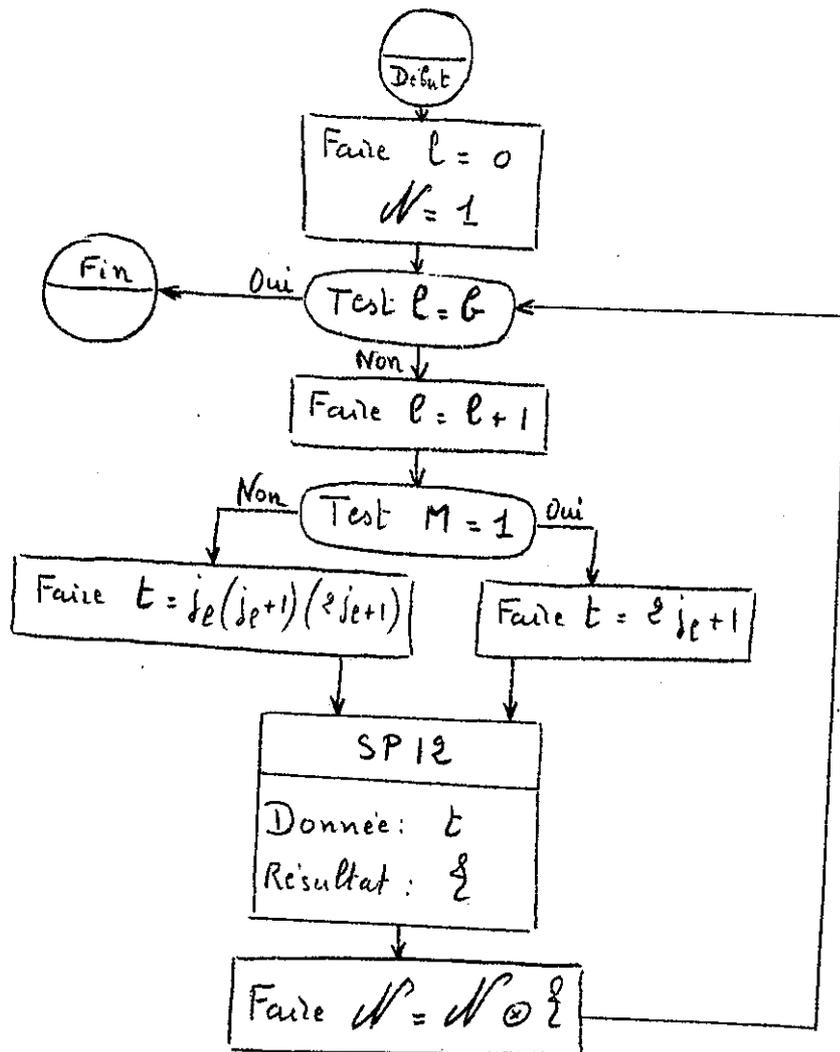




Calcul des Crochets

Données: b ; j_e ; a ; M

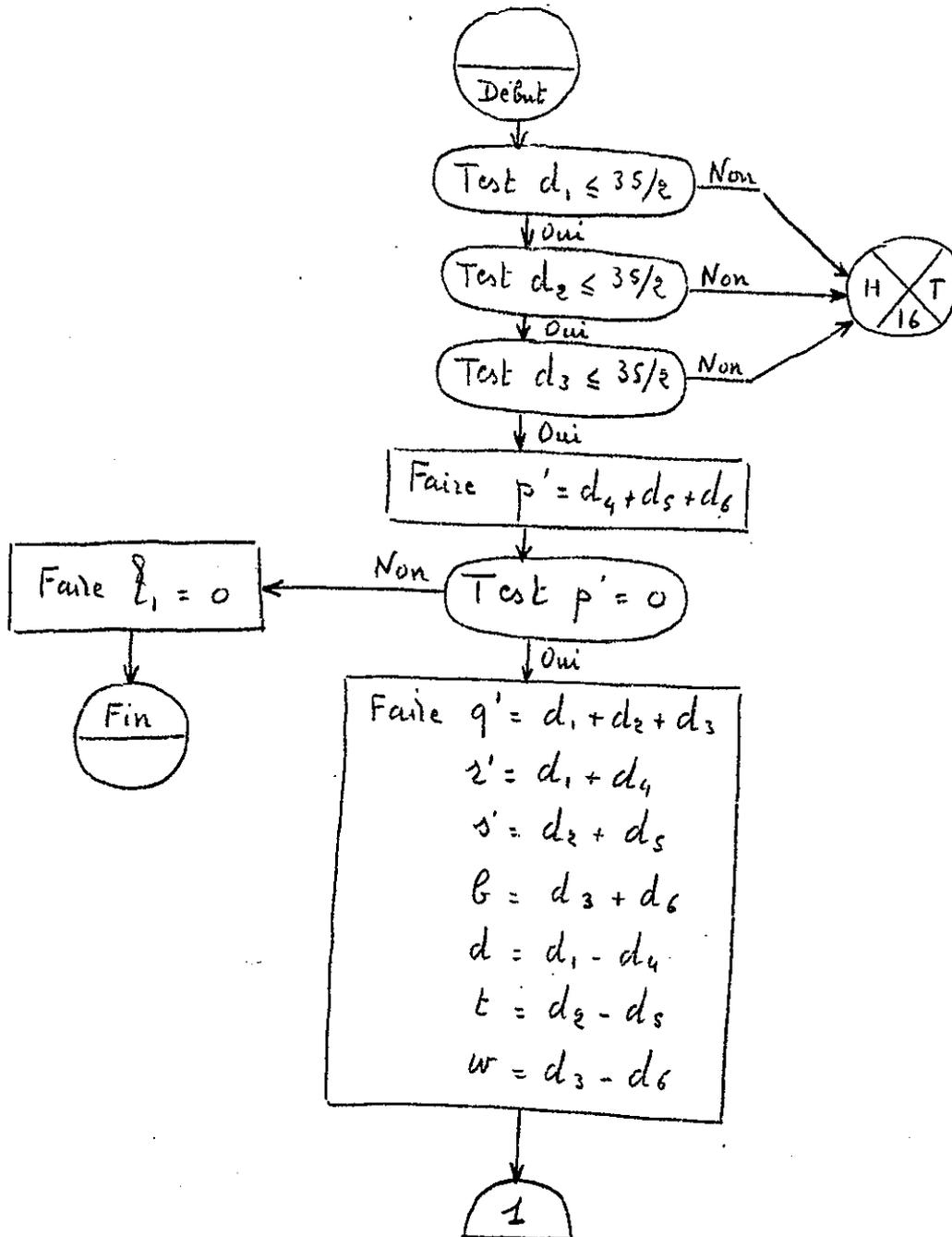
Résultat: \mathcal{N}

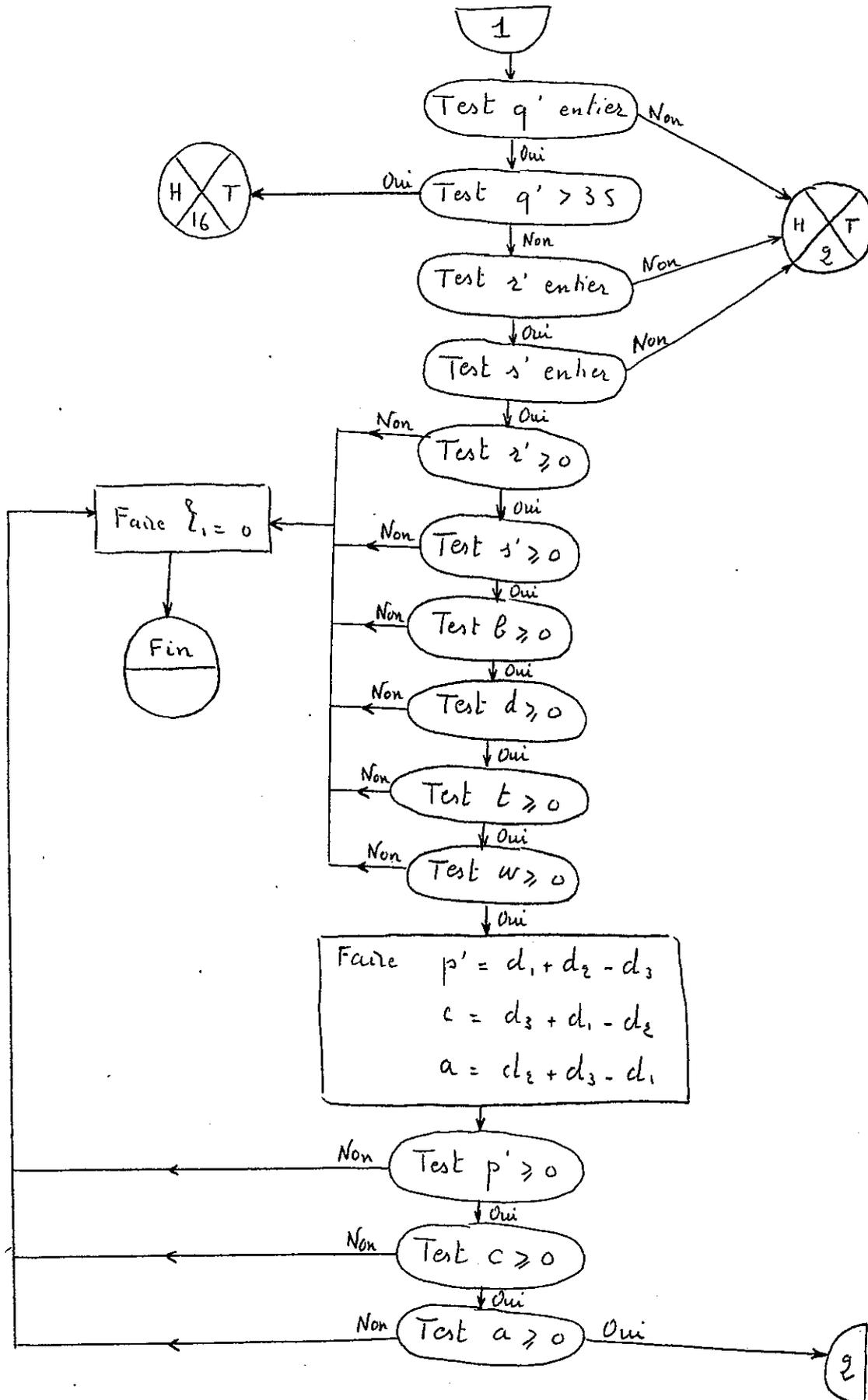


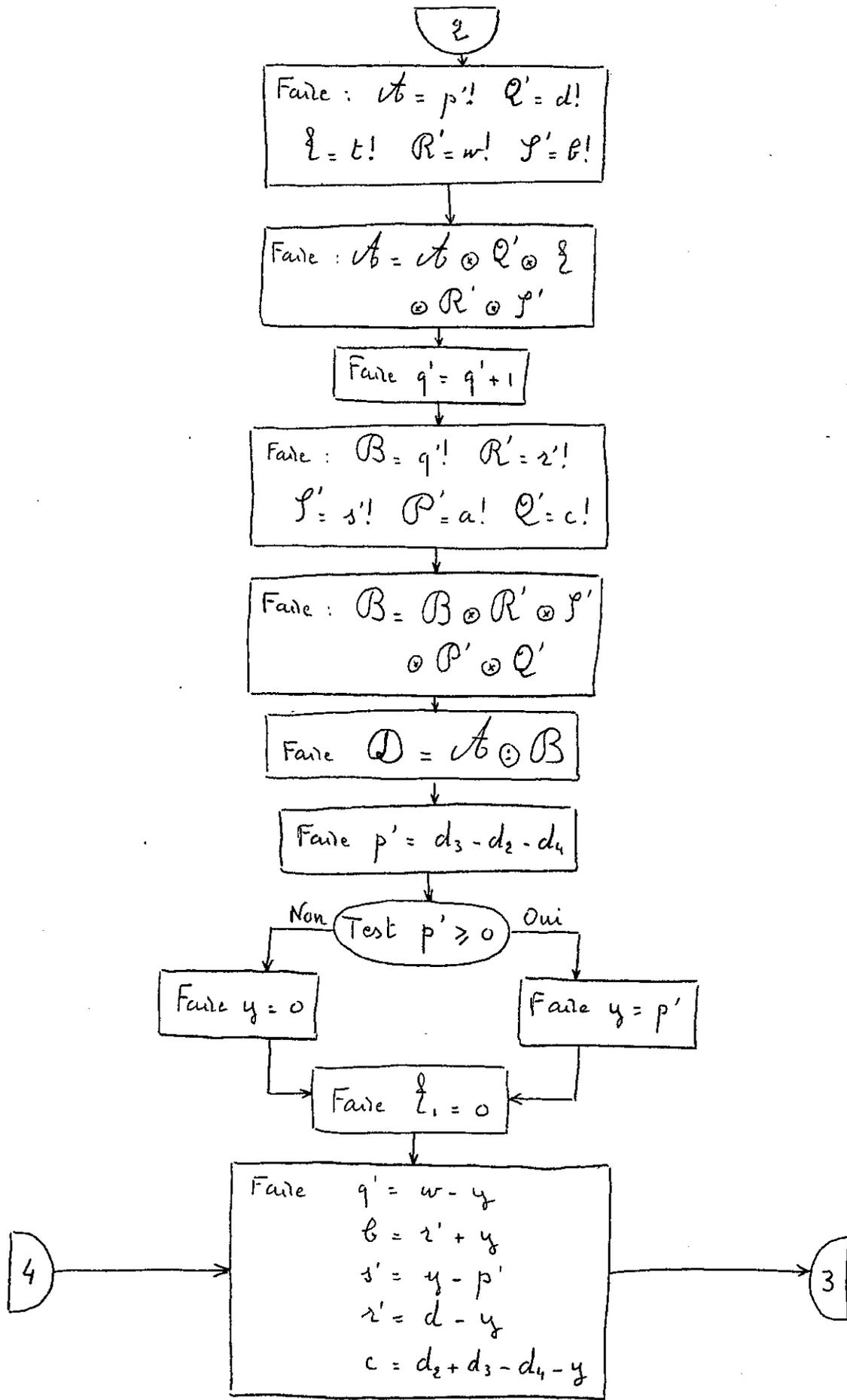
Calcul d'un 3-j

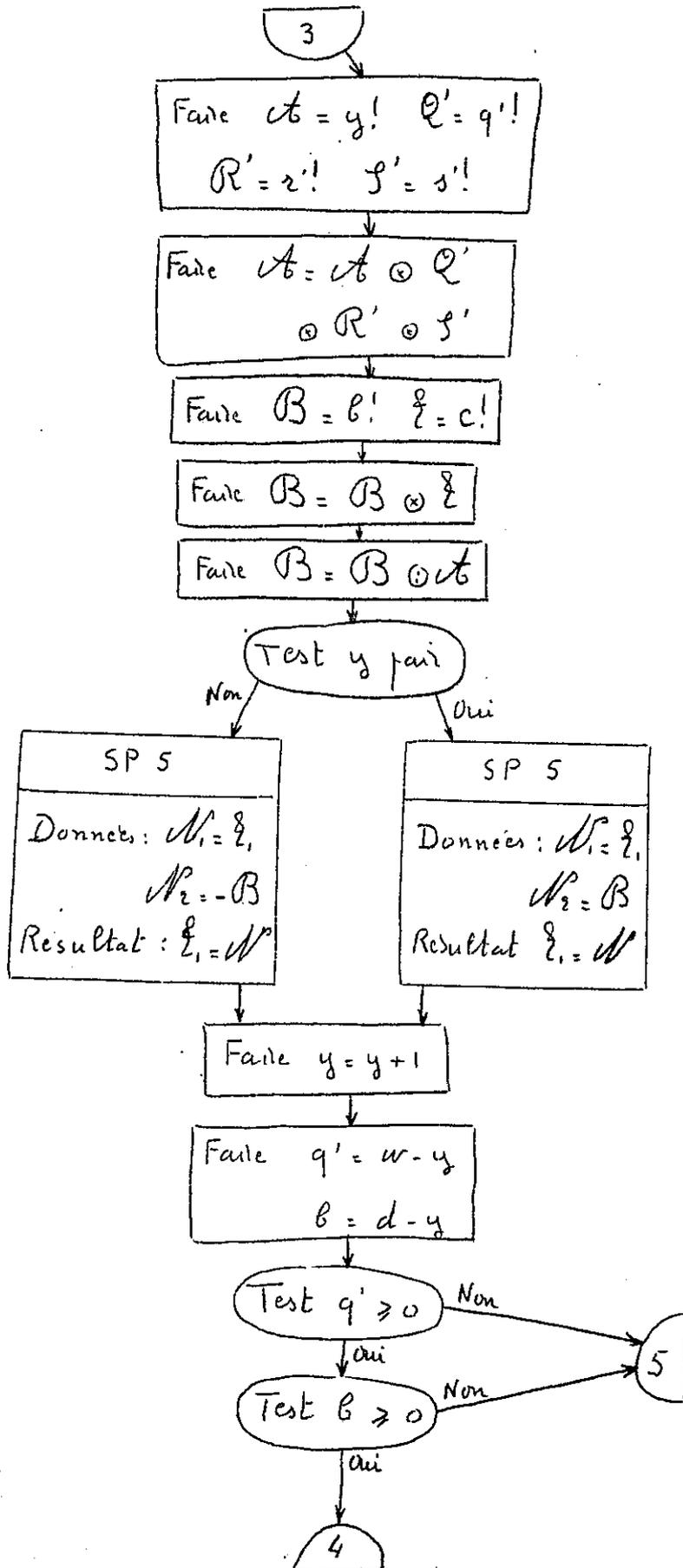
Données : $d_m \quad (1 \leq m \leq 6)$

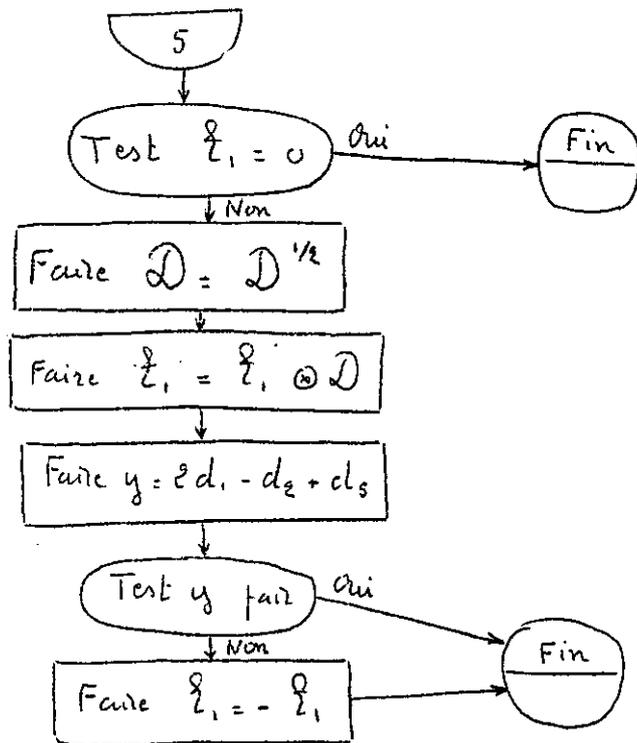
Résultat : \mathcal{L}_1







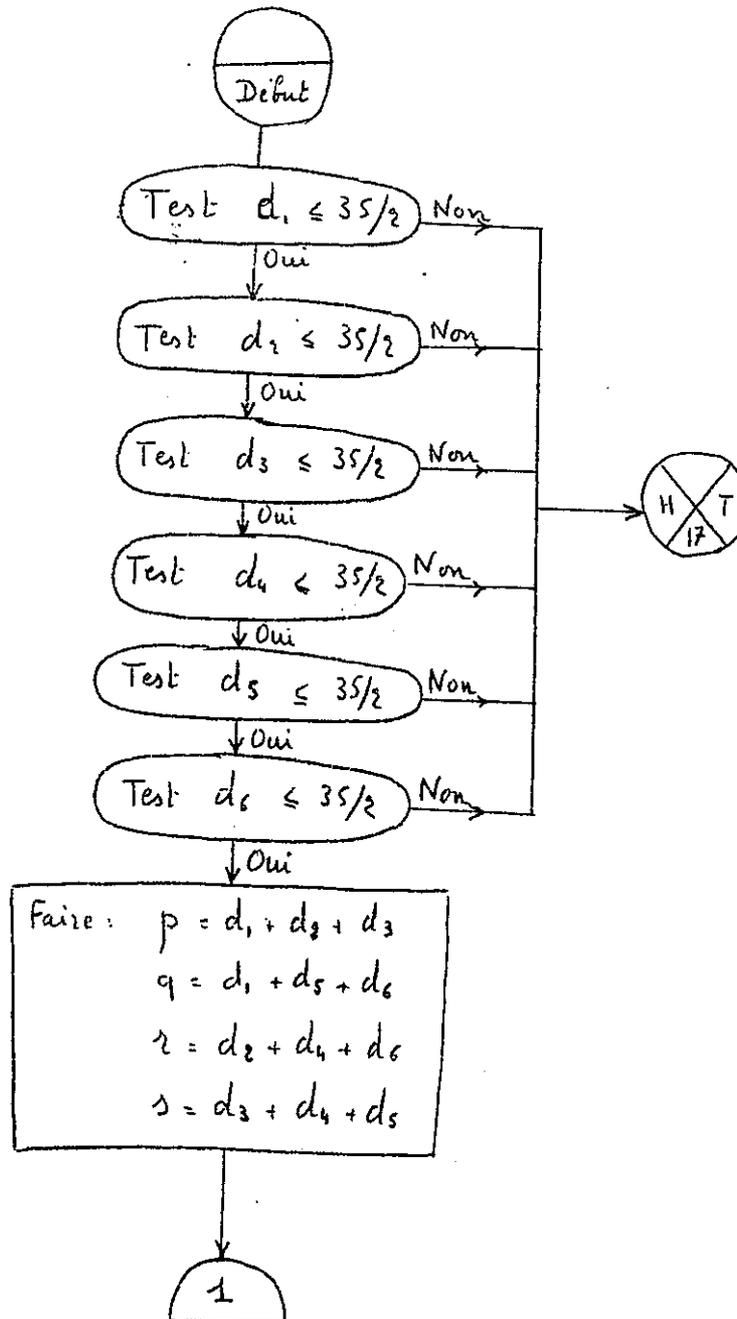


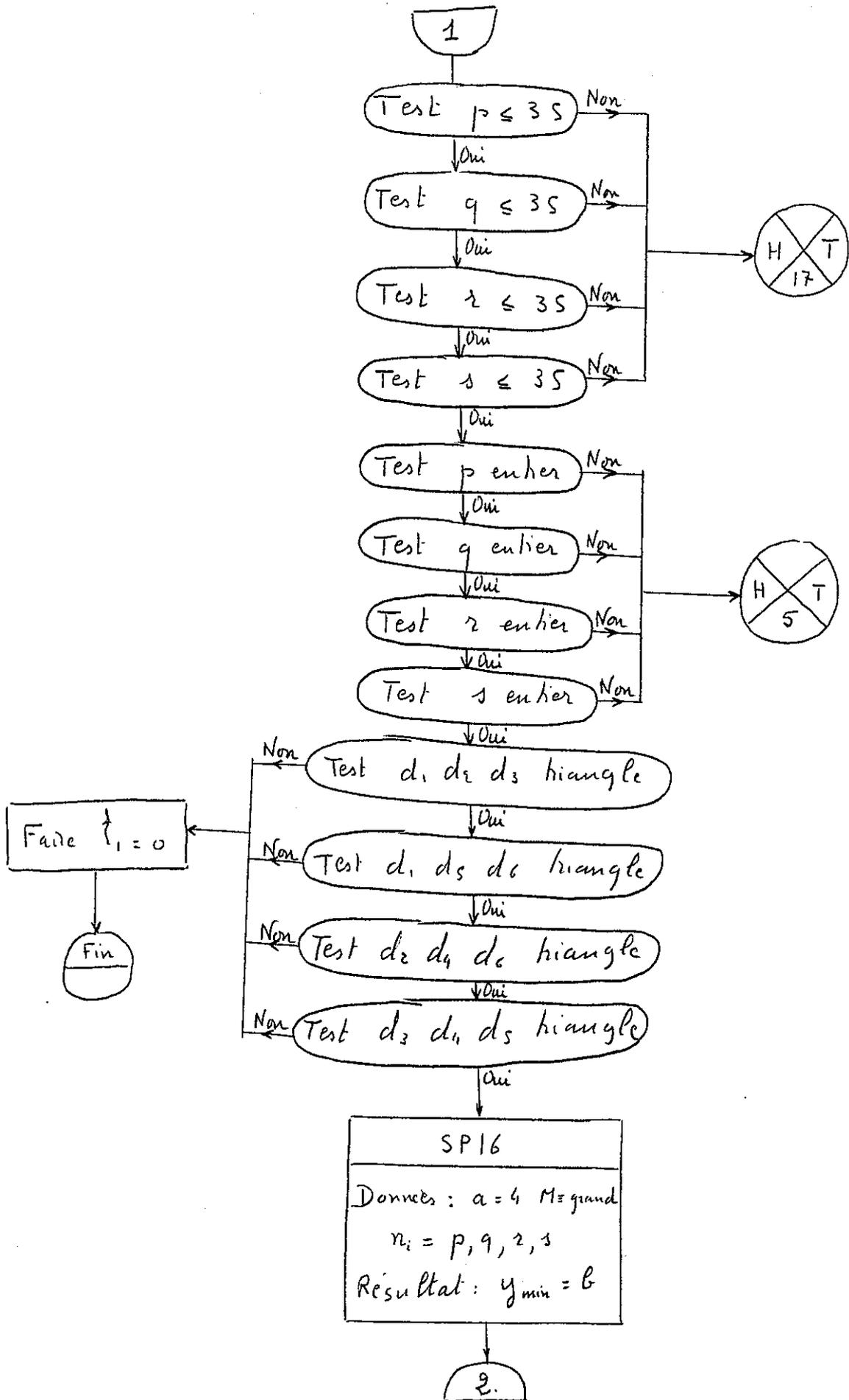


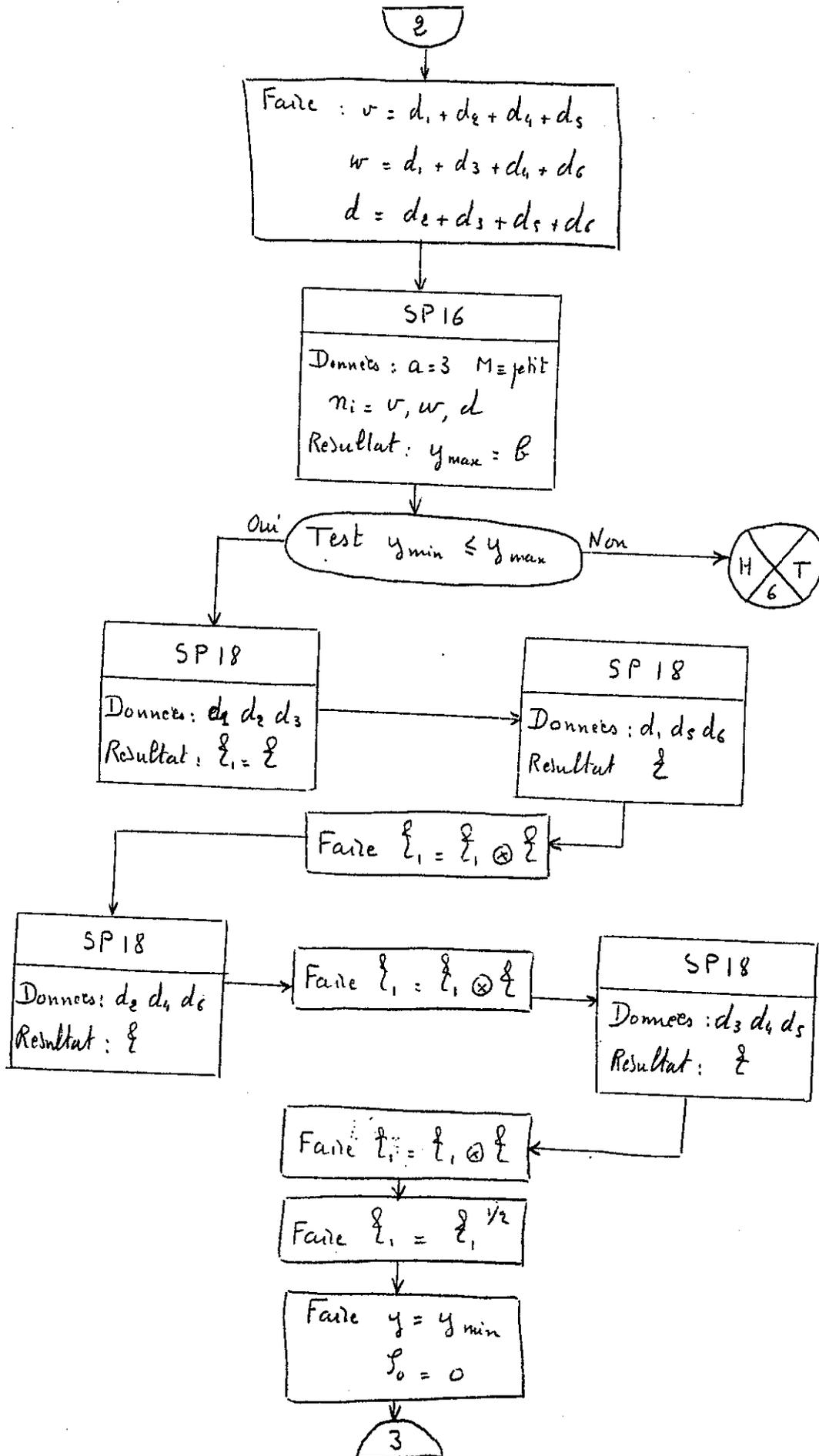
Calcul dim 6 - j

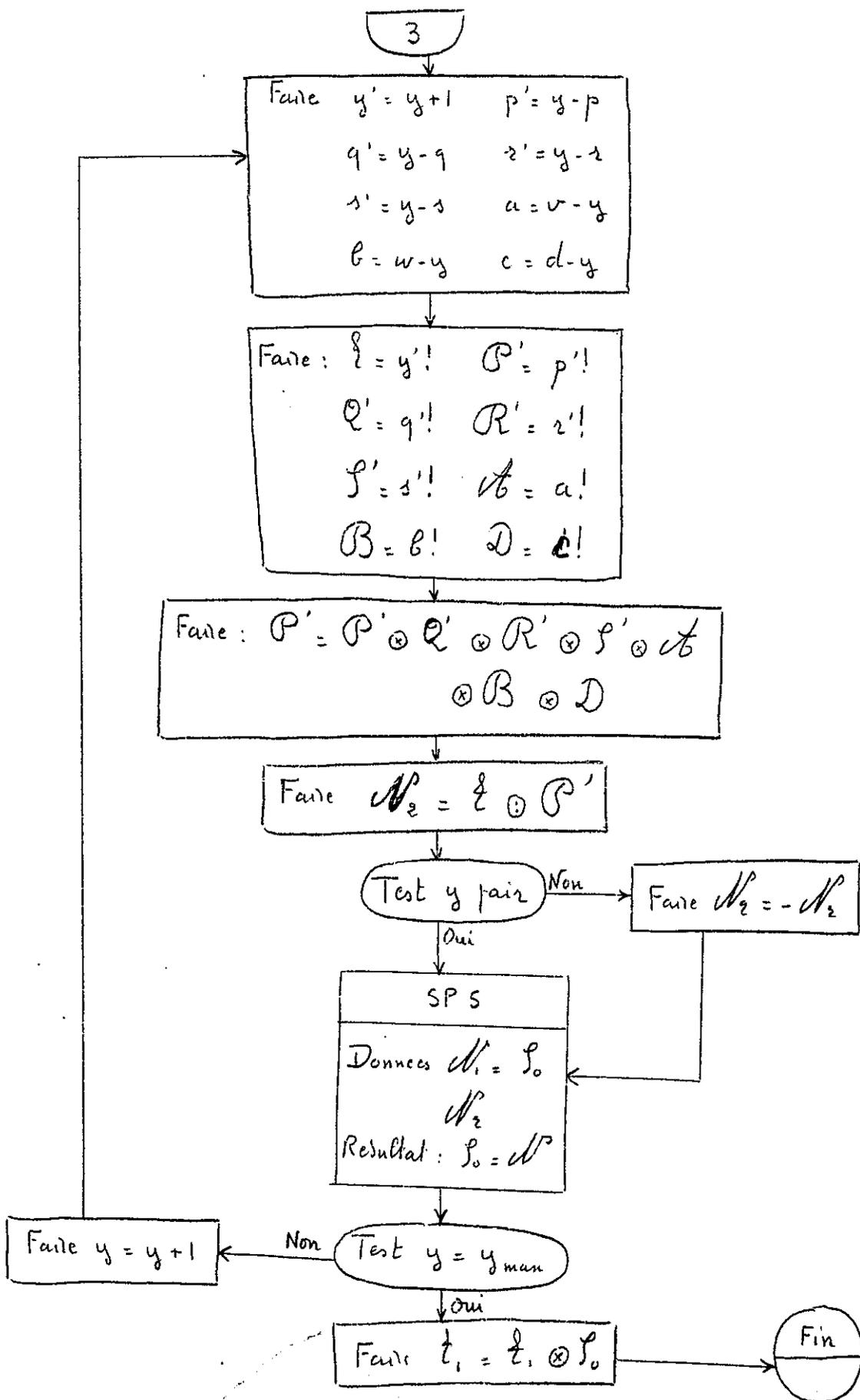
Données : $d_m \quad (1 \leq m \leq 6)$

Résultat : ξ





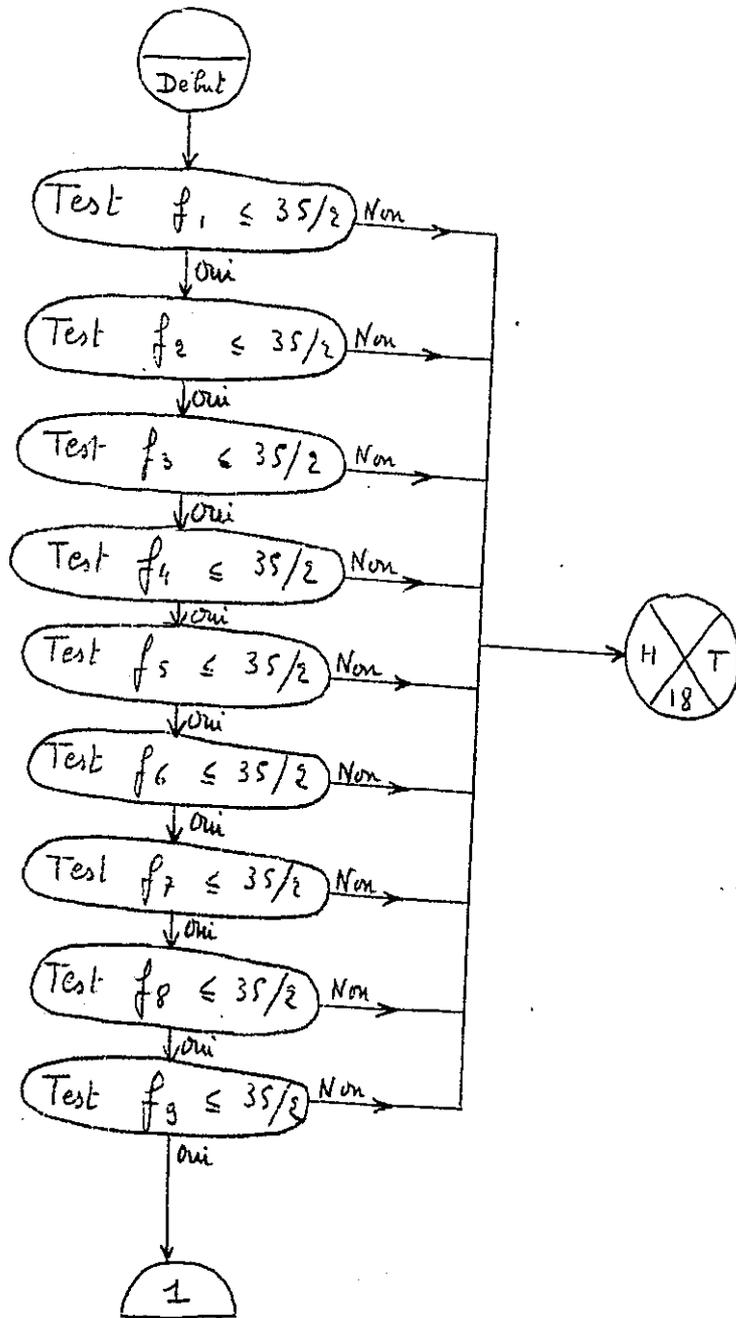


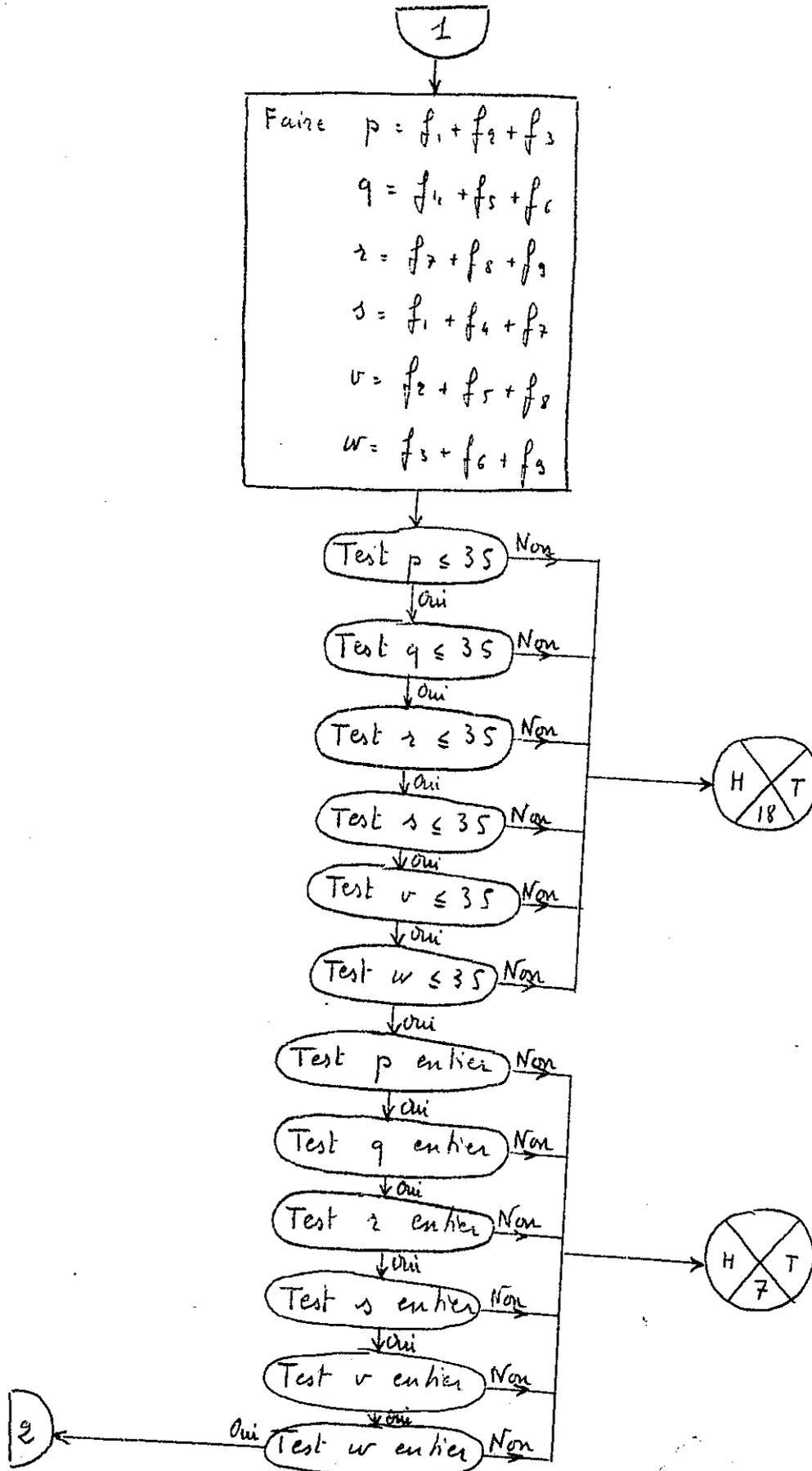


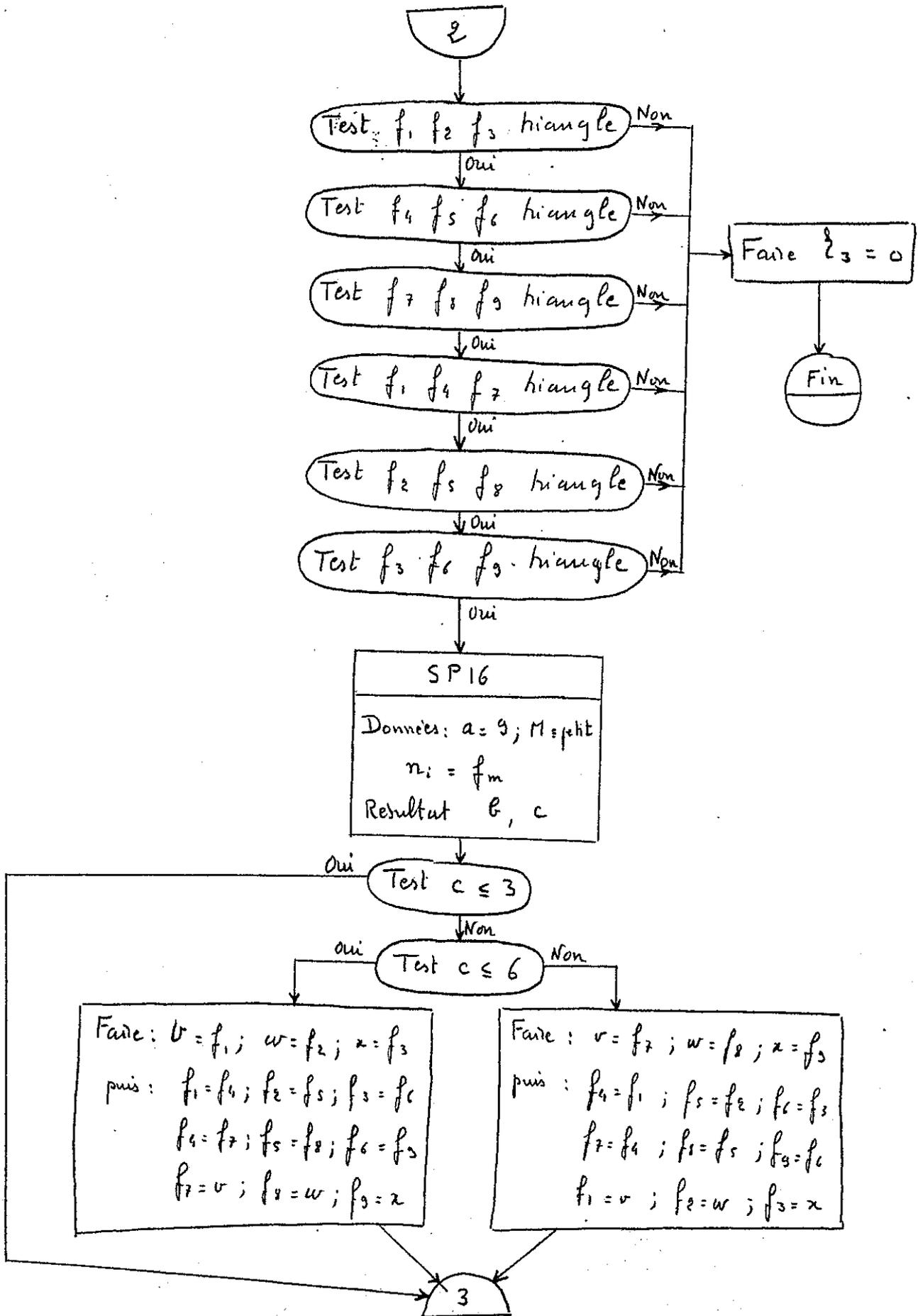
Calcul d'un g_j

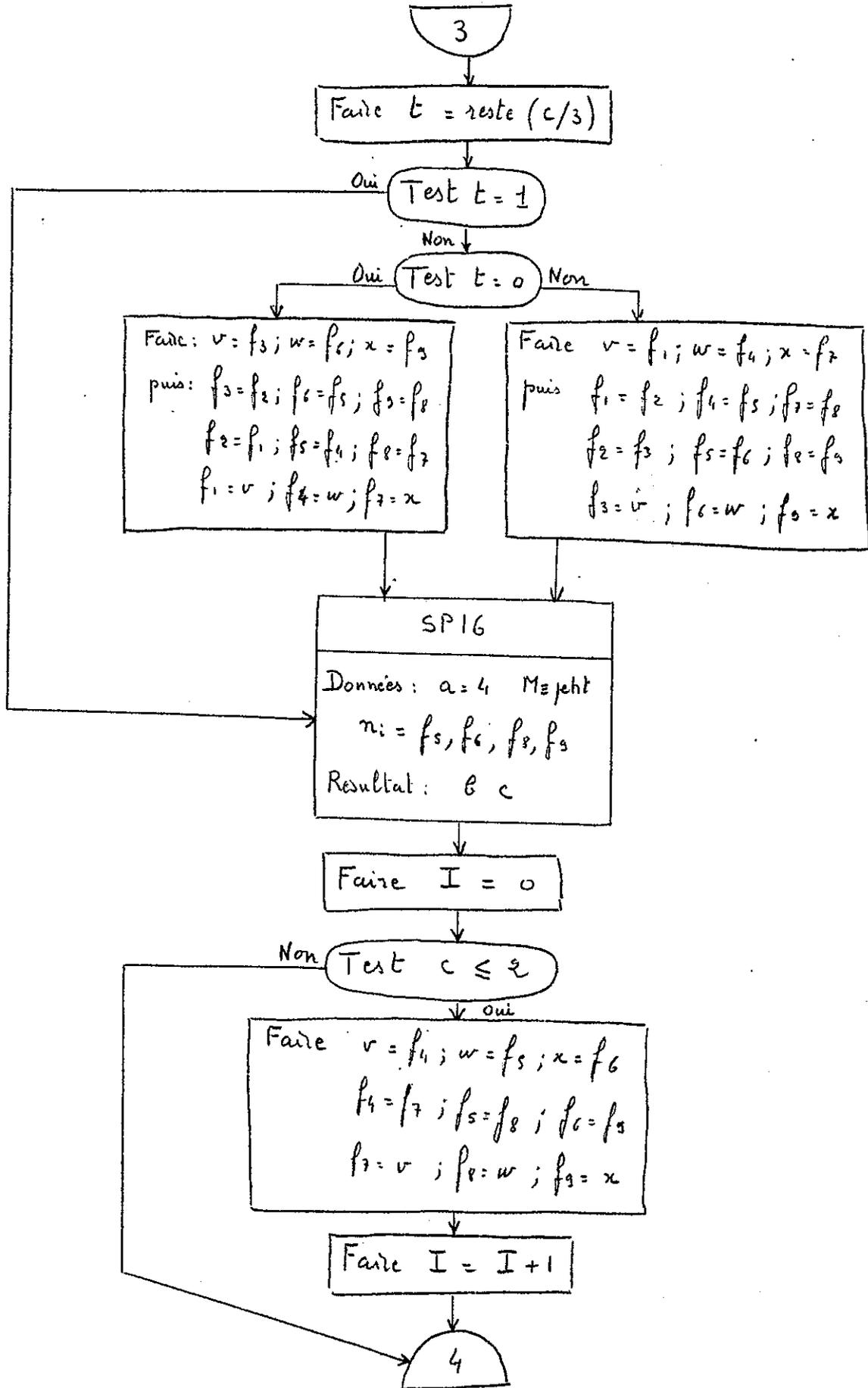
Données: f_m ($1 \leq m \leq 9$)

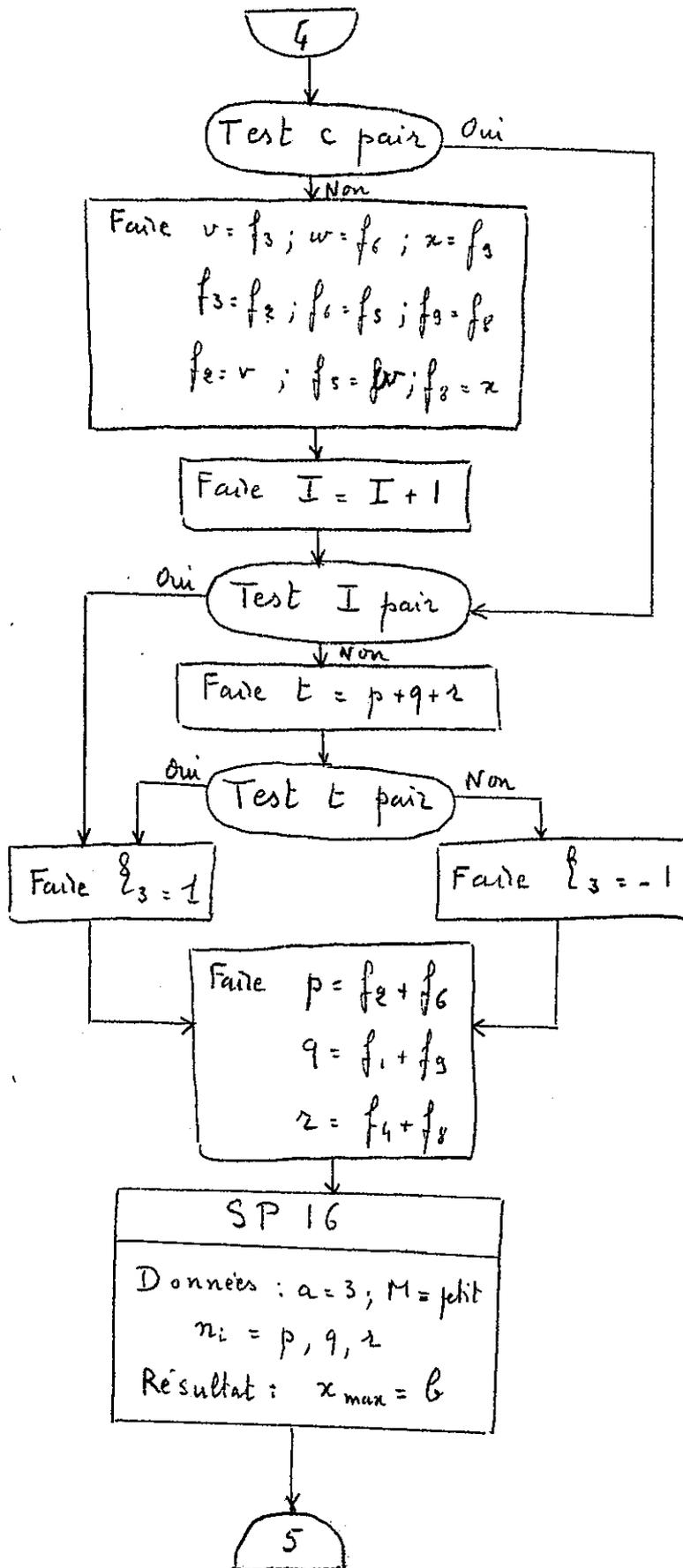
Résultat: g_3

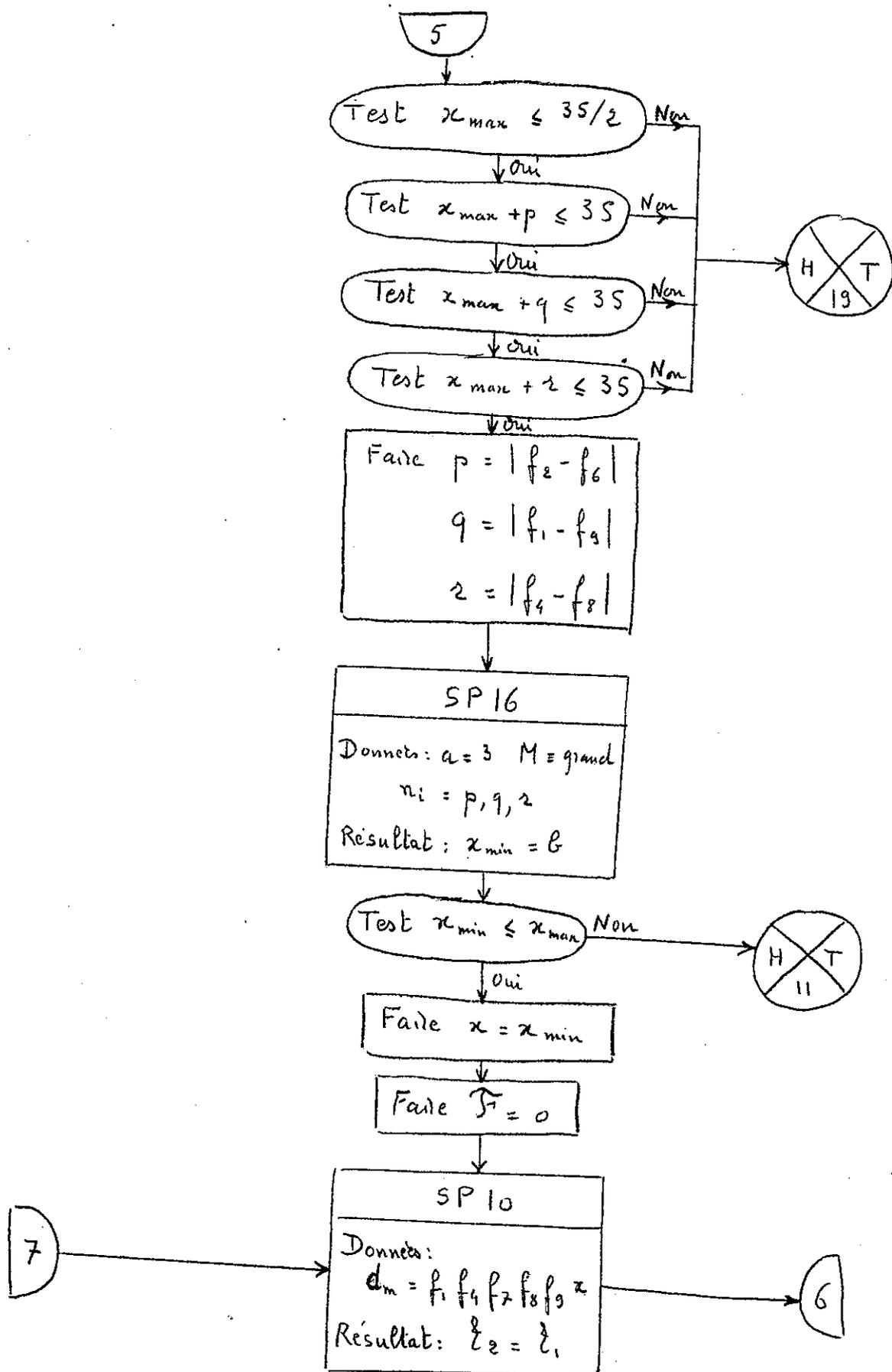


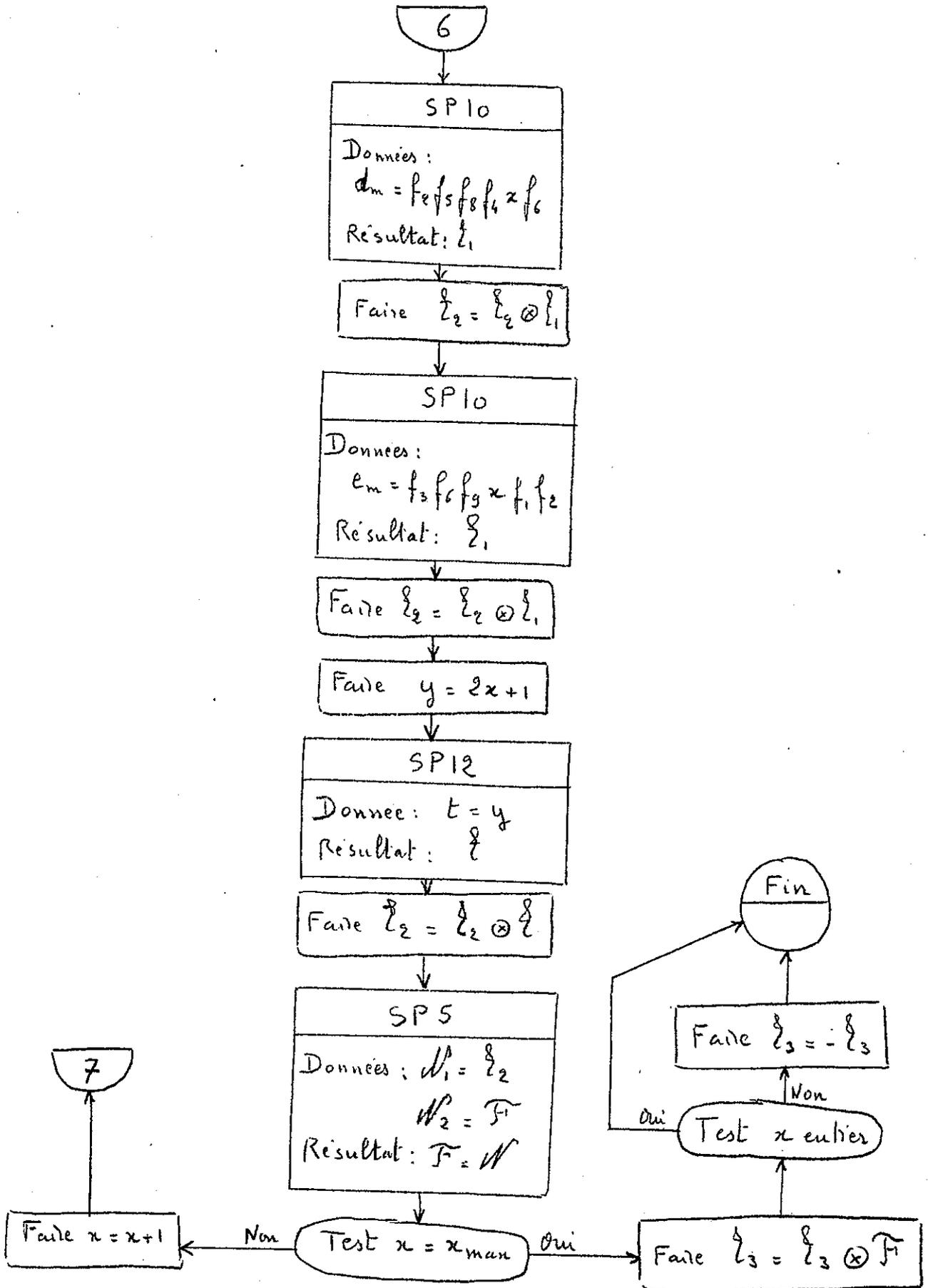








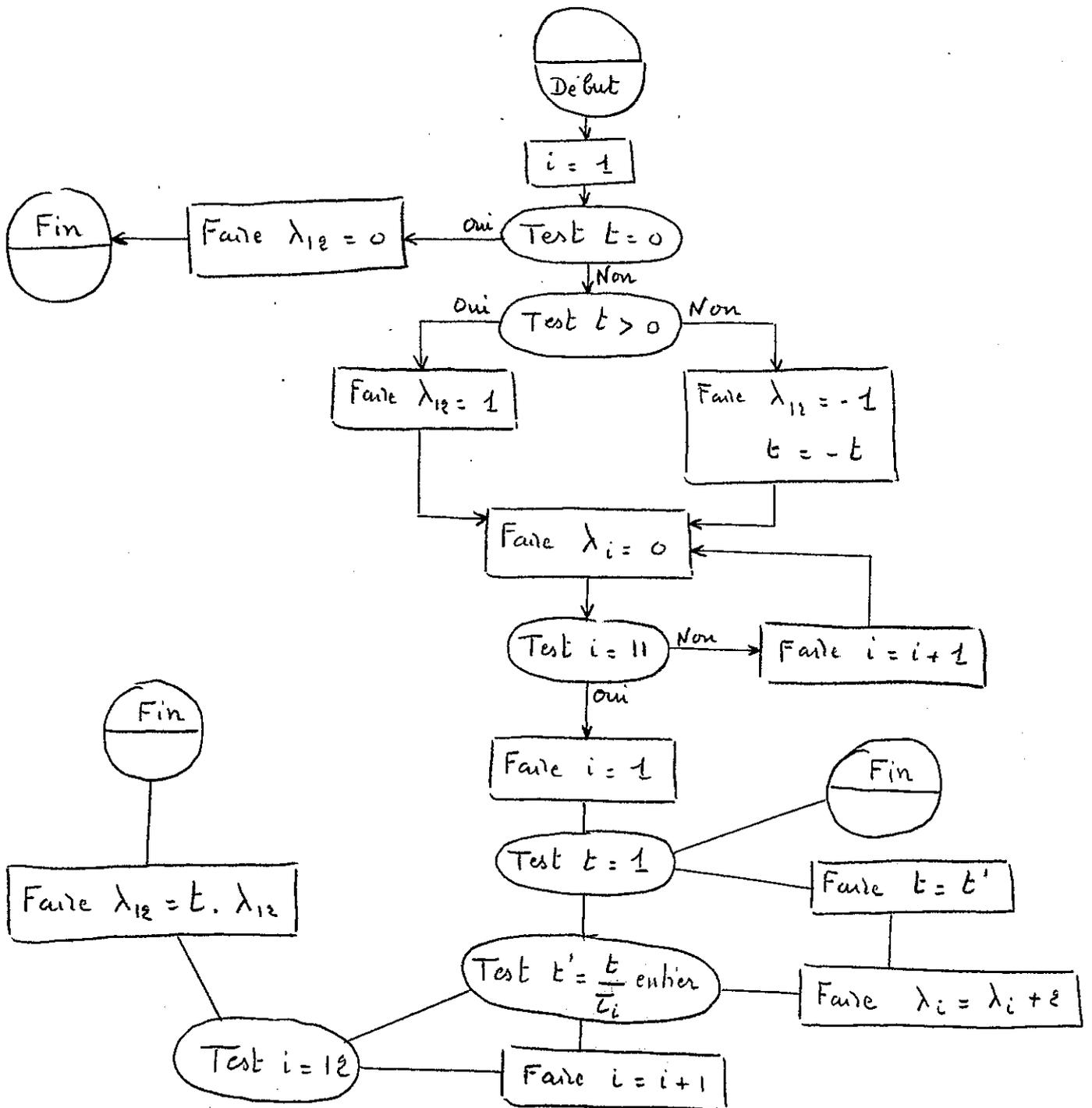




Transformation entier \rightarrow Rotenberg

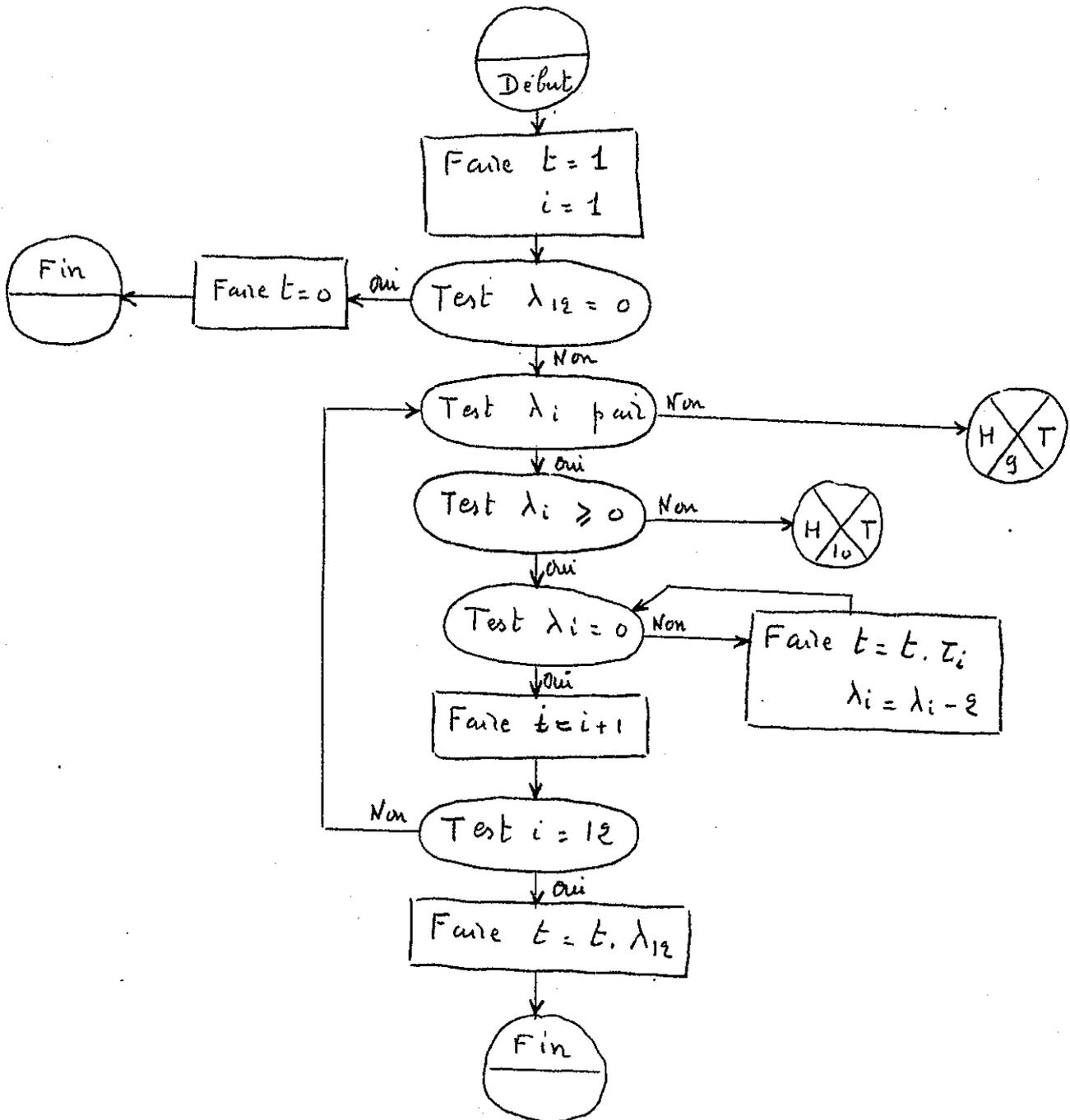
Données : t

Résultat : $\{ \tau_i \}$ ($\tau_i \equiv$ nb premiers)



Transformation Rotenberg \rightarrow entier

Donnée : ξ Résultat : t ($\tau_i = \text{nbs premiers}$)

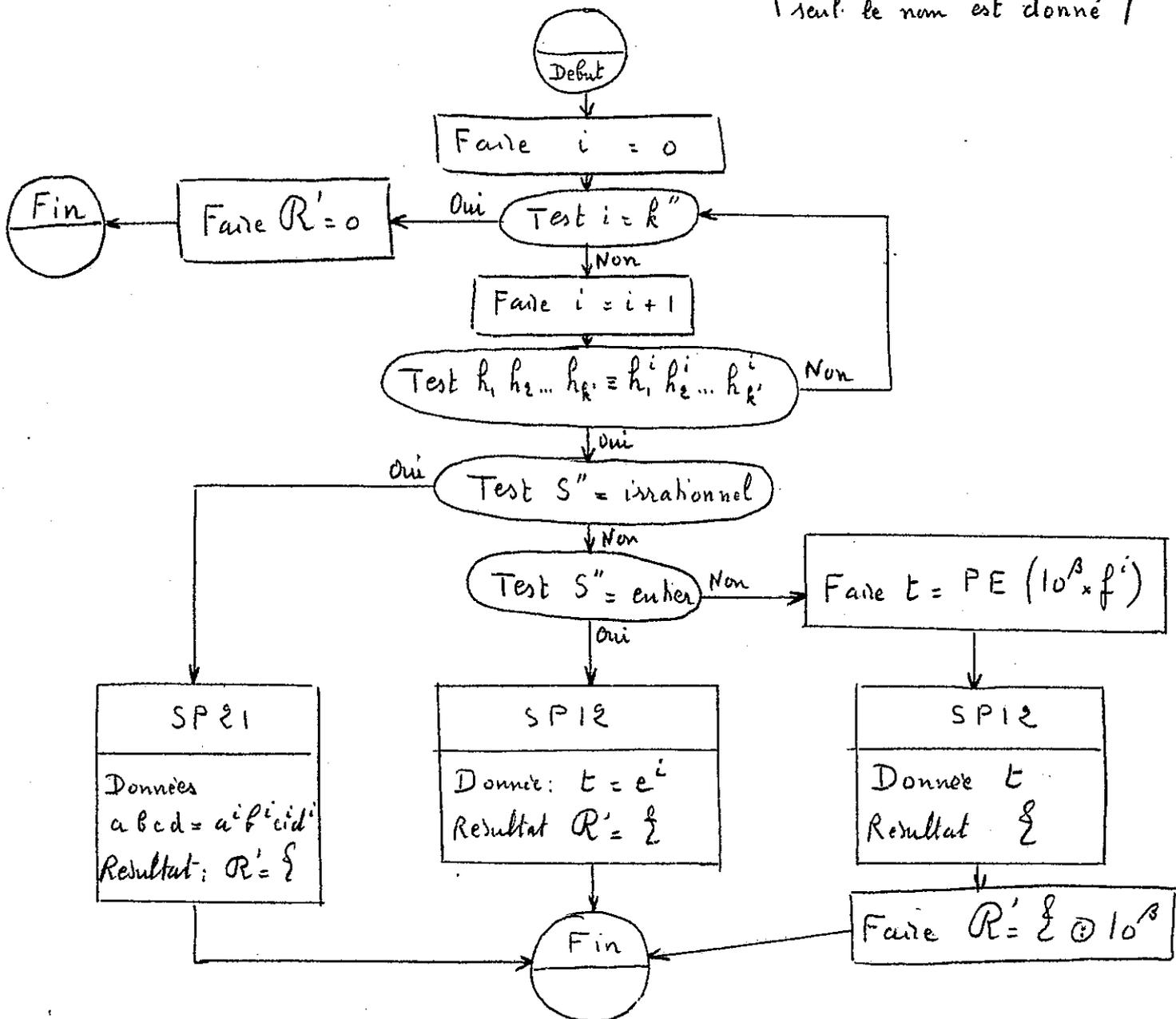


Calcul du facteur du à une Table

Données: Toutes celles relatives à une table.

Résultat: R'

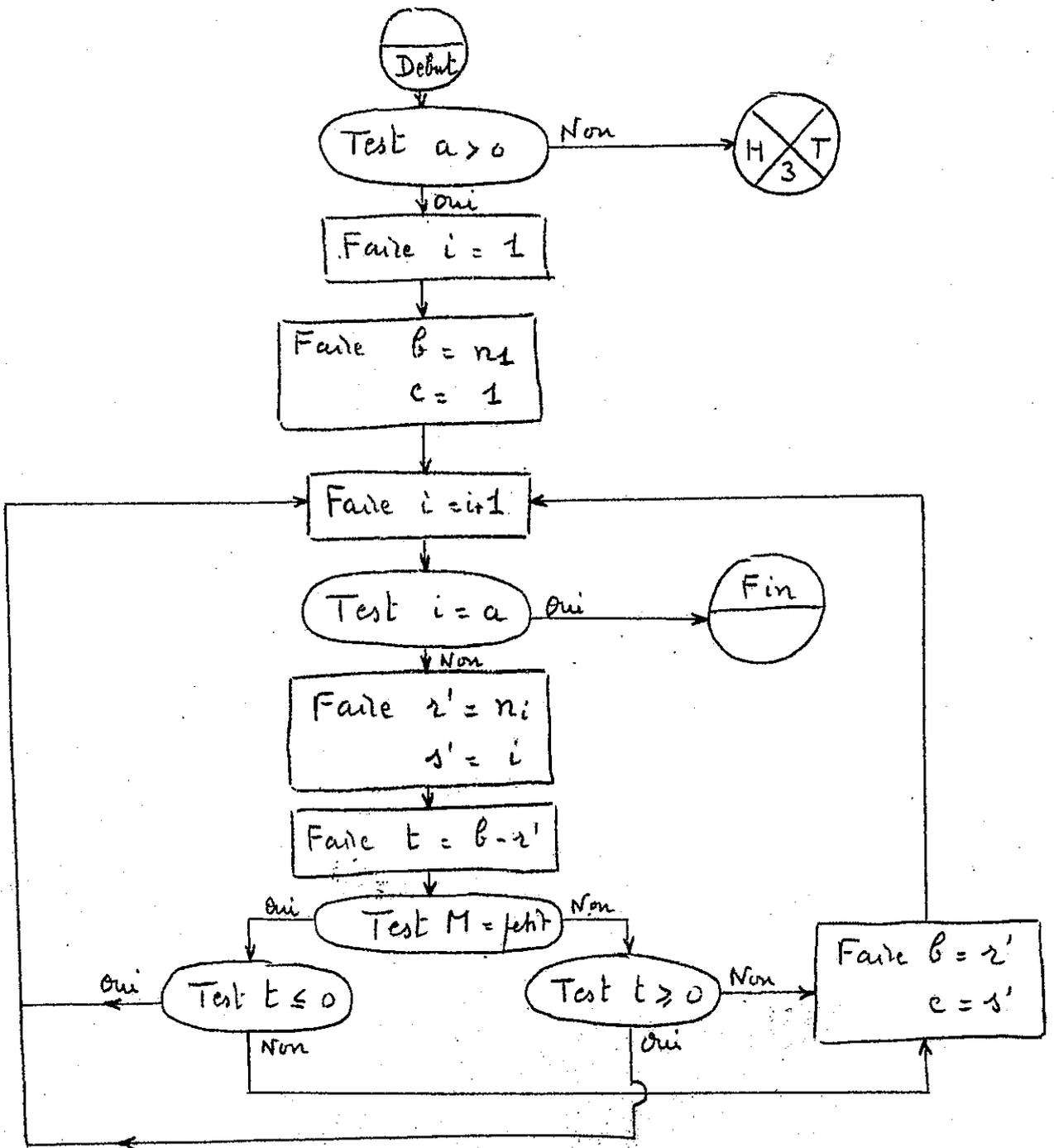
(h_i représente la valeur instantanée de la i ème variable de la table dont seul le nom est donné)



Recherche d'un nombre extrême

Données: a, n_i, M

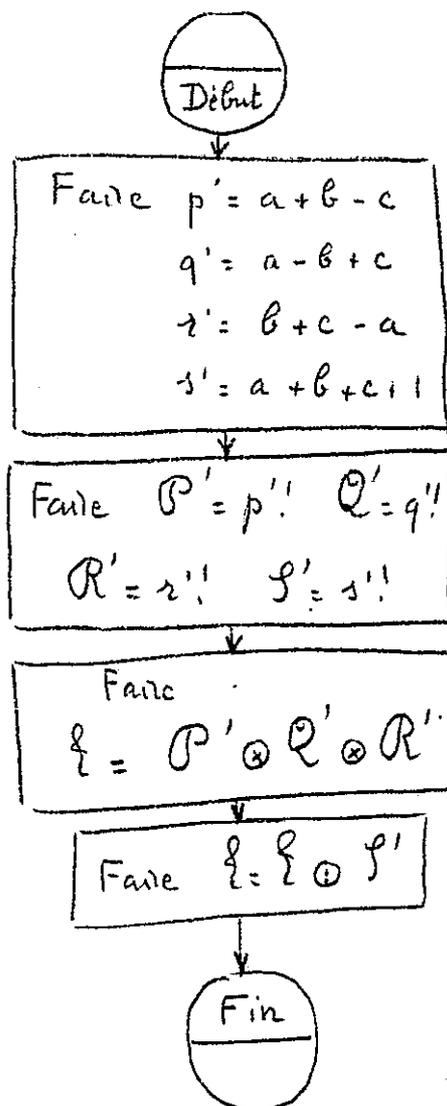
Résultat: b, c



Fonction Δ (6-j)

Données : a, b, c

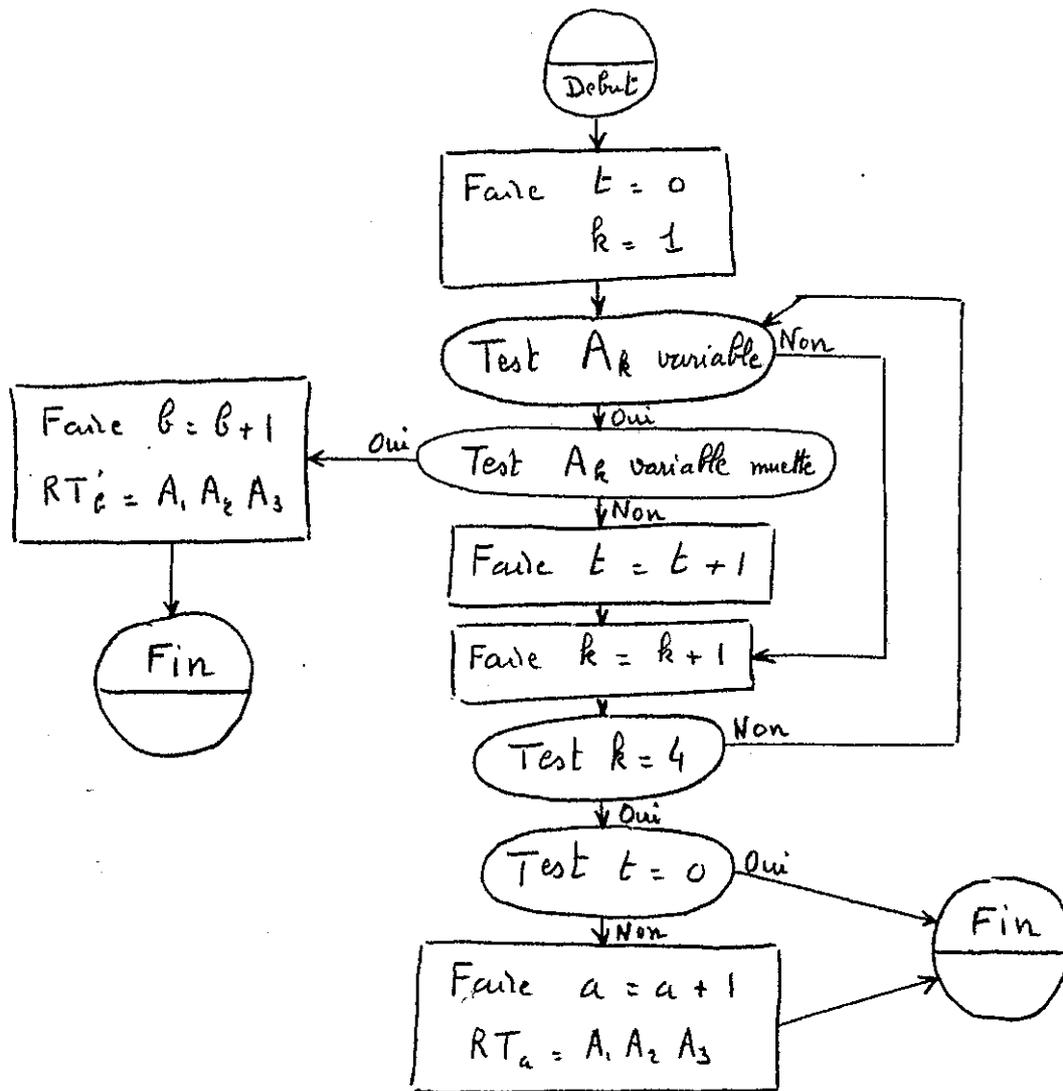
Résultat : $\xi = \Delta(a, b, c)$



Test des variables pour la recherche des relations triangulaires

Données : a, b, A_1, A_2, A_3

Résultat : a, b, RT_a ou RT_b' ou rien

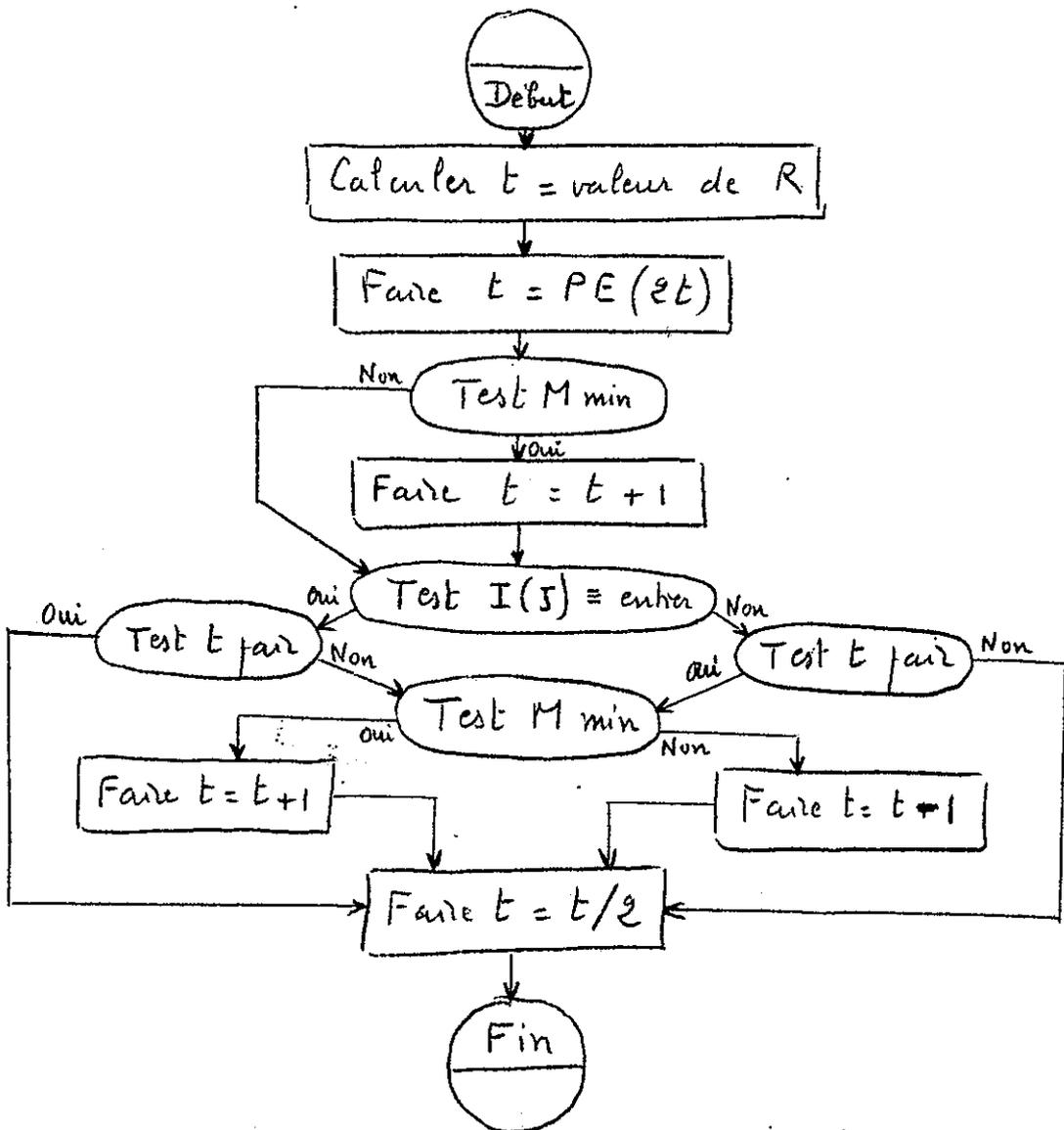


Calcul de la valeur minimale ou maximale d'une variable

Données : M , I , $I(J_I) \equiv$ (entier ou $\frac{1}{2}$ entier)

R_I = relation linéaire des $I-1$ premières variables

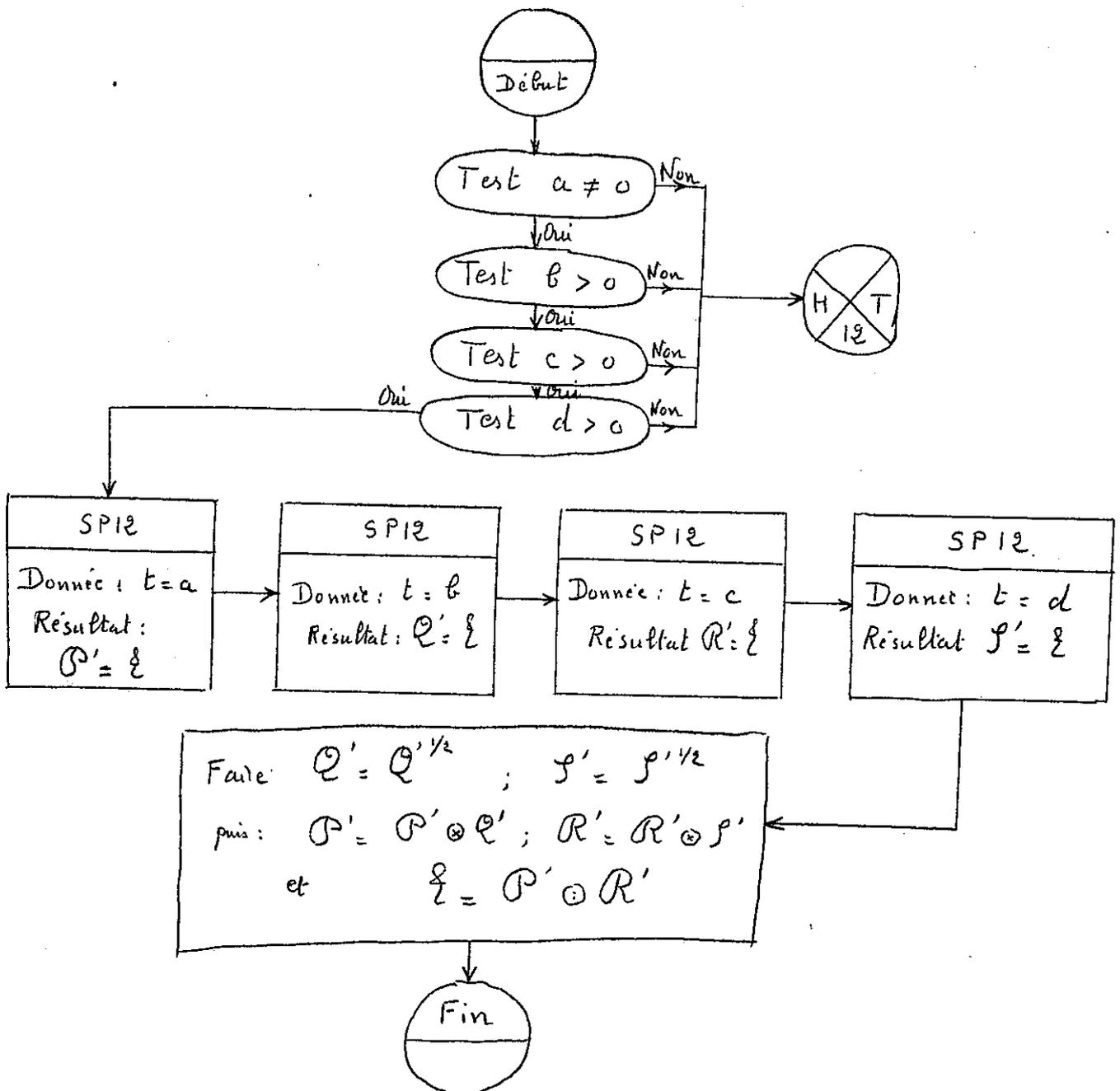
Résultat : t



Transformation de $a\sqrt{b}/c\sqrt{d}$

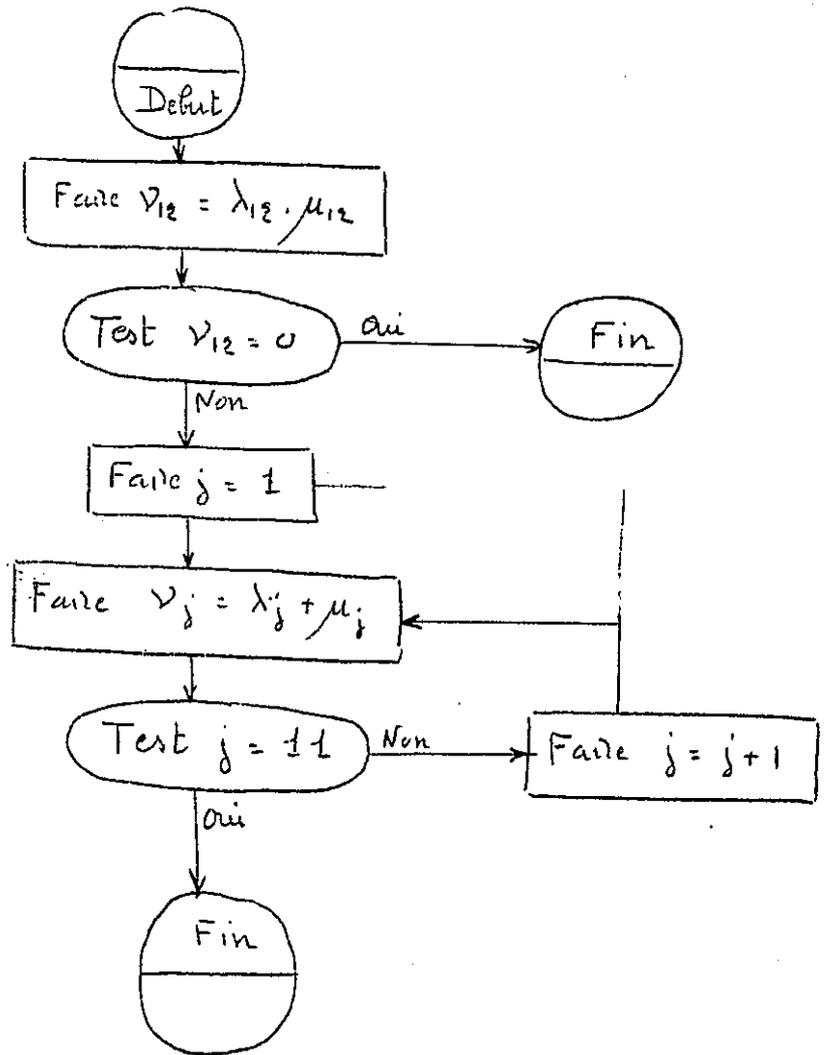
Données : a, b, c, d

Résultat : ξ



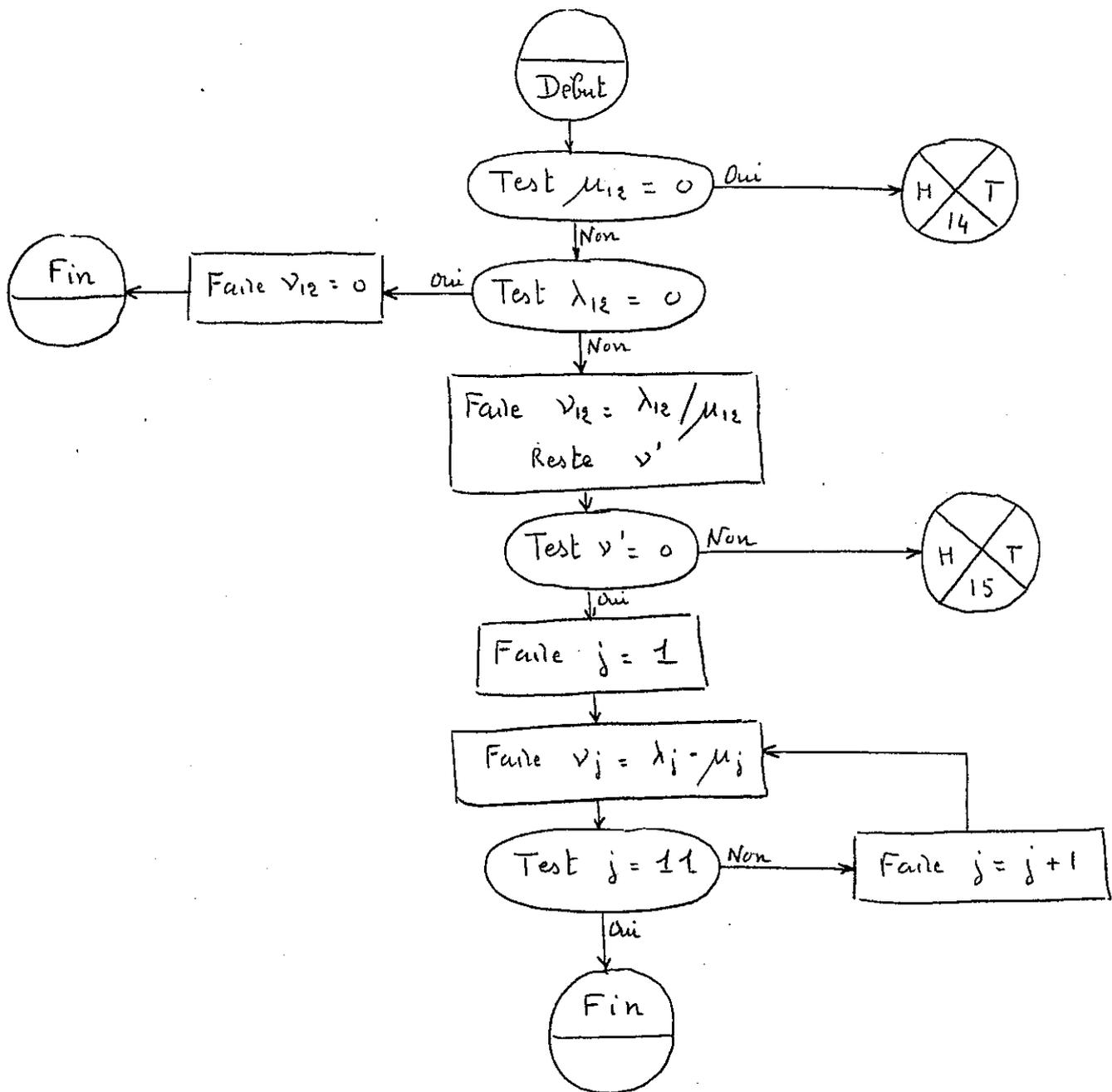
Multiplication Rotenberg

$$A'(v_i) = B'(\lambda_i) \otimes C'(\mu_i)$$



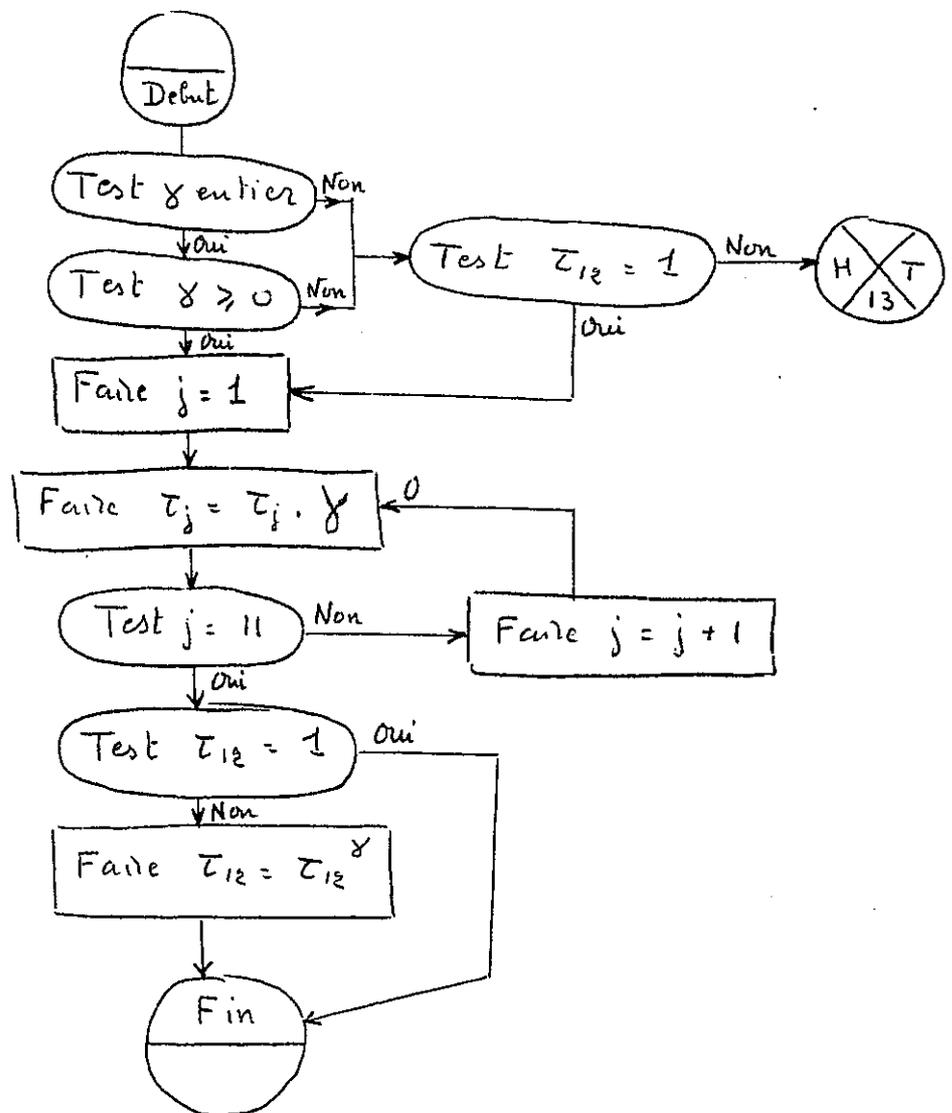
Division Rotenberg

$$C'(v_i) = A'(\lambda_i) \odot B'(\mu_i)$$



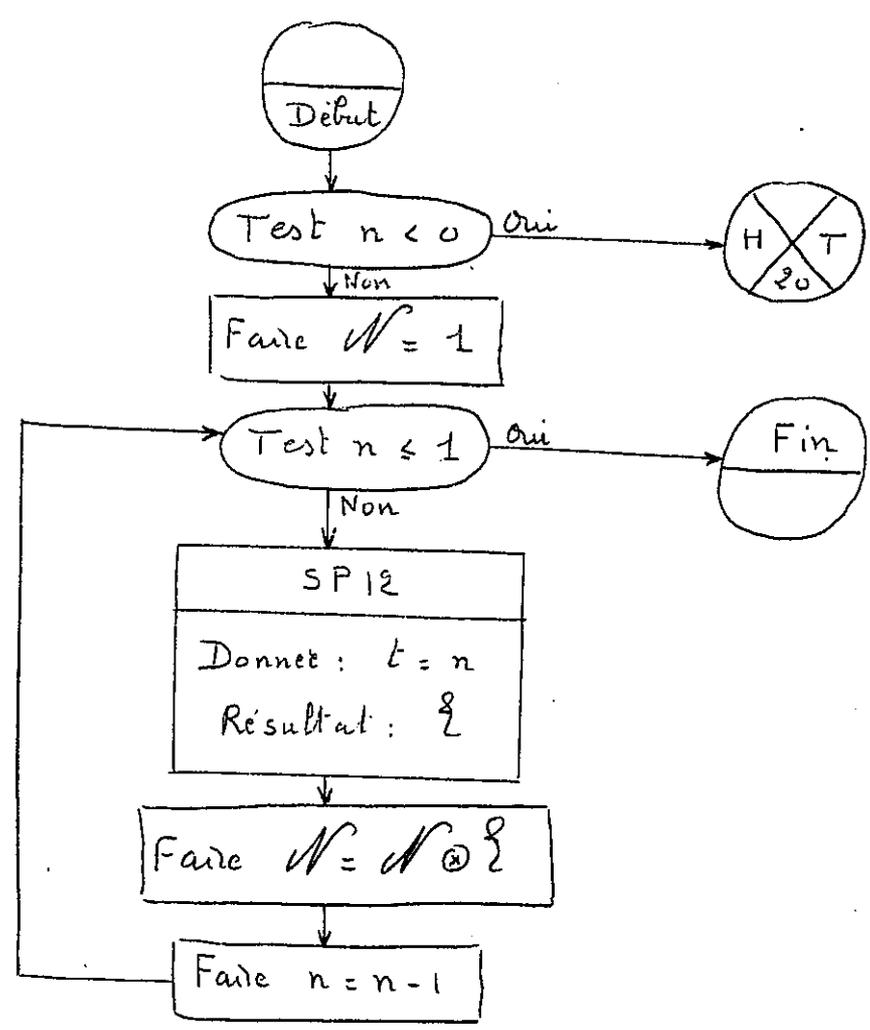
Elevation à la puissance Rotenberg

$$\xi'(\tau_i) = \xi'^{\gamma}(\tau_i)$$



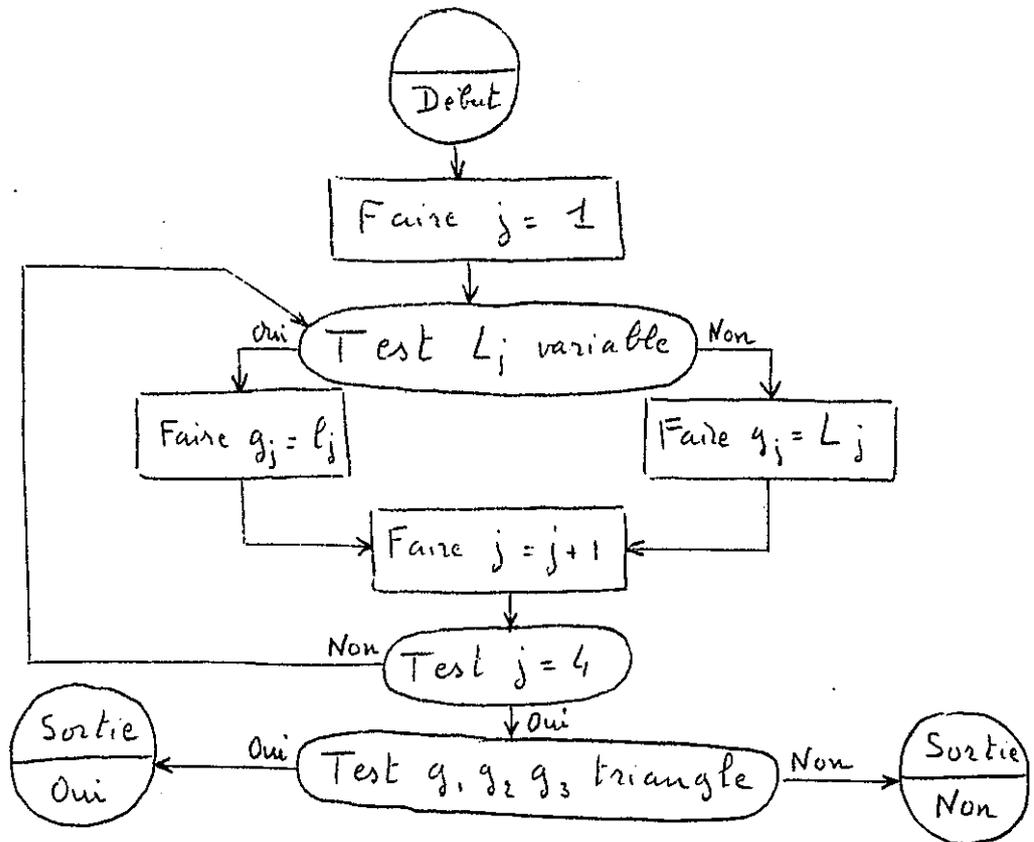
Factorielle

$$N = n!$$



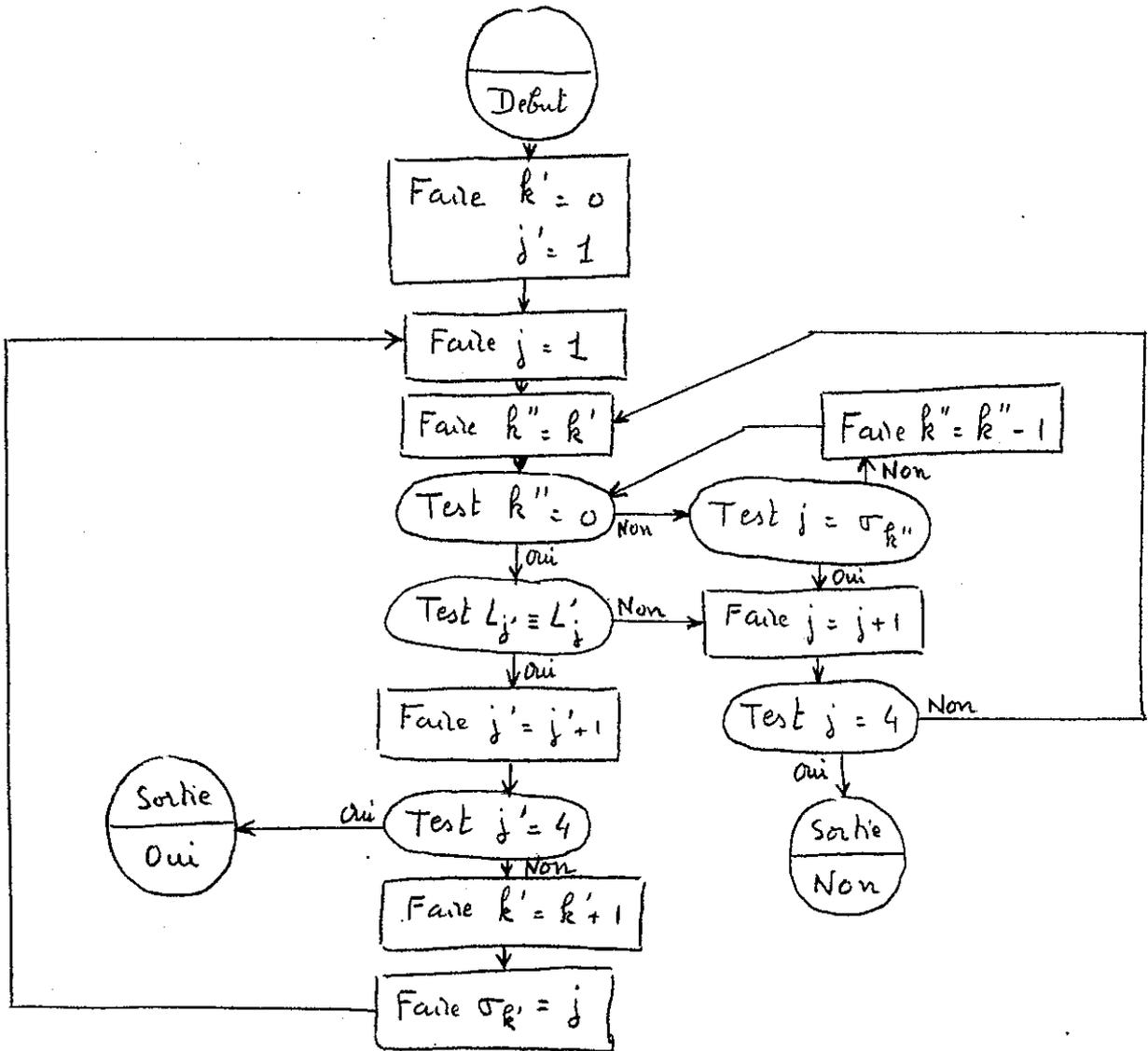
Test RT

$$RT \equiv L_1, L_2, L_3$$

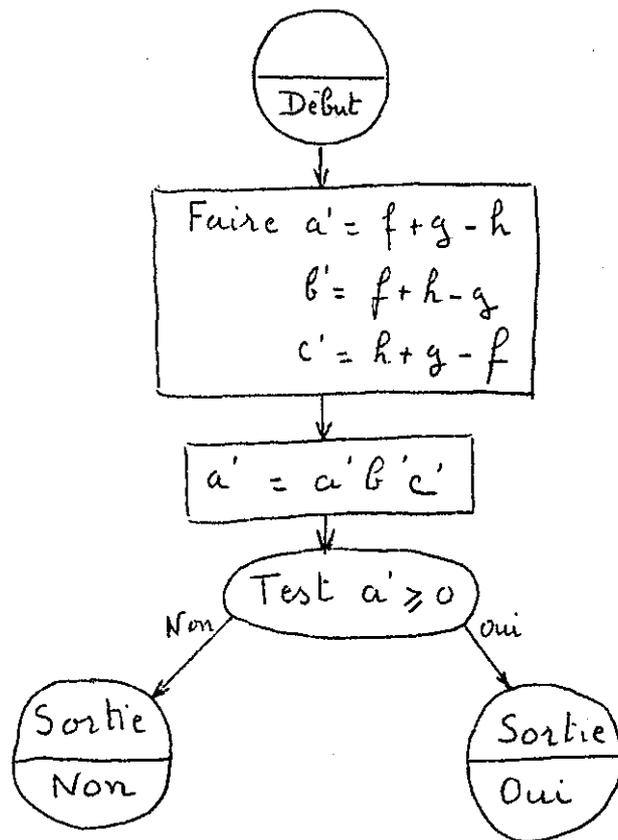


Test $RT \equiv RT'$

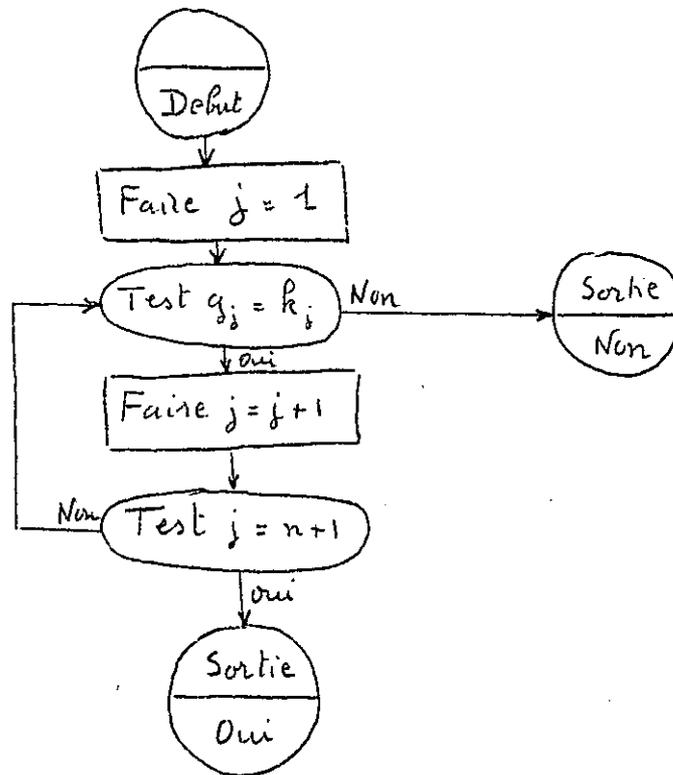
$RT \equiv L, L_2, L_3$; $RT' \equiv L', L'_2, L'_3$



Test triangulaire f, g, h



Test $g_1, g_2 \dots g_n \equiv h_1, h_2 \dots h_n$



Liste des données

Données générales:

$\alpha_0, N_0, (\text{Test initial})_0, K, \sigma, S'_1, S'_2, S'_3$

Pour chaque X_i :

K_i

Pour chaque Σ_i :

$N_i, (\text{Test initial})_i$

Pour chaque Π_i :

$(k_1, k_2, \dots, k_8)_i, (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_4)_i, (a, b, c, d)_i$

$(A_i, B_i, C_i, D_{lm}, E_{lm}, F_{lm}, G_i)_i$

Pour chaque table ij :

$[k', k'', s'', (\beta), H_k, h_k^l, (a^l, b^l, c^l, d^l) \text{ ou } e^l \text{ ou } f^l]_{ij}$

Pour chaque variable:

$P(J_k), I(J_k), R_{k \text{ min}} \text{ et } R_{k \text{ max}}$

Liste des lettres utilisées
pour les grandeurs non données

Variables générales:

$i_i, j_i, j_{i \text{ max}}, j_{i \text{ min}}, K'_i, K''_i, \eta_i$ 1 indice
 RT_i, RT'_i 1 indice (3 mémoires)

Variables locales:

$a, b, c, d, p, q, r, s, t, u, v, w, x, y, x_{\text{min}}, x_{\text{max}},$
 $y_{\text{min}}, y_{\text{max}}, f, g, h, n, p', q', r', s', t', u', v', x, M, S$ } non indicées

$d_{1,2,\dots,6}, f_{1,2,\dots,9}$ } indice prenant
6 ou 9 valeurs

n_i, g_i, h_i, σ_i 1 indice

Genre RT (3 mémoires)

$(L_1, L_2, L_3), (L'_1, L'_2, L'_3), (A_1, A_2, A_3)$

Genre Rotenberg: (12 mémoires)

$A, B, D, F, P, N, N_0, N_1, N_2, S, S_0$ }
 $z, z_1, z_2, z_3, A', B', C', P', Q', R', S', z'$ }

Indices:

$i, i_0, j, j', k, k', k'', l, I, I'$

Liste des Tests

$x = y$ $x > y$ $x < y$
 $x \neq y$ $x \geq y$ $x \leq y$
 a entier a pair

Tests ordinaires

$S = X$; $S = \text{entier}$; $S = \text{oui}$

Dans le cas où S prend quelques valeurs désignées par des mots

$\xi = 0$

Équivalent à $\sum_{i=1}^n \xi_i = 0$ si ξ_i sont les composantes de ξ

A_i variable

A_i peut représenter soit un nombre soit une variable. Il s'agit de le préciser.

A_i variable muette

Sachant que A_i représente la variable J_k , il s'agit de savoir si $k \leq N_0$, nombre de variables externes.

RT
 $RT \equiv RT'$
 a, b, c triangle
 $a_1, a_2, \dots \equiv b_1, b_2, \dots$

Tests organisés

(Test initial)_i

A pair ; A impair

A_1, A_2, A_3 triangle

$A_1 \neq A_2$; $A_1 = A_2$

où A et A_i sont des combinaisons quelconques de nombres et de variables

Pour chaque Σ_i et pour X_0 , il sera donné au départ une série de tests portant sur des variables ou des combinaisons de variables, suivant la liste ci-dessus. Il constitueront à eux tous le (Test initial)_i. (Test initial)_i pourra être inexistant.

Liste des Maltes

- 1 - SP 0 - Il ne doit pas y avoir de variables muettes dans Π .
- 2 - SP 9 - Bon sens du 3-j non respecté
- 3 - SP 16 - a doit être positif
- 4 - SP 4 - Le facteur de phase de Π doit être réel
- 5 - SP 10 - Bon sens du 6-j non respecté.
- 6 - SP 10 - Le nombre de termes de la somme du 6-j doit être ≥ 1
- 7 - SP 11 - Bon sens du 9-j non respecté
- 8 - SP 5 - On ne doit sommer que des entiers
- 9 - SP 13 - Le nombre traduit doit être rationnel
- 10 - SP 13 - Le nombre traduit doit être entier
- 11 - SP 11 - Le nombre de termes de la somme du 9-j doit être ≥ 1
- 12 - SP 21 - On doit avoir : $a \neq 0$ $b, c, d > 0$
- 13 - Puissance - Les nombres premiers > 31 doivent être à des puissances entières, > 0
- 14 - \odot - On ne peut pas diviser par 0
- 15 - \odot - Les nombres premiers > 31 doivent être à des puissances entières, > 0
- 16 - SP 9 - Les limites sont dépassées dans 3-j
- 17 - SP 10 - Les limites sont dépassées dans 6-j
- 18 - SP 11 - Les limites sont dépassées dans 9-j
- 19 - SP 11 - Les limites sont dépassées dans les 6-j d'un 9-j
- 20 - ! - n doit être ≥ 0

