

N° d'ordre :

THÈSE

présentée à la

Faculté des Sciences d'Orsay

Université de Paris

pour obtenir

Le Grade de Docteur ès Sciences Physiques

par

Yves BORDARIER

Laboratoire : AIME COTTON

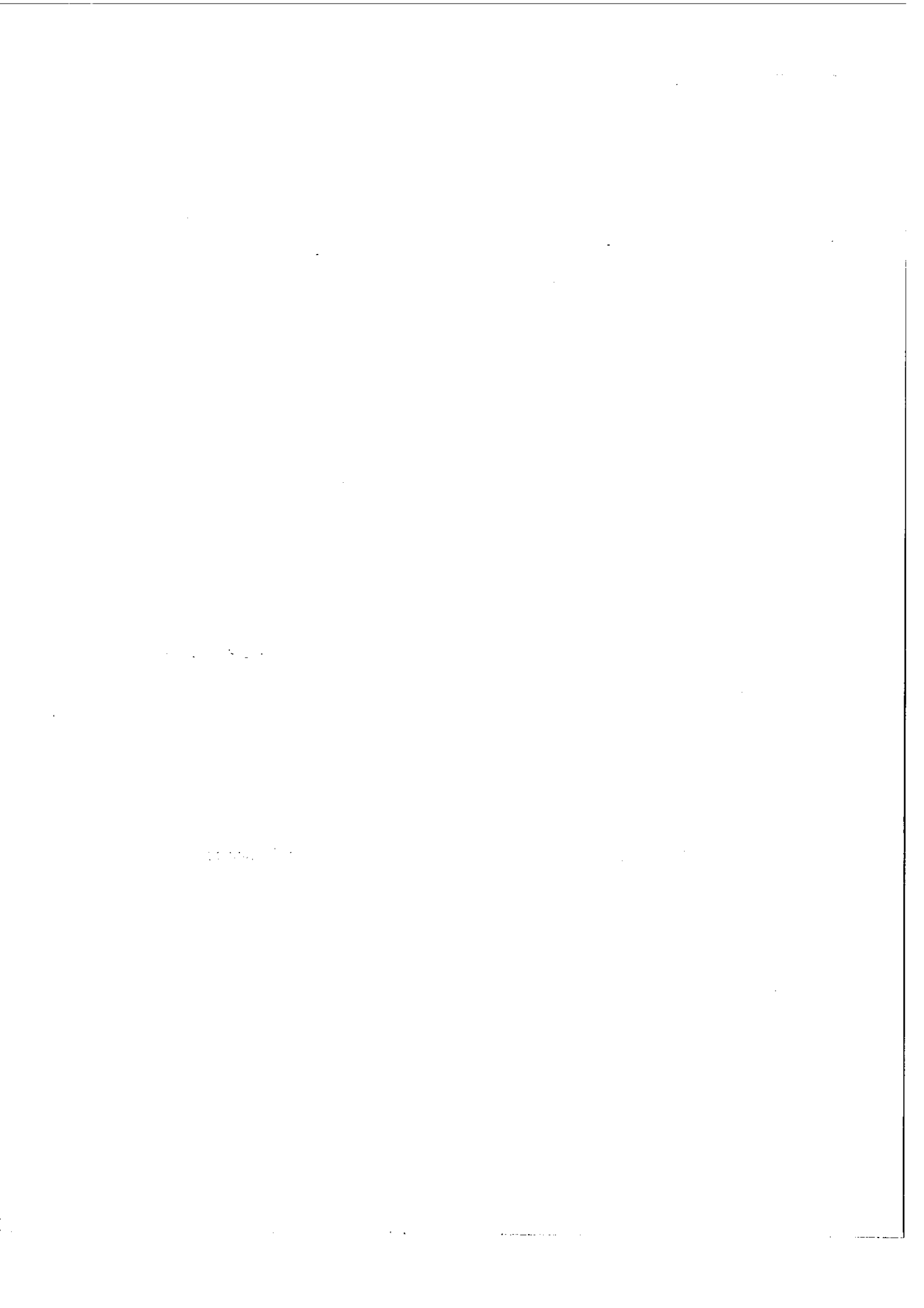
SUJET de la THESE : Contribution à l'emploi de méthodes graphiques en spectroscopie atomique.

Soutenue le 10 Juillet 1970 devant la commission d'examen

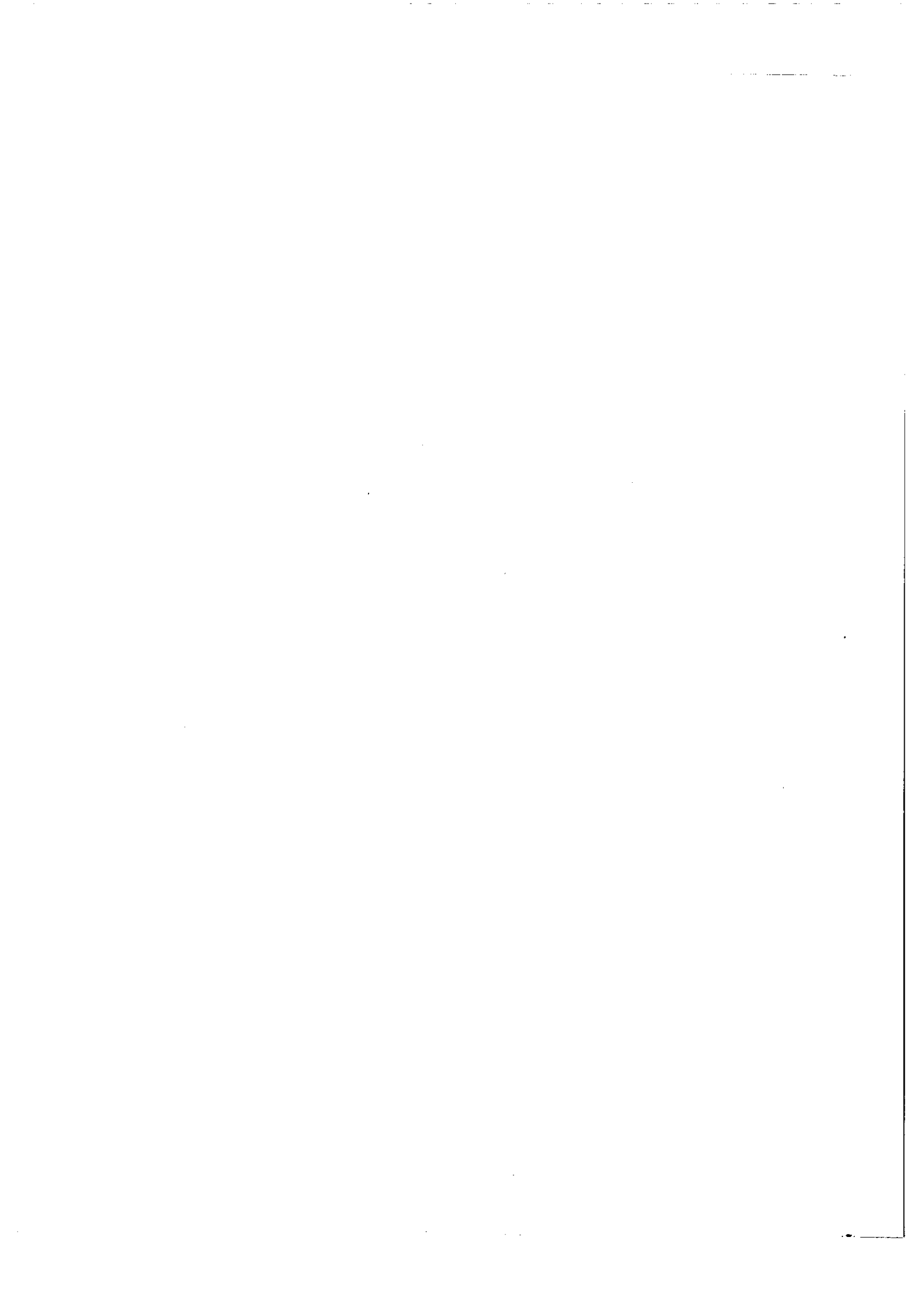
M. P. JACQUINOT.....Président

MM. R. ARVIEU..... }
S. FENEUILLE... }
A.P. JUCYS..... } Examineurs
B.R. JUDD..... }
R. LENNUIER.... }

ORSAY 1970







Ce travail a été effectué au Laboratoire Aimé Cotton au cours des années 1967 - 1970. Je prie Messieurs les Professeurs P. JACQUINOT et R. CHABBAL d'accepter l'expression de mes remerciements pour l'accueil qu'ils m'y ont réservé et pour le constant soutien qu'ils m'ont apporté.

Que Monsieur le Professeur R. LENNUIER, mon parrain au C.N.R.S., veuille trouver ici l'expression de mes sentiments respectueux et reconnaissants.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Monsieur le Professeur B.R. JUDD qui m'a initié à la spectroscopie théorique et m'a toujours encouragé de ses précieux conseils.

Ma reconnaissance va également aux membres du département de Physique théorique de l'Université Hébraïque de Jérusalem, auprès de qui j'ai effectué deux fructueux et stimulants séjours. Je remercie en particulier Y. STEIN pour la discussion qui fut à l'origine de ce travail.

J'aimerais aussi remercier tous mes camarades du Laboratoire et en particulier tous les membres de l'équipe théorique dont les nombreuses remarques et suggestions m'ont aidé à rendre cette méthode plus simple et pratique. Mademoiselle A. CARLIER, dont la collaboration constante, en particulier dans le domaine de la programmation, m'a toujours été d'un grand secours,

S. FENEUILLE, qui m'a apporté, au cours de nombreuses discussions, une aide précieuse dans l'élaboration des principes de la méthode ainsi que Mademoiselle A. CRUBELLIER et M. KIAPISCH ont bien voulu prendre la peine de lire mon manuscrit dont la rédaction définitive doit beaucoup à leurs nombreuses et pertinentes remarques; Mademoiselle A. CRUBELLIER et S. FENEUILLE, aidés par Mesdames O. ROBAUX et N. PELLETIER et Mademoiselle A. CARLIER ont réalisé l'ensemble des graphes de cette thèse. Que tous veuillent bien trouver ici l'expression de ma plus profonde gratitude.

Ce travail n'aurait pu être mené à bien sans les ingénieurs et techniciens du service de calcul de l'UNIVAC 1108 de la Faculté des Sciences d'Orsay. Je les remercie tous vivement de leur aimable coopération.

Je suis reconnaissant à Mesdames TALIB, CATHERINE et COUTOULY pour s'être occupées de taper et d'imprimer ce mémoire avec compétence et célérité.

Enfin, je tiens à remercier Monsieur E. EL-BAZ, Maître de Conférences, pour les critiques et suggestions qu'il a bien voulu me faire à la fin de ce travail.

I - 2 - 2 - 2 - Intégration de chaînes à plusieurs points d'entrée	57
I - 2 - 3 - Quelques applications des règles d'intégration	61
I - 2 - 3 - 1 - Eléments de matrice d'un opérateur élémentaire et de son adjoint	61
I - 2 - 3 - 2 - Intégrations entre opérateurs	65
I - 3 - <u>Algèbre graphique des éléments de matrice et des coefficients de recouplage</u> -	68
I - 3 - 1 - Comparaison avec les premiers graphes de Jucys	69
I - 3 - 1 - 1 - Coefficient $3 - j m$	69
I - 3 - 1 - 2 - Règle de sommation sur un nombre quantique de projection	73
I - 3 - 2 - Règles de simplification des graphes	75
I - 3 - 2 - 1 - Règles de fermeture	77
I - 3 - 2 - 2 - Suppression des branches nulles	81
I - 3 - 2 - 3 - Règles de coupure	85
I - 3 - 3 - Coefficients $3 n - j$	89
I - 4 - <u>Nouveaux graphes de Jucys</u> -	93
I - 4 - 1 - Représentation d'un coefficient de Clebsch-Gordan.....	93
I - 4 - 2 - Sommation sur un nombre quantique de projection	95
I - 4 - 3 - Quelques règles de coupure	97
I - 5 - <u>Conclusion</u> -	99
<u>CHAPITRE II : UTILISATION GRAPHIQUE DE LA SECONDE QUANTIFICATION</u> -	101
II - 1 - <u>Opérateurs annihilation-crédation et relations d'anticommuation</u> -	103

	pages
III - 1 - 4 - 4 - Coupure suivant 4 branches	183
III - 1 - 4 - 5 - Coupure suivant plus de 4 branches	185
III - 2 - <u>Exemples</u> -	191
III - 2 - 1 - Premier exemple	191
III - 2 - 2 - Deuxième exemple	195
III - 2 - 3 - Troisième exemple	203
III - 3 - <u>Structure graphique en couplage LS</u> -	215
III - 4 - <u>Conclusion</u> -	224
<u>CHAPITRE IV - PROGRAMME "SUPRAC" D'ETABLISSEMENT AUTOMATIQUE DES FORMULES</u> - .	225
IV - 1 - <u>Conception et organisation générale du programme</u> -	226
IV - 1 - 1 - Description et organigramme général	226
IV - 1 - 2 - Codage des graphes en mémoire	235
IV - 1 - 3 - Codage d'une formule en mémoire	240
IV - 2 - <u>Description de quelques sous-programmes</u> -	242
IV - 2 - 1 - Programme principal	243
IV - 2 - 2 - Sous-programme CØUPUR	252
IV - 2 - 3 - Sous-programme FØRMUL	259
IV - 2 - 4 - Petits sous-programmes	262
IV - 2 - 5 - Sous-programme LECCAR	264
IV - 3 - <u>Ecriture et présentation du programme</u> -	268
IV - 4 - <u>Conclusion</u> -	270
CONCLUSION	273
BIBLIOGRAPHIE	276

INTRODUCTION

Depuis CONDON et SHORTLEY ¹⁾ et RACAH ²⁾, l'algèbre des moments angulaires et des opérateurs tensoriels joue un grand rôle dans le calcul des spectres atomiques. Or son emploi amène souvent à des calculs longs et compliqués; par exemple, il n'est pas rare de rencontrer des sommations sur des produits de "coefficients $3n-j$ " dont la simplification demande beaucoup d'habileté et d'expérience.

Depuis quelques années, plusieurs auteurs ont cherché à simplifier ces calculs par l'introduction de méthodes graphiques. En 1960, JUCYS et coll. ³⁾ firent paraître un ouvrage, traduit en anglais en 1962, sur la théorie graphique des moments angulaires; en prenant pour base le diagramme représentant un coefficient $3-jm$ de Wigner, ces auteurs montrèrent qu'on peut représenter graphiquement un coefficient de recouplage quelconque et calculer ainsi sa valeur de façon beaucoup plus simple qu'analytiquement; ils développèrent en même temps une théorie très complète des coefficients $3n-j$, $3n-jm$, etc... et de leurs graphes. A peu près en même temps, JUDD ⁴⁾ préconisait l'emploi de graphes semblables pour la simplification des formules obtenues analytiquement.

Malheureusement ces graphes n'étaient pas reliés directement aux éléments de matrice des opérateurs tensoriels utilisés couramment dans les calculs; pour le faire, il fallait par exemple employer la formule de FANO et coll. ⁵⁾ exprimant l'élément de matrice d'un produit d'opérateurs tensoriels sous la forme d'un coefficient de recouplage. Mais cette méthode mi-analytique, mi-graphique n'était d'un emploi ni commode ni général.

C'est ce que remarquèrent à la fois JUCYS et coll. ⁶⁾ et EL BAZ ⁷⁾. Ces auteurs développèrent indépendamment deux systèmes graphiques, étroitement

reliés aux premiers graphes de JUCYS et basés tous les deux sur la représentation du coefficient de Clebsch - Gordan. Le progrès important réalisé par ces deux systèmes est de pouvoir représenter le bra, le ket et l'opérateur d'un élément de matrice séparément et de savoir les réunir en un seul graphe calculable par les méthodes précédentes.

Cependant ces méthodes présentaient encore quelques difficultés d'emploi en spectroscopie atomique, notamment pour la représentation des fonctions d'onde antisymétriques et de certains opérateurs tensoriels. C'est ce que nous avons cherché à améliorer.

Notre but fut double. Nous avons d'abord voulu faire progresser l'aspect formel de la méthode. Nous avons ensuite voulu développer l'aspect pratique de son utilisation.

Formellement nous sommes partis des idées d'EL-BAZ. Dans un premier temps nous avons cherché à les généraliser à différents domaines particulièrement importants en spectroscopie atomique: la distinction du spin et de l'orbite d'un même électron ; la représentation graphique de l'antisymétrie des fonctions d'onde ; enfin la représentation de certains opérateurs plus faciles à utiliser que ceux définis par EL-BAZ. Ces modifications nous ont finalement amenés à construire un système graphique cohérent, bien adapté au calcul des spectres atomiques complexes. Dans un second temps, nous avons justifié les principes de base de notre méthode, à l'aide de la théorie de la seconde quantification dont les aspects atomiques ont été développés par JUDD ⁸⁾. Ceci nous a permis de représenter graphiquement les opérateurs annihilation-création et les coefficients de parenté fractionnelle et d'allier ainsi les avantages de la seconde quantification à ceux de la méthode graphique. La première ramène à des relations entre opérateurs les problèmes des fonctions d'onde et en particulier ceux de l'antisymétrie; la seconde supprime tous les problèmes de recouplage.

Les règles définies dans le premier temps de notre travail suffisaient pour décrire une méthode pratique de calcul des éléments de matrice des opérateurs tensoriels. C'est pourquoi nous avons commencé par décrire, en vue de leur utilisation immédiate, les diverses étapes pratiques du calcul d'un élément de matrice: représentation du bra, du ket et de l'opérateur, intégration, fermeture du graphe, suppression des triangles, coupures, en insistant cette fois sur les simplifications possibles et les procédés utilisables dans les cas concrets rencontrés dans les calculs. Dans cette partie nous avons longuement utilisé les travaux de JUCYS et coll. ⁹⁾ sur la résolution des coefficients $3n-j$ de rang élevé. Cependant, dans les cas complexes, cette méthode reste encore longue et source d'erreurs. Aussi une part importante de ce travail a consisté à écrire et mettre au point le programme "SUPRAC" qui permet d'établir automatiquement la formule correspondant à un élément de matrice quelconque écrit sous sa forme mathématique habituelle. Ce programme, qui sera décrit brièvement ici, utilise la méthode graphique que nous avons mise au point.

Ce travail se divise donc en deux parties de deux chapitres chacune. Dans la première partie, nous développons l'aspect formel de la méthode, alors que dans la seconde, nous nous intéressons à l'utilisation pratique des graphes.

- dans le premier chapitre, nous décrivons la généralisation de la méthode d'EL-BAZ qui a permis son utilisation pratique.

- dans le deuxième chapitre, nous montrons que l'utilisation de la seconde quantification permet la justification et l'extension de la méthode précédente.

- dans le troisième chapitre, nous donnons la méthode pratique de calcul d'un élément de matrice.

- dans le quatrième chapitre, nous décrivons brièvement le programme "SUPRAC".

Pour la clarté de l'exposé, les graphes (hors-textes) et les formules ont été numérotés successivement par le numéro du chapitre en chiffres romains, le numéro du paragraphe et le numéro du graphe ou de la formule dans le paragraphe. Pour simplifier, la référence à un graphe ou à une formule du paragraphe où l'on se trouve, ne porte que ce dernier numéro.

PREMIERE PARTIE

ETUDE FORMELLE DE LA METHODE

Cette partie comprend deux chapitres :

Chapitre I : Principes de la méthode

Chapitre II : Utilisation graphique de la seconde quantification

1. The first part of the document is a letter from the author to the editor.

2.

3.

4. The second part of the document is a letter from the editor to the author.

5. The third part of the document is a letter from the author to the editor.

6. The fourth part of the document is a letter from the editor to the author.

CHAPITRE I

PRINCIPES DE LA METHODE

Le formalisme que nous allons décrire dans ce chapitre comprend trois parties.

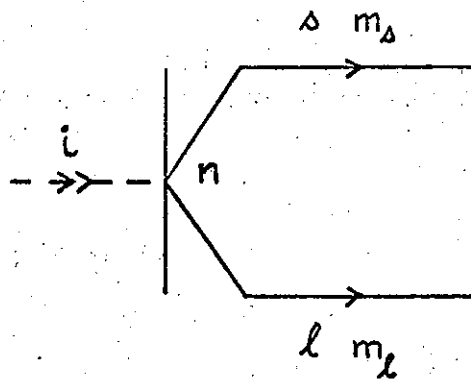
La première concerne la représentation graphique des différentes parties d'un élément de matrice:

- la représentation de bra et de ket numérotés, pour laquelle nous nous sommes fortement inspirés d'EL-BAZ ⁷⁾;
- la représentation de bra et de ket antisymétriques;
- la représentation des opérateurs, qui diffère de celle adoptée par EL-BAZ.

La seconde partie concerne les règles d'intégration, c'est-à-dire de réunion de graphes représentant des fonctions bra ou ket ou des opérateurs en un seul graphe représentant un nombre.

Enfin la troisième partie concerne l'algèbre des graphes ainsi obtenus. Cette algèbre a été essentiellement élaborée par JUCYS et coll. ³⁾. En effet, des modifications simples indiquées par EL-BAZ ⁷⁾ permettent de transformer les graphes obtenus par intégration en graphes de JUCYS, plus symétriques et plus faciles à manier, qui finalement s'expriment à l'aide des coefficients $3n-j$.

A titre de comparaison, nous décrivons ensuite rapidement le nouveau formalisme décrit par JUCYS et coll. ⁶⁾.



$$G_{I-1}^1$$

I - 1 - REPRESENTATION DES DIFFERENTES PARTIES D'UN ELEMENT DE MATRICE -

Ce paragraphe comprend trois parties :

- la représentation des fonctions numérotées.
- la représentation des fonctions antisymétriques.
- la représentation des opérateurs.

I - 1 - 1 - Représentation des bra et ket numérotés :

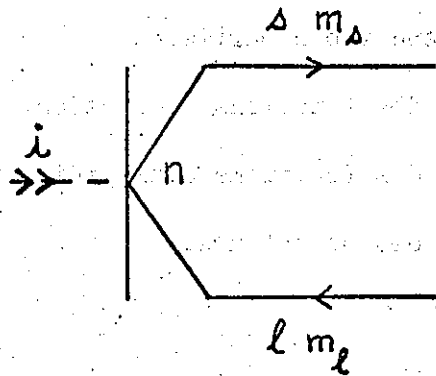
Dans une fonction "numérotée", chaque électron, caractérisé par ses coordonnées d'espace et de spin, elles-mêmes symbolisées dans l'écriture par un numéro, possède des nombres quantiques n et l bien déterminés. Ainsi les ket:

$$|(5d_1, 6p_2) S L M_S M_L) \text{ et } |(5d_2, 6p_1) S L M_S M_L)$$

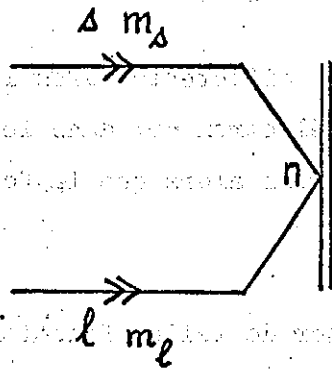
sont deux ket numérotés différents: dans le premier, l'électron 1 est un électron 5d et l'électron 2 un électron 6p; dans le second, il y a eu échange des coordonnées des deux électrons alors que la fonction est restée formellement la même.

Pour représenter de telles fonctions, nous avons utilisé les graphes définis par EL-BAZ ⁷⁾ auxquels nous avons ajouté quelques détails :

- la réunion des branches de spin et d'orbite d'un même électron,
- la précision de certaines règles de sommation sur un nombre quantique magnétique m ,
- enfin l'adjonction d'un double tiret sur l'extrémité covariante des branches liées.



$$G_{I-1}^2$$



$$G_{I-1}^3$$

I - 1 - 1 - 1 - Représentation d'un bra ou d'un ket élémentaire :

Un ket élémentaire est défini par 5 nombres quantiques: n, s, ℓ, m_s, m_ℓ dont le spin s est toujours égal à $1/2$. Il correspond d'autre part aux coordonnées d'un électron déterminé par son numéro i .

Analytiquement il s'écrit :

$$| \psi_i \rangle = | n_i s_i \ell_i m_{si} m_{\ell i} \rangle$$

Graphiquement nous le représentons par le graphe G^1 . Ce graphe est divisé en deux parties par un trait vertical. A gauche se trouve une ligne pointillée représentant les coordonnées de l'électron i qui porte une double flèche rentrante. A droite se trouvent deux lignes continues représentant les deux moments angulaires s et ℓ . Ces deux lignes ou "branches" ont chacune une extrémité libre; cela caractérise le fait que les nombres quantiques de projection m_s et m_ℓ apparaissent explicitement dans le ket. Si, analytiquement, les nombres quantiques m_s et m_ℓ apparaissent précédés d'un signe moins, les flèches qui sont sortantes dans G^1 deviennent rentrantes; par exemple :

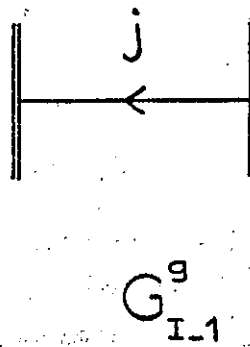
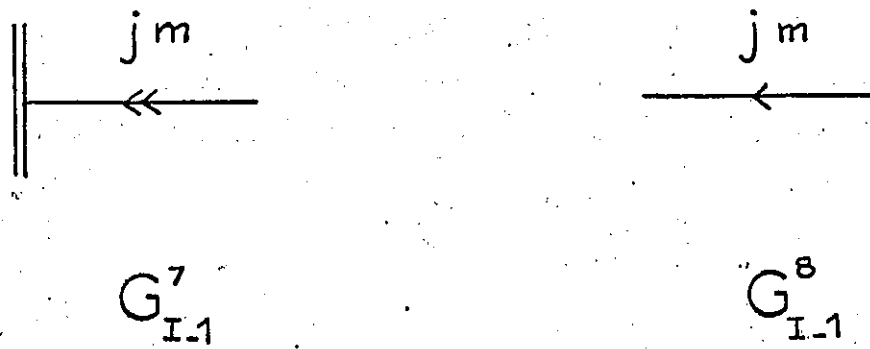
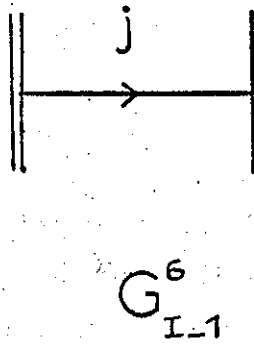
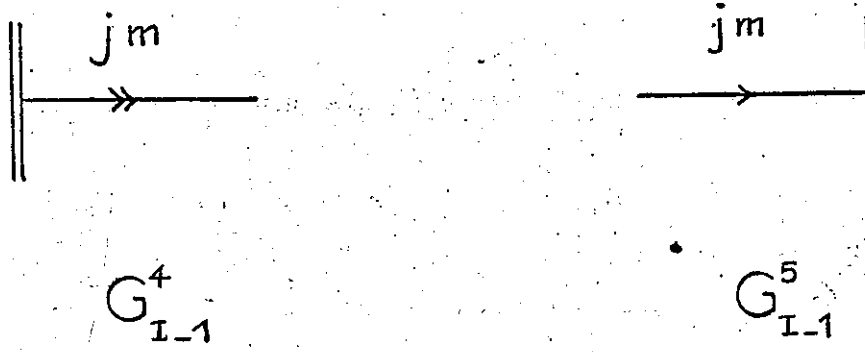
$$| n_i s_i \ell_i m_{si} - m_{\ell i} \rangle = G^2 \quad (I - 1 - 1)$$

Dans tous les cas, les branches d'un ket portent des flèches simples.

Le vecteur bra, conjugué du ket ψ_i , s'écrit :

$$\langle \psi_i | = \langle n_i s_i \ell_i m_{si} m_{\ell i} |$$

Nous le représentons par le graphe G^3 . La correspondance avec le graphe G^1 est immédiate. On remarque encore les deux parties séparées maintenant par un double trait vertical, caractéristique du bra. Pour le reste les flèches simples sont devenues doubles, les flèches sortantes sont devenues rentrantes et réciproquement.



Le changement de sens d'une flèche sur une branche libre correspond, comme dans le ket, à l'apparition d'un signe moins devant le nombre quantique de projection correspondant.

Il faut noter que tous les graphes que nous rencontrerons dans ce travail sont des graphes déformables. Cela signifie que l'on peut modifier leur forme et leur orientation dans le plan de la figure de façon quelconque, à condition toutefois de ne pas changer l'ordre dans lequel les branches se rencontrent aux noeuds du graphe. En particulier, les traits qui sont verticaux dans les graphes G^1 , G^2 , G^3 ne le sont pas nécessairement et nous ne les avons appelés ainsi que pour la clarté de l'exposé.

I - 1 - 1 - 2 - Sommation sur un nombre quantique de projection m :

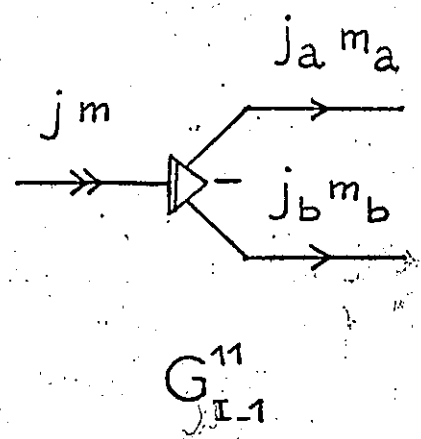
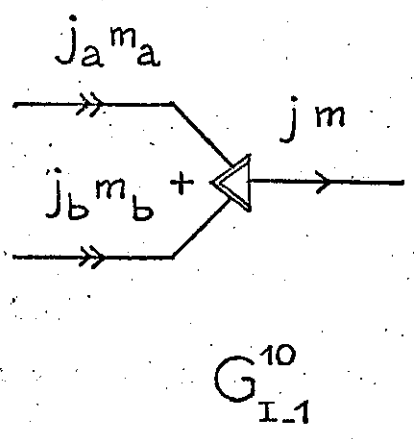
Nous avons dit qu'une branche dont une extrémité est libre représente l'ensemble d'un moment angulaire et de sa projection. La sommation sur un nombre quantique m va donc consister à relier deux branches libres entre elles.

Plus précisément on relie toujours une flèche sortante avec une flèche rentrante et une flèche simple avec une flèche double. Il se présente alors deux possibilités résumées dans les équations suivantes :

$$\sum_m G^4 G^5 = G^6 \quad (I - 1 - 2)$$

$$\text{et } \sum_m G^7 G^8 = (-)^{2j} G^9 \quad (I - 1 - 3)$$

où les tirets qui terminent dans certains cas la branche j signifient qu'elle est liée par là à un graphe plus important; nous avons vu au paragraphe précédent un premier exemple de tels tirets. On remarque d'autre part qu'une branche liée porte toujours une flèche simple.



Les premiers membres des équations (2) et (3) diffèrent seulement par le signe de m , indice muet, et sont donc égaux. On en tire la relation très importante du changement de sens d'une flèche liée :

$$G^6 = (-)^{2j} G^9 \quad (I - 1 - 4)$$

Voyons maintenant le deuxième élément de base de la méthode : le coefficient de Clebsch - Gordan.

I - 1 - 1 - 3 - Coefficients de Clebsch - Gordan :

Le coefficient de Clebsch - Gordan ou coefficient de couplage de deux moments angulaires a deux formes analytiques équivalentes :

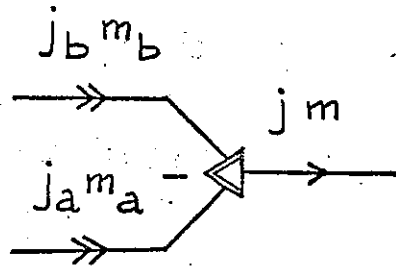
$$(j_a m_a, j_b m_b | j m) \quad \text{et} \quad (j m | j_a m_a, j_b m_b)$$

Il dépend de trois moments angulaires et de leurs projections; dans la première forme, deux d'entre eux apparaissent dans le bra et un dans le ket; dans la seconde forme, au contraire, deux apparaissent dans le ket et un dans le bra.

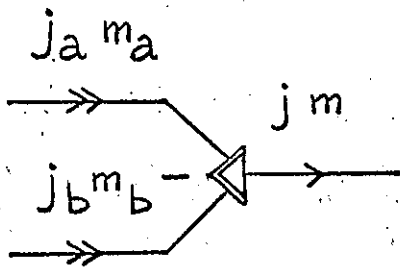
Graphiquement, on peut donc s'attendre à ce qu'il soit représenté par trois branches libres, correspondant aux trois moments angulaires et à leurs projections, les branches "bra" portant une double flèche rentrante et les branches "ket" portant une simple flèche sortante.

C'est ce qui apparait sur les graphes G^{10} et G^{11} qui représentent les deux coefficients de Clebsch - Gordan :

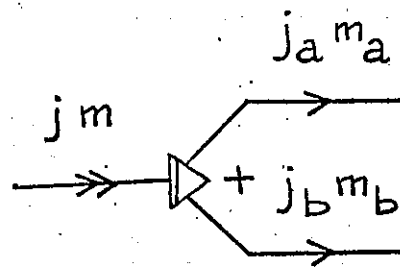
$$(j_a m_a, j_b m_b | j m) = G^{10} \quad (I - 1 - 5)$$



$G_{I.1}^{12}$



$G_{I.1}^{13}$



$G_{I.1}^{14}$

$$(j_m | j_a m_a, j_b m_b) = G^{11} \quad (\text{I} - 1 - 6)$$

dans lesquels nous voyons les trois branches attendues réunies en un noeud triangulaire; chaque côté du triangle reproduit un simple ou un double tiret suivant que la branche correspondante est "ket" ou "bra". En outre le noeud est accompagné d'un signe qui indique le sens de lecture des moments angulaires, par rapport au sens trigonométrique. On peut donc changer à la fois le signe du noeud et l'ordre des branches:

$$G^{10} = G^{12} \quad (\text{I} - 1 - 7)$$

Lorsqu'on change l'ordre des moments angulaires j_a et j_b , on introduit un facteur de phase :

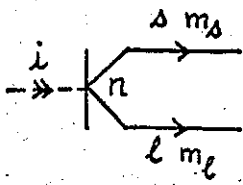
$$(j_b m_b, j_a m_a | j m) = (-)^{j_a + j_b - j} (j_a m_a, j_b m_b | j m) \quad (\text{I} - 1 - 8)$$

Graphiquement ceci correspond au changement de signe d'un noeud triangulaire :

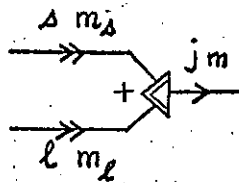
$$G^{13} = (-)^{j_a + j_b - j} G^{10} \quad (\text{I} - 1 - 9)$$

$$G^{14} = (-)^{j_a + j_b - j} G^{11} \quad (\text{I} - 1 - 9)$$

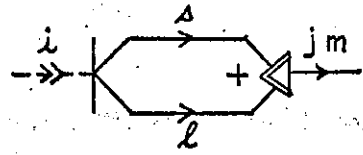
En utilisant la règle de sommation sur m , nous sommes maintenant en mesure de représenter une fonction d'onde couplée.



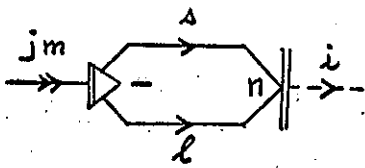
G_{I-1}^{15}



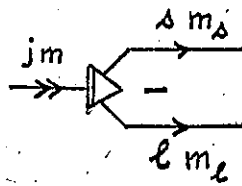
G_{I-1}^{16}



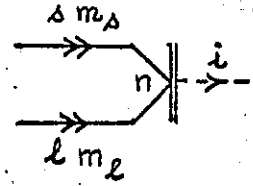
G_{I-1}^{17}



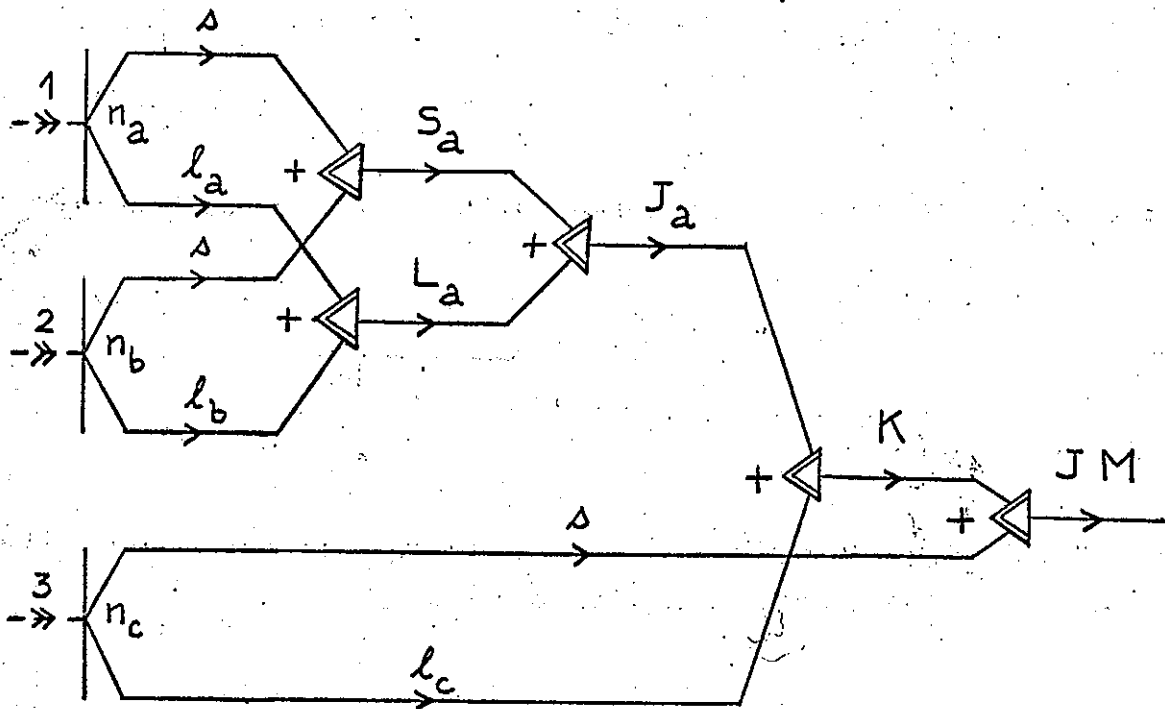
G_{I-1}^{18}



G_{I-1}^{19}



G_{I-1}^{20}



G_{I-1}^{21}

I - 1 - 1 - 4 - Couplage de deux moments angulaires :

Une fonction d'onde couplée peut se développer sur une base de fonctions d'onde non couplées à l'aide des coefficients de Clebsch - Gordan. Par exemple :

$$|n_i s_i \ell_i j_i m_i\rangle = \sum_{m_s m_\ell} |n_i s_i \ell_i m_{s_i} m_{\ell_i}\rangle (s m_s \ell m_\ell | j m) \quad (\text{I - 1 - 10})$$

Nous savons représenter les deux facteurs qui apparaissent dans le second membre de l'équation (10) : ce sont les graphes G^{15} et G^{16} . La sommation sur m_s et m_ℓ s'effectue en reliant les branches correspondantes et on obtient finalement :

$$G^{17} = \sum_{m_s m_\ell} G^{15} G^{16} \quad (\text{I - 1 - 11})$$

De la même manière, on peut écrire pour le bra :

$$G^{18} = \sum_{m_s m_\ell} G^{19} G^{20} \quad (\text{I - 1 - 12})$$

Ces règles se généralisent aisément au couplage d'un nombre quelconque de moments angulaires. Prenons pour exemple un ket à trois électrons, couplés en $(J\ell)K$:

$$|[(s_1 \ell_{a_1}, s_2 \ell_{b_2}) S_a L_a J_a, \ell_{c_3}] K, s_3, J, M\rangle = G^{21} \quad (\text{I - 1 - 13})$$

(les nombres quantiques principaux n_a, n_b, n_c sont implicites).

Nous venons de voir comment représenter des bra ou des ket dont tous les électrons sont numérotés et qui n'ont aucun électron équivalent. Nous allons maintenant voir comment représenter des bra ou des ket antisymétriques, avec ou sans électrons équivalents.

I - 1 - 2 - Représentation des bra et ket antisymétriques :

D'après le principe d'indiscernabilité, les fonctions d'onde qui décrivent un système électronique doivent être antisymétriques par rapport à l'échange des coordonnées de deux électrons quelconques. Elles s'obtiennent comme des combinaisons linéaires de fonctions numérotées.

Nous allons examiner successivement le cas des fonctions d'onde antisymétriques d'électrons non équivalents puis des fonctions d'onde où apparaissent des groupes d'électrons équivalents.

I - 1 - 2 - 1 - Fonctions d'onde antisymétriques d'électrons non équivalents :

Considérons un ket de 3 électrons non équivalents $(nl)_a$, $(nl)_b$, $(nl)_c$ couplés de façon quelconque, et numérotés respectivement 1, 2 et 3. Ecrivons le, par convention :

$$| 1,2,3 | a,b,c,\tau) \quad (I - 1 - 14)$$

où τ représente les nombres quantiques qui définissent le couplage des 3 électrons. Considérons maintenant le ket antisymétrique des mêmes électrons dans le même couplage. Ecrivons le :

$$| 123 | a,b,c,\tau) \quad (I - 1 - 15)$$

La définition de l'antisymétrie s'exprime par :

$$|123| a,b,c,\tau) = -|213| a,b,c,\tau) = |231| a,b,c,\tau) \quad (\text{I} - 1 - 16)$$

Ces fonctions peuvent s'écrire comme une somme de fonctions totalement numérotées précédées du signe + ou - ; un coefficient de normalisation $1/\sqrt{N}$ s'introduit, où N est le nombre de termes de la somme :

$$|123| a,b,c,\tau) = \frac{1}{\sqrt{6}} [|1,2,3| a,b,c,\tau) - |1,3,2| a,b,c,\tau) \\ - |2,1,3| a,b,c,\tau) + \dots] \quad (\text{I} - 1 - 17)$$

Mais on peut définir des fonctions intermédiaires, partiellement antisymétriques. Par exemple :

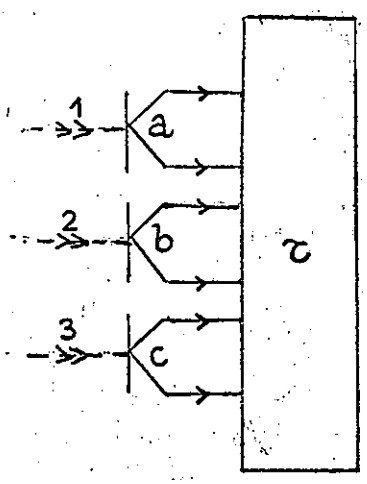
$$|1,23| a,b,c,\tau) = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1,2,3| a,b,c,\tau) - |1,3,2| a,b,c,\tau)] \\ (\text{I} - 1 - 18)$$

Ceci permet d'écrire :

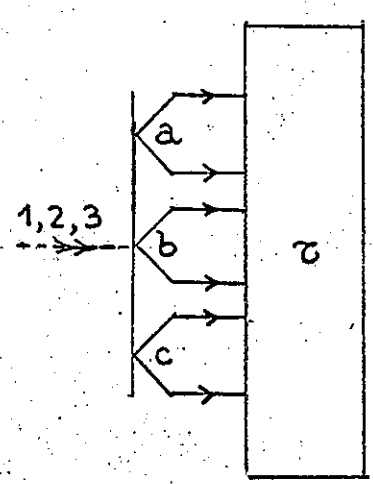
$$|123| a,b,c,\tau) = \frac{1}{\sqrt{3}} [|1,23| a,b,c,\tau) - |2,13| a,b,c,\tau) \\ + |3,12| a,b,c,\tau)] \quad (\text{I} - 1 - 19)$$

La représentation graphique reproduit fidèlement l'écriture ci-dessus où les numéros des électrons sont séparés des moments angulaires; mais elle va permettre de représenter facilement des cas beaucoup plus compliqués.

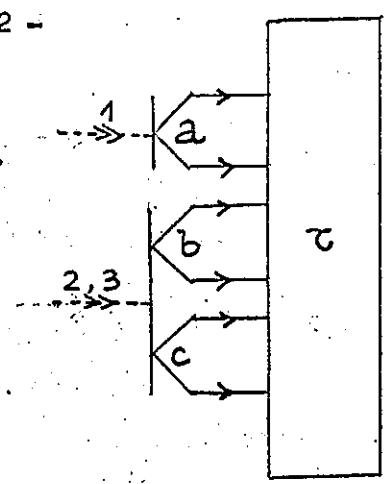
Le ket numéroté (14) se représente par le graphe G^{22} où tout le couplage est représenté par la boîte τ . Nous appellerons "points d'entrée" du graphe les



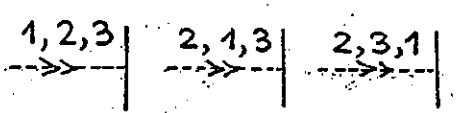
G_{I-1}^{22}



G_{I-1}^{23}



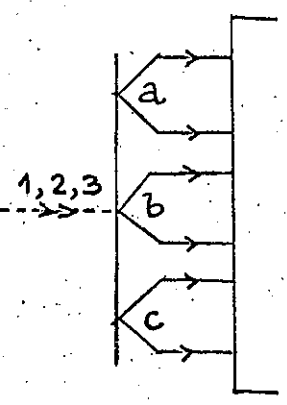
G_{I-1}^{24}



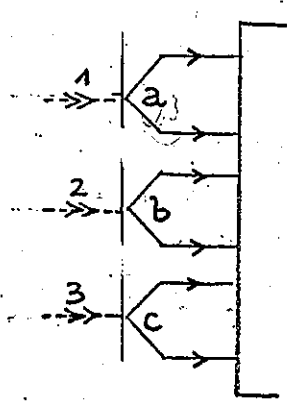
G_{I-1}^{25}

G_{I-1}^{26}

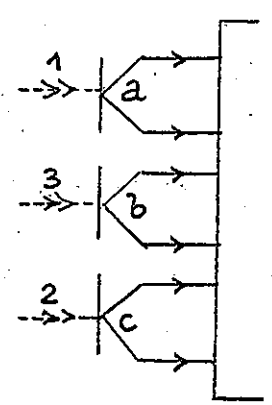
G_{I-1}^{27}



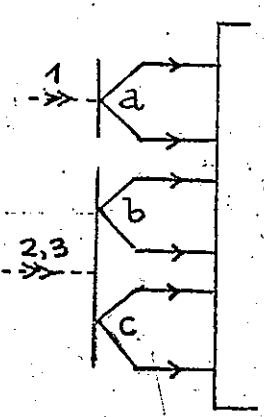
G_{I-1}^{28}



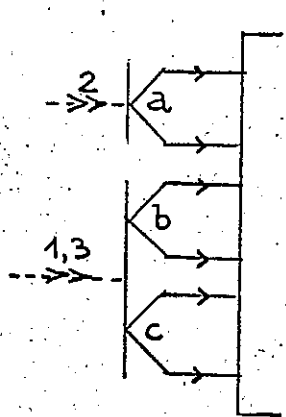
G_{I-1}^{29}



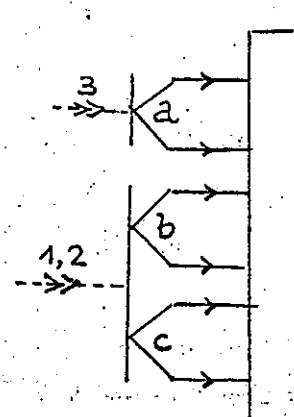
G_{I-1}^{30}



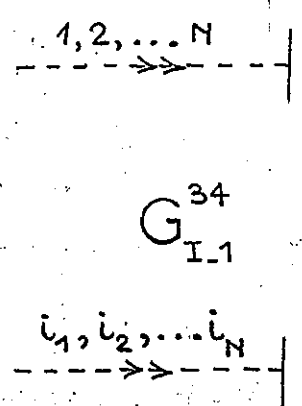
G_{I-1}^{31}



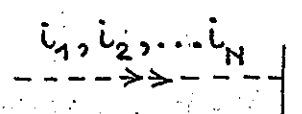
G_{I-1}^{32}



G_{I-1}^{33}



G_{I-1}^{34}



G_{I-1}^{35}

points d'où partent les branches correspondant à chaque électron: ici il y a 3 points d'entrée. Par convention nous représentons l'antisymétrie d'un ket en reliant les tirets de ses différents points d'entrée en une seule "chaîne". A cette chaîne n'aboutit qu'une ligne pointillée qui porte les numéros des électrons dans un ordre déterminé. Le ket antisymétrique (15) se représente donc par le graphe G^{23} . On remarque que l'ordre des points d'entrée dans une chaîne a une signification; il doit être repéré, en principe, par rapport au sens de la ligne pointillée; en pratique l'ordre sera toujours de haut en bas si le tiret de la chaîne est vertical. La fonction partiellement numérotée (18) se représente simplement par le graphe G^{24} .

Finalement, les relations d'antisymétrie peuvent se représenter seulement à l'aide des lignes pointillées et des chaînes. Par exemple, la relation (16) s'écrit :

$$G^{25} = -G^{26} = G^{27} \quad (\text{I} - 1 - 20)$$

La relation (17) s'écrit :

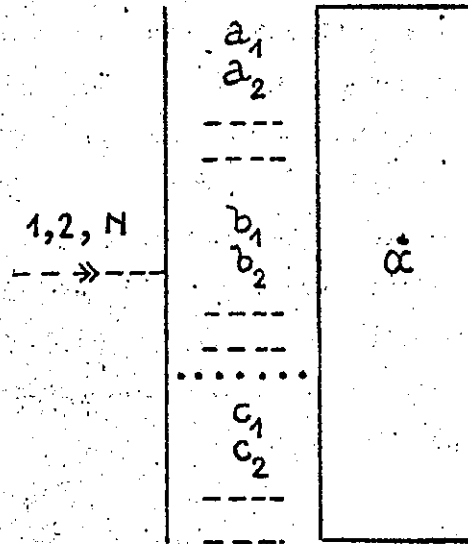
$$G^{28} = \frac{1}{\sqrt{6}} (G^{29} - G^{30} + \dots) \quad (\text{I} - 1 - 21)$$

La relation (18) se représenterait d'une manière analogue et la relation (19) s'écrit :

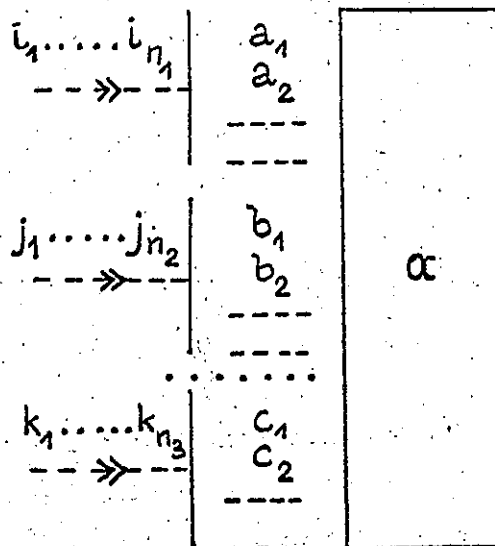
$$G^{28} = \frac{1}{\sqrt{3}} (G^{31} - G^{32} + G^{33}) \quad (\text{I} - 1 - 22)$$

Ces relations se généralisent facilement à des fonctions ayant un nombre quelconque de points d'entrée. L'échange des électrons dans une chaîne, qui généralise l'équation (20), s'exprime par :

$$G^{34} = (-)^{p_i} G^{35} \quad (\text{I} - 1 - 23)$$



G_{I-1}^{36}



G_{I-1}^{37}

où p_i est la parité de la permutation P_i :

$$P_i = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ i_1 & i_2 & \dots & i_N \end{pmatrix}$$

Pour généraliser les équations (21) et (22), considérons un ket à N électrons possédant, dans l'ordre, les points d'entrée $a_1, a_2, \dots, b_1, b_2, \dots, c_1, c_2, \dots$; supposons que les points d'entrée a_i totalisent n_1 électrons, que les points d'entrée b_i totalisent n_2 électrons, ... que les points d'entrée c_i totalisent n_k électrons et représentons ce ket par le graphe G^{36} où α symbolise le couplage des moments angulaires. Nous pouvons alors écrire l'équation tout à fait générale :

$$G^{36} = \left(C_{n_1, n_2, \dots, n_k}^N \right)^{-\frac{1}{2}} \sum_{\ell} (-)^{p_{\ell}} G^{37} \quad (\text{I - 1 - 24})$$

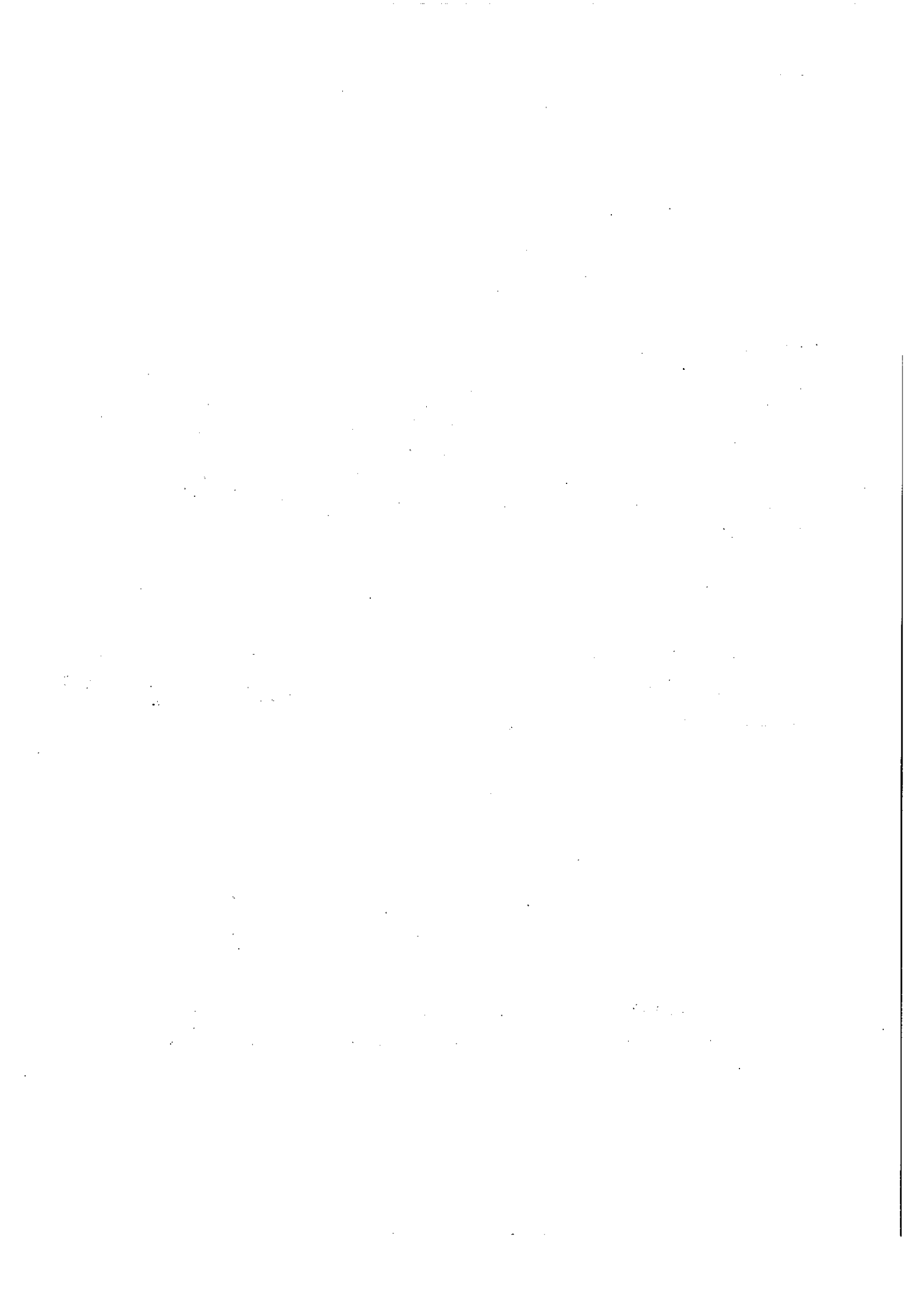
où la somme porte sur toutes les combinaisons de N objets en paquets de n_1, n_2, \dots, n_k objets. $C_{n_1, n_2, \dots, n_k}^N$, coefficient du binôme généralisé, est égal au nombre de termes de la somme; il est donné par la formule :

$$C_{n_1, n_2, \dots, n_k}^N = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k!} \quad (\text{I - 1 - 25})$$

p_{ℓ} est la parité de la permutation P_{ℓ} :

$$P_{\ell} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & N \\ i_1 & i_2 & \dots & i_{n_1} & j_1 & j_2 & \dots & j_{n_2} & \dots & k_1 & k_2 & \dots & k_{n_k} \end{pmatrix}$$

Tout ce que nous venons de dire pour les ket peut se répéter pour les bra; la seule différence est graphique: les lignes pointillées portent une flèche simple, sortante.



Les points d'entrée que nous avons utilisés jusqu'ici ne correspondaient qu'à un seul électron; pour traiter les groupes d'électrons équivalents, nous allons maintenant en définir d'autres mais les relations que nous venons d'établir resteront vraies pour tous les points d'entrée.

I - 1 - 2 - 2 - Fonctions d'onde d'électrons équivalents :

Une fonction d'onde antisymétrique d'électrons équivalents ne s'exprime pas, en général, comme une somme de fonctions numérotées précédées d'un signe + ou - où toutes les permutations possibles apparaissent, comme dans l'équation (17). Par exemple, un état antisymétrique de la configuration ℓ^2 s'écrit ¹⁰⁾:

$$| \ell^2 S L M_S M_L \rangle = | \ell_1 \ell_2 S L M_S M_L \rangle \quad (\text{I - 1 - 26})$$

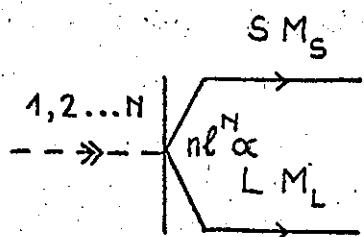
l'antisymétrie étant respectée grâce à la condition :

$$S + L \text{ pair} \quad (\text{I - 1 - 27})$$

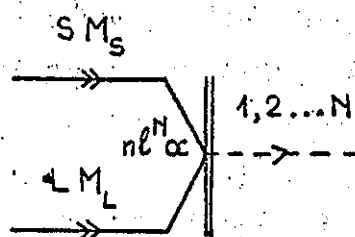
RACAH ^{2,10)} a montré que les états antisymétriques de la configuration ℓ^N s'expriment en fonction de ceux de la configuration ℓ^{N-1} grâce aux coefficients de parenté fractionnelle (cpf) :

$$| \ell^N \alpha S L M_S M_L \rangle = \sum_{\bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}} (\ell^{N-1} \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L} + \ell | \ell^N \alpha S L) | (\ell^{N-1} \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}, \ell) S L M_S M_L \rangle \quad (\text{I - 1 - 28})$$

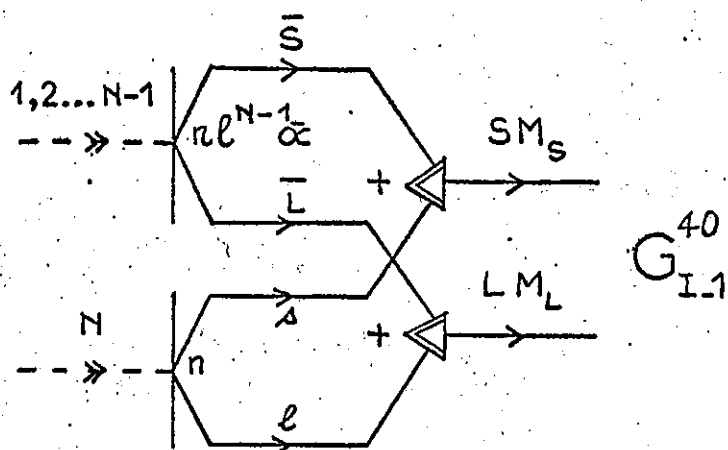
où α et $\bar{\alpha}$ distinguent les états de ℓ^N et ℓ^{N-1} ayant un même jeu de nombres quantiques SL ou $\bar{S}\bar{L}$. Plus généralement, un état de ℓ^N peut se décomposer sur des états de ℓ^{N-p} et de ℓ^p :



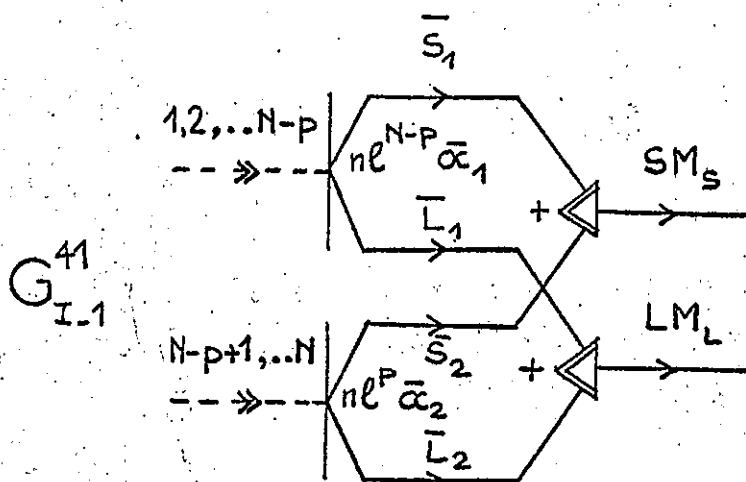
G_{I-1}^{38}



G_{I-1}^{39}



G_{I-1}^{40}



G_{I-1}^{41}

$$| \ell^N \alpha S L M_S M_L) = \sum_{\substack{\bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2}} (\ell^{N-p} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 + \ell^p \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2 |) \ell^N \alpha S L) \\ \times | (\ell^{N-p} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1, \ell^p \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2) S L M_S M_L)$$

(I - 1 - 29)

Graphiquement nous représentons un état antisymétrique de la configuration ℓ^N par un graphe à un seul point d'entrée, ayant deux branches correspondant aux moments angulaires S et L :

$$| n \ell^N \alpha S L M_S M_L) = G^{38} \quad (\text{I} - 1 - 30)$$

$$\text{et } (n \ell^N \alpha S L M_S M_L | = G^{39} \quad (\text{I} - 1 - 31)$$

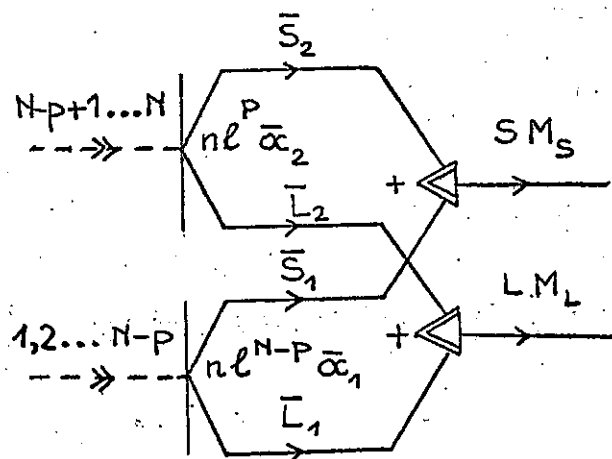
Dans ces graphes, la ligne pointillée est bien celle d'une fonction antisymétrique à N électrons.

Pour numéroter ces fonctions on emploie les relations (28) ou (29) qui s'écrivent graphiquement :

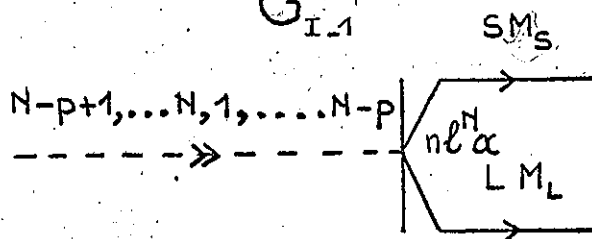
$$G^{38} = \sum_{\bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}} (\ell^{N-1} \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L} + \ell |) \ell^N \alpha S L) G^{40} \quad (\text{I} - 1 - 32)$$

$$G^{38} = \sum_{\substack{\bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2}} (\ell^{N-p} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 + \ell^p \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2 |) \ell^N \alpha S L) G^{41}$$

(I - 1 - 33)



G_{I-1}^{42}



G_{I-1}^{43}

De l'équation (33) nous allons tirer une relation entre cpf où l'ordre des configurations parentes ℓ^{N-p} et ℓ^p est changé. En effet, en vertu de (I - 1 - 9) qui permet de changer le sens d'un noeud triangulaire ou l'ordre de ses branches, le second membre de (33) se transforme et on a :

$$G^{38} = \sum_{\substack{\bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2}} (\ell^{N-p} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 + \ell^p \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2 \mid \ell^N \alpha S L) (-)^{\bar{S}_1 + \bar{L}_1 + \bar{S}_2 + \bar{L}_2 - S - L} \times G^{42} \quad (\text{I - 1 - 34})$$

Par ailleurs, d'après (23) puis à nouveau (33), G^{38} peut aussi s'écrire :

$$G^{38} = (-)^{p(N-p)} G^{43} = (-)^{p(N-p)} \sum_{\substack{\bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2}} (\ell^p \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2 + \ell^{N-p} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 \mid \ell^N \alpha_1 S L) G^{42} \quad (\text{I - 1 - 35})$$

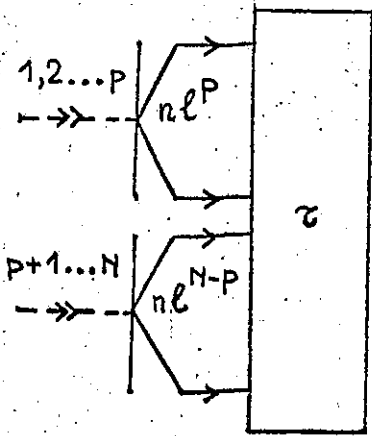
En identifiant terme à terme les seconds membres de (34) et (35), il vient :

$$(\ell^{N-p} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 + \ell^p \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2 \mid \ell^N \alpha S L) = (-)^{p(N-p) + S + L - \bar{S}_1 - \bar{L}_1 - \bar{S}_2 - \bar{L}_2} \times (\ell^p \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2 + \ell^{N-p} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 \mid \ell^N \alpha S L) \quad (\text{I - 1 - 36})$$

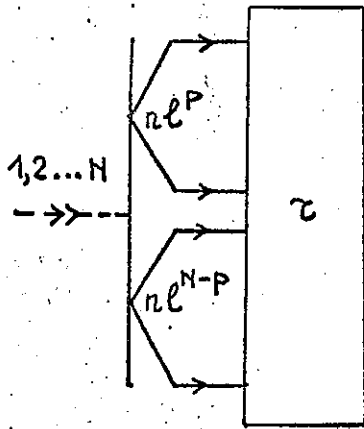
En faisant $p = 1$, on retrouve la formule (29) de RACAHA ^{2b}).

En faisant $N = 2p$, on obtient la relation suivante, facile à vérifier numériquement pour $p = 2$:

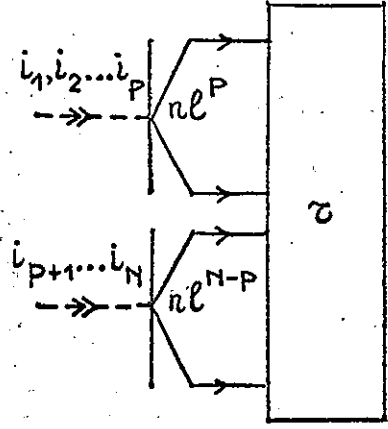
$$(\ell^p \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L} + \ell^p \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L} \mid \ell^{2p} \alpha S L) = 0 \quad \text{pour } S + L \text{ impair} \quad (\text{I - 1 - 37})$$



G⁴⁴
I-1



G⁴⁵
I-1



G⁴⁶
I-1

En faisant $p = 1$ dans cette relation, on montre que $S + L$ est pair pour tous les termes de ℓ^2 .

Il était intéressant de montrer que la méthode graphique permet d'obtenir assez facilement de telles formules. Voyons maintenant les fonctions les plus générales, celles où apparaissent plusieurs groupes d'électrons équivalents.

I - 1 - 2 - 3 - Fonctions d'onde antisymétriques quelconques :

De la même façon qu'au paragraphe I - 1 - 2 - 1, on peut définir des fonctions partiellement numérotées avec des groupes d'électrons équivalents :

$$| 12 \dots p, p + 1 \dots N | \ell^p \dots \ell'^{N-p} \dots \tau = G^{44} \quad (\text{I - 1 - 38})$$

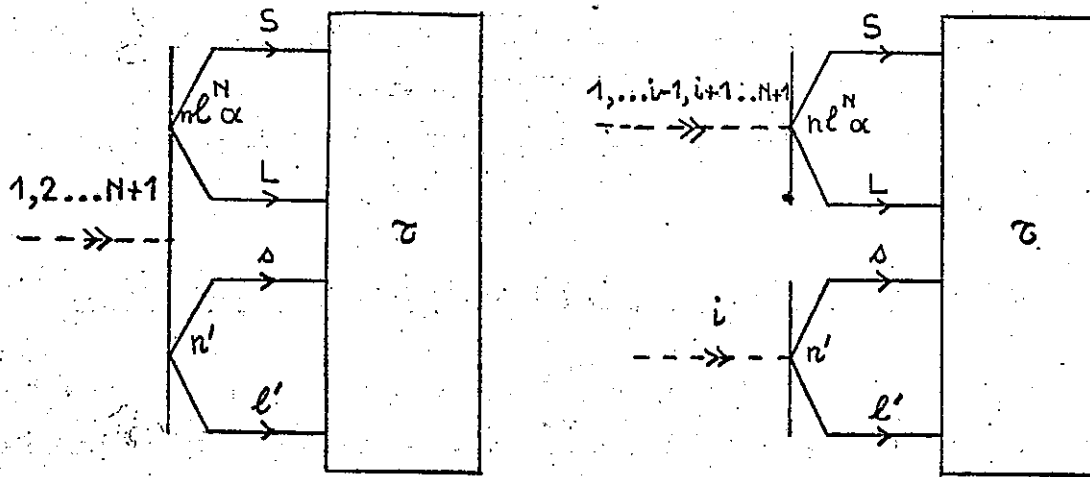
avec lesquelles on peut écrire des relations du type :

$$G^{45} = \binom{N}{p, N-p}^{-\frac{1}{2}} \sum_i (-)^{P_i} G^{46} \quad (\text{I - 1 - 39})$$

Toutes les relations du paragraphe I - 1 - 2 - 1 sont valables dans le cas général, en particulier la relation la plus générale: la relation (24); cependant il faut utiliser les relations de I - 1 - 2 - 2 dès qu'on veut numéroter séparément des électrons équivalents.

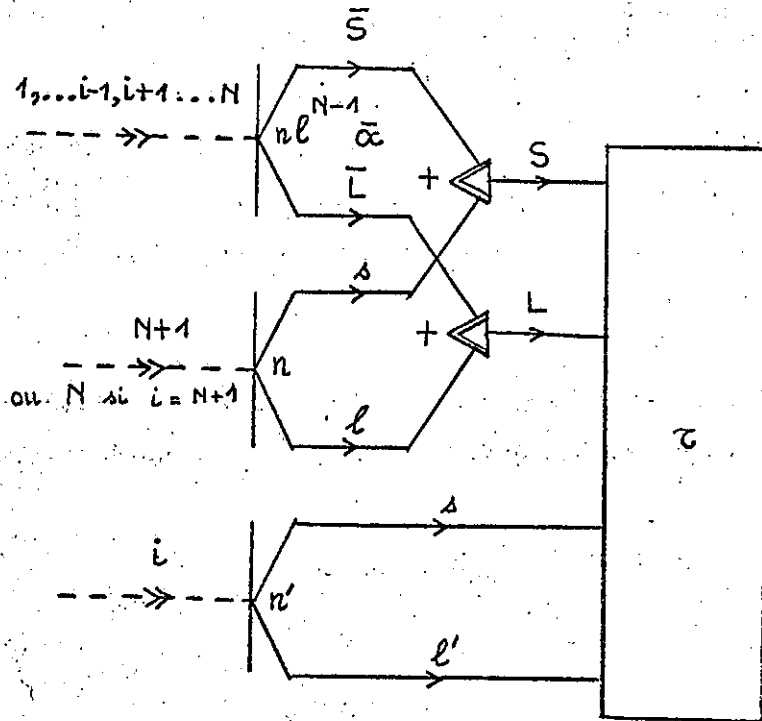
A titre d'exemple, essayons de numéroter 2 électrons ℓ et ℓ' dans un état antisymétrique de la configuration $\ell^N \ell'$. Représentons cet état par le graphe G^{47} . On a :

$$G^{47} = \frac{1}{V(N+1)} \sum_{i=1}^{N+1} (-)^{N+1+i} G^{48}$$



G⁴⁷_{I,1}

G⁴⁸_{I,1}



G⁴⁹_{I,1}

En faisant $p = 1$ dans cette relation, on montre que $S + L$ est pair pour tous les termes de l^2 .

Il était intéressant de montrer que la méthode graphique permet d'obtenir assez facilement de telles formules. Voyons maintenant les fonctions les plus générales, celles où apparaissent plusieurs groupes d'électrons équivalents.

I - 1 - 2 - 3 - Fonctions d'onde antisymétriques quelconques :

De la même façon qu'au paragraphe I - 1 - 2 - 1, on peut définir des fonctions partiellement numérotées avec des groupes d'électrons équivalents :

$$| 12 \dots p, p + 1 \dots N | \ell^p \dots \ell'^{N-p} \dots \tau) = G^{44} \quad (\text{I - 1 - 38})$$

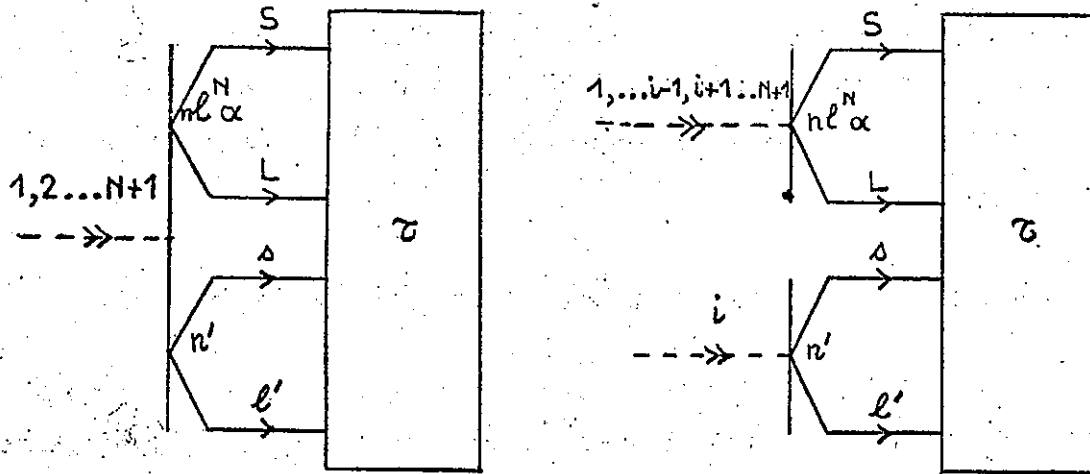
avec lesquelles on peut écrire des relations du type :

$$G^{45} = (C_{p, N-p}^N)^{-\frac{1}{2}} \sum_i (-)^{p_i} G^{46} \quad (\text{I - 1 - 39})$$

Toutes les relations du paragraphe I - 1 - 2 - 1 sont valables dans le cas général, en particulier la relation la plus générale: la relation (24); cependant il faut utiliser les relations de I - 1 - 2 - 2 dès qu'on veut numéroter séparément des électrons équivalents.

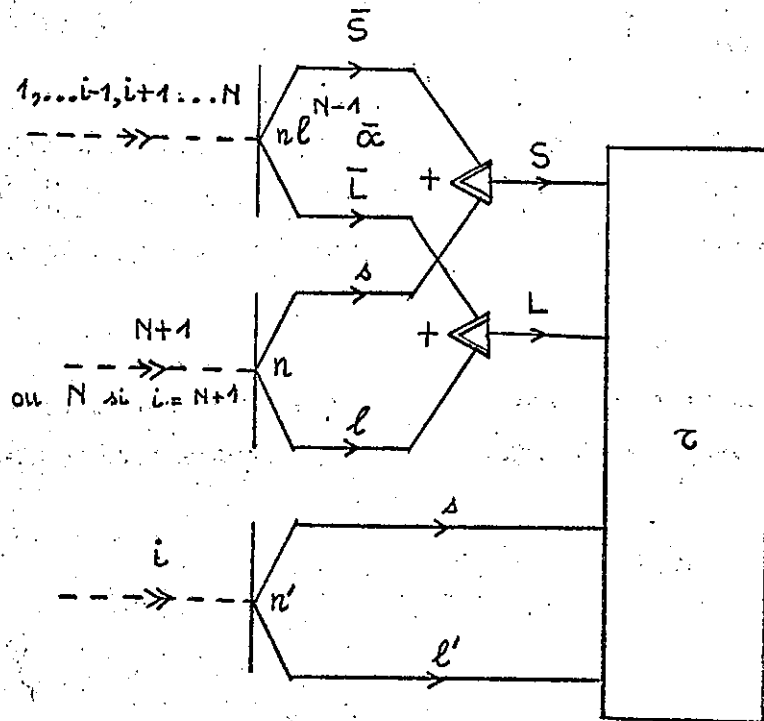
A titre d'exemple, essayons de numéroter 2 électrons ℓ et ℓ' dans un état antisymétrique de la configuration $\ell^N \ell'$. Représentons cet état par le graphe G^{47} . On a :

$$G^{47} = \frac{1}{V(N+1)} \sum_{i=1}^{N+1} (-)^{N+1+i} G^{48}$$

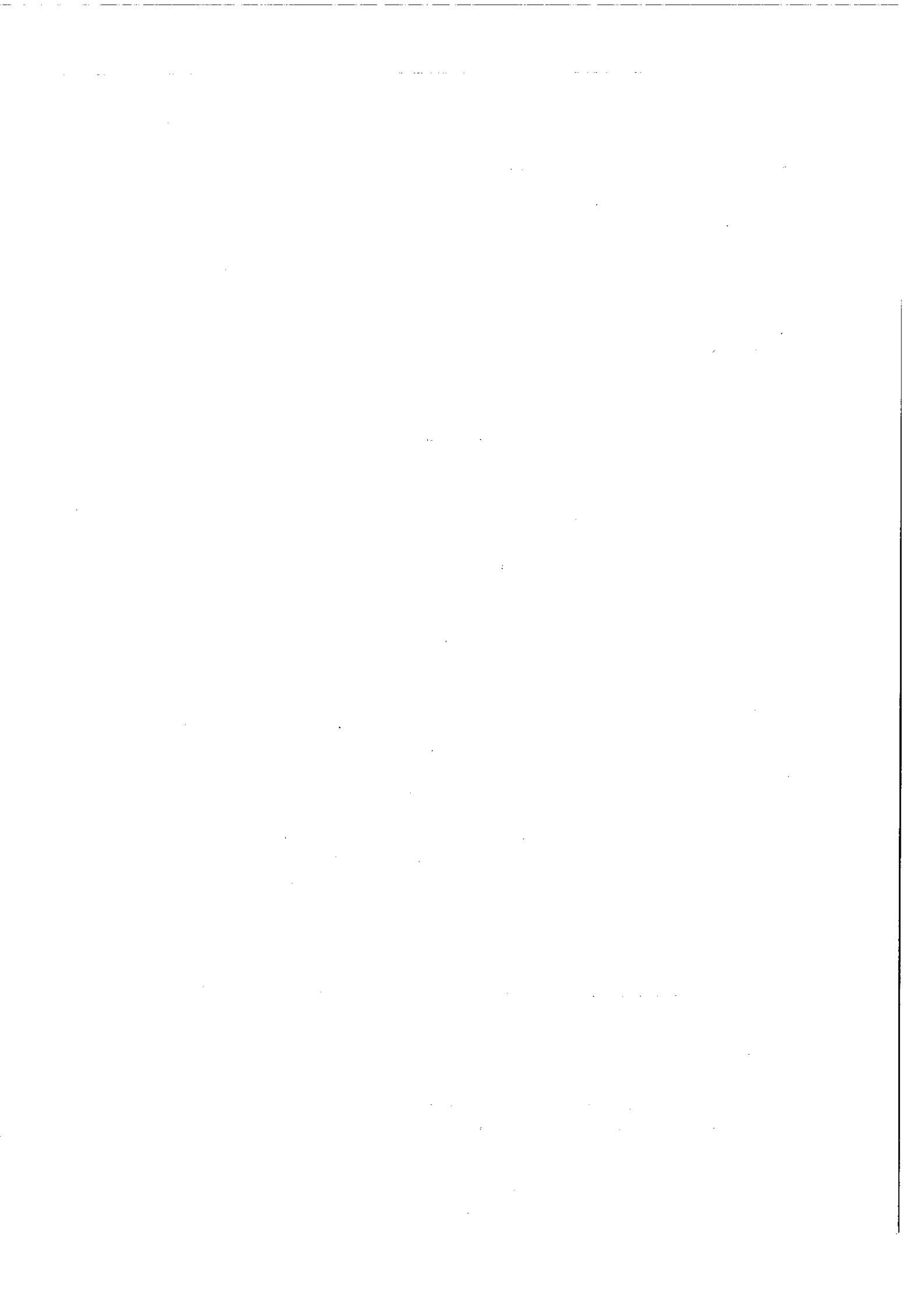


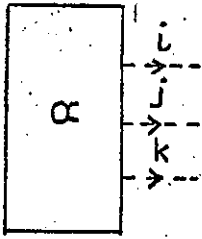
G⁴⁷_{I-1}

G⁴⁸_{I-1}

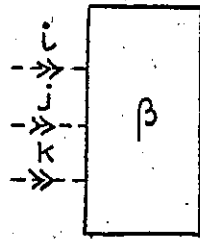


G⁴⁹_{I-1}

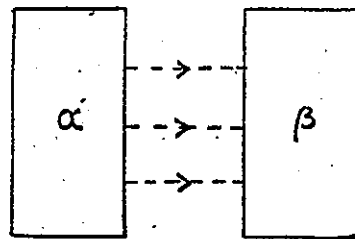




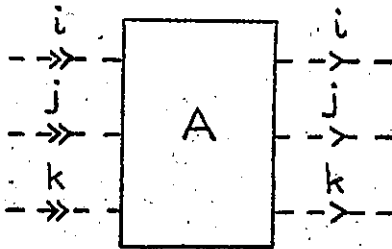
$G_{I.1}^{50}$



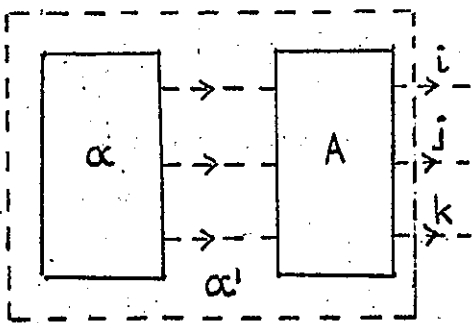
$G_{I.1}^{51}$



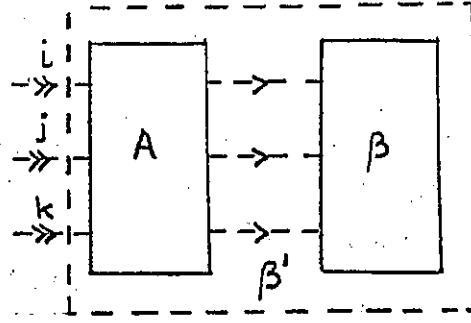
$G_{I.1}^{52}$



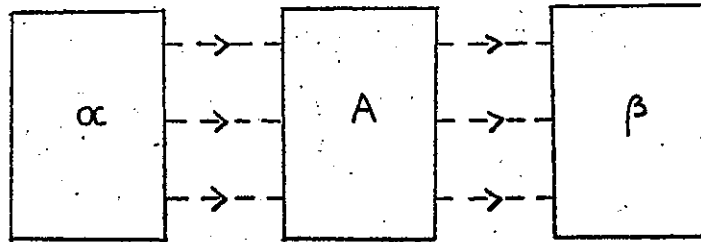
$G_{I.1}^{53}$



$G_{I.1}^{54}$



$G_{I.1}^{55}$



$G_{I.1}^{56}$

I - 1 - 3 - Représentation des opérateurs :

Anticipons un peu sur le paragraphe I - 2. Nous y verrons que le fait de relier les lignes pointillées homologues d'un bra et d'un ket correspond au produit scalaire du bra et du ket c'est-à-dire à l'intégration des deux fonctions; le résultat est un nombre. Autrement dit :

$$\text{si } G^{50} = (\alpha | \quad \text{et} \quad G^{51} = | \beta)$$

$$\text{alors } (\alpha | \beta) = G^{52} \quad (\text{I - 1 - 41})$$

Or, un opérateur A agissant sur le ket β redonne un autre ket β' et de même, agissant sur le bra α , il redonne un autre bra α' . Si donc on représente l'opérateur A avec deux séries de lignes pointillées homologues, une série du type ket et une série du type bra, la cohérence des définitions est respectée.

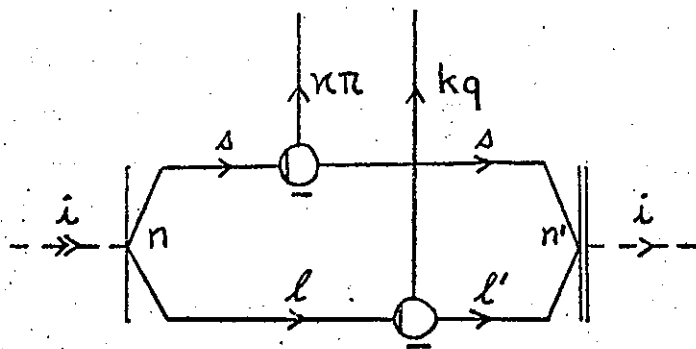
$$\text{Si } G^{53} = A, \text{ alors : } (\alpha | A = (\alpha' | = G^{54}$$

$$A | \beta) = | \beta') = G^{55} \quad \text{et} \quad (\alpha | A | \beta) = G^{56} \quad (\text{I - 1 - 42})$$

Le raisonnement précédent nous a permis de justifier d'une manière générale l'apparition de lignes pointillées dans les opérateurs. Nous allons maintenant voir en détail le contenu de la boîte A, c'est-à-dire la représentation particulière des opérateurs tensoriels élémentaires et de leurs produits tensoriels ou scalaires. Nous examinerons ensuite le cas des projecteurs.

I - 1 - 3 - 1 - Représentation d'un opérateur tensoriel monoélectronique élémentaire :

Tous les opérateurs utilisés en spectroscopie atomique peuvent s'exprimer



$G_{I,1}^{57}$

à l'aide des opérateurs tensoriels élémentaires ¹¹⁾:

$$w^{(nk)}(n\ell, n'\ell') \quad (\text{I} - 1 - 43)$$

définis par leurs éléments de matrice réduits :

$$\langle n_a \ell_a || w^{(nk)}(n\ell, n'\ell') || n_b \ell_b \rangle = \delta(n_a, n) \delta(\ell_a, \ell) \delta(n_b, n') \delta(\ell_b, \ell') \hat{n} \hat{k}$$

(I - 1 - 44)

où : $\hat{k} = \sqrt{2k+1}$. Nous emploierons par la suite très souvent les deux notations classiques ^{4,7)} définies par la formule suivante :

$$\hat{j}^2 = [j] = (2j+1) \quad (\text{I} - 1 - 45)$$

Une composante de l'opérateur tensoriel (43) se représente par :

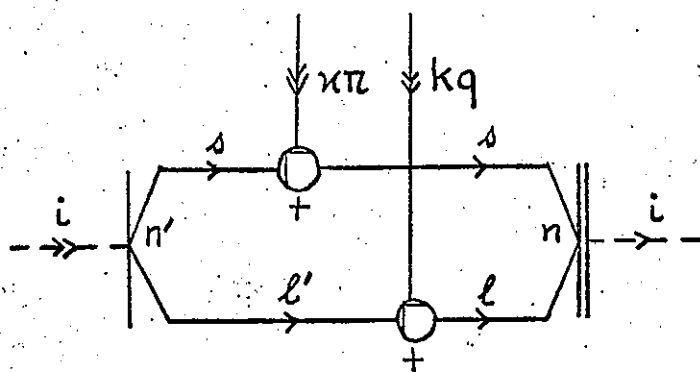
$$w_i^{(nk)}(n\ell, n'\ell') = G^{57} \quad (\text{I} - 1 - 46)$$

La forme graphique adoptée ici sera justifiée à posteriori, d'abord par le calcul des éléments de matrice de cet opérateur (§ I - 2 - 3 et I - 3 - 2), puis par la théorie de la seconde quantification (chap. II). Faisons cependant quelques commentaires :

- les signes qui accompagnent les deux noeuds circulaires donnent, comme pour un noeud triangulaire, le sens de lecture des 3 moments angulaires, dans l'ordre : bra - opérateur - ket;

- les tirets verticaux qui se trouvent à l'intérieur des cercles ont le même rôle que les double-tirets déjà rencontrés; en effet, si on coupait par exemple la branche ℓ , en introduisant une somme sur m_ℓ , il viendrait une double flèche du côté du cercle et le tiret s'explique alors par analogie avec le graphe

¹¹⁾
G_{I-1}.



G⁵⁸_{I.1}

on remarque enfin que les parties gauche et droite du graphe sont analogues, comme nous l'avons annoncé ci-dessus, respectivement à un ket et à un bra.

L'équivalent pour les opérateurs de la conjugaison bra - ket est la conjugaison hermitique : $A - A^+$. A^+ est aussi appelé ¹³⁾ l'opérateur adjoint de A. Une composante de l'adjoint de l'opérateur (43) se représente par :

$$w_i \begin{matrix} (\mu k)^+ \\ \pi q \end{matrix} (n \ell, n' \ell') = G^{58} \quad (I - 1 - 47)$$

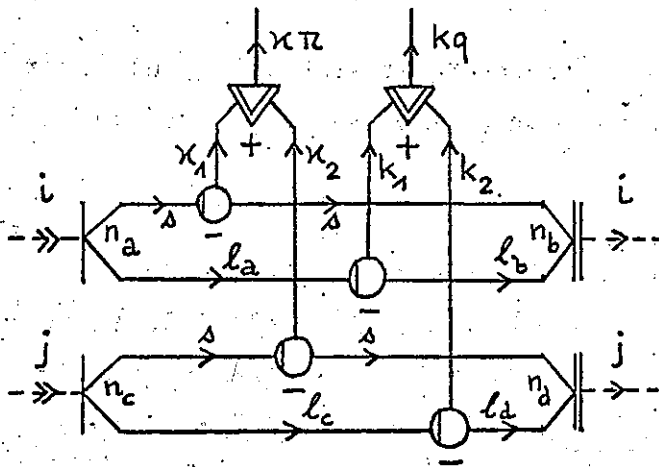
Nous ne justifierons pas ici ce graphe davantage que par l'analogie évidente avec la transformation ket - bra. Une véritable justification sera donnée au paragraphe I - 2 - 3.

Voyons maintenant comment on peut représenter des produits d'opérateurs.

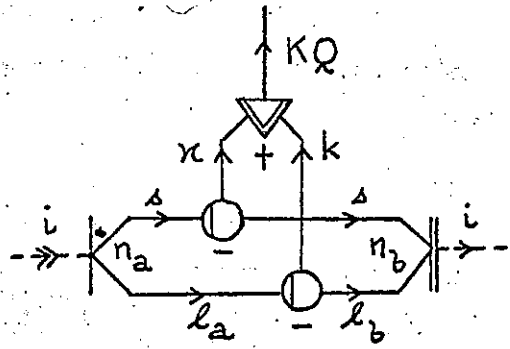
I - 1 - 3 - 2 - Produits tensoriels et scalaires d'opérateurs :

Le produit tensoriel de deux opérateurs est analogue à un couplage. En effet, en appliquant les équations (3-31) et (3-32) de JUDD ⁴⁾ à des double-tenseurs, on obtient :

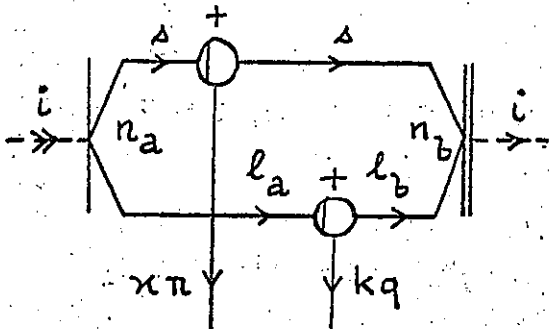
$$x \begin{matrix} (\mu k) \\ \pi q \end{matrix} = \left\{ w_i \begin{matrix} (\mu_1 k_1) \\ \pi_1 q_1 \end{matrix} (n_a \ell_a, n_b \ell_b) \times w_j \begin{matrix} (\mu_2 k_2) \\ \pi_2 q_2 \end{matrix} (n_c \ell_c, n_d \ell_d) \right\} \begin{matrix} (\mu k) \\ \pi q \end{matrix}$$



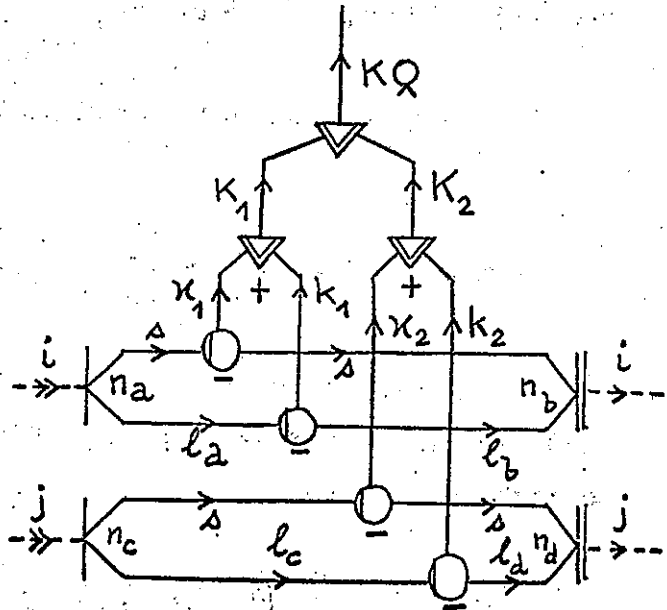
$G_{I,1}^{59}$



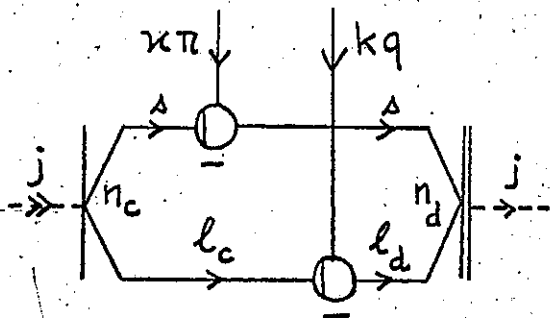
$G_{I,1}^{60}$



$G_{I,1}^{62}$



$G_{I,1}^{61}$



$G_{I,1}^{63}$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\substack{\pi_1 q_1 \\ \pi_2 q_2}} (\kappa_1 \pi_1 \ \kappa_2 \pi_2 \mid \kappa \ \pi) (k_1 q_1 \ k_2 q_2 \mid k \ q) \\
 &\times w_i^{(\kappa_1 k_1)}(n_a \ \ell_a, n_b \ \ell_b) w_j^{(\kappa_2 k_2)}(n_c \ \ell_c, n_d \ \ell_d) \quad (I - 1 - 48)
 \end{aligned}$$

La comparaison de cette équation avec l'équation (I - 1 - 10) nous amène immédiatement à représenter le produit tensoriel par :

$$x \frac{(\kappa k)}{\pi q} = G^{59} \quad (I - 1 - 49)$$

On remarque que les opérateurs se conduisent comme des ket: les branches libres portent des flèches simples, sortantes et les couplages se font à l'aide des triangles "ket", à deux côtés doubles. Ceci est en accord avec JUDD⁴⁾ (§ 8 - 2).

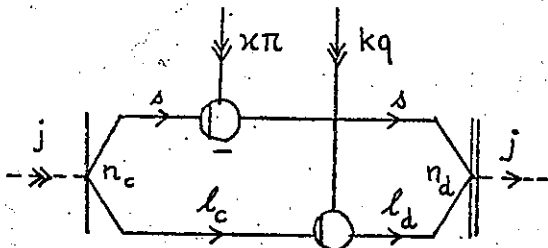
D'autres produits tensoriels peuvent être représentés; voyons les deux plus simples :

$$w_i^{(\kappa k)K} (n_a \ \ell_a, n_b \ \ell_b) = G^{60} \quad (I - 1 - 50)$$

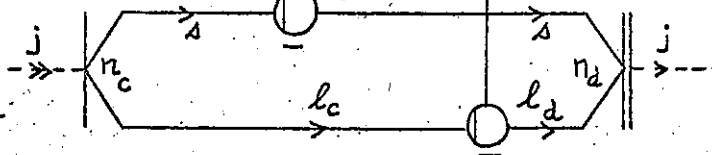
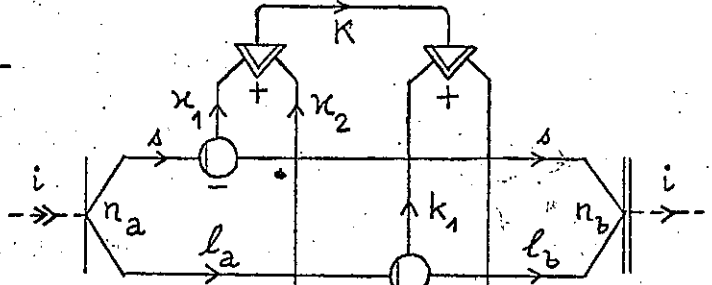
$$\left\{ w_i^{(\kappa_1 k_1)K_1} (n_a \ \ell_a, n_b \ \ell_b) \times w_j^{(\kappa_2 k_2)K_2} (n_c \ \ell_c, n_d \ \ell_d) \right\} \frac{K}{Q} = G^{61} \quad (I - 1 - 51)$$

L'équation (3-33) de JUDD⁴⁾ appliquée à un double-tenseur définit le produit scalaire :

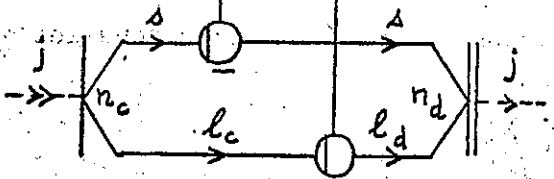
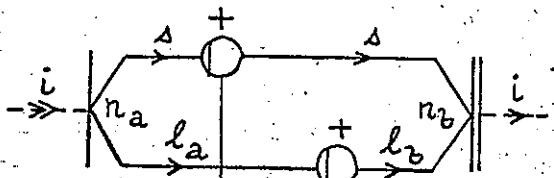
$$\begin{aligned}
 &w_i^{(\kappa k)} (n_a \ \ell_a, n_b \ \ell_b) \cdot w_j^{(\kappa k)} (n_c \ \ell_c, n_d \ \ell_d) \\
 &= \sum_{\pi q} (-)^{\pi+q} w_i^{(\kappa k)} \frac{(\kappa k)}{\pi q} (n_a \ \ell_a, n_b \ \ell_b) w_j^{(\kappa k)} \frac{(\kappa k)}{-\pi-q} (n_c \ \ell_c, n_d \ \ell_d) \\
 &\quad (I - 1 - 52)
 \end{aligned}$$



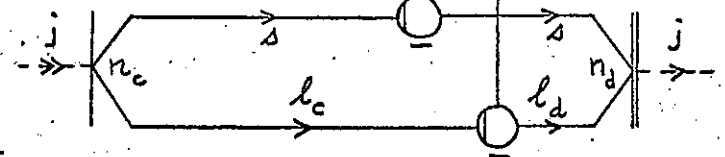
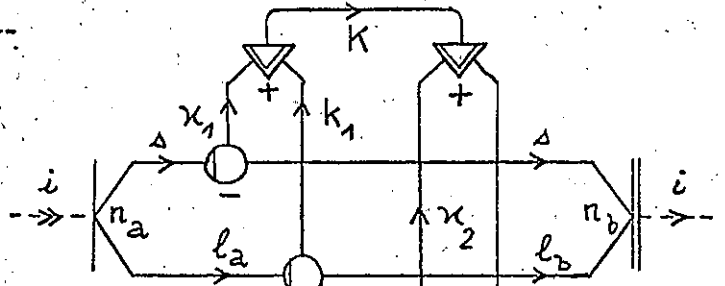
$G_{I.1}^{64}$



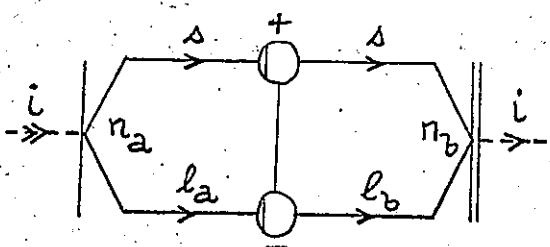
$G_{I.1}^{67}$



$G_{I.1}^{65}$



$G_{I.1}^{68}$



$G_{I.1}^{66}$

Les deux facteurs du second membre sont représentés respectivement par les graphes G^{62} et G^{63} . Ici nous devons faire appel à une règle que nous verrons plus loin (§ I - 3 - 1) et qui dit que la transformation d'une flèche double rentrante en une flèche simple sur une branche libre j m fait apparaître le facteur de phase : $(-)^{j-m}$. Dans ces conditions, on a :

$$(-)^{n+q} G^{63} = (-)^{n+k} G^{64} \quad (\text{I} - 1 - 53)$$

et l'équation (52) devient semblable à l'équation (I - 1 - 2) de sommation sur un nombre quantique de projection. On obtient alors :

$$w_i^{(\mu k)}(n_a \ell_a, n_b \ell_b) \cdot w_j^{(\mu k)}(n_c \ell_c, n_d \ell_d) = (-)^{n+k} G^{65} \quad (\text{I} - 1 - 54)$$

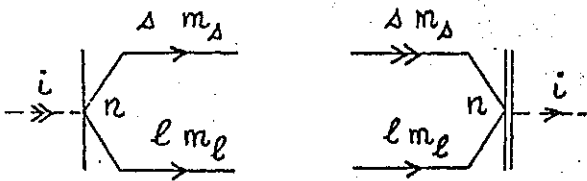
On obtient de même les produits scalaires suivants :

$$w_i^{(k.k)}(n_a \ell_a, n_b \ell_b) = \sum_q (-)^q w_i^{(k.k)}_{q-q}(n_a \ell_a, n_b \ell_b) = (-)^k G^{66} \quad (\text{I} - 1 - 55)$$

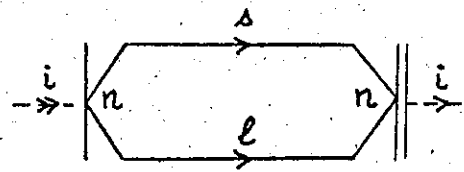
$$\{ w_i^{(\mu_1 k_1)}(n_a \ell_a, n_b \ell_b) \times w_j^{(\mu_2 k_2)}(n_c \ell_c, n_d \ell_d) \}^{K.K.} = (-)^K G^{67} \quad (\text{I} - 1 - 56)$$

$$w_i^{(\mu_1 k_1)K}(n_a \ell_a, n_b \ell_b) \cdot w_j^{(\mu_2 k_2)K}(n_c \ell_c, n_d \ell_d) = (-)^K G^{68} \quad (\text{I} - 1 - 57)$$

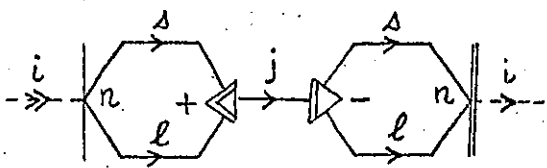
Le produit scalaire de l'équation (56) est défini de la même manière que dans l'équation (55).



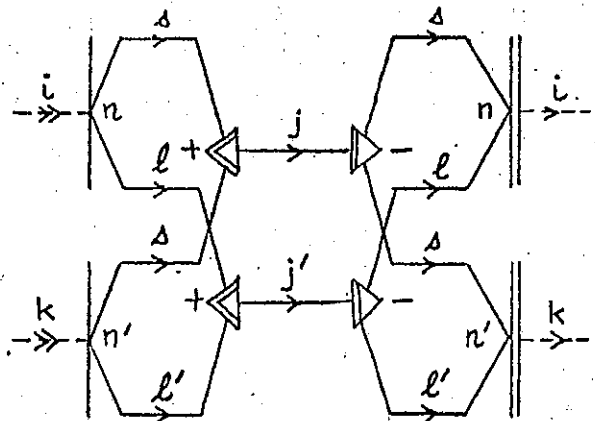
$G_{I.1}^{69}$



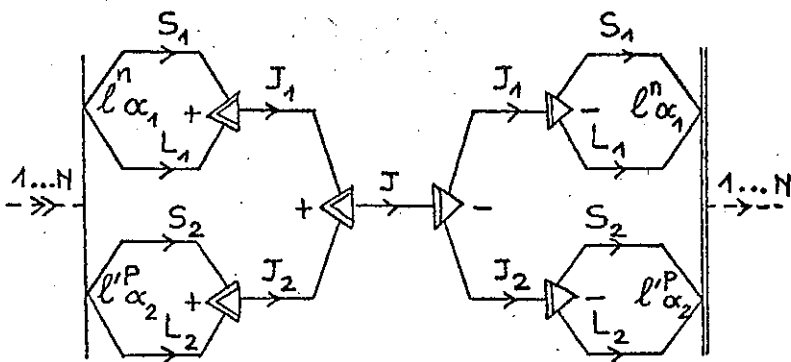
$G_{I.1}^{70}$



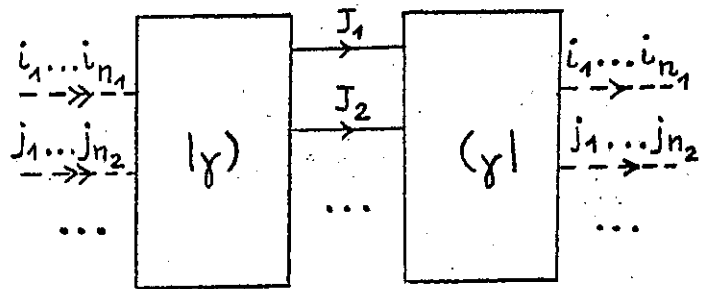
$G_{I.1}^{71}$



$G_{I.1}^{72}$



$G_{I.1}^{73}$



$G_{I.1}^{74}$

Nous savons maintenant représenter un opérateur, produit quelconque d'opérateurs $w_i^{(nk)}(n\ell, n'\ell')$. Avant de passer aux règles d'intégration et de résolution des graphes, nous allons voir rapidement une autre sorte d'opérateurs : les projecteurs, dont nous aurons besoin surtout au chapitre II.

I - 1 - 3 - 3 - Projecteurs :

Si $(\alpha |$ est un bra, $|\alpha\rangle$ le ket conjugué et $|\beta\rangle$ un autre ket, alors :

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle (\alpha | \beta)$$

est un ket proportionnel à $|\alpha\rangle$ et qui est la projection de $|\beta\rangle$ sur $|\alpha\rangle$. L'opérateur qui fait passer de $|\beta\rangle$ à $|\gamma\rangle$ s'écrit :

$$P_\alpha = |\alpha\rangle (\alpha |$$

C'est le projecteur ¹²⁾ sur le vecteur α .

Graphiquement, le projecteur sur une fonction monoélectronique élémentaire, se représente :

$$P_i^{n\ell m_s m_\ell} = G^{69} \quad (I - 1 - 58)$$

Si on somme des projecteurs élémentaires du type (58), on obtient des projecteurs sur le sous-espace défini par les vecteurs sur lesquels on somme. Par exemple :

$$P_i^{n\ell} = \sum_{m_s m_\ell} P_i^{n\ell m_s m_\ell} = G^{70} \quad (I - 1 - 59)$$

projette sur le sous-espace à $4\ell + 2$ dimensions, formé par les ket

$|n_i \ell_i m_{si} m_{\ell i}\rangle$, de n et ℓ donnés. On remarque que les projecteurs ainsi définis ont bien la structure générale du graphe G^{53} .

On peut définir des projecteurs à partir de n'importe quelles fonctions bra, ket conjuguées. Par exemple, les graphes G^{71} et G^{72} sont des projecteurs. On peut aussi définir des projecteurs sur des espaces définis par des fonctions antisymétriques. Par exemple, le graphe G^{73} est un projecteur. On remarque que tous ces graphes ne sont symétriques que dans leur structure, c'est-à-dire l'arrangement des branches et noeuds et dans la valeur des branches, mais pas dans les triangles des noeuds ni dans le sens des branches.

La forme générale d'un projecteur peut donc se représenter par le graphe G^{74} ; la remarque précédente explique les signes $|\gamma\rangle$ et $\langle\gamma|$ contenus dans les boîtes.

Si l'ensemble des ket $|\alpha_k\rangle$ forme une base complète de fonctions d'onde dans l'espace vectoriel utilisé, on a la relation de fermeture :

$$\sum_k |\alpha_k\rangle \langle\alpha_k| = 1 \quad (\text{I} - 1 - 60)$$

Cette relation se traduit de façon générale sur le graphe G^{74} par l'équation :

$$\sum_{\gamma, J_1, J_2, \dots} G^{74} = 1 \quad (\text{I} - 1 - 61)$$

où γ remplace ici tous les nombres quantiques contenus dans la boîte.

Cette dernière relation est très intéressante car elle permet d'introduire un projecteur unité sous une forme quelconque à n'importe quel endroit d'une expression graphique.

Nous avons représenté dans ce paragraphe des opérateurs agissant sur des électrons bien déterminés. Mais de même qu'on utilise des fonctions d'onde antisymétriques par rapport à l'échange de deux électrons, on utilise des opérateurs totalement symétriques tels que :

$$F = \sum_i f_i \quad (\text{I} - 1 - 62)$$

et

$$G = \sum_{i>j} g_{ij} \quad (\text{I} - 1 - 63)$$

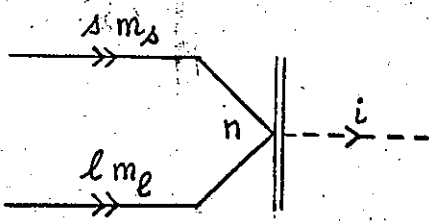
ou f_i et g_{ij} sont les opérateurs définis jusqu'ici. On peut traiter ce problème de deux manières. La première manière utilise le principe d'indiscernabilité d'après lequel chacun des termes des sommes (62) ou (63) apporte la même contribution à l'élément de matrice de l'opérateur total; il suffit donc de calculer l'élément de matrice d'un terme quelconque et de multiplier par le nombre de termes; c'est cette méthode que nous utilisons dans la pratique (chapitres III et IV). La seconde manière de traiter ce problème est reliée à la théorie de la seconde quantification et nous l'étudierons plus en détail au chapitre II.

Nous avons maintenant terminé l'exposé des règles de représentation des différentes parties d'un élément de matrice. Nous allons donc voir comment les réunir, c'est-à-dire étudier les règles d'intégration.

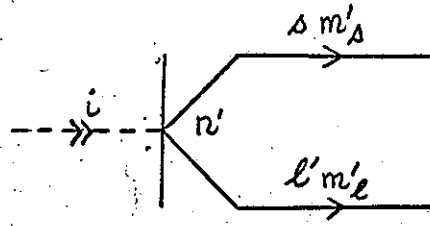
I - 2 - REGLES D'INTEGRATION :

Comme nous l'avons vu au début du paragraphe I - 1 - 3, l'action d'un bra sur un ket, ou produit scalaire, et l'action d'un opérateur sur un bra ou sur un ket se traduit par la liaison des lignes pointillées correspondantes; en prenant certaines précautions, on peut alors supprimer les lignes pointillées et rejoindre les branches homologues. C'est ce que nous appellerons les opérations d'intégration.

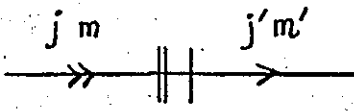
Ce sont ces opérations que nous allons étudier dans ce paragraphe. Nous commencerons par l'intégration d'un bra et d'un ket élémentaire; nous donnerons



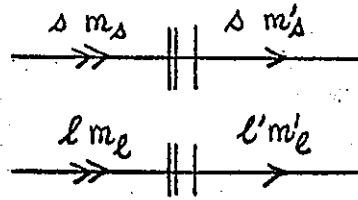
$G^1_{I.2}$



$G^2_{I.2}$



$G^3_{I.2}$



$G^4_{I.2}$

ensuite les règles d'intégration pour deux chaînes quelconques; nous verrons enfin quelques applications fondamentales.

I - 2 - 1 - Intégration d'un bra et d'un ket élémentaires :

Le résultat de ce que nous avons appelé: "intégration d'un bra $(\alpha |$ et d'un ket $| \beta)$ " est en général appelé produit scalaire de $(\alpha |$ par $| \beta)$. Le plus simple que nous puissions représenter est donné par :

$$(n \ s \ \ell \ m_s \ m_\ell \ | \ n' \ s' \ \ell' \ m'_s \ m'_\ell) = \delta(n \ n') \delta(\ell \ \ell') \delta(m_s \ m'_s) \delta(m_\ell \ m'_\ell)$$

(I - 2 - 1)

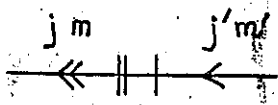
A priori nous devons partir de la représentation du bra et du ket du premier membre de cette équation. Le bra se représente par le graphe G^1 et le ket par le graphe G^2 . Mais le premier membre de (1) est un nombre où toute référence à un électron i déterminé a disparu. Nous devons donc faire disparaître les lignes pointillées. Pour cela nous posons :

$$G^3 = \delta(j \ j') \delta(m, m') \quad (I - 2 - 2)$$

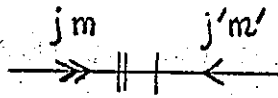
Dans ces conditions, l'équation (1) s'écrit :

$$G^1 G^2 = \delta(n, n') G^4 \quad (I - 2 - 3)$$

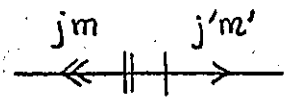
Nous avons supposé dans cette équation que l'écriture du premier membre implique l'intégration. Ce sera le cas chaque fois que deux graphes auront des lignes pointillées ayant les mêmes numéros, celles du premier graphe étant de type "bra", celles du second de type "ket". Il est évident qu'un tel produit n'est pas commutatif.



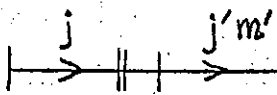
$G_{I.2}^5$



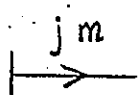
$G_{I.2}^6$



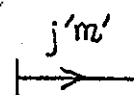
$G_{I.2}^7$



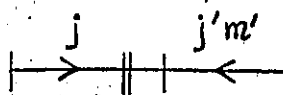
$G_{I.2}^8$



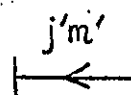
$G_{I.2}^9$



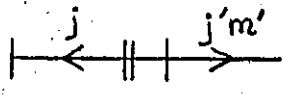
$G_{I.2}^{10}$



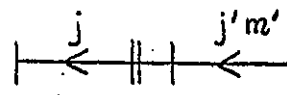
$G_{I.2}^{11}$



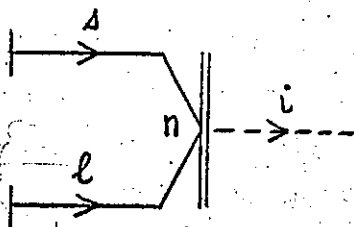
$G_{I.2}^{12}$



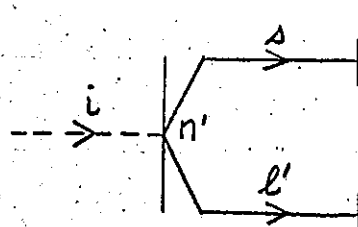
$G_{I.2}^{13}$



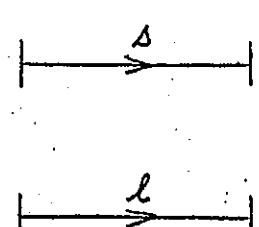
$G_{I.2}^{14}$



$G_{I.2}^{15}$



$G_{I.2}^{16}$



$G_{I.2}^{17}$

En changeant les signes de m ou m' dans l'équation (2), nous obtenons les relations suivantes :

$$G^5 = \delta(j j') \delta(m m') \quad (\text{I} - 2 - 4)$$

$$G^6 = G^7 = \delta(j j') \delta(m, -m') \quad (\text{I} - 2 - 5)$$

On aurait évidemment des relations analogues correspondant à l'équation (3).

Voyons maintenant comment on peut supprimer le triple tiret qui apparaît dans les graphes G^3 à G^7 , lorsqu'une de ses branches, au moins, est liée. Pour cela nous devons écrire par exemple :

$$G^8 = \sum_m G^9 G^3 = \delta(j j') G^{10} \quad (\text{I} - 2 - 6)$$

On trouverait de même les relations suivantes :

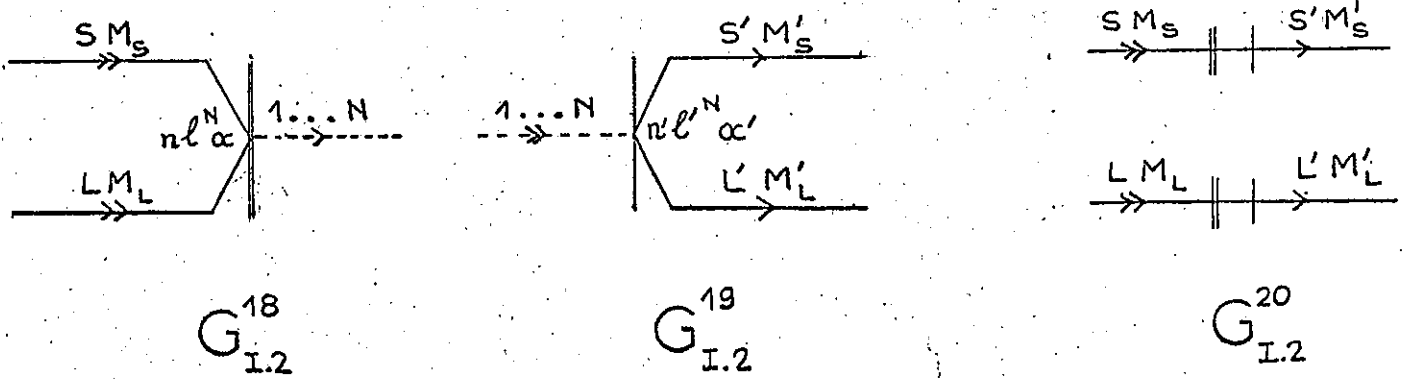
$$G^{11} = \delta(j j') G^{12} \quad (\text{I} - 2 - 7)$$

$$G^{13} = \delta(j j') (-)^{2j} G^{10} \quad (\text{I} - 2 - 8)$$

$$G^{14} = \delta(j j') (-)^{2j} G^{12} \quad (\text{I} - 2 - 9)$$

Des relations avec l'autre branche libre ou les deux branches liées s'en déduiraient de même. La règle est finalement la suivante : la suppression d'un triple tiret entre les branches j et j' introduit le facteur $\delta(j j')$ et s'accompagne de la suppression d'une des deux branches, nécessairement liée; un facteur de phase $(-)^{2j}$ apparaît si la branche supprimée est soit sortante du double tiret, soit rentrante dans le simple tiret.

Cette règle est assez compliquée, mais heureusement, dans la plupart des



cas, les branches sont toutes dans le "bon sens" et on peut appliquer la formule suivante, tirée de (3) :

$$G^{15} G^{16} = \delta(n, n') \delta(\ell, \ell') G^{17} \quad (\text{I} - 2 - 10)$$

Nous allons maintenant passer à des bra et des ket plus compliqués. Mais nous nous limiterons pour chaque point d'entrée au cas de l'équation (10); si les branches avaient un autre sens, les équations ci-dessus permettraient de s'y ramener.

I - 2 - 2 - Intégration de bra et de ket quelconques :

Dans ce paragraphe nous nous intéressons à l'intégration de deux chaînes, au sens défini au paragraphe I - 1 - 2 - 1, une chaîne "bra" et une chaîne "ket" portant sur les mêmes électrons. Pour cela, nous verrons d'abord l'intégration de deux chaînes à un point d'entrée dans le cas d'électrons équivalents; nous verrons ensuite le cas de plusieurs points d'entrée par chaîne.

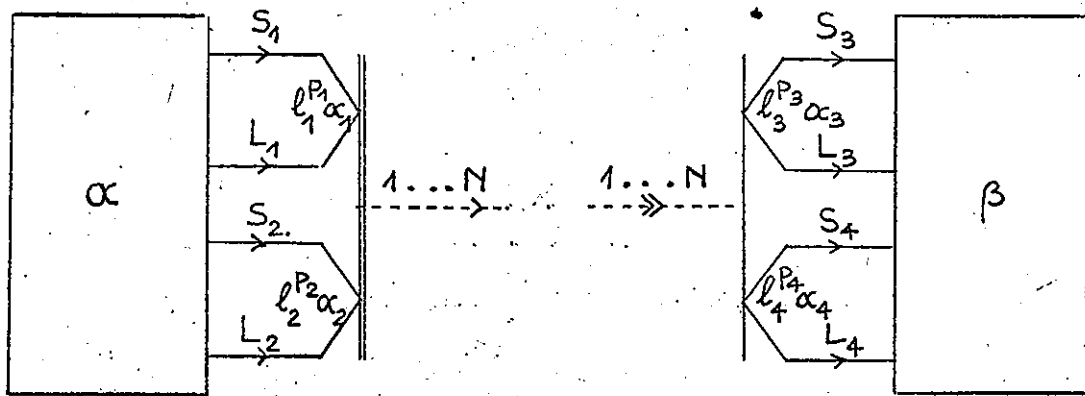
I - 2 - 2 - 1 - Intégration d'un bra et d'un ket d'électrons équivalents :

A partir de l'équation :

$$\begin{aligned} (n \ell^N \alpha S L M_S M_L | n' \ell' \alpha' S' L' M'_S M'_L) &= \delta(n, n') \delta(\ell, \ell') \delta(\alpha, \alpha') \delta(S, S') \delta(L, L') \\ &\times \delta(M_S, M'_S) \delta(M_L, M'_L) \end{aligned} \quad (\text{I} - 2 - 11)$$

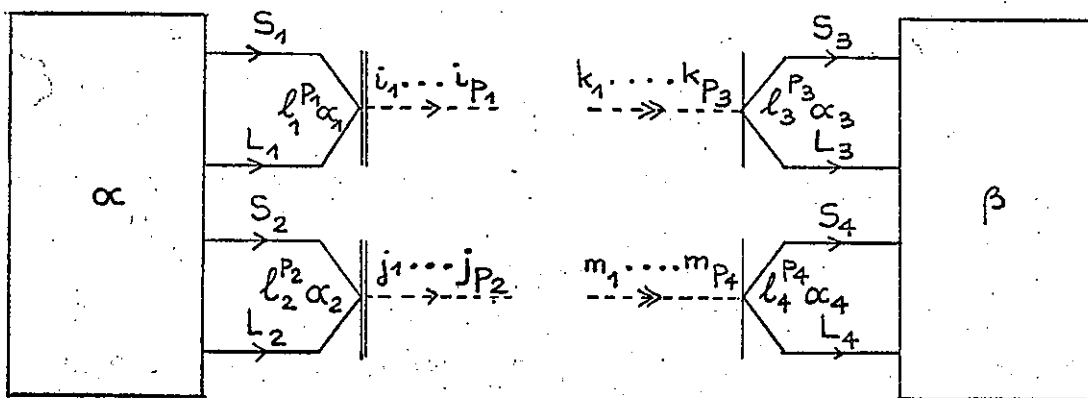
l'équation (3) se généralise immédiatement :

$$G^{18} G^{19} = \delta(n, n') \delta(\ell, \ell') \delta(\alpha, \alpha') G^{20} \quad (\text{I} - 2 - 12)$$



$$G_{I.2}^{21}$$

$$G_{I.2}^{22}$$



$$G_{I.2}^{23}$$

$$G_{I.2}^{24}$$

Remarquons que l'ordre des numéros des électrons aussi bien que leurs valeurs doivent être identiques sur les deux lignes pointillées des graphes G^{18} et G^{19} .

I - 2 - 2 - 2 - Intégration de chaînes à plusieurs points d'entrée :

La première condition nécessaire à l'intégration est que les points d'entrées des deux chaînes se correspondent deux à deux. Plus précisément, considérons les deux graphes G^{21} et G^{22} . Il est clair que si l'une des deux conditions a) ou b) suivantes n'est pas réalisée, le produit $G^{21} G^{22}$ est nul :

a) $l_1 = l_3 ; p_1 = p_3 ; l_2 = l_4 ; p_2 = p_4$

é b) $l_1 = l_4 ; p_1 = p_4 ; l_2 = l_3 ; p_2 = p_3$

Les deux conditions ne peuvent pas être réalisées à la fois car on aurait alors deux points d'entrée d'électrons équivalents dans la même chaîne ce qui est interdit (cf § I - 1 - 2 - 3).

Appliquons alors la relation (I - 1 - 24) aux deux graphes G^{21} et G^{22} :

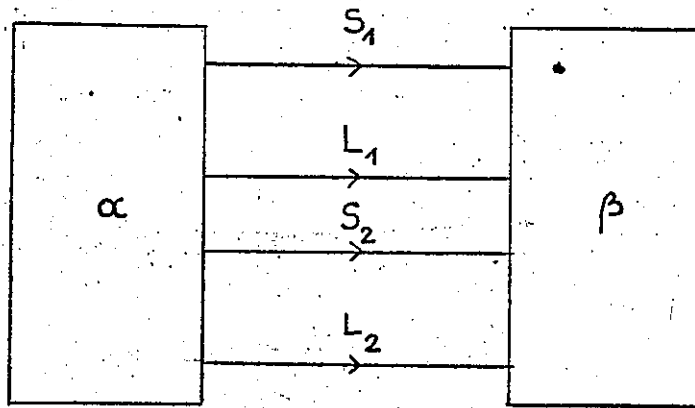
$$G^{21} G^{22} = (C_{p_1, p_2}^N)^{-1} \sum_{\ell \ell'} (-)^{p_\ell + p_{\ell'}} G^{23} G^{24} \quad (\text{I - 2 - 13})$$

où : $P_\ell = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ i_1 & i_2 & \dots & i_{p_1} & j_1 & j_2 & \dots & j_{p_2} \end{pmatrix}$ et $P_{\ell'} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ k_1 & k_2 & \dots & k_{p_3} & m_1 & m_2 & \dots & m_{p_4} \end{pmatrix}$

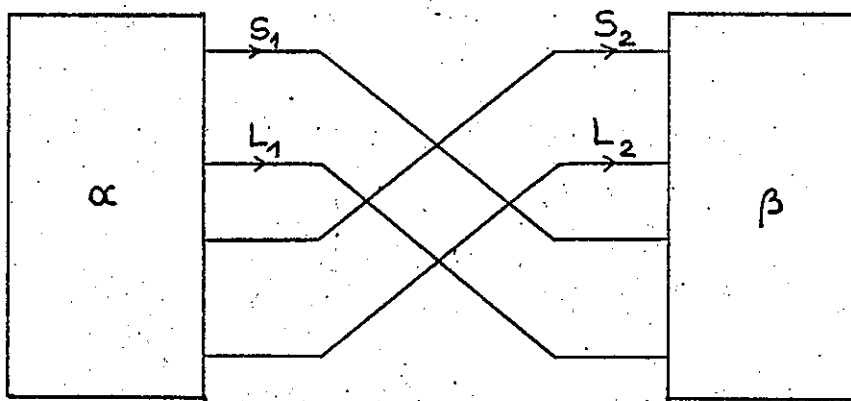
Si la condition a) est réalisée, seuls les termes pour lesquels on peut choisir:

$$i_t = k_t \quad \text{et} \quad j_t = m_t \quad \text{pour tout } t$$

donnent une contribution non nulle. Il existe C_{p_1, p_2}^N termes de ce genre pour



$G_{1.2}^{25}$



$G_{1.2}^{26}$

lesquels :

$$P_{\ell} = P_{\ell'}, \quad \text{et donc : } (-)^{P_{\ell} + P_{\ell'}} = 1$$

En utilisant la relation (12), on obtient finalement :

$$G^{21} G^{22} = \delta(\alpha_1 \alpha_3) \delta(S_1 S_3) \delta(L_1 L_3) \delta(\alpha_2 \alpha_4) \delta(S_2 S_4) \delta(L_2 L_4) G^{25} \quad (\text{I} - 2 - 14)$$

Si c'est la condition b) qui est réalisée, il y a également $C_{P_1 P_2}^N$

termes non nuls pour lesquels :

$$P_{\ell} P_{\ell'} = P_{\ell''} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 & \dots & \dots & \dots & N \\ p_1 + 1 & p_1 + 2 & \dots & N & 1 & 2 & \dots & p_1 \end{pmatrix}$$

le facteur de phase est donc constant :

$$(-)^{P_{\ell} + P_{\ell'}} = (-)^{P_{\ell''}}$$

et finalement :

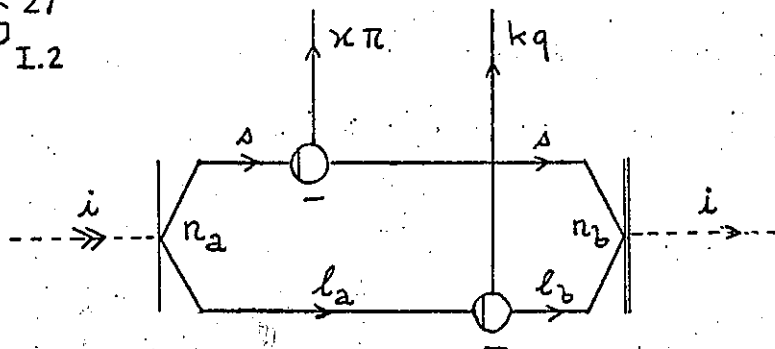
$$G^{21} G^{22} = (-)^{P_{\ell''}} \delta(\alpha_1 \alpha_4) \delta(S_1 S_4) \delta(L_1 L_4) \delta(\alpha_2 \alpha_3) \delta(S_2 S_3) \delta(L_2 L_3) G^{26} \quad (\text{I} - 2 - 15)$$

Dans le cas général, le produit scalaire de deux graphes est égal au graphe obtenu en reliant les branches des points d'entrée homologues, multiplié par les deltas correspondants et par le facteur de phase $(-)^P$. p est la parité de la permutation P définie de la façon suivante : on numérote les électrons des points d'entrée du bra dans l'ordre où ils apparaissent; on numérote ensuite les électrons homologues du ket avec les mêmes numéros; P est la



$G_{I.2}^{27}$

$G_{I.2}^{29}$



$G_{I.2}^{28}$

permutation qui fait passer de l'ordre naturel des entiers à celui de cette dernière numérotation.

Voyons maintenant quelques applications de ces règles au calcul des éléments de matrice des opérateurs monoélectroniques élémentaires.

I - 2 - 3 - Quelques applications des règles d'intégration :

Nous avons maintenant la possibilité de calculer les éléments de matrice d'un opérateur élémentaire et de son adjoint; ceci va nous permettre d'établir des relations importantes concernant les cercles qui caractérisent leurs graphes.

D'autre part, nous allons montrer qu'on peut effectuer des "intégrations" entre opérateurs et en donner quelques applications.

I - 2 - 3 - 1 - Eléments de matrice d'un opérateur élémentaire et de son adjoint :

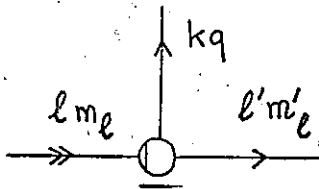
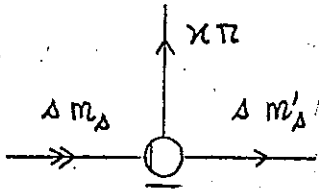
Nous allons montrer dans ce paragraphe qu'on peut associer une valeur aux cercles qui apparaissent dans les graphes des opérateurs; ils peuvent ainsi être sortis du graphe. Nous en déduirons une relation entre des deux sortes de cercles rencontrés (graphes G_{I-1}^{57} et G_{I-1}^{58}).

L'élément de matrice d'un opérateur élémentaire s'écrit :

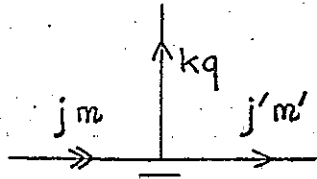
$$E = (n \ s \ \ell \ m_s \ m \ | \ w_{\pi q}^{(nk)} (n_a \ \ell_a, n_b \ \ell_b) \ | \ n' \ s' \ \ell' \ m'_s \ m'_\ell) = G^{27} G^{28} G^{29}$$

(I - 2 - 16)

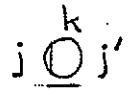
D'après les règles du paragraphe I - 2 - 1, nous avons :



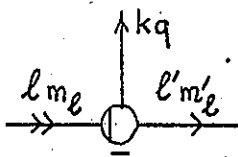
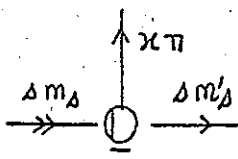
$G_{I.2}^{30}$



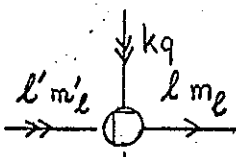
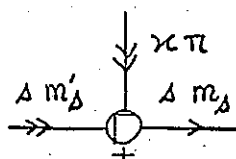
$G_{I.2}^{31}$



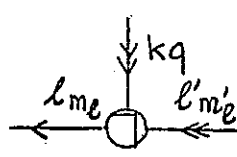
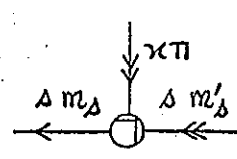
$G_{I.2}^{32}$



$G_{I.2}^{33}$



$G_{I.2}^{34}$



$G_{I.2}^{35}$

$$E = \delta(n_a n_b) \delta(l_a l_b) \delta(n'_a n'_b) \delta(l'_a l'_b) G^{30} \quad (\text{I} - 2 - 17)$$

Exprimons maintenant E par le théorème de Wigner-Eckart :

$$E = (-)^{s+l+m} \begin{pmatrix} s & \kappa & s \\ -m & \pi & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} (n_s l \parallel w^{(\kappa k)} (n_a l_a, n_b l_b) \parallel n'_s l') \quad (\text{I} - 2 - 18)$$

où l'élément de matrice réduit est donné par la formule (I - 1 - 44). Utilisons maintenant une relation que nous établirons un peu plus loin (§ I - 3 - 1) selon laquelle :

$$(-)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} = G^{31} \quad (\text{I} - 2 - 19)$$

Nous voyons alors que la formule (18) se déduit de (17) à condition de poser :

$$G^{32} = \hat{k} \quad (\text{I} - 2 - 20)$$

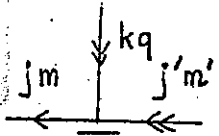
Le double tiret et le sens du noeud servent ici à savoir où se trouve le nombre k .

Pour calculer la valeur du cercle qui apparait dans l'opérateur adjoint, on utilise la relation de définition de celui-ci (13) :

$$\begin{aligned} & (n_s l m_s m_l | w^{(\kappa k)}_{\pi q} (n_a l_a, n_b l_b) | n'_s l' m'_s m'_l) \\ & = (n'_s l' m'_s m'_l | w^{(\kappa k)+}_{\pi q} (n_a l_a, n_b l_b) | n_s l m_s m_l) \end{aligned} \quad (\text{I} - 2 - 21)$$

En utilisant les graphes G^{57}_{I-1} et G^{58}_{I-1} et les règles d'intégration, on obtient immédiatement :

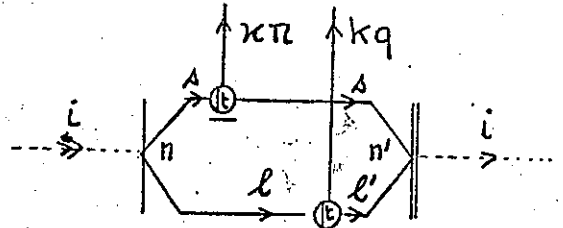
$$G^{33} = G^{34} = G^{35} \quad (\text{I} - 2 - 22)$$



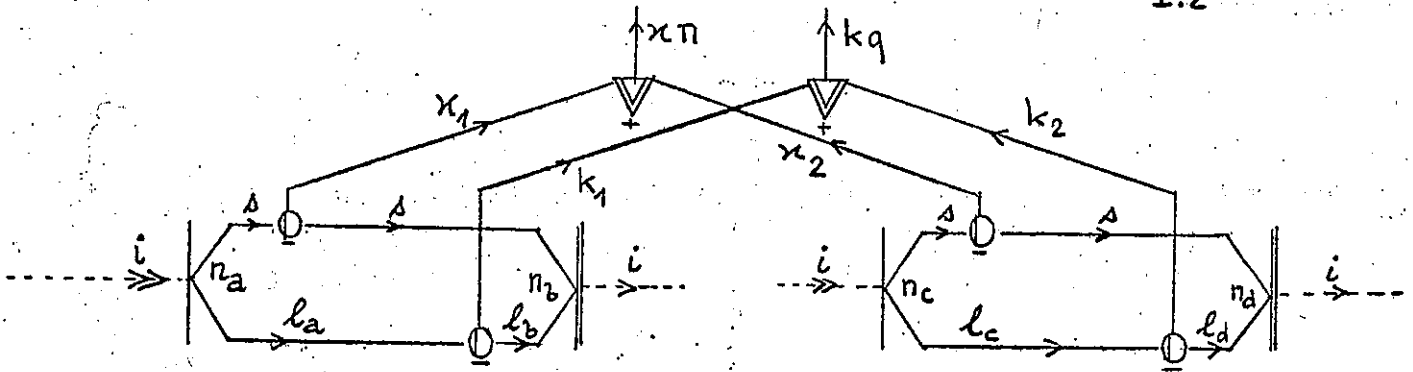
$G_{I.2}^{36}$



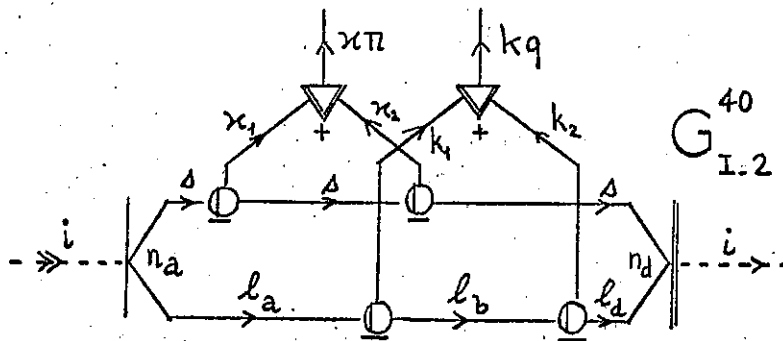
$G_{I.2}^{37}$



$G_{I.2}^{38}$



$G_{I.2}^{39}$



$G_{I.2}^{40}$

En utilisant une autre forme de l'équation (19), à savoir :

$$(-)^{j'-m'+k-q} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ m-q & -m' & \end{pmatrix} = G^{36} \quad (\text{I} - 2 - 23)$$

et en sortant également les cercles des graphes G^{33} et G^{35} , il vient la relation générale :

$$G^{32} = (-)^{2j} G^{37} \quad (\text{I} - 2 - 24)$$

Les propriétés des coefficients 3-jm de Wigner, nécessaires à l'établissement de cette relation, sont rappelées au paragraphe (I - 3 - 1).

On voit maintenant comment on peut représenter un opérateur tensoriel quelconque du type :

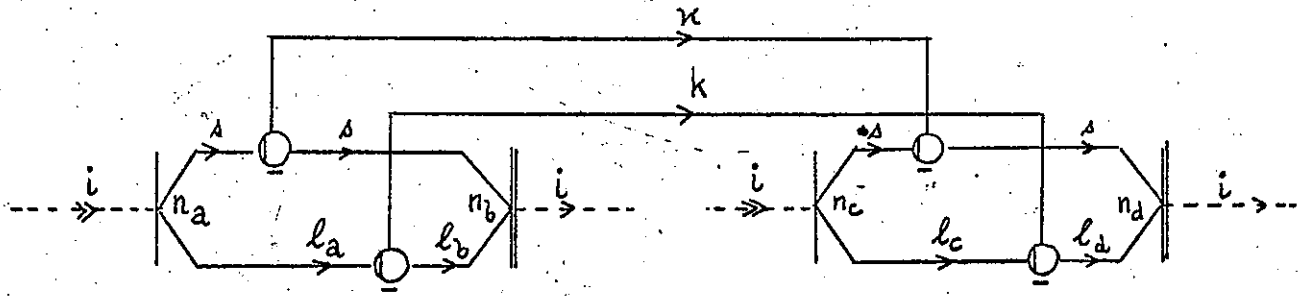
$$t_i \begin{pmatrix} \kappa k \\ \pi q \end{pmatrix} (n l, n' l') \quad (\text{I} - 2 - 25)$$

En effet, un tel opérateur diffère de l'opérateur w seulement par ses éléments de matrice réduits. Il suffit donc de donner une certaine valeur à un cercle dans lequel on inscrira la lettre t , et l'opérateur (25) se représentera, de la même manière que w , par le graphe G^{38} .

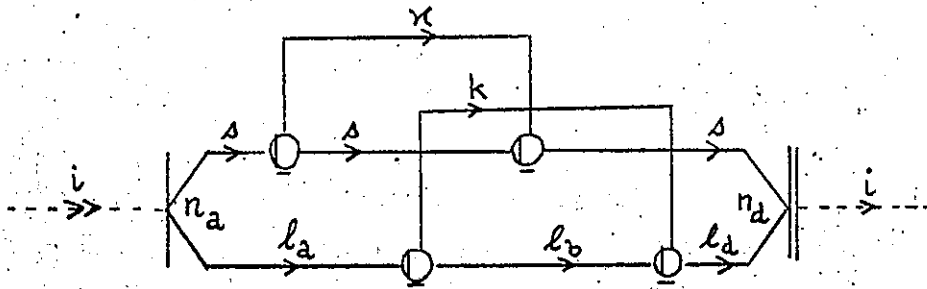
I - 2 - 3 - 2 - Intégrations entre opérateurs :

Lorsque deux opérateurs se suivent et portent sur le ou les mêmes électrons, on peut les relier entre eux comme si celui de droite était un ket et celui de gauche un bra. C'est justifié car ce sera réellement le cas dès que l'un d'eux aura agit sur un ket ou sur un bra.

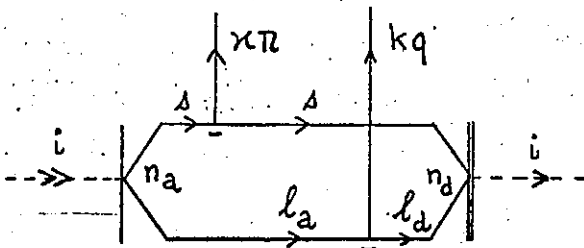
Le résultat n'est plus qu'un seul opérateur, portant sur le ou les ^{mêmes} électrons, qui peut, dans certains cas, immédiatement se simplifier. Voyons quelques



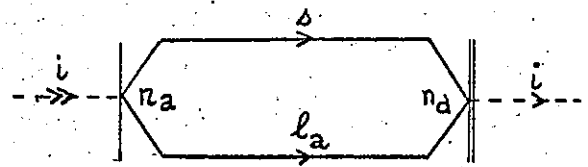
$G_{I.2}^{41}$



$G_{I.2}^{42}$



$G_{I.2}^{43}$



$G_{I.2}^{44}$

exemples.

Le produit tensoriel de deux opérateurs élémentaires portant sur le même électron i , se représente par :

$$G^{39} = \delta(n_b n_c) \delta(l_b l_c) G^{40} \quad (\text{I} - 2 - 26)$$

De même, le produit scalaire des mêmes opérateurs s'écrit :

$$G^{41} = \delta(n_b n_c) \delta(l_b l_c) G^{42} \quad (\text{I} - 2 - 27)$$

Or, nous verrons au paragraphe I - 3 - 2 que si on peut retirer une partie fermée d'un graphe en coupant celui-ci suivant 2 ou 3 branches, le graphe est proportionnel à celui obtenu en joignant les branches coupées (la partie retirée indique le coefficient de proportionnalité); s'il n'y a que deux branches coupées, il apparait un facteur δ . Par exemple les graphes G^{40} et G^{42} se simplifient de la façon suivante :

$$G^{40} = A G^{43} \quad (\text{I} - 2 - 28)$$

$$G^{42} = B \delta(l_a l_d) G^{44} \quad (\text{I} - 2 - 29)$$

Nous avons vu dans ce paragraphe comment on peut obtenir, par intégration, les graphes des éléments de matrice et des coefficients de recouplage. Ces graphes qui représentent donc des nombres, n'ont plus, de lignes pointillées. C'est leur algèbre que nous allons étudier maintenant dans le paragraphe I - 3.

I - 3 - ALGÈBRE GRAPHIQUE DES ÉLÉMENTS DE MATRICE ET DES COEFFICIENTS

DE RECOUPLAGE

Les graphes que nous avons obtenus pour représenter les éléments de matrice et les coefficients de recouplage ont les mêmes propriétés que les graphes définis par JUCYS ³⁾ et on peut leur appliquer exactement les mêmes règles qu'à ces derniers.

C'est ce que nous allons montrer en rappelant d'abord brièvement les principes de base des graphes de JUCYS. Pour chacune de ses définitions importantes; nous montrerons, en suivant EL-BAZ ⁷⁾, la correspondance avec les nôtres.

Ayant ainsi montré l'identité de nos graphes et de ceux de JUCYS, nous rappellerons les principales règles auxquelles ils obéissent et qui permettent de trouver leur valeur. Nous verrons successivement :

- les règles de fermeture,
- la suppression des branches nulles,
- les règles de coupure.

En appliquant ces règles, on aboutit finalement aux graphes des coefficients \mathfrak{Z}_{n-j} , dont nous rappellerons alors les principales propriétés.

Nous ne reprenons pas, dans ce paragraphe, l'ensemble des règles et des démonstrations de JUCYS. Nous nous contentons de rappeler celles qui nous ont paru essentielles à l'utilisation pratique de la méthode; nous avons quelquefois modifié un peu leur présentation pour améliorer encore la facilité de leur emploi (par exemple : la partie sur la suppression des branches nulles).

I - 3 - 1 - Comparaison avec les premiers graphes de Jucys :

Nous allons examiner, dans ce paragraphe, les deux définitions de base des graphes de Jucys :

- la représentation du coefficient 3-jm de Wigner,
 - la sommation sur un nombre quantique magnétique,
- et montrer leur correspondance avec nos définitions.

I - 3 - 1 - 1 - Coefficient 3-jm :

Le coefficient 3-jm est représenté par un noeud simple, ou "pôle", à 3 branches :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = G^1 \quad (\text{I - 3 - 1})$$

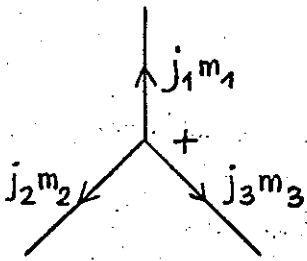
Comme pour le coefficient de Clebsch - Gordan, le signe indique le sens de lecture des 3 moments angulaires et le sens des flèches indique que les nombres m_i apparaissent avec un signe +.

Rappelons les principales propriétés de ce coefficient. Nous les exprimerons graphiquement. L'échange de deux colonnes introduit un facteur de phase, qui correspond donc au changement de signe d'un pôle:

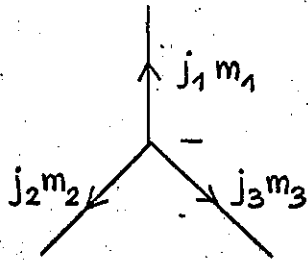
$$G^1 = (-)^{j_1 + j_2 + j_3} G^2 \quad (\text{I - 3 - 2})$$

Le changement de signe des 3 nombres m_i introduit le même facteur de phase:

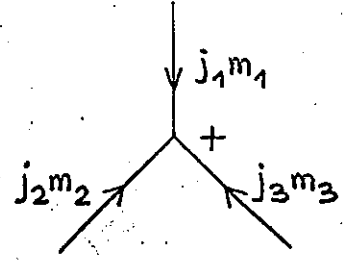
$$G^1 = (-)^{j_1 + j_2 + j_3} G^3 \quad (\text{I - 3 - 3})$$



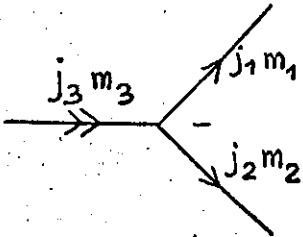
$G_{I.3}^1$



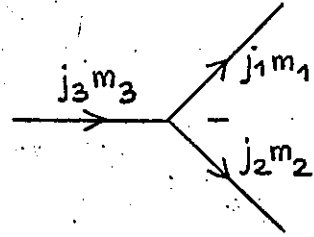
$G_{I.3}^2$



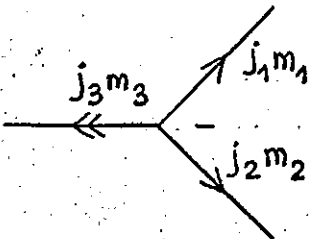
$G_{I.3}^3$



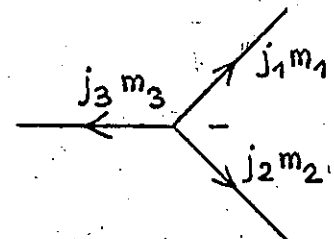
$G_{I.3}^4$



$G_{I.3}^5$



$G_{I.3}^6$



$G_{I.3}^7$

Wigner ¹⁴⁾ introduit la notation suivante :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m_3 \\ m_1 & m_2 & j_3 \end{pmatrix} = (-)^{j_3 - m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{I} - 3 - 4)$$

applicable à une colonne ou plusieurs colonnes quelconques du coefficient.

A l'aide de cette notation, les coefficients de Clebsch-Gordan s'expriment simplement :

$$(j_1 \ m_1 \ j_2 \ m_2 \ | \ jm) = (-)^{j_1 - j_2 - j} \hat{j} \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & j \\ j_1 & j_2 & m \end{pmatrix} \quad (\text{I} - 3 - 5)$$

$$(jm \ | \ j_1 \ m_1 \ j_2 \ m_2) = (-)^{j_1 - j_2 + j} \hat{j} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m \\ m_1 & m_2 & j \end{pmatrix} \quad (\text{I} - 3 - 6)$$

On convient, avec EL-BAZ ⁷⁾, de représenter le premier membre de l'équation (4) par le graphe G^4 . L'équation (4) s'écrit alors :

$$G^4 = (-)^{j_3 - m_3} G^5 \quad (\text{I} - 3 - 7)$$

en changeant le signe de m_3 , on obtient :

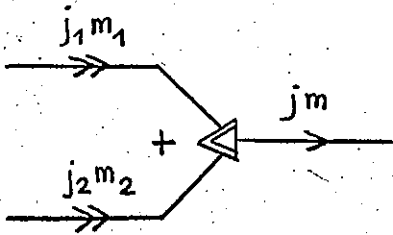
$$G^6 = (-)^{j_3 + m_3} G^7 \quad (\text{I} - 3 - 8)$$

Ces deux équations expriment le facteur de phase dû à la suppression d'une double flèche.

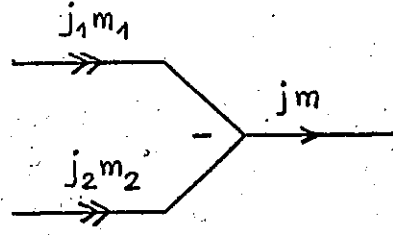
A un changement de signe près (formule (2)), les formules (5) et (6) s'écrivent alors :

$$G^8 = (-)^{2j_1} \hat{j} G^9 \quad (\text{I} - 3 - 9)$$

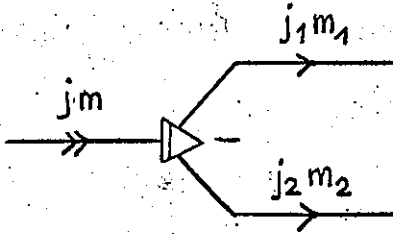
$$G^{10} = (-)^{2j_2} \hat{j} G^{11} \quad (\text{I} - 3 - 10)$$



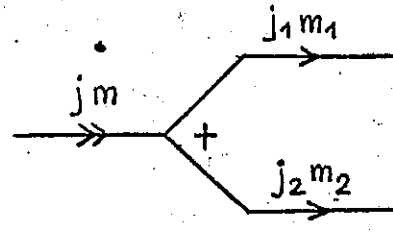
$G_{I.3}^8$



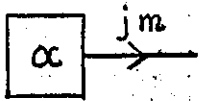
$G_{I.3}^9$



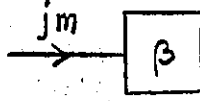
$G_{I.3}^{10}$



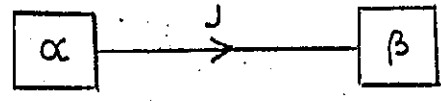
$G_{I.3}^{11}$



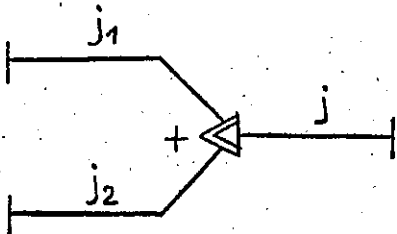
$G_{I.3}^{12}$



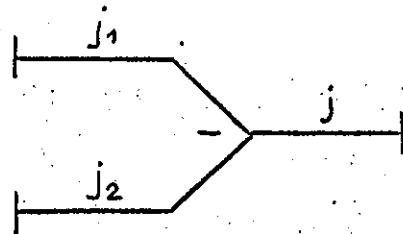
$G_{I.3}^{13}$



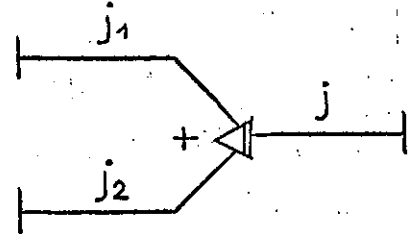
$G_{I.3}^{14}$



$G_{I.3}^{15}$



$G_{I.3}^{16}$



$G_{I.3}^{17}$

Pour pouvoir écrire de façon tout à fait générale ces formules de suppression des triangles, il nous faut connaître la règle de sommation sur m dans les graphes de Jucys.

I - 3 - 1 - 2 - Règle de sommation sur un nombre quantique de projection :

La règle donnée par JUCYS ³⁾ est la suivante : la sommation sur un indice m s'effectue en reliant deux branches libres homologues (même j , même m), l'une sortante, l'autre rentrante, à condition qu'il se trouve sous la somme le facteur de phase $(-)^{j-m}$. Elle s'exprime graphiquement par :

$$\sum_m (-)^{j-m} G^{12} G^{13} = G^{14} \quad (\text{I - 3 - 11})$$

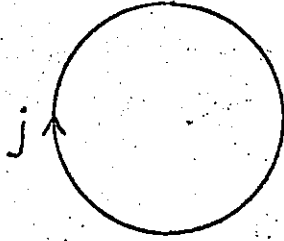
Si on utilise l'une des formules (7) ou (8) pour faire disparaître le facteur de phase, on s'aperçoit que cette formule est exactement la même que l'une des formules (I - 1 - 2) ou (I - 1 - 3).

Cette constatation nous permet de généraliser les formules (9) et (10) à des branches liées. Ces formules étant indépendantes du sens des flèches, nous ne les indiquons pas; il est entendu qu'ils se conservent au cours de l'opération :

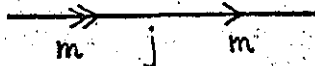
$$G^{15} = (-)^{2j_1} \updownarrow G^{16} \quad (\text{I - 3 - 12})$$

$$G^{17} = (-)^{2j_2} \updownarrow G^{16} \quad (\text{I - 3 - 13})$$

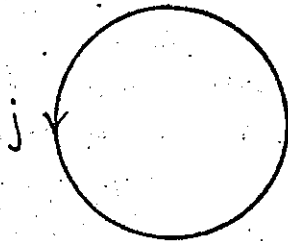
Ces deux formules, très importantes, expriment la possibilité de supprimer les triangles dans un graphe quelconque, et donc de passer de nos graphes aux graphes de Jucys. De plus, la suppression d'un triangle ne modifie que le noeud sur lequel il est placé. Or les principales règles de Jucys (règles de



$G_{I.3}^{18}$



$G_{I.3}^{19}$



$G_{I.3}^{20}$

jj

fermeture et de coupure) ne concernent que les branches du graphe auquel elles s'appliquent. Elles peuvent donc être utilisées sur nos graphes, avant ou après la suppression des triangles.

En particulier, la règle de changement de sens d'une branche est la même (formule I - 1 - 4). Il existe cependant un graphe dans lequel le sens d'une branche n'a pas de signification particulière : le graphe circulaire. En effet :

$$G^{18} = \sum_{\text{III}} G^{19} = G^{20} = [j] \quad (\text{I} - 3 - 14)$$

La comparaison des deux formules (12) et (13) donne une relation entre les deux sortes de triangles :

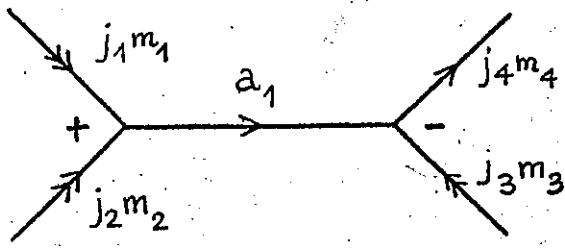
$$G^{15} = (-)^{2j} G^{17} \quad (\text{I} - 3 - 15)$$

Cette formule est la même que celle pour les cercles (formule (I-2-24)).

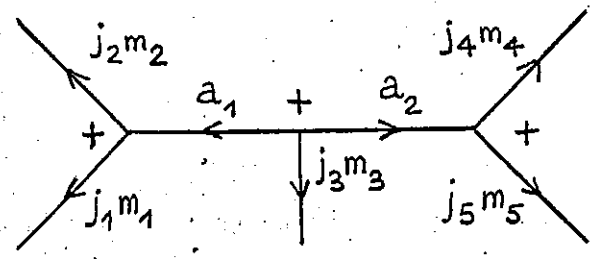
Maintenant que nous avons montré l'identité des deux systèmes graphiques, voyons quelles sont les règles qui permettent de les résoudre (autrement dit de les calculer).

I - 3 - 2 - Règles de simplification des graphes :

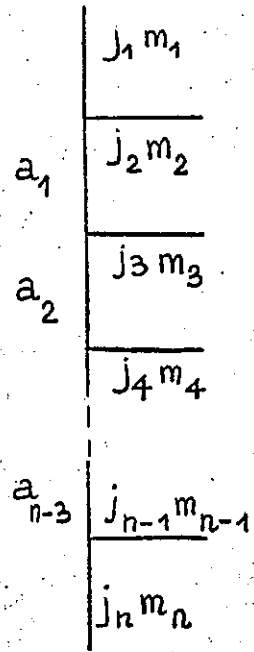
Les règles qui suivent ont pour but d'exprimer les graphes sous la forme des coefficients $3n-j$ ou des coefficients $n-jm$. Ces derniers sont des coefficients de Wigner généralisés, ou coefficients de couplage: le plus connu est le $3-jm$ déjà rencontré. Les premiers sont des coefficients de recouplage, dont le plus connu est le coefficient $6-j$ (introduit d'abord par RACAH ²⁾ sous une forme un peu différente). Nous verrons, dans le paragraphe suivant, la représen-



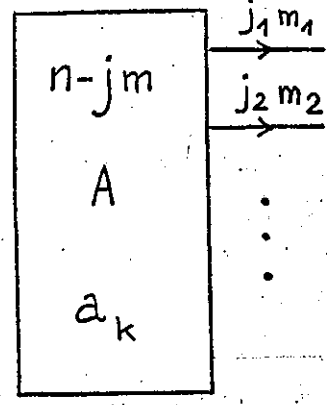
$G_{I.3}^{21}$



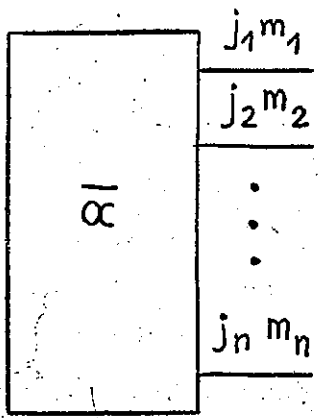
$G_{I.3}^{22}$



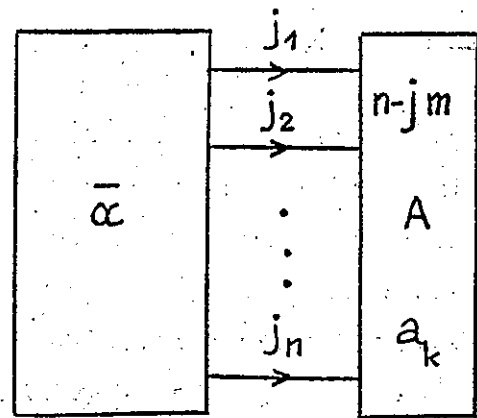
$G_{I.3}^{23}$



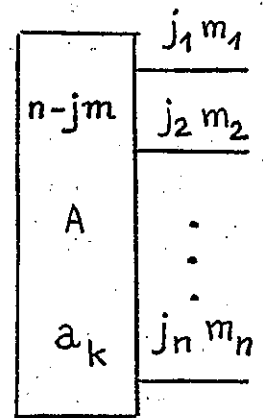
$G_{I.3}^{24}$



$G_{I.3}^{25}$



$G_{I.3}^{26}$



$G_{I.3}^{27}$

tation de ces coefficients et quelquesunes de leurs propriétés. Mais auparavant, nous allons voir les règles qui permettent de simplifier un graphe quelconque pour en faire un produit de $3n-j$ ou de $n-jm$.

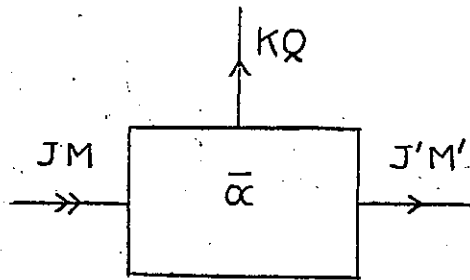
Certaines des règles données dans ce paragraphe sont longues et difficiles à démontrer. Nous renvoyons le lecteur au livre de JUCYS et coll.³⁾ pour ces démonstrations.

I - 3 - 2 - 1 - Règles de fermeture :

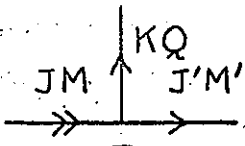
On appelle "fermeture d'un graphe" à n branches libres, l'écriture de ce graphe sous la forme d'un graphe fermé, où les n branches se rejoignent en un certain nombre de noeuds, et d'un coefficient $n-jm$.

Voyons donc d'abord comment se représente un coefficient $n-jm$ de façon générale. C'est, comme nous l'avons dit, un coefficient de couplage de h moments angulaires; il contient $n-3$ moments angulaires intermédiaires que nous noterons a_1, a_2, \dots, a_{n-3} . Les graphes G^{21} et G^{22} représentent respectivement un $4-jm$ et un $5-jm$. De façon générale, ils ont une structure arborescente, c'est-à-dire où n'apparaît aucune boucle : le graphe G^{23} représente un $n-jm$ général, le signe des noeuds, le sens et la nature des flèches étant variables. Un $n-jm$ s'exprime de façon évidente en fonction de coefficients $3-jm$, en faisant apparaître les sommations sur les projections des $n-3$ moments angulaires intermédiaires. De façon générale, nous représenterons un $n-jm$ par le graphe G^{24} , où A précise l'ordre de couplage des moments angulaires et les facteurs de phase employés et où k varie de 1 à $n-3$.

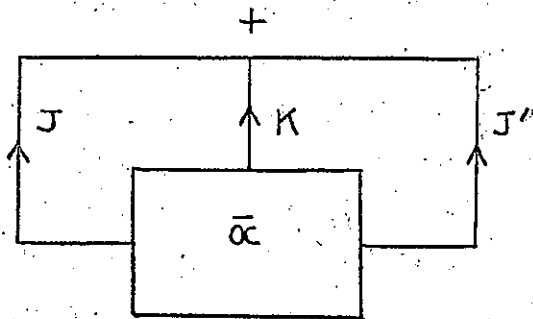
Dans ces conditions, la fermeture d'un graphe s'exprime par la formule suivante (formule (13.5) de JUCYS³⁾):



$G_{I.3}^{28}$



$G_{I.3}^{29}$



$G_{I.3}^{30}$

$$G^{25} = \sum_{\substack{a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_{n-3}}} [a_1] [a_2] \dots [a_{n-3}] G^{26} G^{27} \quad (\text{I} - 3 - 16)$$

La barre qui surmonte α signifie que la boîte ne contient pas d'autres branches libres que celles qui sont effectivement dessinées. D'autre part, l'absence de flèches sur les branches libres signifie qu'elles peuvent être quelconques, sortantes ou rentrantes, simples ou doubles; mais leur nature et leur sens se conservent au cours de l'opération. Par contre, le sens des branches j_1, j_2, \dots, j_n dans le graphe fermé (G^{26}) est bien déterminé: elles sont toujours dirigées vers le n -jm.

Nous allons tout de suite utiliser la relation (16) dans deux cas particuliers importants :

a) $n = 3$: dans ce cas, la somme disparaît et le n -jm devient un 3-jm. C'est le cas de l'élément de matrice :

$$(\Psi \ J \ M \mid \bar{X}^K \mid \Psi' \ J' \ M') \quad (\text{I} - 3 - 17)$$

qui s'exprime graphiquement :

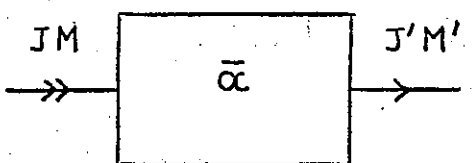
$$G^{28} = G^{29} G^{30} \quad (\text{I} - 3 - 18)$$

Nous reconnaissons ici le théorème de Wigner - Eckart :

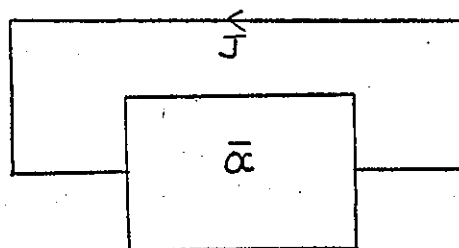
$$(\Psi \ J \ M \mid \bar{X}^K \mid \Psi' \ J' \ M') = \begin{pmatrix} M & K & J' \\ J & Q & M' \end{pmatrix} (\Psi \ J \parallel \bar{X}^K \parallel \Psi' \ J') \quad (\text{I} - 3 - 19)$$

Nous savons donc maintenant représenter un élément de matrice réduit :

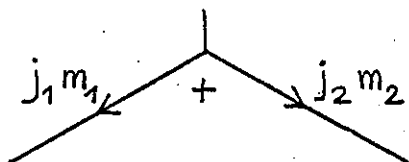
$$(\Psi \ J \parallel \bar{X}^K \parallel \Psi' \ J') = G^{30} \quad (\text{I} - 3 - 20)$$



$G_{I.3}^{31}$



$G_{I.3}^{32}$



$G_{I.3}^{33}$

b) n = 2 : ce cas est en fait un cas particulier du précédent, le 2-jm étant un 3-jm où un des moments angulaires est nul. Il n'y a donc pas non plus de somme mais le 2-jm peut tout de suite se remplacer par un facteur δ et un coefficient numérique :

$$G^{31} = \delta(J J') \delta(M M') [J]^{-1} G^{32} \quad (I - 3 - 21)$$

Ces formules nous permettent de nous ramener, dans tous les cas, à un graphe fermé. Nous allons maintenant apprendre à simplifier ces graphes.

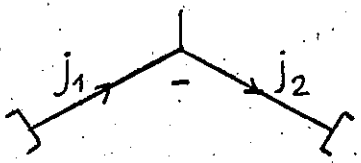
I - 3 - 2 - 2 - Suppression des branches nulles :

Lorsqu'une branche a la valeur zéro, on la supprime simplement. Seulement les noeuds qui constituaient ses extrémités ne sont pas supprimés pour autant; ce sont les formules qui permettent de les supprimer que nous donnons dans ce paragraphe.

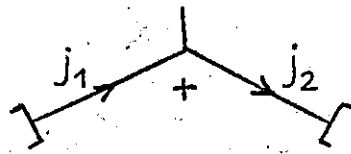
Nous donnerons seulement les formules concernant les pôles; celles concernant les triangles peuvent s'en déduire facilement à l'aide des relations (I - 3 - 12) et (I - 3 - 13). La petite branche qui apparait aux noeuds des graphes de ce paragraphe représente l'emplacement de la branche nulle; il est indiqué pour que le signe du noeud ait encore un sens.

Les règles ci-dessous se déduisent toutes de la formule exprimant le 2-jm ³⁾:

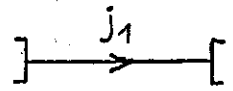
$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & 0 \\ m_1 & m_2 & 0 \end{pmatrix} = G^{33} = j_1^{-1} \delta(j_1 j_2) (-)^{j_1 - m_1} \delta(m_1, -m_2) \quad (I - 3 - 22)$$



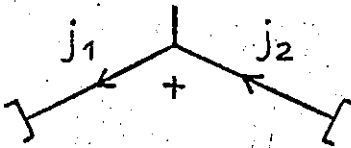
$G_{I.3}^{34}$



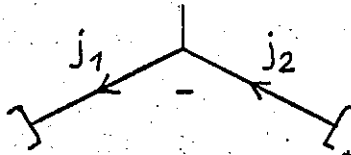
$G_{I.3}^{35}$



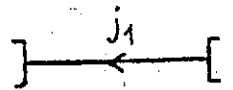
$G_{I.3}^{36}$



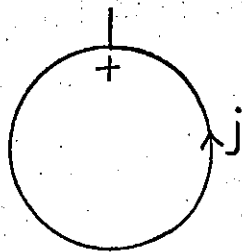
$G_{I.3}^{37}$



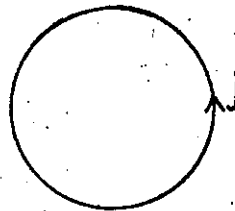
$G_{I.3}^{38}$



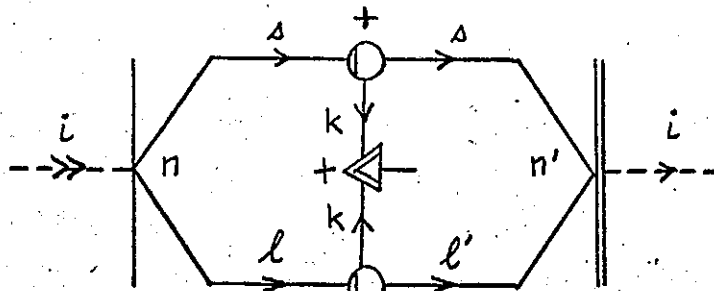
$G_{I.3}^{39}$



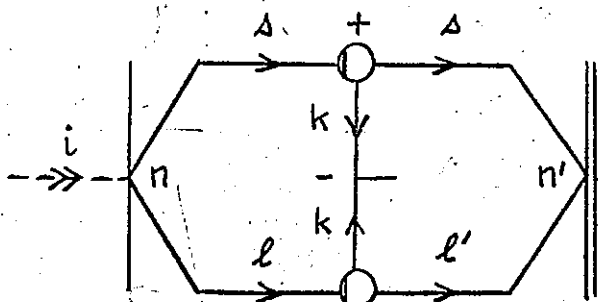
$G_{I.3}^{40}$



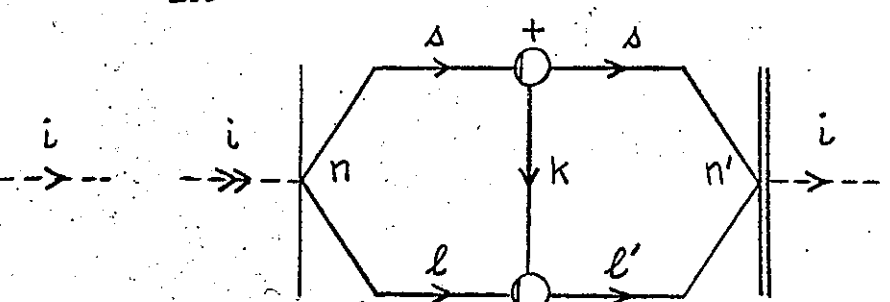
$G_{I.3}^{41}$



$G_{I.3}^{42}$



$G_{I.3}^{43}$



$G_{I.3}^{44}$

A partir de cette formule, on établit aisément les suivantes :

$$G^{34} = (-)^{2j_1} G^{35} = \delta(j_1, j_2) \hat{j}_1^{-1} G^{36} \quad (\text{I} - 3 - 23)$$

$$G^{37} = (-)^{2j_1} G^{38} = \delta(j_1, j_2) \hat{j}_1^{-1} G^{39} \quad (\text{I} - 3 - 24)$$

Les branches qui interviennent dans ces graphes ont des extrémités quelconques (tirets, pôles, extrémités libres) : ces formules sont donc tout à fait générales; j_1 et j_2 peuvent même être la même branche :

$$G^{40} = \hat{j}^{-1} G^{41} = \hat{j} \quad (\text{I} - 3 - 25)$$

Nous allons utiliser immédiatement ces formules pour retrouver la relation entre le produit scalaire de deux opérateurs, ou le "couplage scalaire" des deux rangs d'un même opérateur (cf formule (I - 1 - 55)) et le produit tensoriel de rang 0 correspondant.

Considérons le graphe d'un produit tensoriel de rang 0 :

$$w_i^{(k,k) 0} (n \ell, n' \ell') = G^{42} \quad (\text{I} - 3 - 26)$$

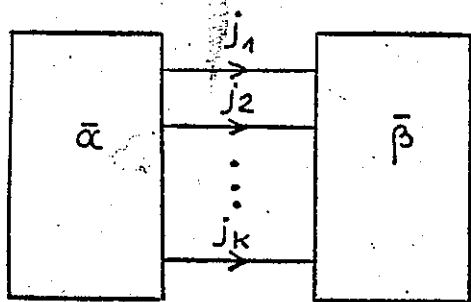
Commençons par supprimer le triangle (formule (I - 3 - 15)) :

$$G^{42} = (-)^{2k} G^{43} \quad (\text{I} - 3 - 27)$$

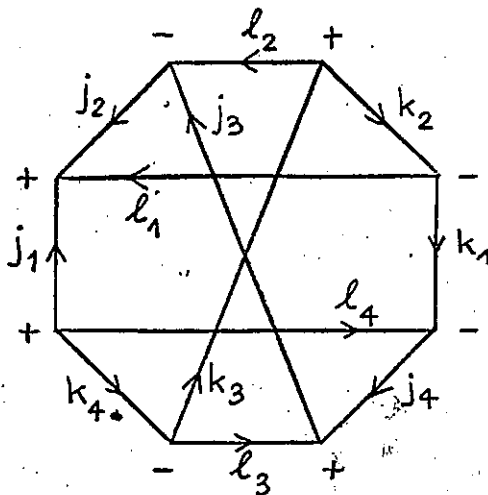
En utilisant la formule (24), il vient finalement :

$$G^{42} = \hat{k}^{-1} G^{44} = (-)^k \hat{k}^{-1} w_i^{(k,k)} (n \ell, n' \ell') \quad (\text{I} - 3 - 28)$$

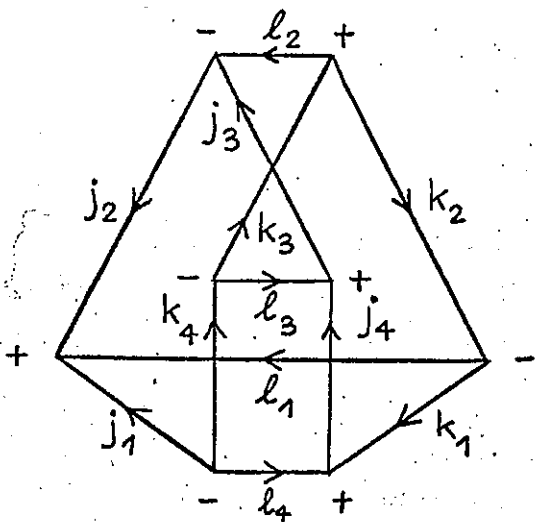
Cette formule est obtenue par JUDD⁴⁾ analytiquement.



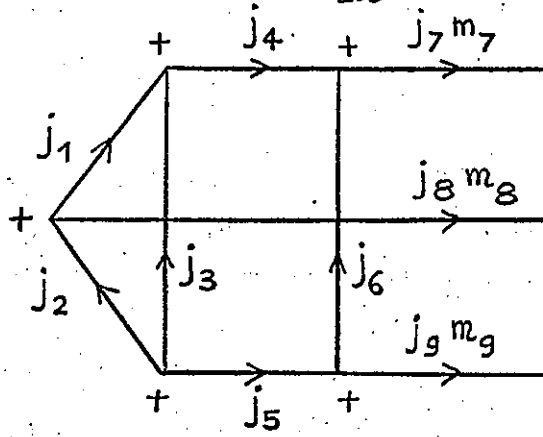
$G_{I.3}^{45}$



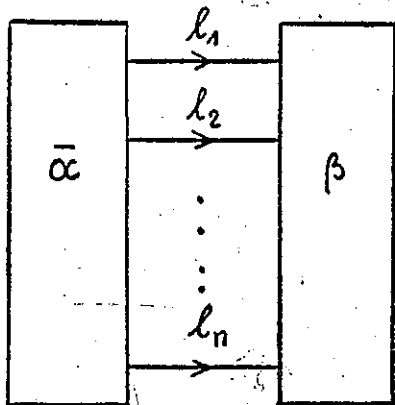
$G_{I.3}^{46}$



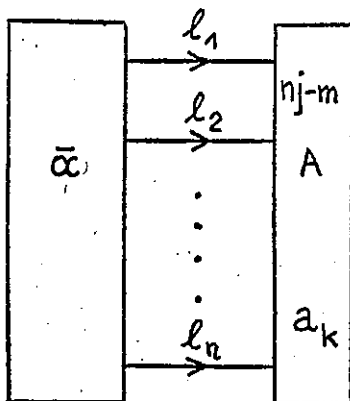
$G_{I.3}^{47}$



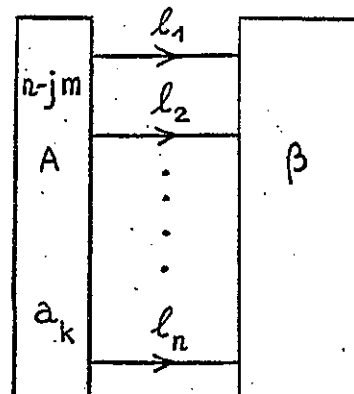
$G_{I.3}^{48}$



$G_{I.3}^{49}$



$G_{I.3}^{50}$



$G_{I.3}^{51}$

Nous avons vu comment fermer un graphe et comment supprimer ses branches nulles, il ne nous reste plus à voir que les règles de coupure qui permettent d'obtenir les $3n-j$ les plus simples.

I - 3 - 2 - 3 - Règles de coupure :

Nous dirons qu'un graphe possède une "coupure suivant k branches" si on peut dessiner ce graphe sous la forme de deux graphes reliés par k branches, c'est-à-dire sous la forme du graphe G^{45} .

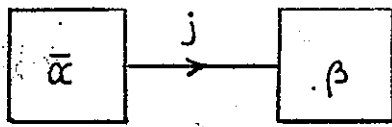
Prenons un exemple : le graphe G^{46} , dont nous verrons plus loin qu'il correspond à un coefficient $12-j$, peut être coupé de façon évidente suivant les 4 branches j_1, j_3, k_1, k_3 . Mais il peut aussi être coupé suivant les branches j_2, k_2, j_4, k_4 ; en effet on peut le redessiner sous la forme de G^{47} .

Lorsqu'un graphe possède des branches libres, nous ne parlerons de coupure que lorsque toutes les branches libres seront placées du même côté des branches coupées. Par exemple, dans G^{48} , j_4, j_5, j_8 est une coupure alors que j_2, j_3, j_6 n'en est pas une.

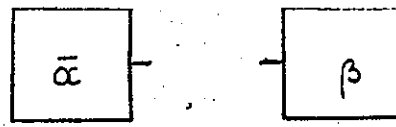
Nous pouvons donner maintenant la "règle de coupure" d'un graphe (formule (14-2) de JUCYS³⁾). Si un graphe G^{49} possède une coupure suivant les branches l_1, l_2, \dots, l_n , on peut écrire :

$$G^{49} = \sum_{a_1, a_2, \dots, a_{n-3}} [a_1] \dots [a_{n-3}] G^{50} G^{51} \quad (I - 3 - 29)$$

Cette formule très importante permet de simplifier un graphe quelconque en l'exprimant comme une somme de produits de deux graphes plus simples. Mais dans les cas particuliers où $n \leq 3$, la somme disparaît et la formule (29) permet alors d'écrire le graphe du premier membre comme le produit de deux graphes plus simples.



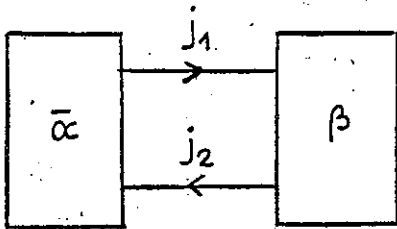
$G_{I.3}^{52}$



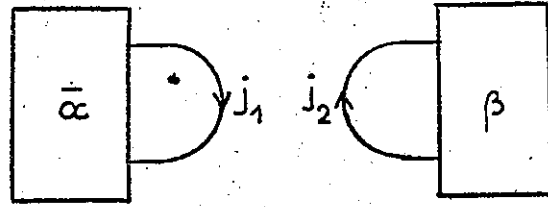
$G_{I.3}^{53}$



$G_{I.3}^{54}$

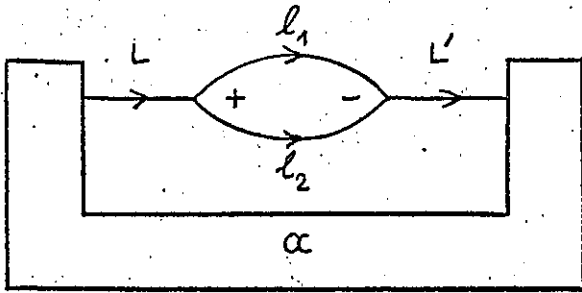


$G_{I.3}^{55}$

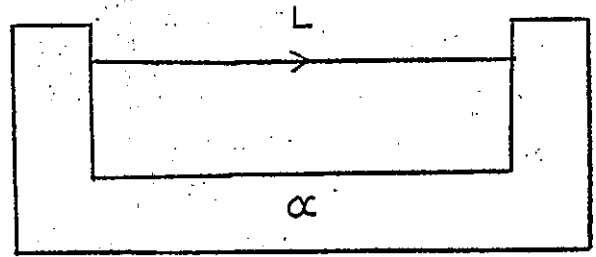


$G_{I.3}^{56}$

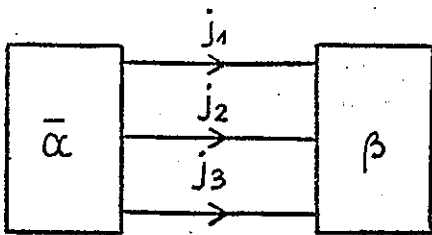
$G_{I.3}^{57}$



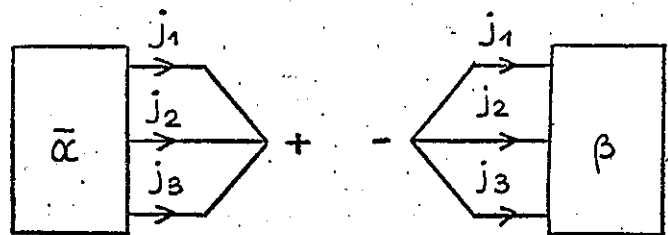
$G_{I.3}^{58}$



$G_{I.3}^{59}$

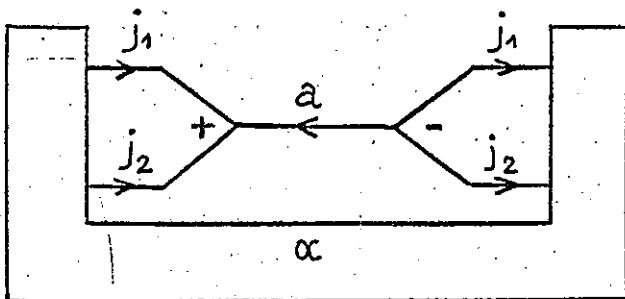


$G_{I.3}^{60}$

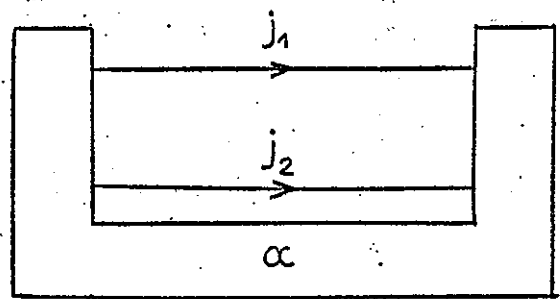


$G_{I.3}^{61}$

$G_{I.3}^{62}$



$G_{I.3}^{63}$



$G_{I.3}^{64}$

Plus précisément, on a :

a) pour n = 1 :

$$G^{52} = \delta(j, 0) G^{53} G^{54} \quad (I - 3 - 30)$$

b) pour n = 2 :

$$G^{55} = \delta(j_1, j_2) [j_1]^{-1} G^{56} G^{57} \quad (I - 3 - 31)$$

dont un cas particulier important s'écrit :

$$G^{58} = \delta(\ell_1, \ell_2, L) \delta(L, L') (-)^{2L} [L]^{-1} G^{59} \quad (I - 3 - 32)$$

On a utilisé ici le graphe du delta triangulaire (G_{I-3}^{72})

£

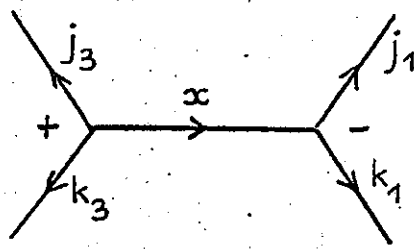
c) pour n = 3 :

$$G^{60} = G^{61} G^{62} \quad (I - 3 - 33)$$

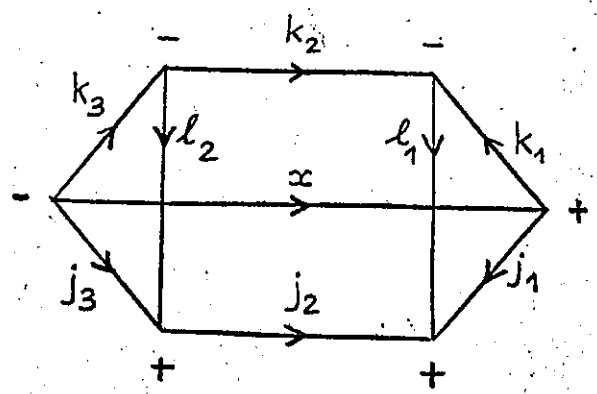
Pour $n > 3$, les n -jm utilisables sont de plus en plus nombreux et on emploie la formule générale (29). Cependant un cas particulier de $n = 4$ permet de sommer un graphe sur une de ses branches liées :

$$\sum_a [a] G^{63} = G^{64} \quad (I - 3 - 34)$$

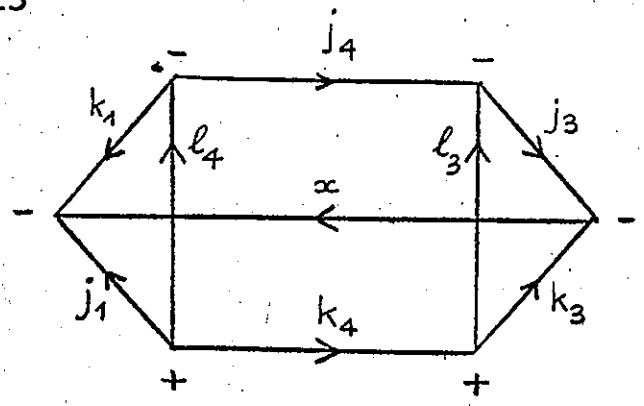
Dans toutes les formules ci-dessus, les blocs α ou β représentent, quelle que soit leur forme, un graphe fermé ou quelconque suivant que α ou β sont surlignés ou non. Nous verrons de nombreuses applications de ces formules dans les chapitres suivants; mais pour fixer les idées, donnons tout de suite un exemple simple d'utilisation de la formule (29). Prenons l'exemple du graphe G^{46} et utilisons, pour la coupure j_1, j_3, k_1, k_3 , le 4-jm représenté dans le graphe G^{65} . Pour utiliser la formule (29), toutes les branches coupées doivent aller dans la même direction; nous devons donc changer le sens de k_1 . Il vient :



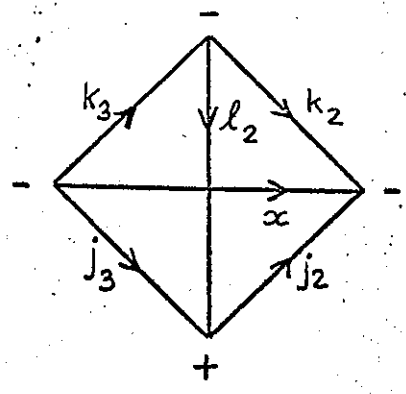
$G_{I.3}^{65}$



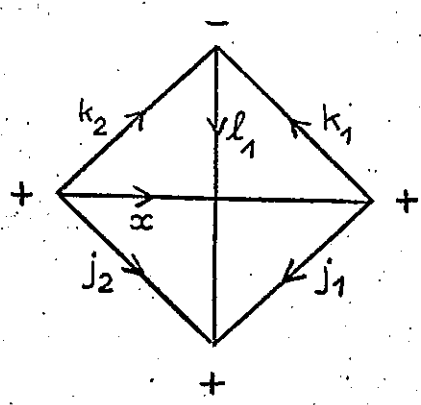
$G_{I.3}^{66}$



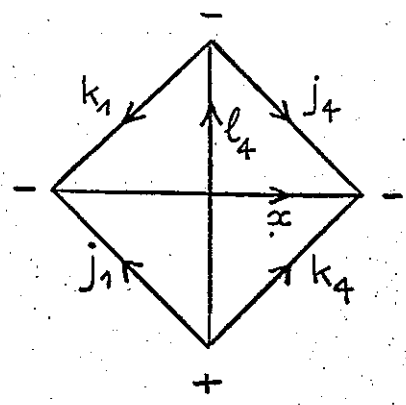
$G_{I.3}^{67}$



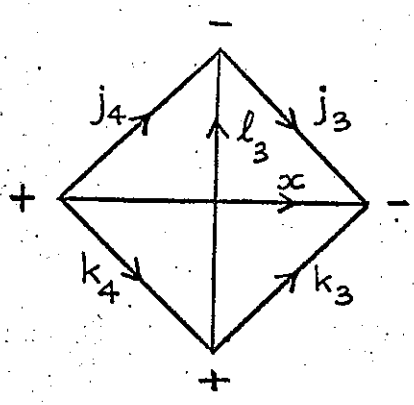
$G_{I.3}^{68}$



$G_{I.3}^{69}$



$G_{I.3}^{70}$



$G_{I.3}^{71}$

$$G^{46} = \sum_x (-)^{2k_1} [x] G^{66} G^{67} \quad (\text{I} - 3 - 35)$$

Chacun des graphes G^{66} et G^{67} peut alors se couper suivant 3 branches (formule (33)) :

$$G^{46} = \sum_x (-)^{2k_1+2x} [x] G^{68} G^{69} G^{70} G^{71} \quad (\text{I} - 3 - 36)$$

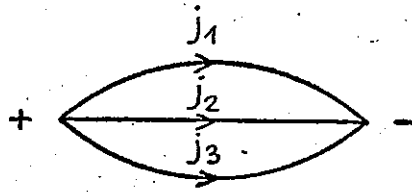
Nous verrons au paragraphe suivant que chacun des 4 graphes obtenus est un 6-j, à un facteur de phase près. On obtient donc la formule de décomposition d'un 12-j sur une somme de 4 6-j.

Lorsque, dans la formule (29), le nombre de noeuds de β , par exemple, est inférieur ou égal à $n-2$, le graphe obtenu en reliant $\bar{\alpha}$ au n -jm possède au moins autant de noeuds que le graphe de départ. On n'a donc rien gagné dans l'opération. Une telle coupure est dite "triviale". Ce serait le cas, par exemple, d'une coupure suivant 3 branches qui n'isoleraient qu'un noeud.

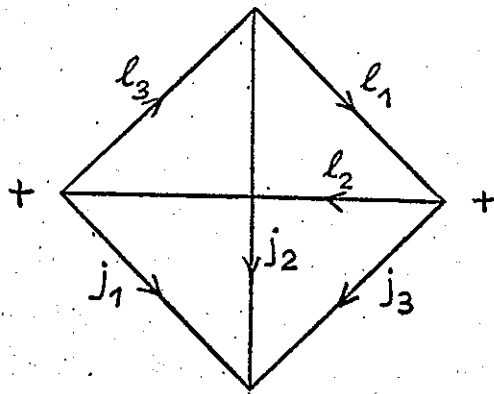
Nous avons vu que certains graphes peuvent s'exprimer comme le produit de deux autres (formules (30) à (33)). Les autres graphes fermés, qui ne possèdent pas de coupure à moins de 4 branches, sont les graphes des coefficients $3n-j$.

I - 3 - 3 - Coefficients $3n-j$:

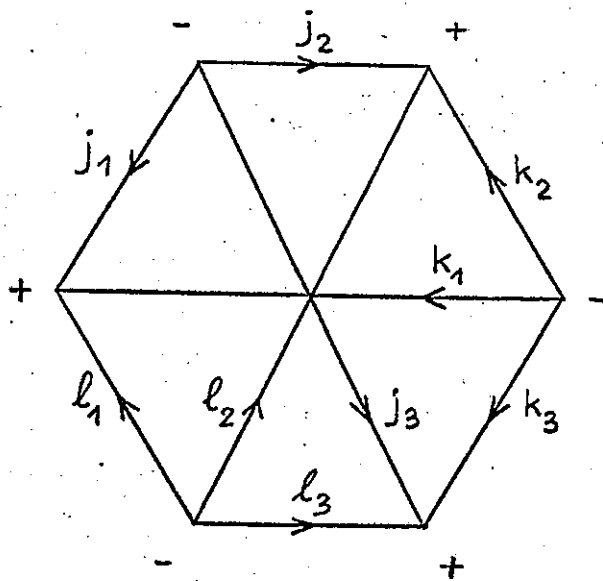
Les coefficients $3n-j$ se classent par valeur de n . Pour $n \leq 3$, à chaque valeur de n correspond un seul type de coefficient. Ensuite leur nombre croît très rapidement, comme l'indique le tableau I - 1¹⁵⁾.



$G_{I.3}^{72}$



$G_{I.3}^{73}$



$G_{I.3}^{74}$

Ils sont représentés par des graphes fermés, possédant $3n$ branches et $2n$ noeuds polaires. Pour chaque coefficient, le signe des noeuds et le sens des branches, qui indiquent la phase, doivent être précisés.

Voyons d'abord la forme que prennent les 3 coefficients les plus simples :

Tableau I - 1	
Nombre N de coefficients $3n-j$ différents pour chaque valeur de n	
n	N
4	2
5	5
6	18
7	84
8	576
9	4536 (?)

a) $\underline{n=1}$: c'est le delta triangulaire, qui vaut 1 si les 3 moments angulaires forment un triangle ($|j_1 - j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2$) et 0 sinon :

$$G^{72} = \delta(j_1, j_2, j_3) \quad (I - 3 - 37)$$

b) $\underline{n=2}$: c'est le coefficient $6-j$:

$$G^{73} = \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} \quad (I - 3 - 38)$$

c) $\underline{n=3}$: c'est le coefficient $9-j$:

$$G^{74} = \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ k_1 & k_2 & k_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} \quad (I - 3 - 39)$$

Le graphe du $12-j$ de première espèce (G_{I-3}^{46}) a été donné à titre d'exemple au paragraphe précédent, et nous rencontrerons quelques exemples de $15-j$ et de $18-j$ aux chapitres suivants. Une liste complète des graphes et des formules des coefficients $3n-j$ jusqu'à $n = 6$ inclus est donnée par JUCYS³⁾. Au delà,

The first part of the document discusses the importance of maintaining accurate records of all transactions and activities. This includes keeping track of income, expenses, and assets. It is essential to have a clear understanding of your financial situation at all times.

The second part of the document provides a detailed overview of the various financial instruments and services available. This includes information on stocks, bonds, mutual funds, and other investment options. It also covers the basics of banking, credit, and insurance.

The third part of the document focuses on tax planning and management. It explains how to take full advantage of the various tax deductions and credits available. It also discusses the importance of staying up-to-date on the latest tax laws and regulations.

The fourth part of the document addresses the issue of retirement planning. It discusses the different types of retirement accounts and the benefits of each. It also provides guidance on how to determine the appropriate amount to save for retirement.

The fifth part of the document covers estate planning and the transfer of assets. It explains the various ways in which assets can be passed on to heirs and the importance of having a will. It also discusses the benefits of trusts and other estate planning tools.

The sixth part of the document discusses the importance of risk management and insurance. It explains how to identify potential risks and the best ways to mitigate them. It also provides information on the different types of insurance policies available.

The seventh part of the document covers the topic of financial counseling and advisory services. It discusses the benefits of working with a professional advisor and how to choose the right one for your needs. It also provides information on the fees and costs associated with these services.

The eighth part of the document discusses the importance of staying informed about financial news and market trends. It provides information on the various sources of financial information and the best ways to stay up-to-date. It also discusses the importance of having a long-term perspective when it comes to investing.

The final part of the document provides a summary of the key points discussed throughout the document. It emphasizes the importance of taking control of your financial future and making informed decisions. It also provides a list of resources for further information.

on doit utiliser soi-même les formules de coupure décrites au paragraphe précédent, afin de se ramener à des graphes plus simples. Nous donnerons, au chapitre III, plusieurs exemples de ce procédé.

Nous avons maintenant décrit l'ensemble des règles qui nous permettent de construire puis de résoudre les graphes de coefficients de recouplage ou d'éléments de matrice. Ces règles ont été construites à partir des définitions d'EL-BAZ ⁷⁾.

Parallèlement, JUCYS et coll. ⁶⁾ ont mis au point une autre méthode, dérivée de la première et qui a le même point de départ que celle d'EL-Baz : la représentation d'un coefficient de Clebsch - Gordan.

A titre de comparaison, nous allons voir rapidement les principales caractéristiques de cette méthode.

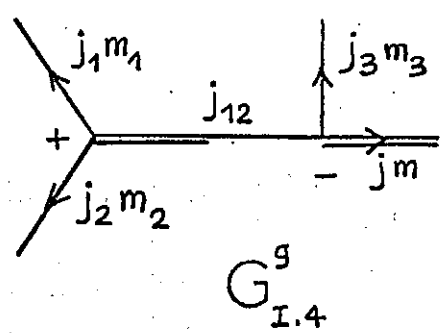
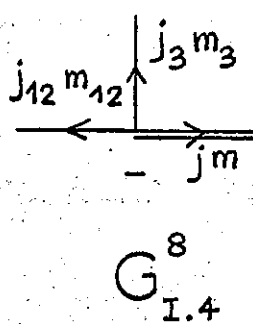
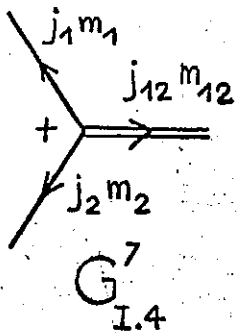
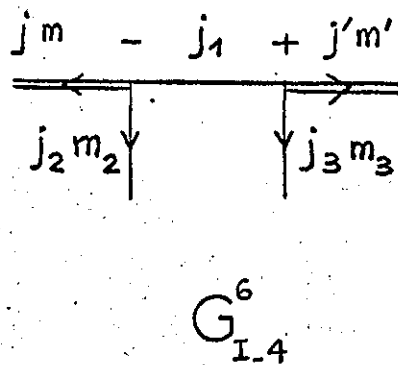
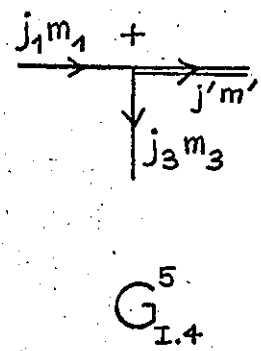
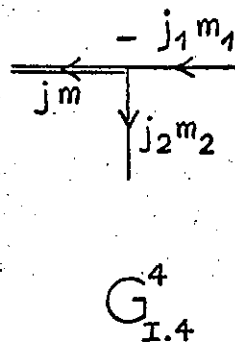
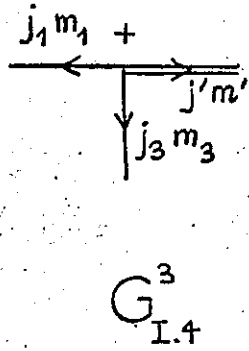
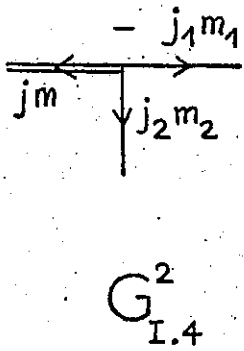
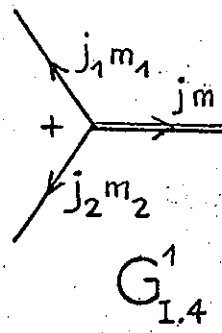
I - 4 - NOUVEAUX GRAPHES DE JUCYS :

Nous nous limiterons dans ce paragraphe à la description de quelques règles caractéristiques de la nouvelle méthode de Jucys, mais sans souci d'être exhaustif puisque notre but n'est que la comparaison des deux méthodes.

Nous verrons successivement la représentation d'un coefficient de Clebsch-Gordan, la sommation sur un nombre quantique de projection et quelques règles de coupure.

I - 4 - 1 - Représentation d'un coefficient de Clebsch - Gordan :

Comme pour EL-Baz, le fondement de la méthode est la représentation graphique directe du coefficient de Clebsch - Gordan. Mais ici le même graphe



représente les deux formes conjuguées du coefficient.

$$G^1 = (j_1 m_1 j_2 m_2 | jm) = (jm | j_1 m_1 j_2 m_2) \quad (\text{I} - 4 - 1)$$

Le moment angulaire résultat j est représenté par un trait double alors que les deux autres sont représentés par un trait fin; le signe du noeud a la même signification qu'auparavant; enfin le sens des flèches est lié, comme dans le 3-jm, à l'apparition d'un signe + ou - devant les nombres quantiques m_i .

Cette représentation est beaucoup plus directe que la nôtre (graphes G_{I-1}^{10} et G_{I-1}^{11}) et elle a l'avantage de représenter les deux coefficients conjugués par un seul graphe. Cette propriété se conserve quelque soit la complexité des coefficients. Voyons maintenant la seconde définition graphique de base : la sommation sur m .

I - 4 - 2 - Sommation sur un nombre quantique de projection :

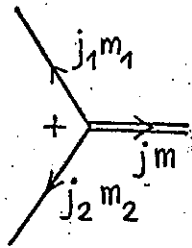
La règle de sommation sur m , qui se représente ici encore par la liaison de deux branches libres, va dépendre maintenant de l'épaisseur des branches. D'autre part, on relie toujours des branches de sens opposé.

Pour deux branches fines, la règle est la suivante :

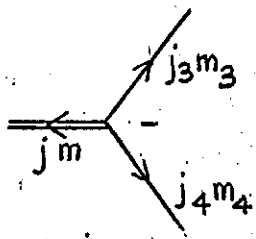
$$\sum_m G^2 G^3 = \sum_m G^4 G^5 = G^6 \quad (\text{I} - 4 - 2)$$

On voit que la flèche de la branche liée a disparu. Avec d'autres épaisseurs de branches, on a :

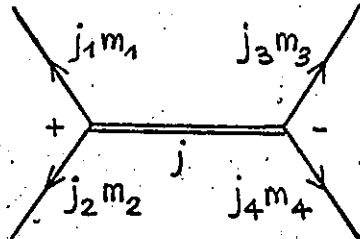
$$\sum_m G^7 G^8 = G^9 \quad (\text{I} - 4 - 3)$$



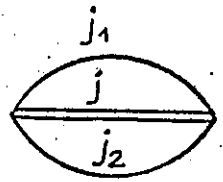
$G_{I.4}^{10}$



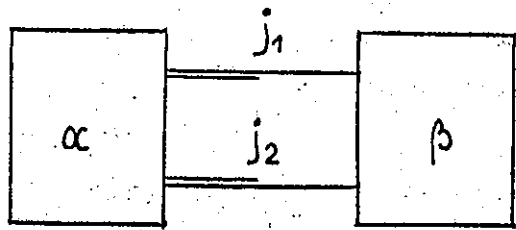
$G_{I.4}^{11}$



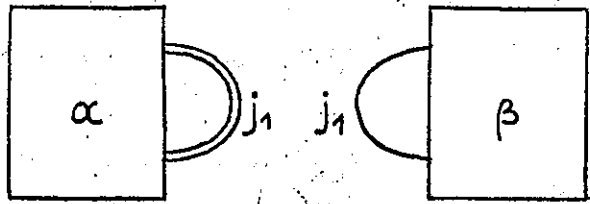
$G_{I.4}^{12}$



$G_{I.5}^{13}$

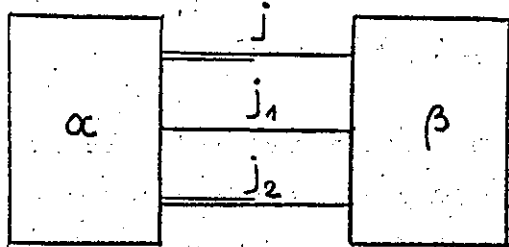


$G_{I.4}^{14}$

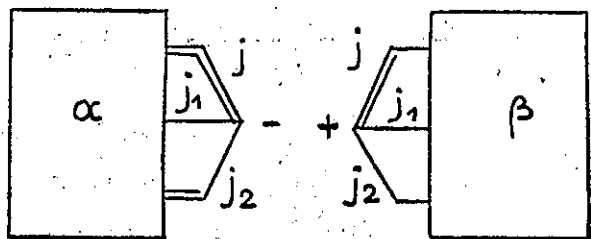


$G_{I.4}^{15}$

$G_{I.4}^{16}$

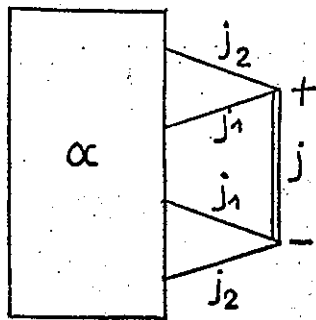


$G_{I.4}^{17}$

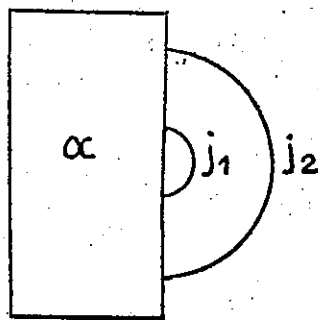


$G_{I.4}^{18}$

$G_{I.4}^{19}$



$G_{I.4}^{20}$



$G_{I.4}^{21}$

$$\sum_m G^{10} G^{11} = [j] G^{12} \quad (\text{I - 4 - 4})$$

le coefficient $[j]$ qui apparait dans l'équation (4) entraîne la relation simple suivante :

$$G^{13} = \delta(j_1 j_2 j) \quad (\text{I - 4 - 5})$$

Nous voyons ainsi apparaitre trois sortes de branches liées : les branches fines (j_1 dans G^6), les branches épaisses (j dans G^{12}) et les branches "mixtes" (j_{12} dans G^9). Elles n'obéissent pas toujours aux mêmes règles graphiques : la sommation sur m en est un premier exemple. Cela implique qu'il existe des règles différentes suivant la nature des branches.

I - 4 - 3 - Quelques règles de coupure :

Les règles de coupure ne sont données que dans certains cas. On définit par exemple :

- la coupure suivant deux branches mixtes :

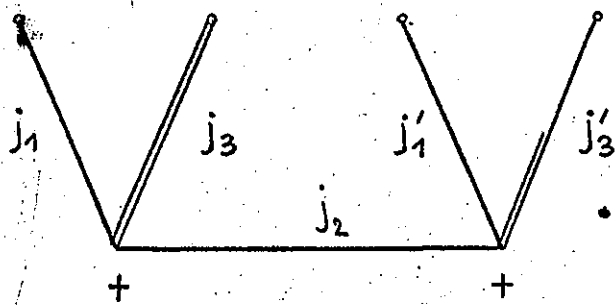
$$G^{14} = \delta(j_1 j_2) G^{15} G^{16} \quad (\text{I - 4 - 6})$$

- la coupure suivant trois branches (deux mixtes, une fine) :

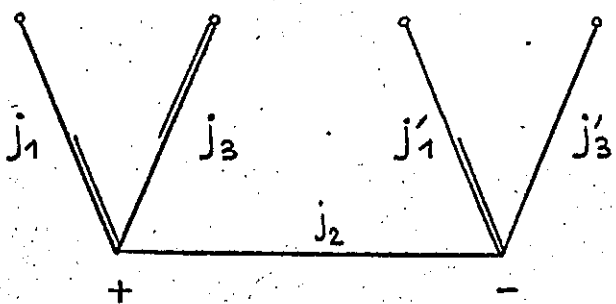
$$G^{17} = G^{18} G^{19} \quad (\text{I - 4 - 7})$$

- la sommation sur une branche épaisse :

$$\sum_j G^{20} = G^{21} \quad (\text{I - 4 - 8})$$



$$G_{I.4}^{22}$$



$$G_{I.4}^{23}$$

Pour pouvoir appliquer ces formules, il faut donc savoir transformer la nature des branches. Cette opération se fait sur deux branches simultanément. En voici un exemple :

$$G^{22} = \frac{j_3'}{j_1 j_1' j_3} G^{23} \quad (I - 4 - 9)$$

Le principe consiste à transporter, autour de deux noeuds distants d'une branche, des "demi-épaisseurs" d'une branche sur une autre. Lorsqu'on obtient des graphes irréductibles, des règles permettent de se ramener aux graphes des coefficients $3n-j$ qui n'ont plus que des lignes fines.

Comme El-Baz, Jucys ne s'est pas intéressé aux mêmes opérateurs que nous, ce qui rend la comparaison difficile dans ce domaine.

En conclusion, la méthode de Jucys présente des avantages et des inconvénients par rapport à notre méthode. L'unicité de la représentation et la simplicité des définitions et des règles de coupure compensent l'obligation de tenir compte de la nature des branches et la relative complexité des formules de changement d'épaisseur (par exemple : formule (9)).

I - 5 - CONCLUSION :

L'ensemble des règles graphiques définies dans ce chapitre sont suffisantes pour pouvoir calculer des éléments de matrice variés. En effet, nous avons vu la représentation séparée des différentes parties de l'élément, leur intégration et la résolution du graphe obtenu en termes de coefficients $3n-j$.

Mais il reste encore des problèmes d'ordre pratique, notamment sur la manière de trouver et d'effectuer les coupures qui n'ont pas été abordées; certaines règles, notamment l'intégration, peuvent se simplifier; enfin des remarques sur la structure que prend un graphe dans certains cas particuliers de couplage, peuvent être faites.

Ceci fait l'objet du troisième chapitre dans lequel on trouvera également plusieurs exemples complets d'utilisation de la méthode. Mais auparavant nous voulons montrer comment la théorie de la seconde quantification aboutit à la définition d'un second système graphique qui justifie en partie, et complète le premier.

CHAPITRE II

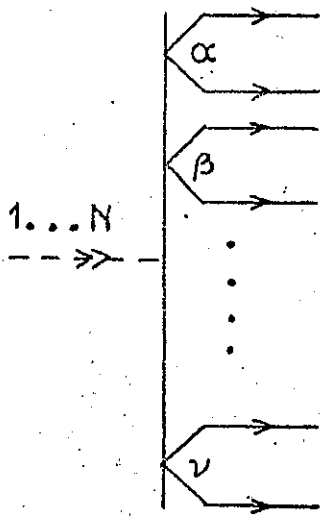
UTILISATION GRAPHIQUE DE LA SECONDE QUANTIFICATION

Dans son ouvrage déjà cité ⁸⁾, JUDD indique les nombreuses possibilités qu'offre l'utilisation des techniques de seconde quantification en spectroscopie atomique. Il montre en particulier qu'on peut représenter à l'aide des opérateurs annihilation-création aussi bien les fonctions bra et ket que les opérateurs tensoriels à un ou plusieurs électrons. Or cette identité de représentation des différentes parties d'un élément de matrice est également une caractéristique des graphes. Il était donc naturel d'essayer de faire le lien entre les deux méthodes en représentant graphiquement les opérateurs annihilation et création.

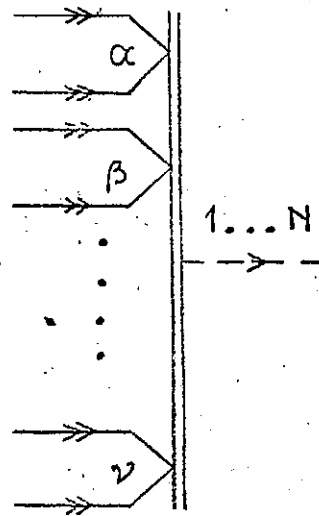
Notre étude nous a permis de justifier, de façon plus fondamentale, certaines définitions graphiques et en particulier la représentation de l'opérateur $w^{(nk)}(n\ell, n'\ell')$. D'autre part, nous verrons dans plusieurs exemples que la méthode graphique, en éliminant les découplages ou recouplages, améliore encore les performances des techniques de la seconde quantification.

Nous suivons dans ce paragraphe le plan du livre de JUDD ⁸⁾ auquel on se reportera pour les démonstrations analytiques et les commentaires. On trouvera donc les paragraphes suivants :

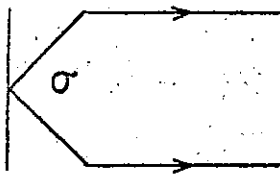
- II - 1 - Opérateurs annihilation-création et relations d'anti-commutation.
- II - 2 - Représentation des opérateurs.
- II - 3 - Propriétés tensorielles des opérateurs annihilation et création.
- II - 4 - Représentation des coefficients de parenté fractionnelle.
- II - 5 - Utilisation pratique des opérateurs $w^{(nk)}(n\ell, n'\ell')$.
- II - 6 - Conclusion.



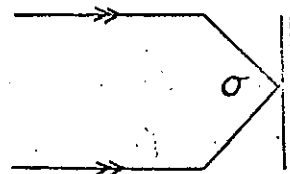
$G_{II.1}^1$



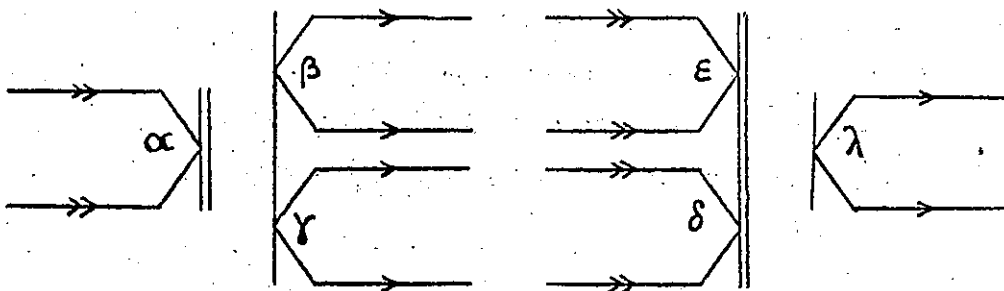
$G_{II.1}^2$



$G_{II.1}^3$



$G_{II.1}^4$



$G_{II.1}^5$

I - 1 - OPERATEURS ANNIHILATION - CREATION ET RELATIONS D'ANTI-COMMUTATION -

Un état déterminantal est considéré comme le résultat d'une suite d'opérateurs "création" sur l'état vide :

$$a_{\alpha}^{+} a_{\beta}^{+} \dots a_{\nu}^{+} | 0 \rangle = \{ \alpha \beta \dots \nu \} = | \alpha \beta \dots \nu \rangle \quad (\text{II-1-1})$$

où α, β, \dots représentent des jeux de nombres quantiques $n_{\ell} m_s m_{\ell}$. De même, l'état conjugué correspond à une suite d'opérateurs "annihilation" :

$$\langle 0 | a_{\nu} \dots a_{\beta} a_{\alpha} = \{ \alpha \beta \dots \nu \}^{*} = \langle \alpha \beta \dots \nu | \quad (\text{II-1-2}).$$

Le ket et le bra des équations (1) et (2) se représentent, d'après I - 1 - 2 - 1, par les graphes G^1 et G^2 . Il est donc naturel d'associer les opérateurs annihilation ou création aux différents points d'entrée. Mais les opérateurs a_{σ} ou a_{σ}^{+} ne portent pas d'information sur le numéro des électrons. Nous posons donc :

$$a_{\sigma}^{+} = G^3 \quad (\text{II-1-3})$$

$$a_{\sigma} = G^4 \quad (\text{II-1-4})$$

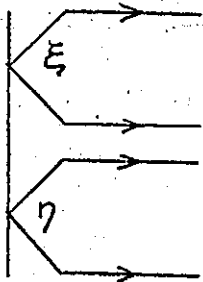
Nous décidons d'autre part qu'une équation graphique se lit de gauche à droite et pour les traits verticaux :

- de haut en bas pour les traits simples
- de bas en haut pour les traits doubles.

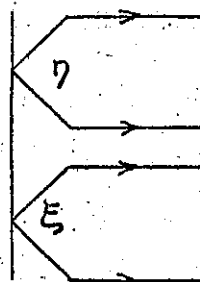
Exemple : $G^5 = a_{\alpha} a_{\beta}^{+} a_{\gamma}^{+} a_{\delta} a_{\epsilon} a_{\lambda}^{+} \quad (\text{II-1-5}).$

Les graphes de ce chapitre ne sont donc pas aussi déformables que ceux définis auparavant : l'ordre des opérateurs, donc des points d'entrée, tel qu'il vient d'être défini, a un sens et on ne peut donc plus déplacer que les branches qui en sortent.

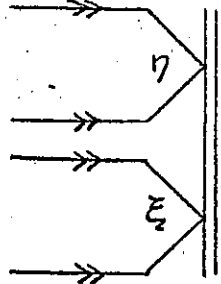
Les opérateurs annihilation-création obéissent à trois relation d'anti-commutation :



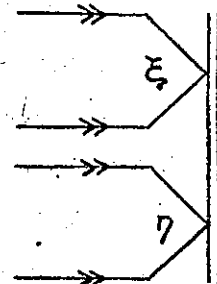
$G_{II.1}^6$



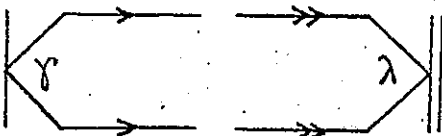
$G_{II.1}^7$



$G_{II.1}^8$



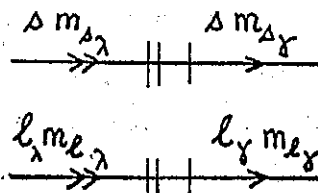
$G_{II.1}^9$



$G_{II.1}^{10}$



$G_{II.1}^{11}$



$G_{II.1}^{12}$

$$a_{\xi}^{+} a_{\eta}^{+} + a_{\eta}^{+} a_{\xi}^{+} = 0 \quad (\text{II-1-6})$$

$$a_{\xi} a_{\eta} + a_{\eta} a_{\xi} = 0 \quad (\text{II-1-7})$$

$$a_{\gamma}^{+} a_{\lambda} + a_{\lambda} a_{\gamma}^{+} = \delta(\gamma \lambda) \quad (\text{II-1-8})$$

En utilisant le graphe $G_{I.2}^4$, résultat de l'intégration d'un bra et d'un ket élémentaires, nous pouvons représenter les trois relations ci-dessus graphiquement :

$$G^6 + G^7 = 0 \quad (\text{II-1-9})$$

$$G^8 + G^9 = 0 \quad (\text{II-1-10})$$

$$G^{10} + G^{11} = \delta(n_{\gamma} n_{\lambda}) G^{12} \quad (\text{II-1-11}).$$

Par analogie avec le premier chapitre, le sens des flèches des branches libres est relié au signe devant les nombres m_s ou m_l .

Voyons maintenant à quelle représentation générale des opérateurs nous conduit la seconde quantification.

II - 2 - REPRESENTATION DES OPERATEURS -

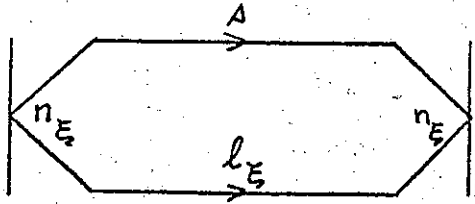
JUDD donne l'expression, dans le langage de la seconde quantification, de divers opérateurs : un opérateur particulier, l'opérateur nombre et deux opérateurs plus généraux :

- l'opérateur à une particule :

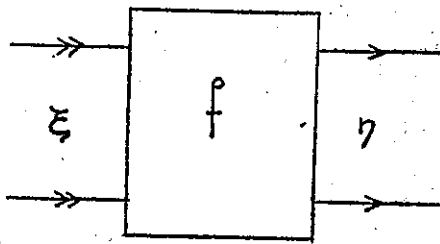
$$F = \sum_i f_i \quad (\text{II-2-1})$$

- l'opérateur à deux particules :

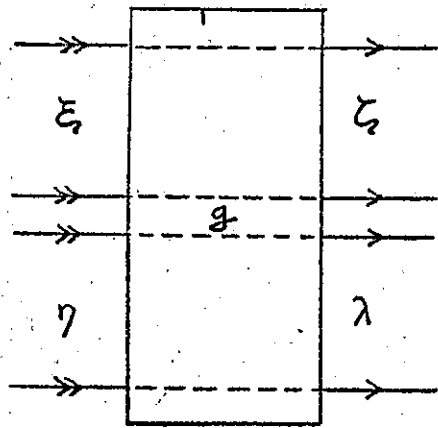
$$G = \sum_{i>j} g_{ij} \quad (\text{II-2-2})$$



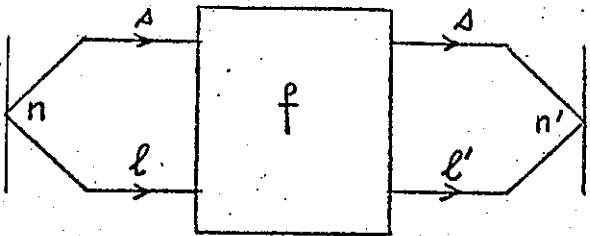
$G_{II.2}^1$



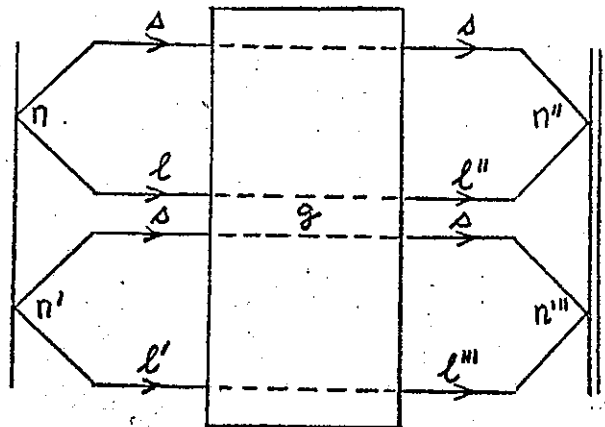
$G_{II.2}^2$



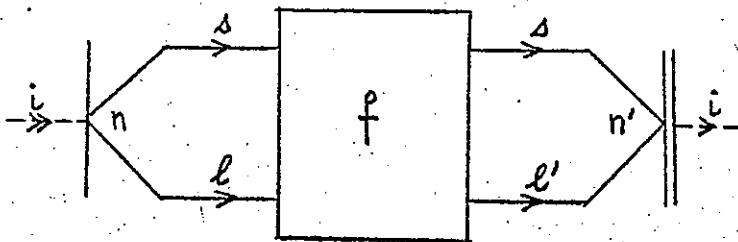
$G_{II.2}^3$



$G_{II.2}^4$



$G_{II.2}^5$



$G_{II.2}^6$

L'opérateur nombre s'exprime, en seconde quantification par :

$$\mathcal{N} = \sum_{\xi} a_{\xi}^{+} a_{\xi} \quad (\text{II-2-3})$$

Judd montre que ses valeurs propres sont égales à N , nombre d'électrons de la fonction propre. Graphiquement, nous devons décomposer l'ensemble des nombres quantiques symbolisés par ξ en deux groupes : $n\ell$ et $m_s m_l$; nous pouvons ainsi représenter la sommation sur m_s et m_l en reliant les branches correspondantes des deux opérateurs :

$$\mathcal{N} = \sum_{n\ell} G^1 \quad (\text{II-2-4})$$

Les opérateurs F et G s'expriment, à leur tour, avec les opérateurs annihilation-crédation (équations (6) et (7) de JUDD⁸⁾) :

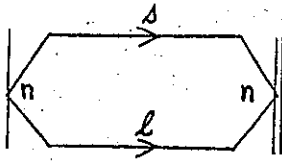
$$F = \sum_{\xi\eta} a_{\xi}^{+} (\xi | f | \eta) a_{\eta} \quad (\text{II-2-5})$$

$$G = \frac{1}{2} \sum_{\xi\eta\zeta\lambda} a_{\xi}^{+} a_{\eta}^{+} (\xi_1 \eta_2 | g_{12} | \zeta_1 \lambda_2) a_{\lambda} a_{\zeta} \quad (\text{II-2-6})$$

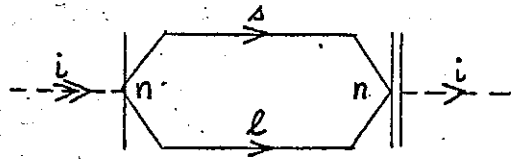
où l'élément de matrice présent en (6) est numéroté. Après intégration, les éléments de matrice des équations (5) et (6) se représentent respectivement par les graphes G^2 et G^3 . Les pointillés du graphe G^3 signifient que la structure du graphe g indique clairement que ξ se transforme en ζ et η en λ . Un raisonnement analogue à celui fait pour l'opérateur nombre, nous donne alors l'expression graphique de F et G :

$$F = \sum_{n\ell, n'\ell'} G^4 \quad (\text{II-2-7})$$

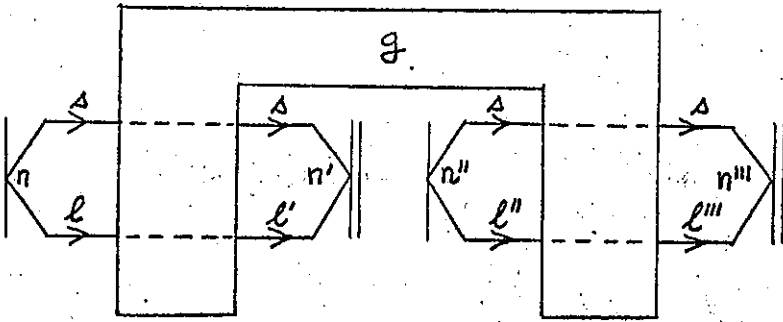
$$G = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\ell, n'\ell' \\ n''\ell'', n'''\ell'''}} G^5 \quad (\text{II-2-8})$$



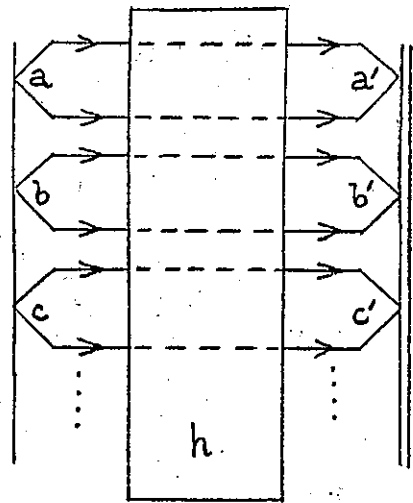
$G^7_{II.2}$



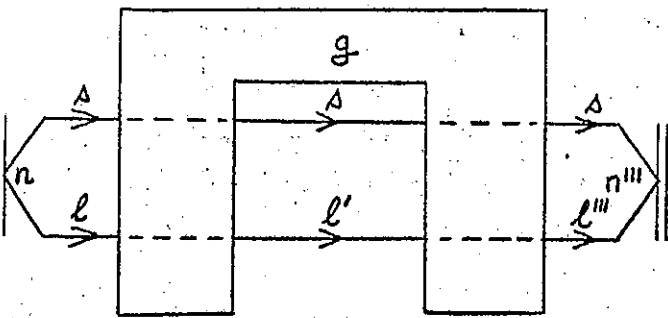
$G^8_{II.2}$



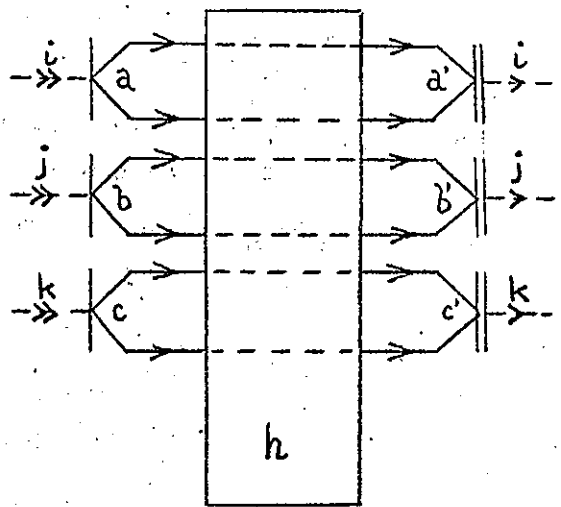
$G^9_{II.2}$



$G^{11}_{II.2}$



$G^{10}_{II.2}$



$G^{12}_{II.2}$

Nous voyons apparaître ici les mêmes structures graphiques qu'au chapitre I où nous aurions pu écrire :

$$f_i(nl, n'l') = G^6 \quad (\text{II-2-9})$$

Des relations (1), (7) et (9), on déduit :

$$G^4 = \sum_i G^6 \quad (\text{II-2-10}).$$

Ici, une remarque s'impose. Le nombre N , implicite dans les sommes des équations (1) ou (10), n'apparaît plus nulle part lorsqu'on représente l'opérateur F par la seconde quantification, aussi bien analytiquement (formule (5)) que graphiquement (graphe G^4). En fait, cela signifie que les opérateurs F définis en (1) et en (5) ne sont pas tout à fait les mêmes; seules leurs valeurs propres associées à des fonctions propres à N électrons sont confondues. En conséquence, l'équation (10) n'est pas tout à fait rigoureuse. Un exemple de cette ambiguïté est donné par le cas de l'opérateur nombre. Appliquons lui l'équation (10); on obtient :

$$\mathcal{N} = \sum_{nl} G^7 = \sum_i \sum_{nl} G^8 \quad (\text{II-2-11})$$

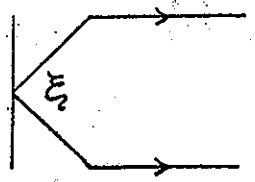
Or (équation (I-1-61)) :

$$\sum_{nl} G^8 = 1 \quad (\text{II-2-12})$$

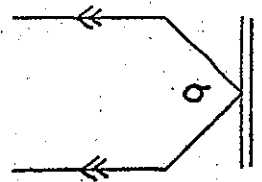
Le troisième membre de (11) est donc égal à N , c'est à dire la valeur propre de \mathcal{N} : il est évident que l'équation (11) n'est exacte que si les opérateurs sont appliqués à des fonctions à N électrons.

Pour un opérateur à 2 électrons nous pouvons maintenant voir la différence entre le graphe G^5 et le graphe G^9 , où les deux boîtes g , bien que de formes différentes, représentent la même structure graphique. En effet, d'après les relations d'anticommutation, nous avons :

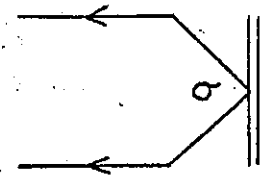
$$G^9 = \delta(n'n'') \delta(l'l'') G^{10} + G^5 \quad (\text{II-2-13})$$



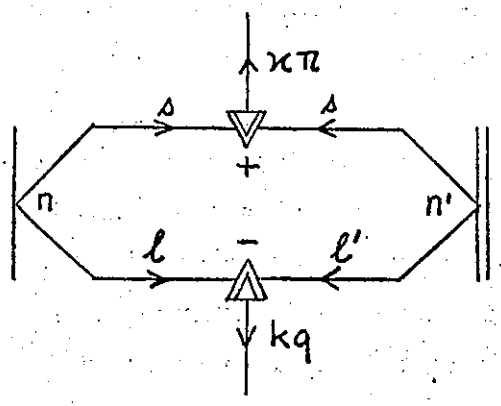
$G_{II.3}^1$



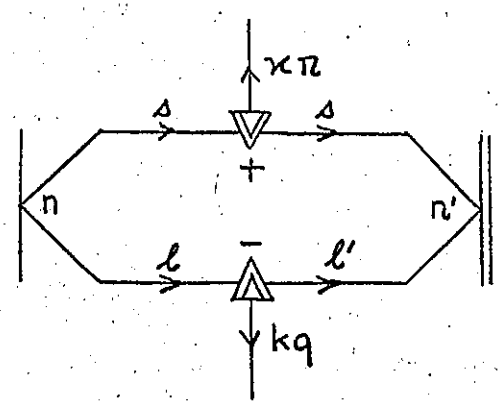
$G_{II.3}^2$



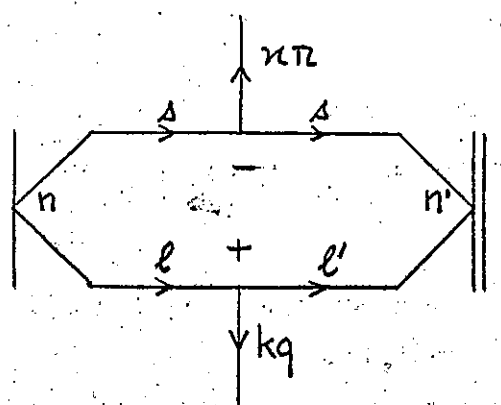
$G_{II.3}^3$



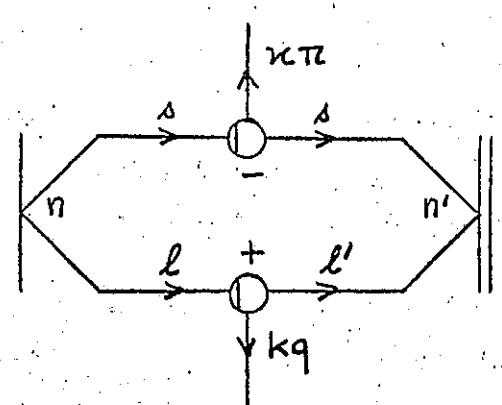
$G_{II.3}^4$



$G_{II.3}^5$



$G_{II.3}^6$



$G_{II.3}^7$

Cette équation correspond terme à terme à la suivante :

$$\sum_{i,j} g_{ij} = \sum_i g_{ii} + \sum_{i \neq j} g_{ij} \quad (\text{II-2-14})$$

Nous généralisons en écrivant :

$$G^{11} = \sum_{i \neq j \neq k \dots} G^{12} \quad (\text{II-2-15})$$

A travers les propriétés tensorielles des opérateurs annihilation et création, nous allons maintenant voir la représentation de l'opérateur $W^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell')$.

II - 3 - PROPRIETES TENSORIELLES DES OPERATEURS ANNIHILATION ET CREATION -

En se servant des propriétés tensorielles des opérateurs annihilation-crédation, JUDD donne l'expression de l'opérateur $W^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell')$ en seconde quantification. Il en déduit ensuite plusieurs expressions entre les tenseurs annihilation-crédation eux-mêmes.

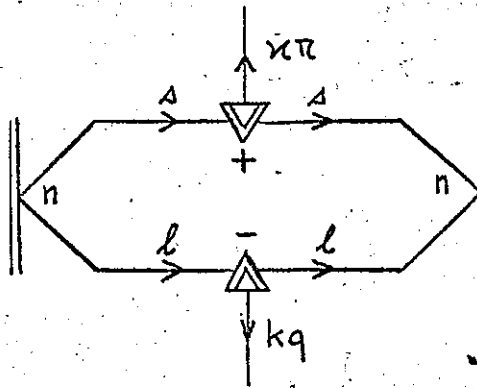
Dans ce paragraphe, nous suivons le même plan : nous représentons ainsi l'opérateur $W^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell')$ et nous retrouvons la forme définie au chapitre I; nous obtenons ensuite les mêmes expressions que JUDD, mais graphiquement et de façon plus simple.

II - 3 - 1 - Représentation de l'opérateur $W^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell')$ -

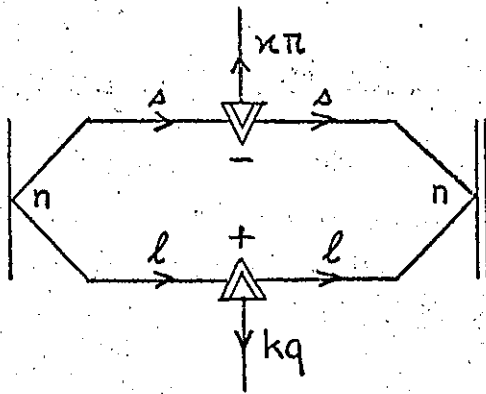
Nous séparerons à nouveau dans ce paragraphe le groupe $n\ell \ m_s \ m_\ell$ en représentant $n\ell$ par la lettre de l'opérateur et $m_s \ m_\ell$ par son indice.

Posons alors ⁸⁾ :

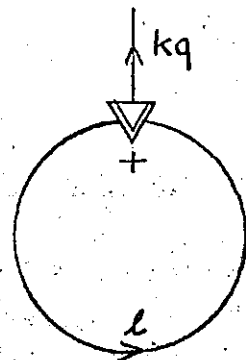
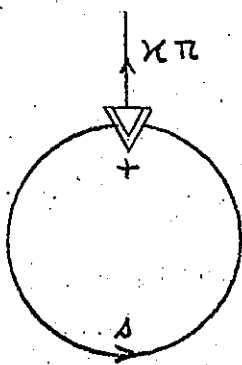
$$\tilde{a}_\sigma = (-)^{s+\ell-m_s-m_\ell} a_{-\sigma} \quad (\text{II-3-1})$$



$G_{\text{II.3}}^8$



$G_{\text{II.3}}^9$



$G_{\text{II.3}}^{10}$

A l'aide de cette définition, Judd montre que les opérateurs a_{ξ}^{+} d'une part et \tilde{a}_{ξ} d'autre part, forment les composantes de deux tenseurs :

$$a^{+} \quad \text{et} \quad a \quad (II-3-2)$$

de rangs s et ℓ respectivement par rapport au spin et à l'orbite. Nous savons représenter a_{ξ}^{+} : graphe G^1 ; le graphe G^2 représente $a_{-\sigma}$ (les double-flèches sont sortantes) ; la suppression des double-flèches fait apparaître le facteur $(-)^{s+\ell+m_s+m_l}$ ce qui revient à écrire finalement :

$$\tilde{a}_{\sigma} = - G^3 \quad (II-3-3)$$

Les règles de couplage graphique des opérateurs (cf. § I-1-3) permettent d'écrire alors facilement :

$$(a^{+}b)_{\pi q}^{(\kappa k)} = - G^4 = G^5 \quad (II-3-4)$$

La suppression des triangles et leur remplacement par des cercles donnent :

$$\begin{aligned} (a^{+}b)_{\pi q}^{(\kappa k)} &= - \hat{\kappa} \hat{k} G^6 \\ &= - G^7 = - W_{\pi q}^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell') \end{aligned} \quad (II-3-5)$$

où $W_{\pi q}^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell')$ est défini par une équation semblable à (II-2-10) :

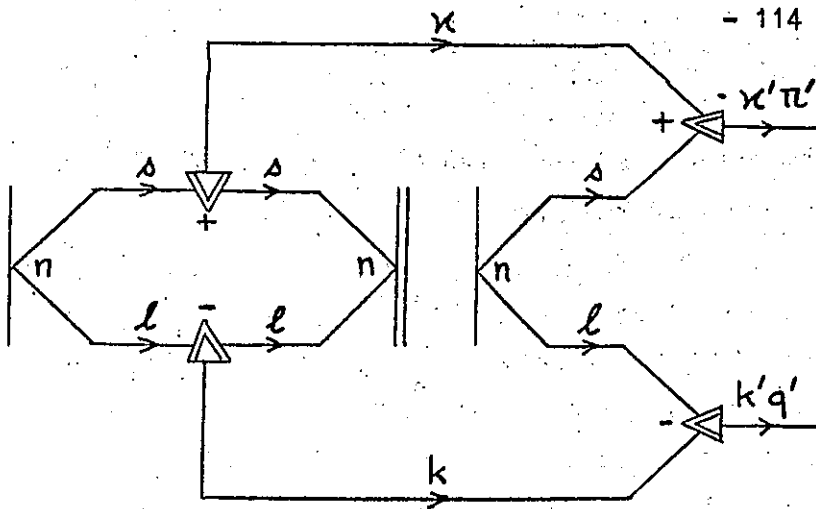
$$W_{\pi q}^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell') = \sum_i w_{i\pi q}^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell') \quad (II-3-6)$$

Le fait que la relation (5) soit identique au résultat de Judd justifie la forme graphique que nous avons choisie, au premier chapitre, pour l'opérateur $w_i^{(\kappa k)}(n\ell, n'\ell')$. Nous allons voir maintenant que ce résultat, associé aux relations d'anticommutation exprimées graphiquement permet de retrouver simplement les relations tensorielles établies par JUDD⁸⁾.

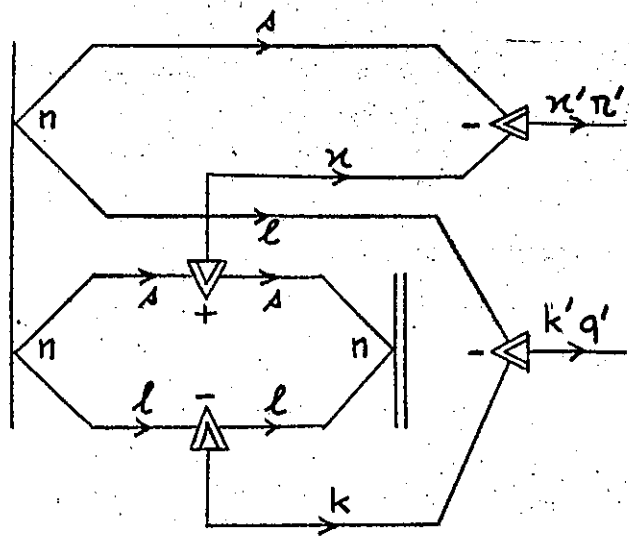
II - 3 - 2 - Produits tensoriels d'opérateurs annihilation-création -

La première des deux relations que nous voulons démontrer graphiquement est l'équation (29) de JUDD⁸⁾ :

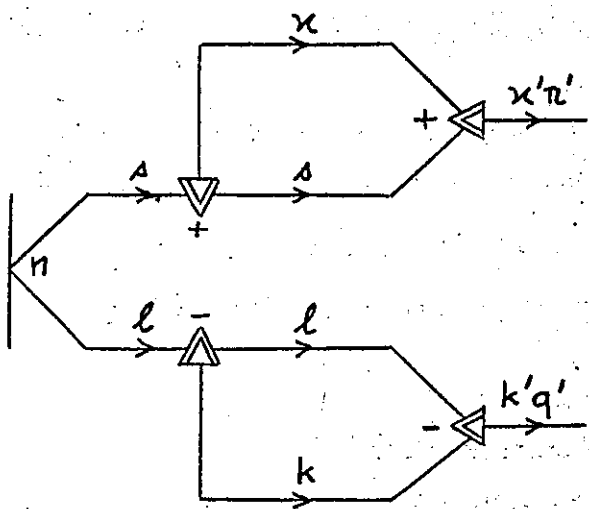
$$(a a^{+})^{(\kappa k)} + (-)^{2\ell+2s-\kappa-k} (a^{+}a)^{(\kappa k)} = \delta(\kappa, 0) \delta(k, 0) \hat{s} \hat{l} \quad (II-3-7)$$



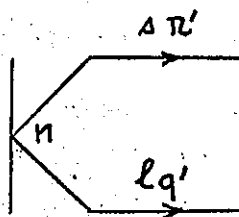
$G_{II.3}^{11}$



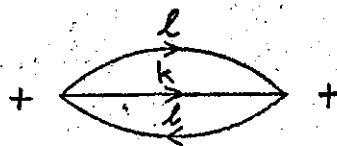
$G_{II.3}^{12}$



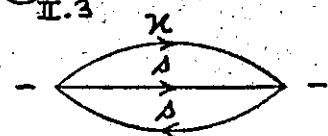
$G_{II.3}^{13}$



$G_{II.3}^{14}$



$G_{II.3}^{16}$



$G_{II.3}^{15}$

Le premier terme du premier membre se représente par le graphe G^8 qui s'obtient de la même manière que le graphe G^5 . Après changement de sens des deux branches s et des deux branches l , la relation d'anticommutation (II-1-11) donne immédiatement :

$$G^8 + G^9 = G^{10} \quad (\text{II-3-8})$$

Dans le graphe G^9 , le changement de signe des noeuds fait apparaître le facteur $(-)^{2s-\kappa+2l-k}$ et le graphe obtenu est bien celui de l'opérateur $(a^+a)^{(\kappa k)}$. La fermeture des deux graphes contenus dans G^{10} donne le facteur : $\delta(\kappa, 0) \delta(k, 0)$; la suppression des triangles puis celle des deux branches nulles par la formule (I-3-25) donne finalement :

$$G^{10} = \delta(\kappa, 0) \delta(k, 0) \hat{s} \hat{l} \quad (\text{II-3-9})$$

Nous obtenons bien la formule de Judd (formule (7)).

La deuxième relation que nous voulons démontrer transforme l'opérateur suivant :

$$[(a^+a)^{(\kappa k)} a^+]^{(\kappa' k')} = G^{11} \quad (\text{II-3-10})$$

En utilisant successivement la relation (II-1-11) pour échanger les deux opérateurs de droite, puis la formule (II-1-10) pour échanger les deux opérateurs création, on obtient :

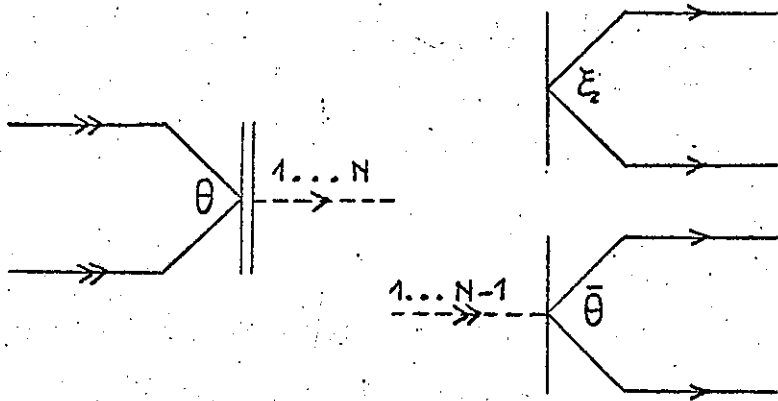
$$G^{11} = G^{12} + G^{13} \quad (\text{II-3-11})$$

Dans G^{12} , on change le signe des deux noeuds (s, κ, κ') et (l, k, k') et on obtient :

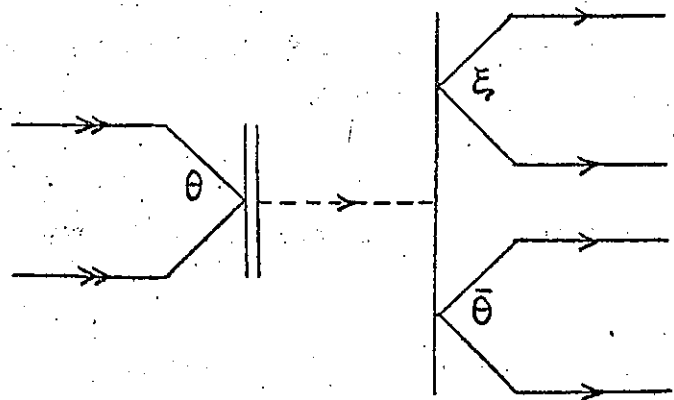
$$G^{12} = (-)^{s+\kappa-\kappa'+l+k-k'} [a^+(a^+a)^{(\kappa k)}]^{(\kappa' k')} \quad (\text{II-3-12})$$

Le graphe G^{13} peut-être coupé suivant les branches (s, κ') puis (l, k') et on obtient, après suppression des triangles :

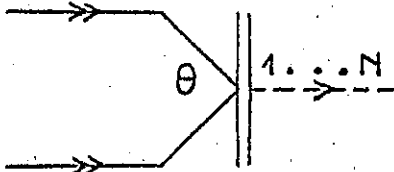
$$G^{13} = \delta(\kappa' s) \delta(k' l) (\hat{\kappa k} / \hat{s} \hat{l}) (-)^{2s} G^{14} G^{15} G^{16} \quad (\text{II-3-13})$$



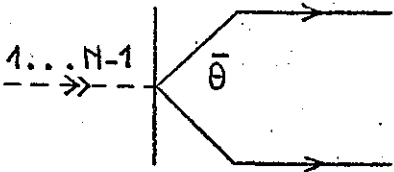
$G^1_{II.4}$



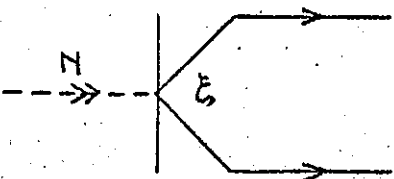
$G^2_{II.4}$



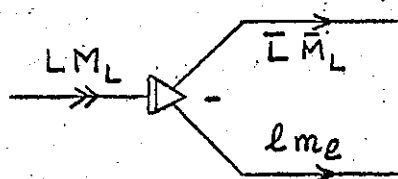
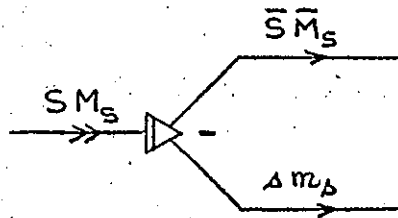
$G^3_{II.4}$



$G^4_{II.4}$



$G^5_{II.4}$



Les graphes G^{15} et G^{16} peuvent se ramener à deux deltas triangulaires (graphe G_{I-3}^{72}) en changeant le signe d'un noeud dans chaque et en mettant toutes les branches dans le même sens; ceci s'écrit :

$$G^{15} G^{16} = (-)^{2s+\kappa+2\ell+k+2s+2\ell} \delta(s s \kappa) \delta(\ell \ell k) \quad (\text{II-3-14})$$

Il vient finalement (*) :

$$\begin{aligned} [(a^+ a)^{(\kappa k)} a^+]^{(\kappa' k')} &= (-)^{k+\kappa+s+\ell-\kappa'-k'} [a^+(a^+ a)^{(\kappa k)}]^{(\kappa' k')} \\ &+ (-)^{\kappa+k+1} (\hat{\kappa} \hat{k} / \hat{s} \hat{\ell}) \delta(\kappa' s) \delta(k' \ell) a^+ \end{aligned} \quad (\text{II-3-15})$$

On voit par ces deux exemples que la méthode graphique nous permet d'utiliser des produits tensoriels d'opérateurs a et a^+ sans avoir à les découpler, ce qui simplifie encore leur utilisation. Nous retrouvons ici le même avantage que pour le calcul des éléments de matrice ordinaires.

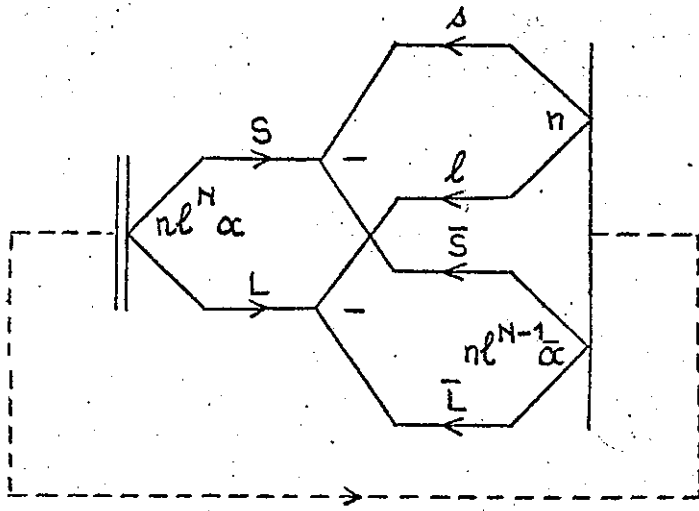
Un pas supplémentaire peut être franchi par la représentation des éléments de matrice réduits des opérateurs a et a^+ , qui ne sont autres que les coefficients de parenté fractionnelle (c p f).

II - 4 - REPRESENTATION DES COEFFICIENTS DE PARENTE FRACTIONNELLE -

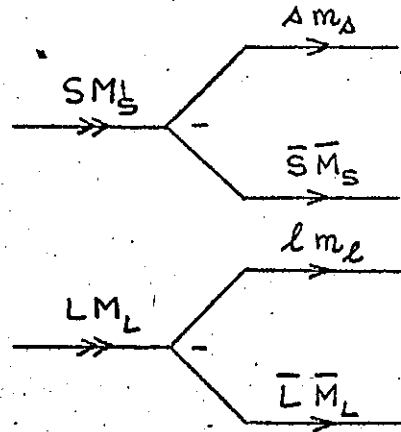
Afin de calculer la relation entre l'élément de matrice réduit de a_{ξ}^+ et le coefficient de parenté fractionnelle correspondant, Judd établit la relation suivante :

$$(\theta | a_{\xi}^+ | \bar{\theta}) = (-)^{N-1} \sqrt{N} (\theta | \bar{\theta}, \xi_N) \quad (\text{II-4-1})$$

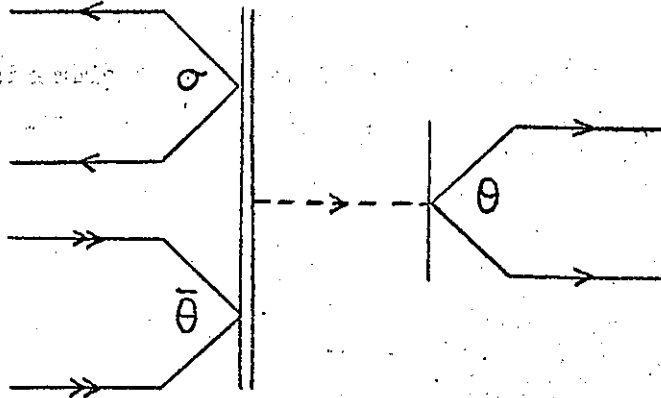
(*) Nous trouvons le signe opposé à celui de JUDD⁸⁾ pour le second terme du second membre.



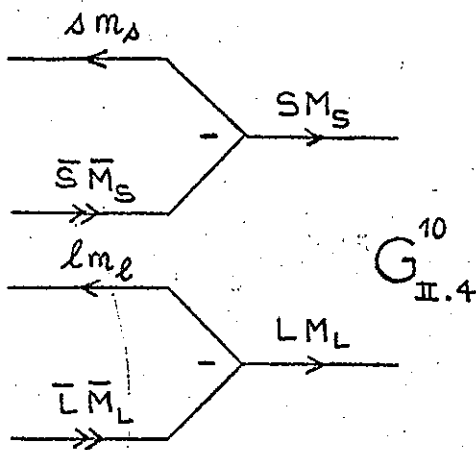
$G_{II.4}^6$



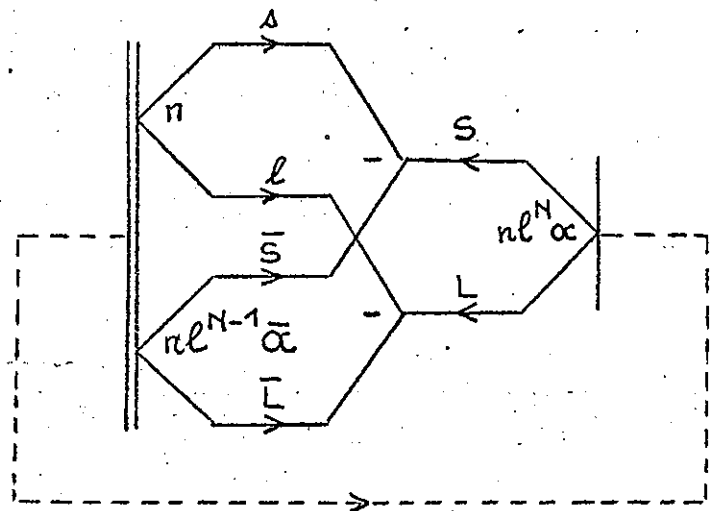
$G_{II.4}^7$



$G_{II.4}^8$



$G_{II.4}^{10}$



$G_{II.4}^9$

$$\begin{aligned} \theta &= \Psi M_S M_L = n \ell^N \alpha S L M_S M_L \\ \bar{\theta} &= \bar{\Psi} \bar{M}_S \bar{M}_L = n \ell^{N-1} \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L} \bar{M}_S \bar{M}_L \end{aligned}$$

Représentons graphiquement les deux membres de cette équation. Le premier se représente par le graphe G^1 , qui n'est autre que la juxtaposition des graphes du bra, de l'opérateur et du ket ; nous le représentons conventionnellement par le graphe G^2 pour indiquer que l'intégration est effectuée. Le coefficient de recouplage $(\theta | \bar{\theta}, \xi_N)$ est le résultat de l'intégration du graphe "bra" G^3 et du graphe "ket" G^4 où l'électron ξ est déjà numéroté; cette intégration s'effectue en numérotant un électron du bra par la formule (I-1-32) puis en reliant les branches correspondantes :

$$G^3 G^4 = (\Psi \{ | \bar{\Psi} + \ell \} G^5 \quad (\text{II-4-2})$$

Le graphe G^2 étant un élément de matrice, on peut lui appliquer le théorème de Wigner-Eckart qui s'écrit graphiquement (formules (I-3-18) et (III-3-8)) :

$$G^2 = G^6 G^7 \quad (\text{II-4-3})$$

Le retournement du bra et du ket dans le graphe G^6 a été fait pour la commodité du dessin et n'a pas de signification particulière; rappelons que, seul, l'ordre des points d'entrée a un sens.

Or, en supprimant les triangles de G^5 , il vient :

$$G^5 = - \hat{S} \hat{L} G^7 \quad (\text{II-4-4})$$

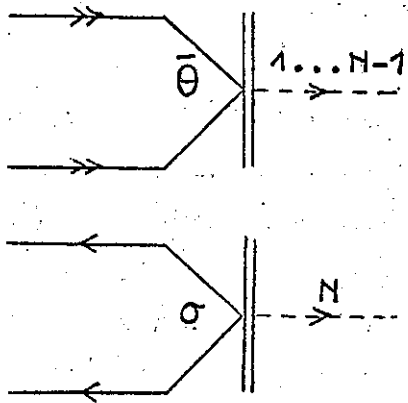
L'équation (1) s'écrit finalement :

$$G^6 = (-)^N \sqrt{N} \hat{S} \hat{L} (\Psi \{ | \bar{\Psi} + \ell \} \quad (\text{II-4-5})$$

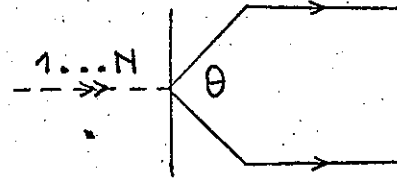
C'est l'équation (31) de JUDD⁸⁾.

L'équation (32), conjuguée de (31), s'obtient de la même manière à partir de l'équation suivante, conjuguée de (1) :

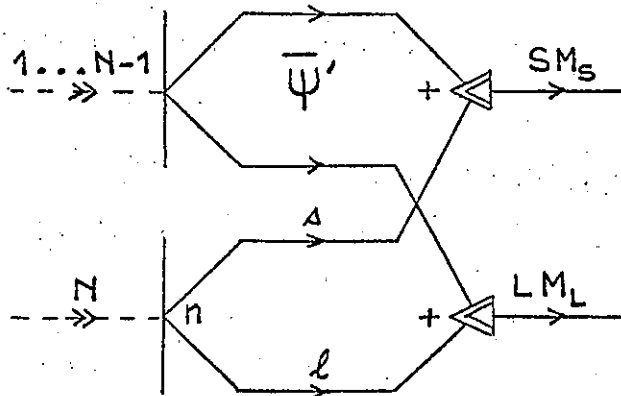
$$(\bar{\theta} | \hat{\alpha}_\sigma | \theta) = (-)^{N-1} \sqrt{N} (\bar{\theta}, \bar{\sigma} | \theta) \quad (\text{II-4-6})$$



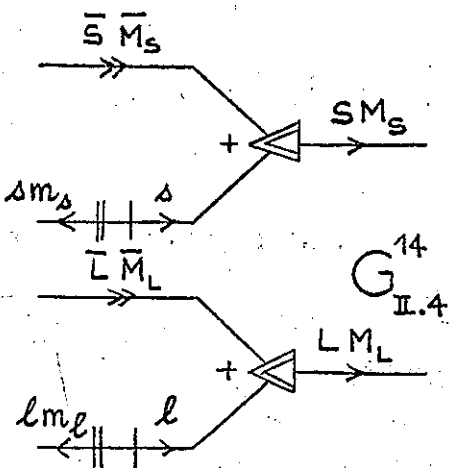
$G_{I.4}^{11}$



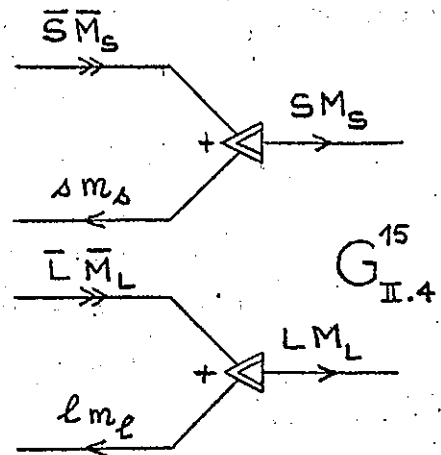
$G_{I.4}^{12}$



$G_{I.4}^{13}$



$G_{I.4}^{14}$



$G_{I.4}^{15}$

où la transformation de σ en $\tilde{\sigma}$ a la même signification que la transformation de a_σ en \tilde{a}_σ . Le premier membre de l'équation (6) s'écrit :

$$(\bar{\theta} | \tilde{a}_\sigma | \theta) = - G^8 = - G^9 G^{10} \quad (\text{II-4-7})$$

Pour calculer le coefficient de recouplage du second membre, nous utilisons de la même manière le développement du ket $|\theta\rangle$:

$$(\bar{\theta}, \tilde{\sigma} | \theta) = - G^{11} G^{12} = - \sum_{\tilde{\Psi}'} (\bar{\Psi}' + \ell | \Psi) G^{11} G^{13} = - (\bar{\Psi} + \ell | \Psi) G^{14} \quad (\text{II-4-8})$$

Pour supprimer les triple-tirets de G^{14} , on utilise la règle définie au paragraphe I-2-1- : on supprime simplement les deux branches liées s et ℓ , sans facteur de phase puisqu'elles sont sortantes du côté du simple tiret :

$$(\bar{\theta}, \tilde{\sigma} | \theta) = - (\bar{\Psi} + \ell | \Psi) G^{15} \quad (\text{II-4-9})$$

Finalement :

$$G^{15} = (-)^{S+L+s+\ell-\bar{S}-\bar{L}} \hat{S} \hat{L} G^{10} \quad (\text{II-4-10})$$

et

$$- G^9 = (-)^{N+S+L+s+\ell-\bar{S}-\bar{L}} V_N \hat{S} \hat{L} (\bar{\Psi} + \ell | \Psi) \quad (\text{II-4-11})$$

On retrouve bien l'équation (32) de JUDD⁸⁾.

Jusque là nous n'avons fait qu'écrire graphiquement les mêmes équations que Judd. Nous allons maintenant traiter deux des exemples de cet auteur et nous verrons, en particulier dans le second, que la méthode graphique peut, là aussi, simplifier encore l'établissement de certaines formules.

Nous allons nous servir, dans les deux exemples qui vont suivre, d'une règle pratique que nous ne démontrerons qu'au chapitre III. Elle concerne les graphes dans lesquels les branches de spin et d'orbite se sont jamais couplées, c'est à dire ne se rejoignent qu'aux points d'entrée. D'après cette règle, les relations de fermeture ou de coupure de ces graphes peuvent être effectuées séparément pour la partie de spin et celle d'orbite, comme si elles constituaient deux graphes séparés. En particulier, l'élément de matrice réduit d'un tenseur

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

...the ... of ...

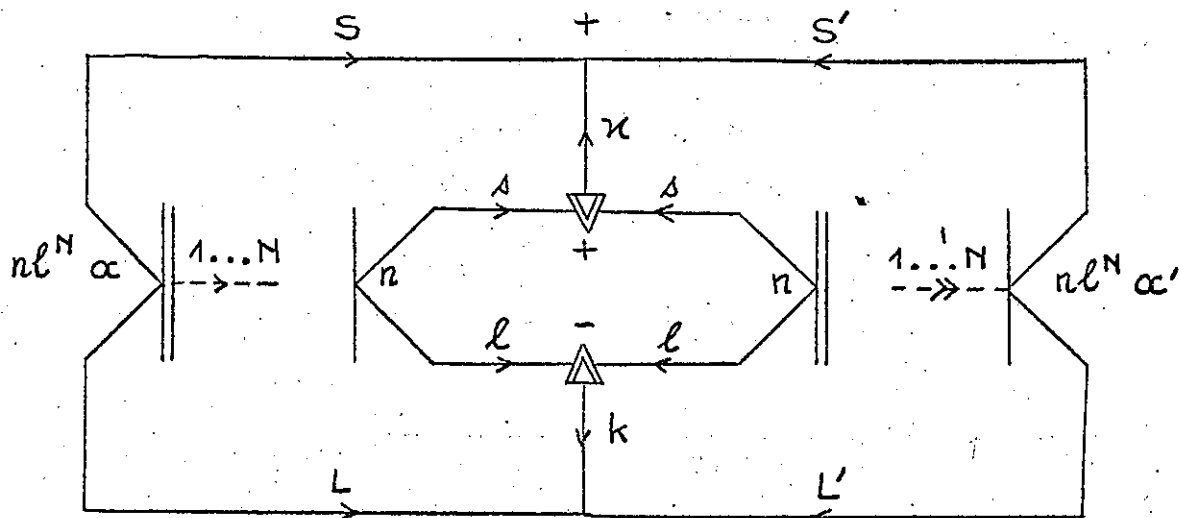
...the ... of ...

...the ... of ...

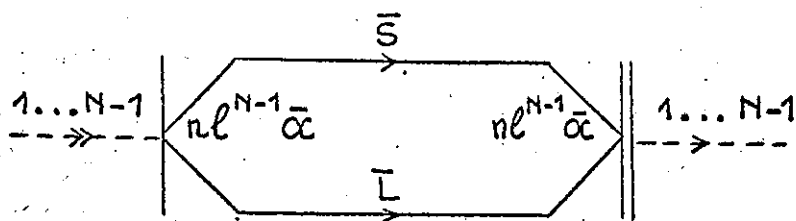
...the ... of ...

...the ... of ...

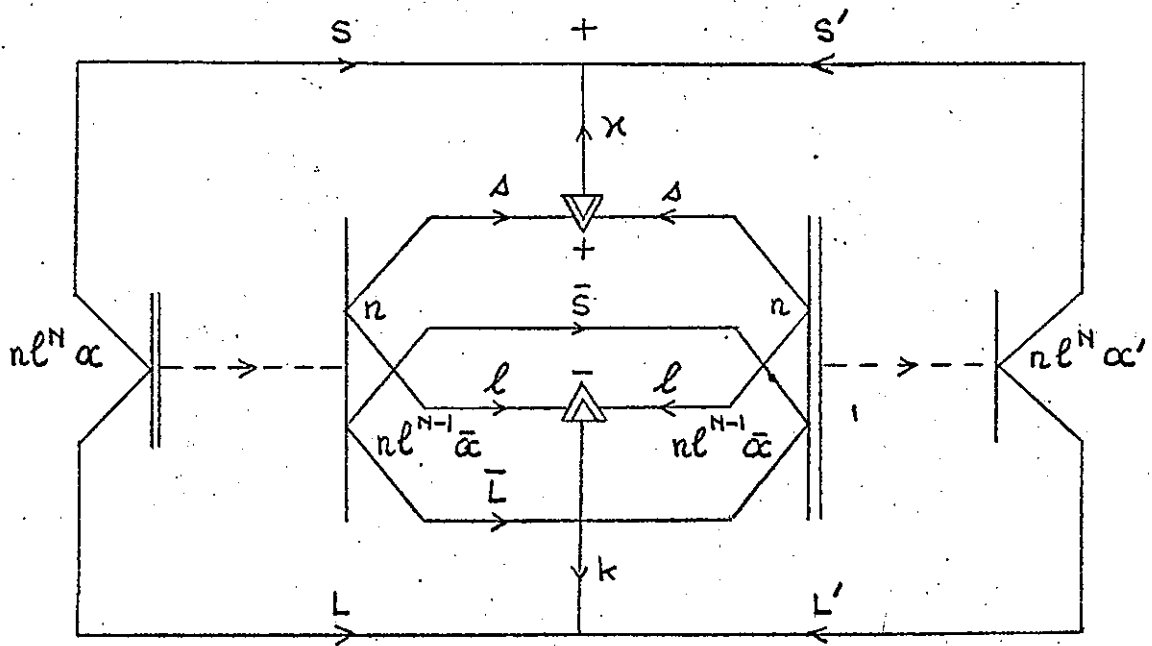
...the ... of ...



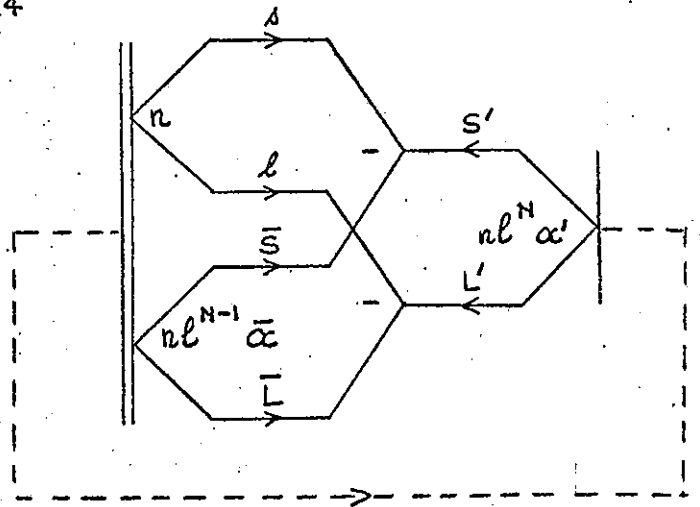
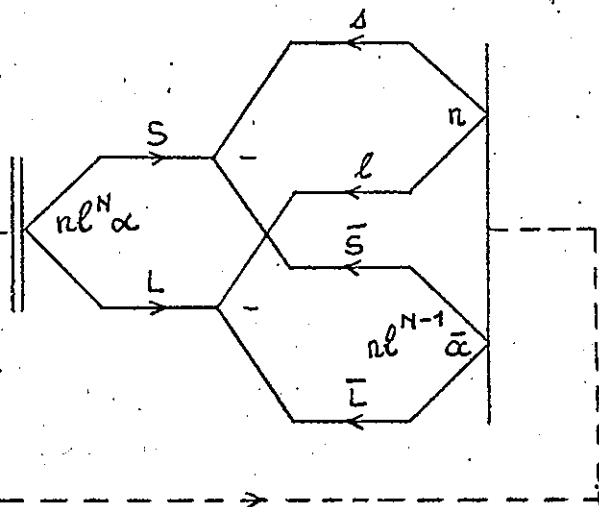
G^{16}
II.4



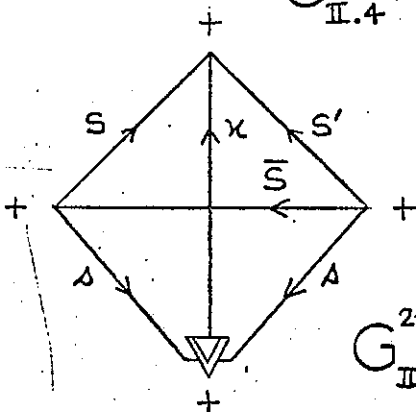
G^{17}
II.4



$G_{II.4}^{18}$

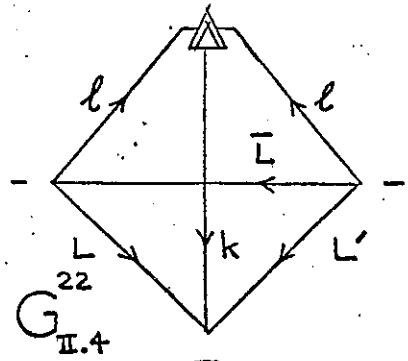


$G_{II.4}^{19}$



$G_{II.4}^{21}$

$G_{II.4}^{20}$



$G_{II.4}^{22}$

double sur une base de fonctions $|\Psi S L M_S M_L\rangle$ s'obtient en reliant séparément les branches de spin (S, κ, S') et d'orbite (L, k, L') .

Le premier exemple consiste à calculer l'élément de matrice réduit :

$$E_1 = (n\ell^N \alpha S L \parallel W^{(\kappa k)}(n\ell, n\ell) \parallel n\ell^N \alpha' S' L') \quad (\text{II-4-12})$$

D'après la règle ci-dessus, il se représente par le graphe G^{16} . On reconnaît les points d'entrée du bra (à gauche), de l'opérateur (les deux du centre) et du ket.

Introduisons alors l'opérateur projection (cf. § I-1-3-3) :

$$\sum_{\alpha \bar{S} \bar{L}} G^{17} = \sum_{\alpha \bar{S} \bar{L} \bar{M}_S \bar{M}_L} | n\ell^{N-1} \alpha \bar{S} \bar{L} \bar{M}_S \bar{M}_L \rangle (n\ell^{N-1} \alpha \bar{S} \bar{L} \bar{M}_S \bar{M}_L | = 1 \quad (\text{II-4-13})$$

et plaçons le entre les deux opérateurs a^+ et a de $W^{(\kappa k)}$, c'est à dire, graphiquement, au-dessous d'eux (cf. l'exemple (II-1-5)); effectuons l'intégration. Il vient :

$$E_1 = \sum_{\alpha \bar{S} \bar{M}} G^{18} \quad (\text{II-4-14})$$

En utilisant à nouveau la règle donnée plus haut pour les graphes où spin et orbite sont séparés, nous pouvons couper successivement le graphe G^{18} par les 4 groupes de 3 branches suivants :

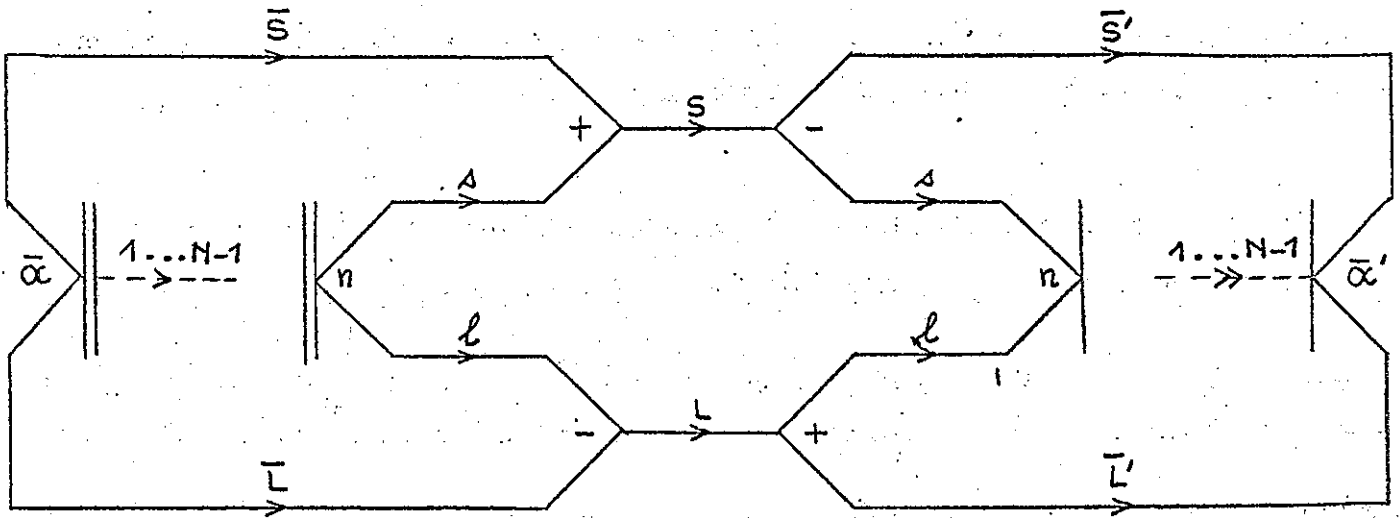
$$(S, s, \bar{S}), (S', s, \bar{S}), (L, \ell, \bar{L}) \text{ et } (L', \ell, \bar{L}).$$

Nous obtenons :

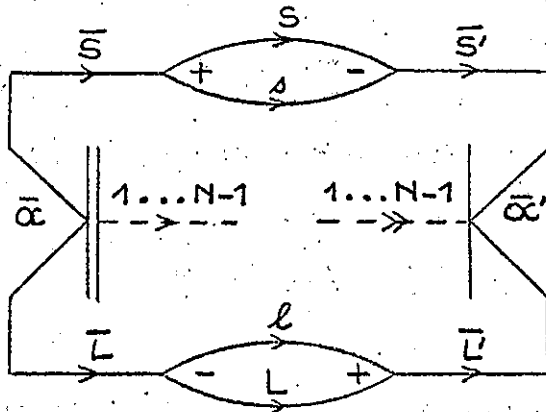
$$G^{18} = (-)^{2\bar{S}+2\bar{L}} G^{19} G^{20} G^{21} G^{22} \quad (\text{II-4-15})$$

G^{19} et G^{20} sont reliés aux c p f par les équations (5) et (11); G^{21} et G^{22} se transforment en deux coefficients 6 - j :

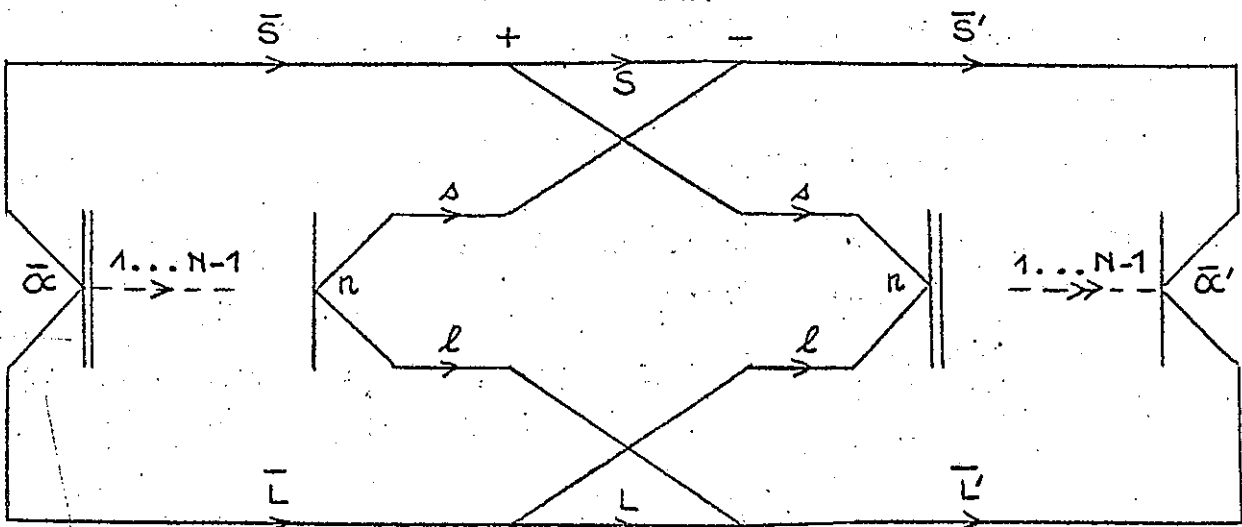
$$G^{19} = (-)^N \sqrt{N} \hat{S} \hat{L} (\Psi \{ | \bar{\Psi} + \ell \}) \quad (\text{II-4-16})$$



$G^{23}_{II.4}$



$G^{24}_{II.4}$



$G^{25}_{II.4}$

$$G^{20} = (-)^{N+S'+L'+s+\ell-\bar{S}-\bar{L}+1} \sqrt{N} \hat{S}' \hat{L}' (\bar{\Psi} + \ell | \Psi') \quad (\text{II-4-17})$$

$$G^{21} G^{22} = (-)^{S-S'+n+L-L'+k+1} \hat{n} \hat{k} \begin{Bmatrix} s & n & s \\ S & \bar{S} & S' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & k & \ell \\ L & \bar{L} & L' \end{Bmatrix} \quad (\text{II-4-18})$$

Finalement :

$$E_1 = N \hat{S} \hat{L} \hat{S}' \hat{L}' \hat{n} \hat{k} \sum_{\alpha \bar{S} \bar{L}} (-)^{S+s+\bar{S}+n+L+\ell+\bar{L}+k} (\Psi | \bar{\Psi} + \ell) (\bar{\Psi} + \ell | \Psi') \begin{Bmatrix} s & n & s \\ S & \bar{S} & S' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & k & \ell \\ L & \bar{L} & L' \end{Bmatrix} \quad (\text{II-4-19})$$

qui est la formule obtenue analytiquement par JUDD ⁸⁾, p.36.

Le second exemple est l'établissement de la formule de REDMOND ¹⁶⁾, citée par JUDD ⁸⁾ p. 37 et 38. Contrairement à ce que nous avons fait jusqu'ici, nous partons d'un graphe qui n'a pas d'expression analytique simple : le graphe G^{23} . Comme Judd, on conviendra, pour cette démonstration, de surmonter les nombres quantiques d'un signe caractéristique de la configuration à laquelle ils appartiennent :

$$\begin{aligned} \sim & \text{ pour } n\ell^{N-2} \\ - & \text{ pour } n\ell^{N-1} \\ \text{rien} & \text{ pour } n\ell^N \end{aligned}$$

Appliquons maintenant la relation d'anticommution aux deux opérateurs (ou points d'entrée) centraux :

$$G^{23} = G^{24} - G^{25} \quad (\text{II-4-20}).$$

Les 4 branches s et ℓ ont été changées de sens avant l'utilisation de la relation. Nous allons maintenant transformer séparément chacun de ces 3 graphes.

Nous introduisons au centre du graphe G^{23} , comme nous l'avons fait dans l'exemple précédent, le projecteur sur l'espace des états $|\ell^N \alpha S' L' M' M' \rangle_{S' L'}$.

Auparavant, G^{23} est redessiné autrement sans changer de valeur :

$$G^{23} = \sum_{\alpha S' L'} G^{26} \quad (\text{II-4-21})$$

1. The first step in the process is to identify the problem or issue that needs to be addressed. This involves gathering information and understanding the context of the situation.

2. Once the problem is identified, the next step is to analyze the situation and determine the root cause of the problem. This may involve conducting a thorough investigation or using analytical tools.

3. After the root cause has been identified, the next step is to develop a plan of action. This plan should outline the specific steps that will be taken to address the problem and achieve the desired outcome.

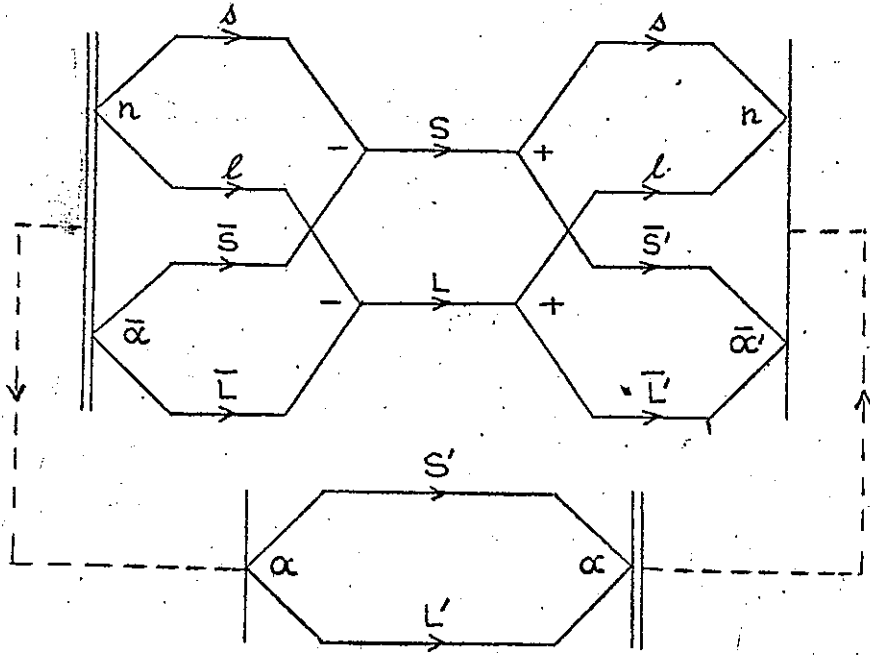
4. The final step in the process is to implement the plan and monitor the results. This involves putting the plan into action and tracking progress to ensure that the problem is resolved and the desired outcome is achieved.

CONFIDENTIAL - SECURITY INFORMATION

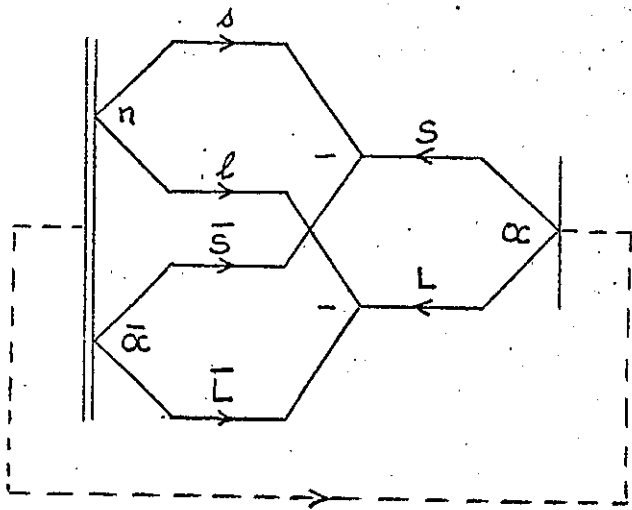
5. The next step is to evaluate the effectiveness of the plan and make any necessary adjustments. This involves comparing the actual results against the expected outcomes and identifying any areas for improvement.

6. Once the plan has been evaluated and any necessary adjustments have been made, the next step is to document the results and share the findings with relevant stakeholders.

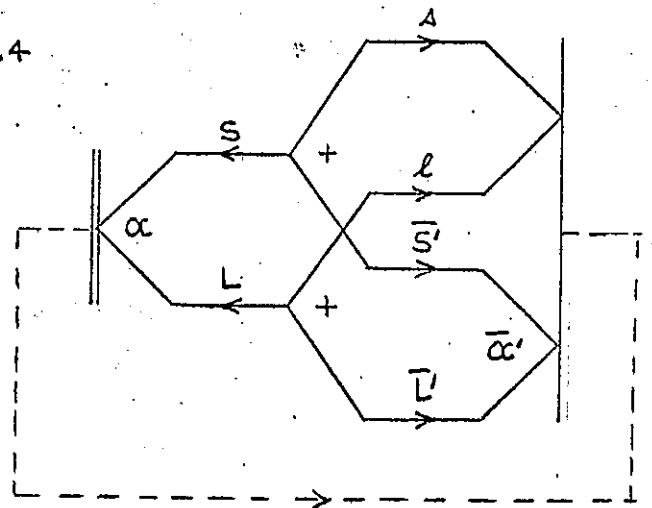
7. Finally, the process should be reviewed and refined to ensure that it is effective and efficient. This involves identifying any lessons learned and incorporating them into future planning and implementation.



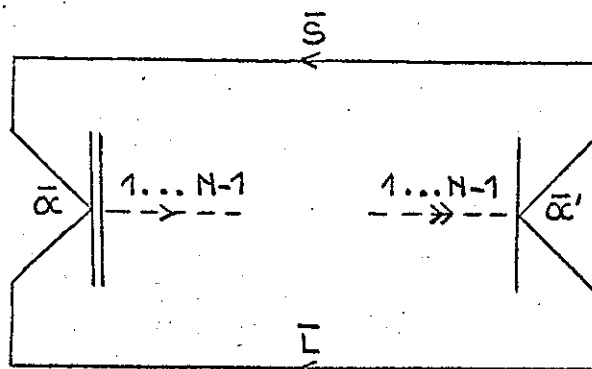
G^{26}
II.4



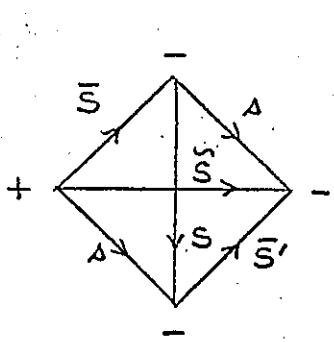
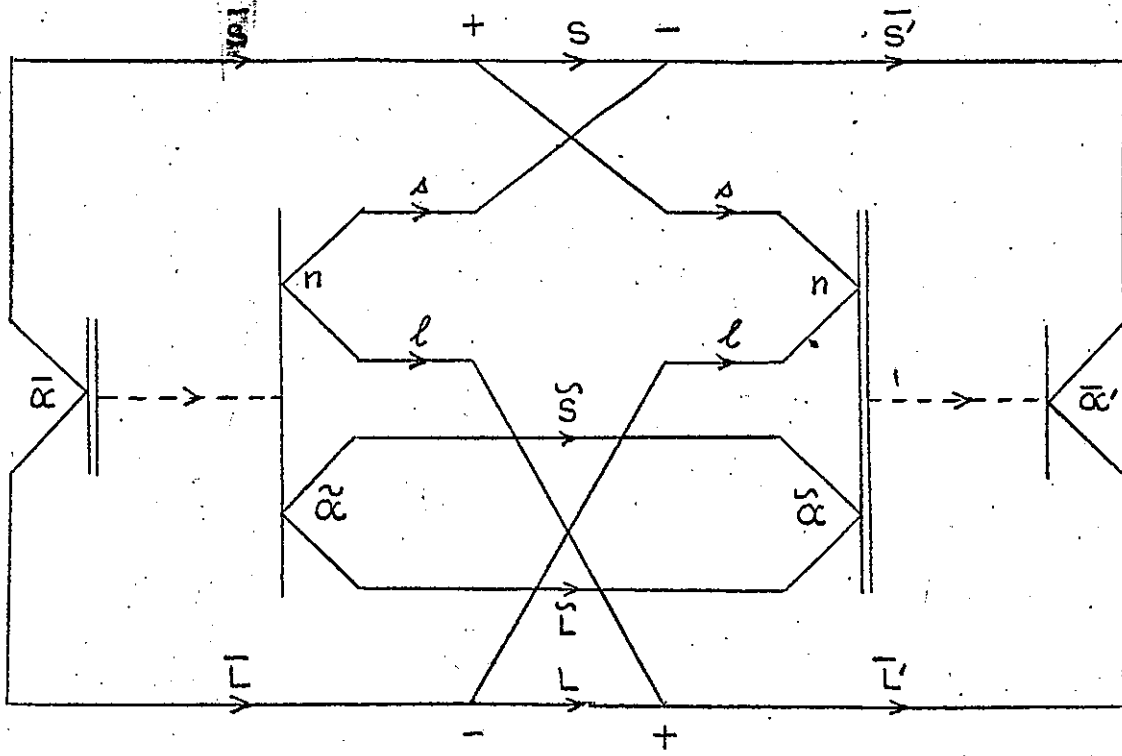
G^{27}
II.4



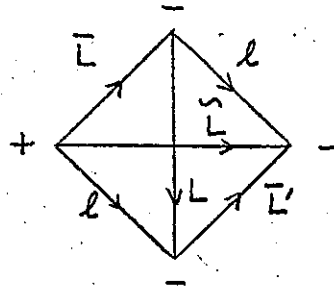
G^{28}
II.4



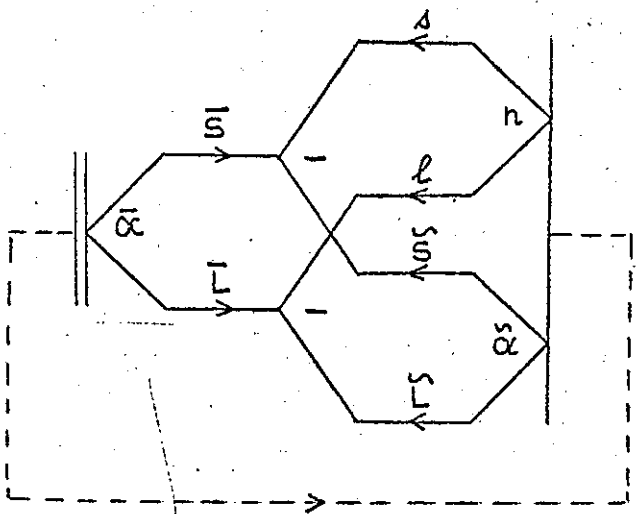
G^{29}
II.4



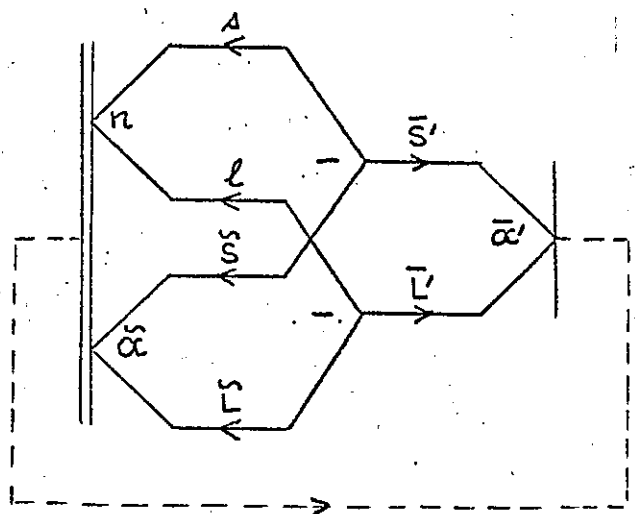
$G_{II.4}^{30}$



$G_{II.4}^{31}$



$G_{II.4}^{32}$



$G_{II.4}^{33}$

G^{26} , dans lequel le spin et l'orbite sont séparés, peut être coupé successivement suivant les deux couples de branches : S, S' et L, L' et on obtient :

$$\begin{aligned} G^{23} &= \sum_{\alpha} (-)^{2S} [S]^{-1} [L]^{-1} G^{27} G^{28} \\ &= N (-)^{\bar{S}' - \bar{S} + \bar{L}' - \bar{L}} \sum_{\alpha} (\bar{\Psi} + \ell | \Psi) (\Psi | \bar{\Psi}' + \ell) \end{aligned} \quad (\text{II-4-22})$$

Dans le graphe G^{24} , on supprime les boucles (formule (I-3-32)) :

$$G^{24} = \delta(\bar{S}, \bar{S}') \delta(\bar{L}, \bar{L}') [S]^{-1} [L]^{-1} G^{29} \quad (\text{II-4-23})$$

puis on intègre et on exprime les cercles obtenus par (I-3-14) :

$$G^{24} = \delta(\bar{\Psi}, \bar{\Psi}') \quad (\text{II-4-24})$$

Enfin le graphe G^{25} est lui aussi multiplié par un projecteur : celui des états $|\ell^{N-2} \tilde{\alpha} \tilde{S} \tilde{L} \tilde{M}_S \tilde{M}_L\rangle$:

$$G^{25} = \sum_{\tilde{\Psi}} G^{30}$$

G^{30} peut à son tour être coupé suivant les quatre triplés suivants :

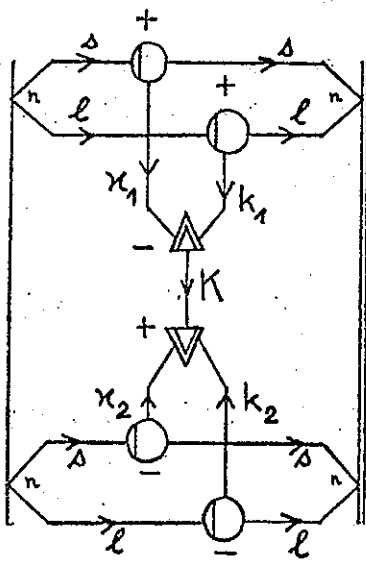
$$(\bar{S}, s, \tilde{S}), (\bar{L}, \ell, \tilde{L}), (\bar{S}', s, \tilde{S}'), (\bar{L}', \ell, \tilde{L}')$$

$$\begin{aligned} G^{25} &= \sum_{\tilde{\Psi}} G^{31} G^{32} G^{33} \\ &= (N-1) (-)^{2S} \hat{S} \hat{L} \hat{S}' \hat{L}' \sum_{\tilde{\Psi}} (\tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} + \ell) (\tilde{\Psi} + \ell | \tilde{\Psi}') \left\{ \begin{matrix} \bar{S} & s & \tilde{S} \\ \bar{S}' & s & S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{L} & \ell & \tilde{L} \\ \bar{L}' & \ell & L \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (\text{II-4-25})$$

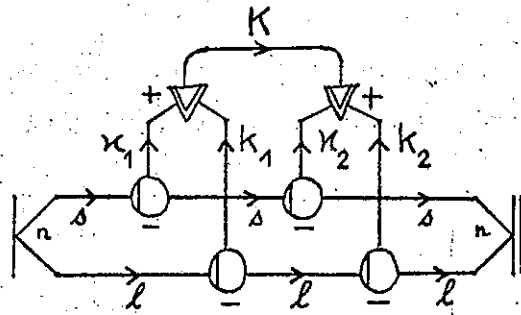
En écrivant ⁸⁾ :

$$N' |\alpha' S L M_S M_L\rangle = \sum_{\alpha} N(\alpha S L | \Psi' + \ell) |\alpha S L M_S M_L\rangle \quad (\text{II-4-26})$$

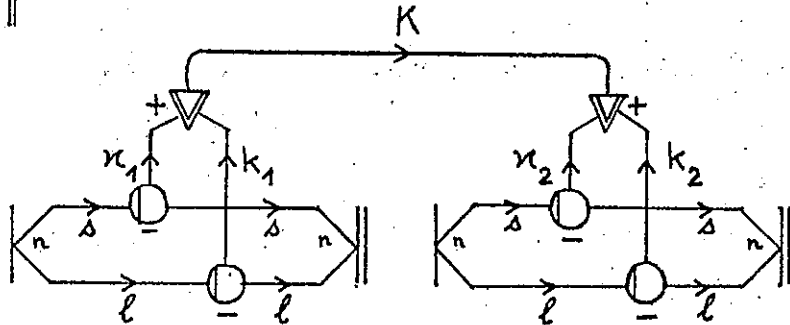
l'équation (20), multipliée par $(-)^{\bar{S}' - \bar{S} + \bar{L}' - \bar{L}}$ donne l'expression obtenue par Judd :



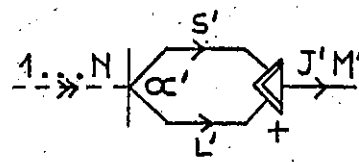
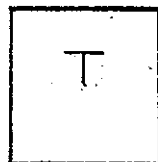
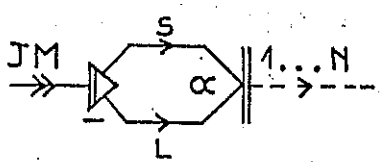
$G^1_{II.5}$



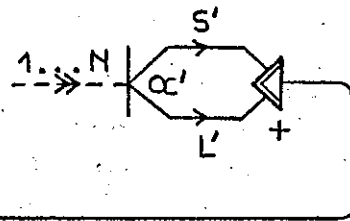
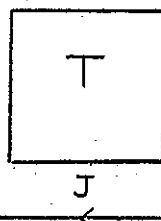
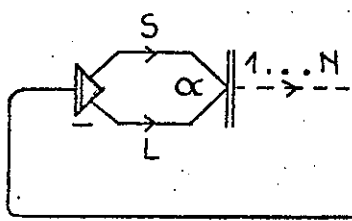
$G^2_{II.5}$



$G^3_{II.5}$



$G^4_{II.5}$



$G^5_{II.5}$

$$N' (\bar{\Psi} | \alpha' S L) = \delta (\bar{\Psi}, \bar{\Psi}') + (N-1) (-)^{\bar{S}+\bar{S}'+\bar{L}+\bar{L}'} \hat{S} \hat{L} \hat{S}' \hat{L}' \sum_{\tilde{\Psi}} (\bar{\Psi} || \tilde{\Psi} + \ell) (\tilde{\Psi} + \ell || \bar{\Psi}') \left\{ \begin{matrix} \bar{S} & s & \tilde{S} \\ \bar{S}' & s & S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{L} & \ell & \tilde{L} \\ \bar{L}' & \ell & L \end{matrix} \right\} \quad (\text{II-4-27})$$

La différence essentielle de notre calcul avec celui de Judd vient de ce que nous n'avons pas eu besoin d'effectuer de recouplage. Alors que Judd part de l'élément de matrice réduit :

$$(\bar{\Psi} || (a a^+)^{(\mu k)} || \bar{\Psi}') \quad (\text{II-4-28})$$

puis fait disparaître μ et k par sommation après avoir multiplié la formule par le produit de deux $\delta - j$, nous sommes partis directement d'une expression où la somme sur μ et k était déjà effectuée.

C'est en effet l'avantage principal des graphes de pouvoir éliminer les recouplages; dans les exemples ci-dessus, cet avantage est faible car les recouplages sont simples mais plus les calculs seront compliqués, plus la méthode graphique sera avantageuse.

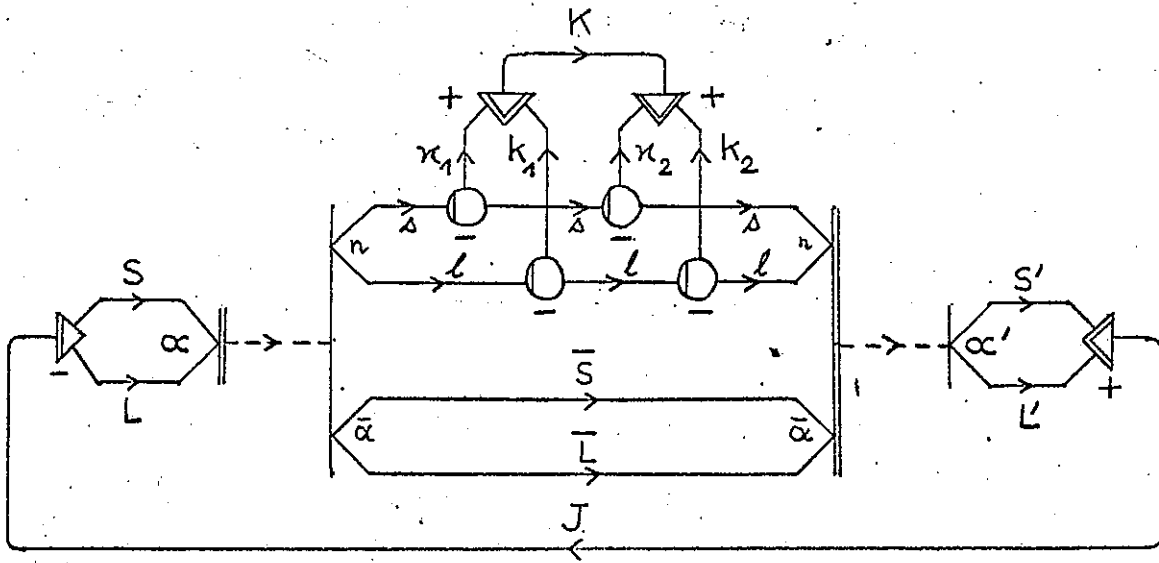
Nous allons maintenant voir, sous l'angle graphique, un dernier aspect de l'utilisation des opérateurs $W^{(\mu k)}(n\ell, n'\ell')$.

II - 5 - UTILISATION PRATIQUE DES OPERATEURS $W^{(\mu k)}(n\ell, n'\ell')$ -

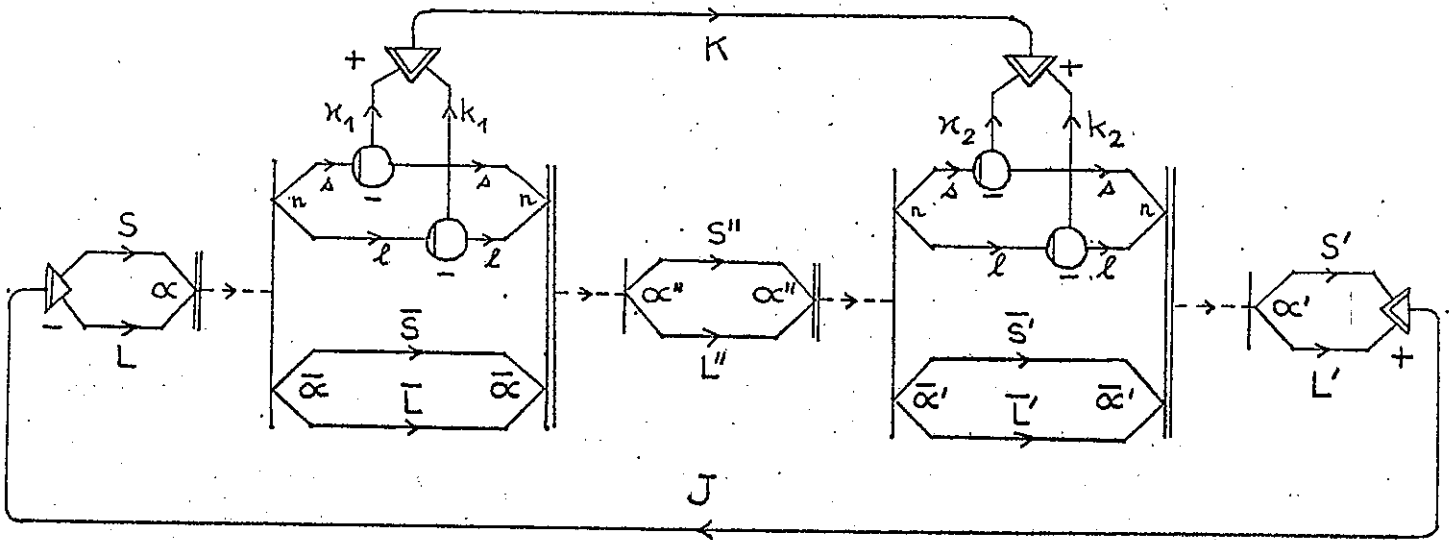
Un des avantages de la définition des opérateurs $W^{(\mu k)}(n\ell, n'\ell')$ est de pouvoir calculer de plusieurs manières différentes une même somme sur des opérateurs élémentaires $w_i^{(\mu k)}(n\ell, n'\ell')$.

Prenons un exemple. L'opérateur :

$$T = \sum_{i \neq j} \left\{ w_i^{(\mu_1 k_1)}(n\ell, n\ell) \times w_j^{(\mu_2 k_2)}(n\ell, n\ell) \right\}^{K.K} \quad (\text{II-5-1})$$



G^6
II.5



G^7
II.5

peut encore s'écrire :

$$T = \left\{ W^{(n_1 k_1)}_{(n\ell, n\ell)} \times W^{(n_2 k_2)}_{(n\ell, n\ell)} \right\}^{K.K}$$

$$- \sum_i \left\{ w_i^{(n_1 k_1)}_{(n\ell, n\ell)} \times w_i^{(n_2 k_2)}_{(n\ell, n\ell)} \right\}^{K.K} \quad (II-5-2)$$

Si nous voulons calculer les éléments de matrice de T pour la configuration $n\ell^N$, la forme (1) fait intervenir les états grand-parents $n\ell^{N-2}$, alors que la seconde forme ne fera intervenir que des états parents $n\ell^{N-1}$, si l'on prend soin d'intercaler un opérateur projection entre les deux opérateurs $W^{(nk)}_{(n\ell, n\ell)}$. Dans certains calculs compliqués (interactions à 3 corps, configurations mélangées, etc...), cette opération est avantageuse.

Avec les règles définies au premier chapitre, nous ne savions calculer graphiquement T que sous la forme (1), nous savons maintenant représenter et calculer l'une quelconque des deux formes, et passer de l'une à l'autre. Calculons, à titre d'exemple, les éléments de matrice de T , pour la configuration $n\ell^N$.

Commençons par représenter l'opérateur T :

$$T = (-)^K G^1 = (-)^K (G^2 - G^3) \quad (II-5-3)$$

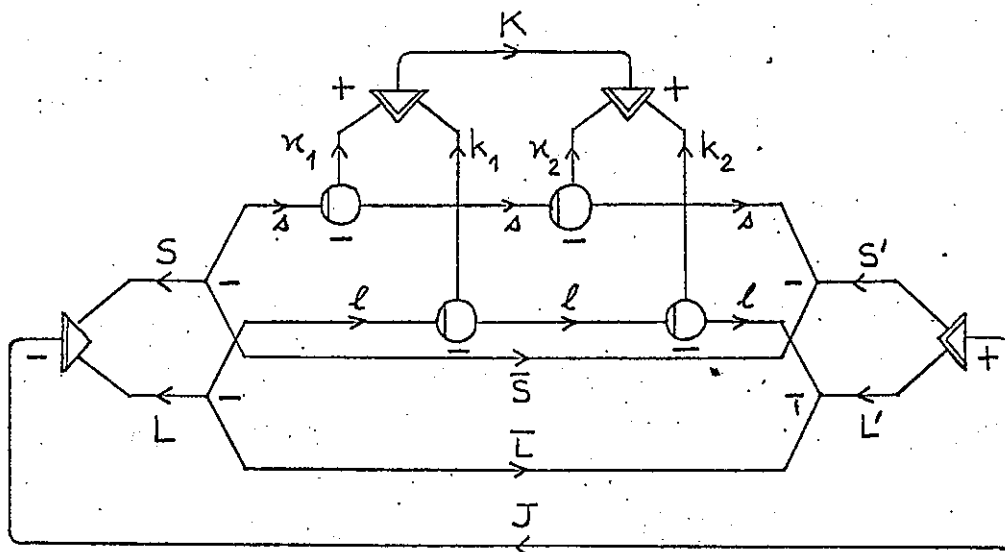
Le facteur de phase vient de la définition du produit scalaire (I-1-56). Les éléments de matrice de T peuvent d'abord s'écrire succinctement :

$$(\Psi | T | \Psi') = (n\ell^N \alpha S L J M_J | T | n\ell^N \alpha' S' L' J' M'_J)$$

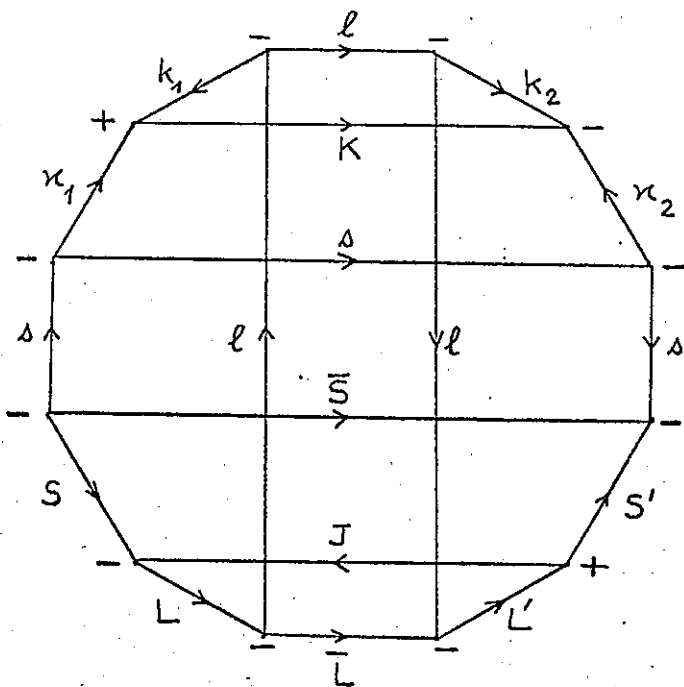
$$= G^4 = \delta(J J') \delta(M_J M'_J) [J]^{-1} G^5 \quad (II-5-4)$$

Pour calculer cet élément de matrice, nous allons introduire dans G^2 et G^3 des projecteurs sur des états de $n\ell^N$ ou de $n\ell^{N-1}$ et finalement :

$$(\Psi | T | \Psi') = \delta(J J') \delta(M_J M'_J) [J]^{-1} (-)^K \left(\sum_{\Psi} G^6 - \sum_{\Psi'' \Psi'} G^7 \right) \quad (II-5-5)$$



$G^8_{II.5}$



$G^9_{II.5}$

Nous savons maintenant couper de tels graphes pour obtenir des c p f :

$$G^6 = N \hat{S} \hat{L} \hat{S}' \hat{L}' (-)^{S'+L'+s+\ell-\bar{S}-\bar{L}+1} (\Psi \{ | \bar{\Psi} + \ell \} (\bar{\Psi} + \ell | | \Psi') G^8 \quad (\text{II-5-6})$$

et :

$$G^8 = [J] [K] \hat{\kappa}_1 \hat{\kappa}_2 \hat{k}_1 \hat{k}_2 (-)^{2L+2S'+2\kappa_1+2\kappa_2} G^9 \quad (\text{II-5-7})$$

enfin G^9 est égal, à un facteur de phase près, à un 18 - j de seconde espèce ³⁾ :

$$G^9 = (-)^{\bar{S}+\bar{L}+S'+L+\kappa_1+\kappa_2+\ell+s} \begin{bmatrix} \ell & L & S & s & \kappa_1 & k_1 \\ \bar{L} & J & \bar{S} & s & K & \ell \\ \ell & L' & S' & s & \kappa_2 & k_2 \end{bmatrix} \quad (\text{II-5-8})$$

De son coté :

$$G^7 = N^2 [S''] [L''] \hat{S} \hat{L} \hat{S}' \hat{L}' (-)^{S'+L'-S''-L''-\bar{S}-\bar{L}-\bar{S}'-\bar{L}'+1} (\Psi \{ | \bar{\Psi} + \ell \} (\bar{\Psi} + \ell | | \Psi'') (\Psi'' \{ | \bar{\Psi}' + \ell \} (\bar{\Psi}' + \ell | | \Psi') G^{10} \quad (\text{II-5-9})$$

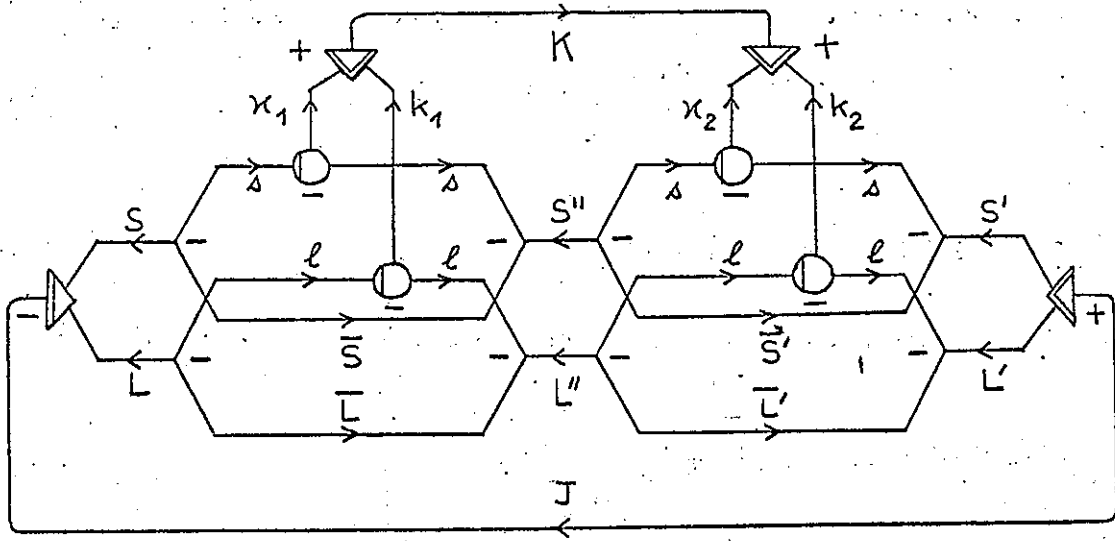
G^{10} peut être coupé suivant les quatre triplets : $(S \kappa_1 S'')$, $(L k_1 L'')$, $(S'' \kappa_2 S')$ et $(L'' k_2 L')$:

$$G^{10} = [J] [K] \hat{\kappa}_1 \hat{\kappa}_2 \hat{k}_1 \hat{k}_2 (-)^{2L+2S'+2\kappa_1+2\kappa_2+2S''+2L''} G^{11} \quad (\text{II-5-10})$$

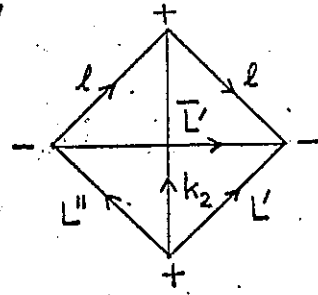
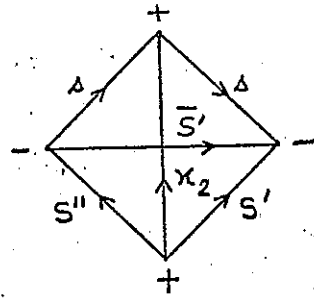
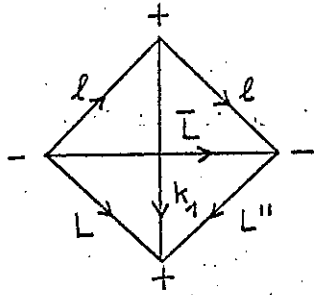
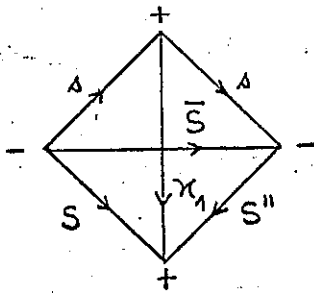
et :

$$G^{11} = (-)^{S''+L''+S'+L+\kappa_1+\kappa_2} \begin{Bmatrix} s & \kappa_1 & s \\ S & \bar{S} & S'' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & k_1 & \ell \\ L & \bar{L} & L'' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & \kappa_2 & s \\ S' & \bar{S}' & S'' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & k_2 & \ell \\ L' & \bar{L}' & L'' \end{Bmatrix} \begin{bmatrix} L & \kappa_1 & L' & \kappa_2 \\ J & L'' & S'' & K \\ S & S' & k_1 & k_2 \end{bmatrix} \quad (\text{II-5-11})$$

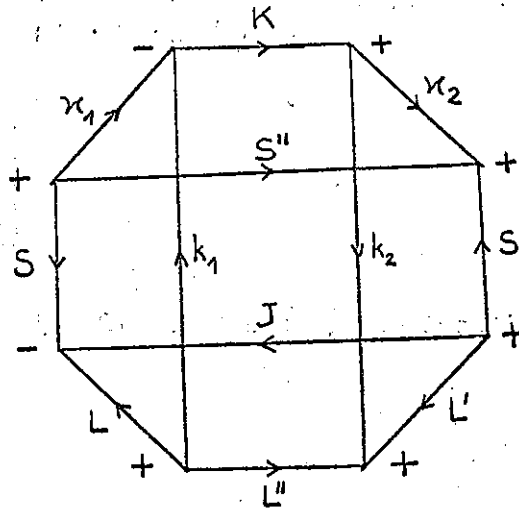
le dernier coefficient de (11) est un 12 - j de seconde espèce ³⁾.



$G_{II.5}^{10}$



$G_{II.5}^{11}$



Finalement, l'équation (5) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 (\Psi | T | \Psi') &= \delta(J J') \delta(M_J M'_J) N[K] \hat{S} \hat{L} \hat{S}' \hat{L}' \hat{n}_1 \hat{n}_2 \hat{k}_1 \hat{k}_2 (-)^{L+L'+n_1+k_2+K} \\
 &\times \left\{ \sum_{\bar{\Psi}} (\Psi \{ | \bar{\Psi} + \ell \}) (\bar{\Psi} + \ell \{ | \Psi') \left[\begin{array}{cccccc} \ell & L & S & s & n_1 & k_1 \\ \bar{L} & J & \bar{S} & s & K & \ell \\ \ell & L' & S' & s & n_2 & k_2 \end{array} \right] \right. \\
 &+ \sum_{\Psi'' \bar{\Psi} \bar{\Psi}'} N[S''] [L''] (-)^{\bar{S}+\bar{L}+\bar{S}'+\bar{L}'+2S''} (\Psi \{ | \bar{\Psi} + \ell \}) (\bar{\Psi} + \ell \{ | \Psi'') (\Psi'' \{ | \bar{\Psi}'+\ell \}) (\bar{\Psi}'+\ell \{ | \Psi') \\
 &\left. \left\{ \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{ccc} s & n_1 & s \\ S & \bar{S} & S'' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} \ell & k_1 & \ell \\ L & \bar{L} & L'' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} s & n_2 & s \\ S' & \bar{S}' & S'' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} \ell & k_2 & \ell \\ L' & \bar{L}' & L'' \end{array} \right\} \left[\begin{array}{cccc} L & n_1 & L' & n_2 \\ J & L'' & S'' & K \\ S & S' & k_1 & k_2 \end{array} \right] \right\} \right. \quad (II-5-12)
 \end{aligned}$$

L'exemple que nous venons de traiter complètement montre que, même dans un cas complexe comme celui-ci, que nous avons choisi à dessein, la méthode graphique reste simple; d'autre part nous savons maintenant l'utiliser aussi bien pour les opérateurs $W^{(nk)}(n\ell, n'\ell')$ que pour les opérateurs élémentaires $w_i^{(nk)}(n\ell, n'\ell')$.

II - 6 - CONCLUSION -

Nous avons introduit dans ce chapitre une représentation des opérateurs annihilation-création et de leurs relations d'anticommutation. L'application à ces graphes des règles définies précédemment a permis de développer une méthode graphique équivalente aux techniques de la seconde quantification; à titre d'exemple, nous avons retrouvé les principaux résultats obtenus par JUDD⁸⁾.

En particulier nous avons justifié la structure graphique des opérateurs adoptée au chapitre I. Mais les opérateurs représentés à l'aide de la seconde quantification sont des opérateurs totalement symétriques par rapport à l'échange de deux particules : leur représentation graphique ouvre de nouvelles possibilités pour l'emploi de la méthode en offrant plusieurs moyens de calcul des éléments de matrice d'un même opérateur.

D'autre part, nous avons défini les graphes des éléments de matrice réduits des opérateurs annihilation-crédation, reliés très simplement aux coefficients de parenté fractionnelle. Ceci nous a permis de développer une méthode de calcul un peu différente de celle employée au chapitre I : la numérotation des bra ou des ket de groupes d'électrons équivalents y est remplacée par l'introduction d'un projecteur et la mise en facteur, au moyen de coupures, des $c p f$.

Loin de rendre inutiles les règles définies au chapitre I, nous pensons avoir ainsi augmenté la souplesse de la méthode et sa cohérence interne.

SECONDE PARTIE

UTILISATION PRATIQUE DES GRAPHS

Cette partie comprend deux chapitres :

Chapitre III : Méthode pratique de calcul des éléments de matrice.

Chapitre IV : Programme SUPRAC d'établissement automatique
des formules.

CHAPITRE III

METHODE PRATIQUE DE CALCUL

DES ELEMENTS DE MATRICE

Les règles que nous avons décrites dans la première partie de ce travail permettent en principe le calcul graphique d'un élément de matrice quelconque. Mais notre but était non seulement de développer et de décrire une méthode de calcul, mais aussi de faciliter le plus possible son application pratique.

C'est pourquoi nous décrivons dans ce chapitre la suite des opérations à effectuer pour le calcul d'un élément de matrice; nous avons simplifié ces opérations au maximum; de plus, les plus compliquées d'entre elles (concernant la coupure des $3n-j$ irréductibles) sont très rarement utilisées.

Comme nous l'avons vu, le calcul d'un élément de matrice comprend trois phases que nous allons revoir l'une après l'autre :

- la construction des graphes du bra, de l'opérateur et du ket: nous indiquons dans ce paragraphe une manière simple et systématique de dessiner ces graphes.

- l'intégration : celle-ci est réduite à une opération graphique très simple; le coefficient numérique qui s'introduit alors peut être obtenu à l'aide d'une formule unique.

- le calcul du graphe intégré : cette opération est en général très simple; cependant, pour les graphes très complexes, le choix de la meilleure

coupure possible n'est plus évident; nous décrivons ici les règles que JUCYS ⁹⁾ préconise pour le résoudre.

Dans un second paragraphe, nous donnons trois exemples complets d'utilisation de la méthode. Le premier exemple est une illustration des calculs rencontrés couramment en spectroscopie atomique; nous l'avons choisi pour montrer la simplicité de la méthode dans ce cas. Les deux autres exemples sont au contraire des calculs plus compliqués que ceux rencontrés normalement; ils démontrent cependant qu'une utilisation systématique de la méthode permet de résoudre, sans difficultés, n'importe quel problème.

Enfin le troisième paragraphe est consacré à une étude rapide de la structure des graphes en couplage LS pur ou presque pur.

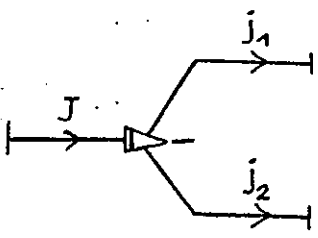
III - 1 - DESCRIPTION DES REGLES PRATIQUES DE CALCUL :

Nous passons en revue, dans ce paragraphe, les différentes phases du calcul d'un élément de matrice :

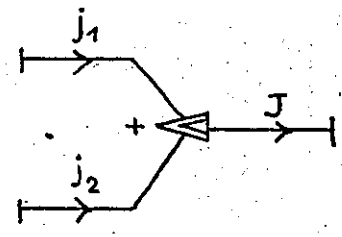
- construction des graphes de départ,
- intégration,
- fermeture et simplification du graphe intégré,
- coupure du ou des $3n-j$ obtenus.

III - 1 - 1 - Construction des graphes de départ :

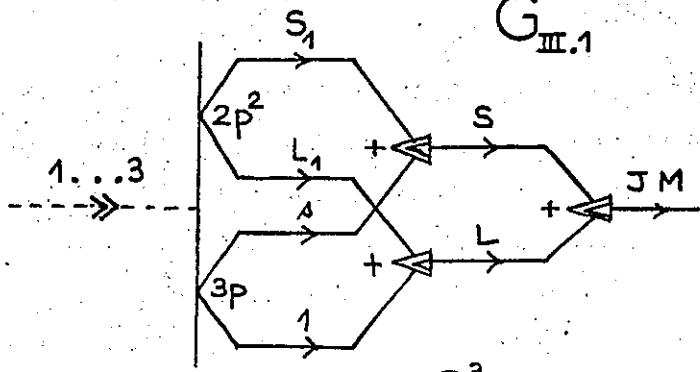
Nous rappelons dans ce paragraphe les diverses conventions que nous



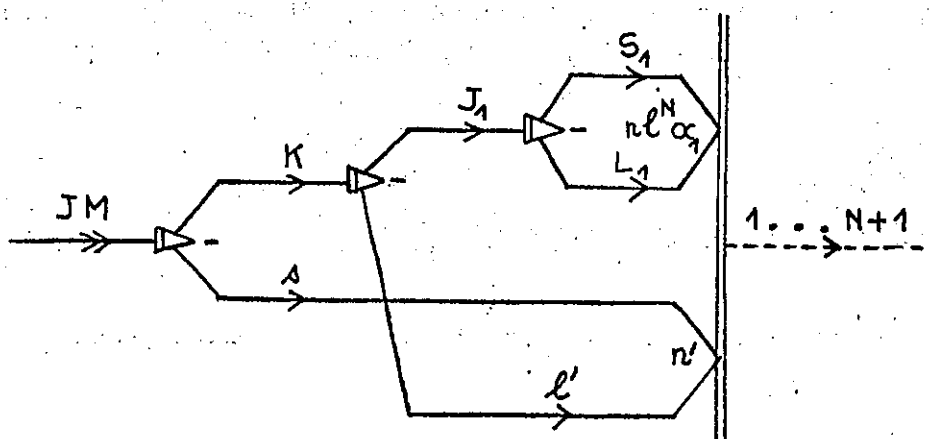
$G_{III.1}^1$



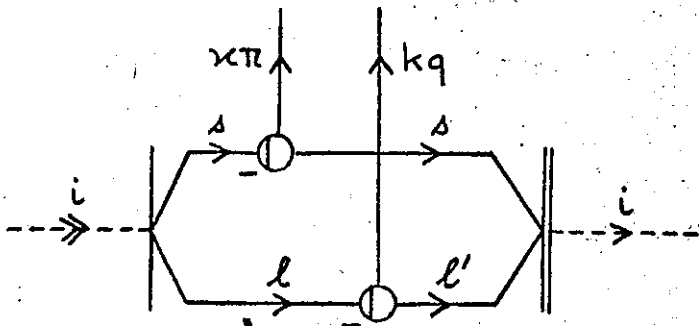
$G_{III.1}^2$



$G_{III.1}^3$



$G_{III.1}^4$



$G_{III.1}^5$

avons utilisées jusqu'ici pour dessiner nos graphes. Sans être nécessaires, elles rendent le calcul graphique beaucoup plus simple et rapide.

III - 1 - 1 - 1 - Construction du bra et du ket :

Une manière commode de dessiner le bra et le ket consiste à orienter toutes les branches horizontalement de gauche à droite, en allant :

- dans le bra des moments résultants aux moments élémentaires et aux lignes pointillées,

- dans le ket des lignes pointillées et des moments élémentaires aux moments résultants.

Chaque couplage de moments angulaires se représente par un noeud triangulaire. Si le couplage est écrit : $(j_1 j_2) J$, on place j_1 au dessus de j_2 ; dans ces conditions, tous les noeuds ont une des deux allures suivantes :

$$\text{bra} : G^1 \quad ; \quad \text{ket} : G^2 \quad (\text{III} - 1 - 1)$$

A gauche du bra et à droite du ket, on trouve alors les branches libres qui portent une flèche double rentrante dans le bra et une flèche simple sortante dans le ket. A l'autre extrémité se trouvent les points d'entrée où se rejoignent les branches de spin et d'orbite de chaque groupe d'électrons équivalents.

On part en général de bra et de ket totalement antisymétriques. Les points d'entrée sont alors reliés par un même trait vertical, ou chaîne. Ils doivent apparaître, de haut en bas, dans le même ordre que les groupes d'électrons correspondants, dans la fonction.

Voici deux exemples :

$$| 2p^2 S_1 L_1, 3p^2 P, S L J M \rangle = G^3 \quad (\text{III} - 1 - 2)$$

$$([(n\ell^N \alpha_1 S_1 L_1) J_1, n' \ell'] K, s, J M | = G^4 \quad (\text{III} - 1 - 3)$$

III - 1 - 1 - 2 - Construction de l'opérateur :

Afin d'avoir une méthode systématique, nous commençons par exprimer l'opérateur à l'aide des $w_i^{(nk)}(n \ell, n' \ell')$ dont le graphe G^5 est connu.

Voici, à titre d'exemple, l'expression des deux principales interactions existant dans l'atome : l'interaction de spin - orbite et l'interaction coulombienne. La partie angulaire de l'interaction de spin-orbite s'écrit⁸⁾ :

$$\sum_i s_i \cdot \ell_i = [\ell(\ell+1)(2\ell+1) / 6]^{1/2} \sum_i w_i^{(1-1)}(n\ell, n\ell) \quad (\text{III} - 1 - 4)$$

L'interaction coulombienne Q s'exprime⁴⁾ au moyen des opérateurs $C_i^{(k)}$:

$$Q = \sum_k \sum_{i>j} C_i^{(k)} \cdot C_j^{(k)} \frac{k}{r^{k+1}} \quad (\text{III} - 1 - 5)$$

qui peuvent s'exprimer à leur tour au moyen des opérateurs $w_i^{(ok)}(n \ell, n' \ell')$ ¹⁷⁾ :

$$C_i^{(k)} = \sqrt{2} k^{-1} \sum_{n\ell, n'\ell'} w_i^{(ok)}(n\ell, n'\ell') (n\ell || C^{(k)} || n'\ell') \quad (\text{III} - 1 - 6)$$

En intégrant la partie radiale, l'opérateur Q devient équivalent à l'expression suivante ¹⁷⁾:

$$Q' = 2 \sum_k [k]^{-1} \sum_{i>j} \sum_{\substack{n\ell, n'\ell' \\ n''\ell'', n'''\ell'''}} w_i^{(ok)}(n\ell, n'\ell') \cdot w_j^{(ok)}(n''\ell'', n'''\ell''') \\ \times (n\ell \parallel C^{(k)} \parallel n'\ell') (n''\ell'' \parallel C^{(k)} \parallel n'''\ell''') R^k(n\ell n''\ell'', n'\ell' n'''\ell''') \\ \text{(III - 1 - 7)}$$

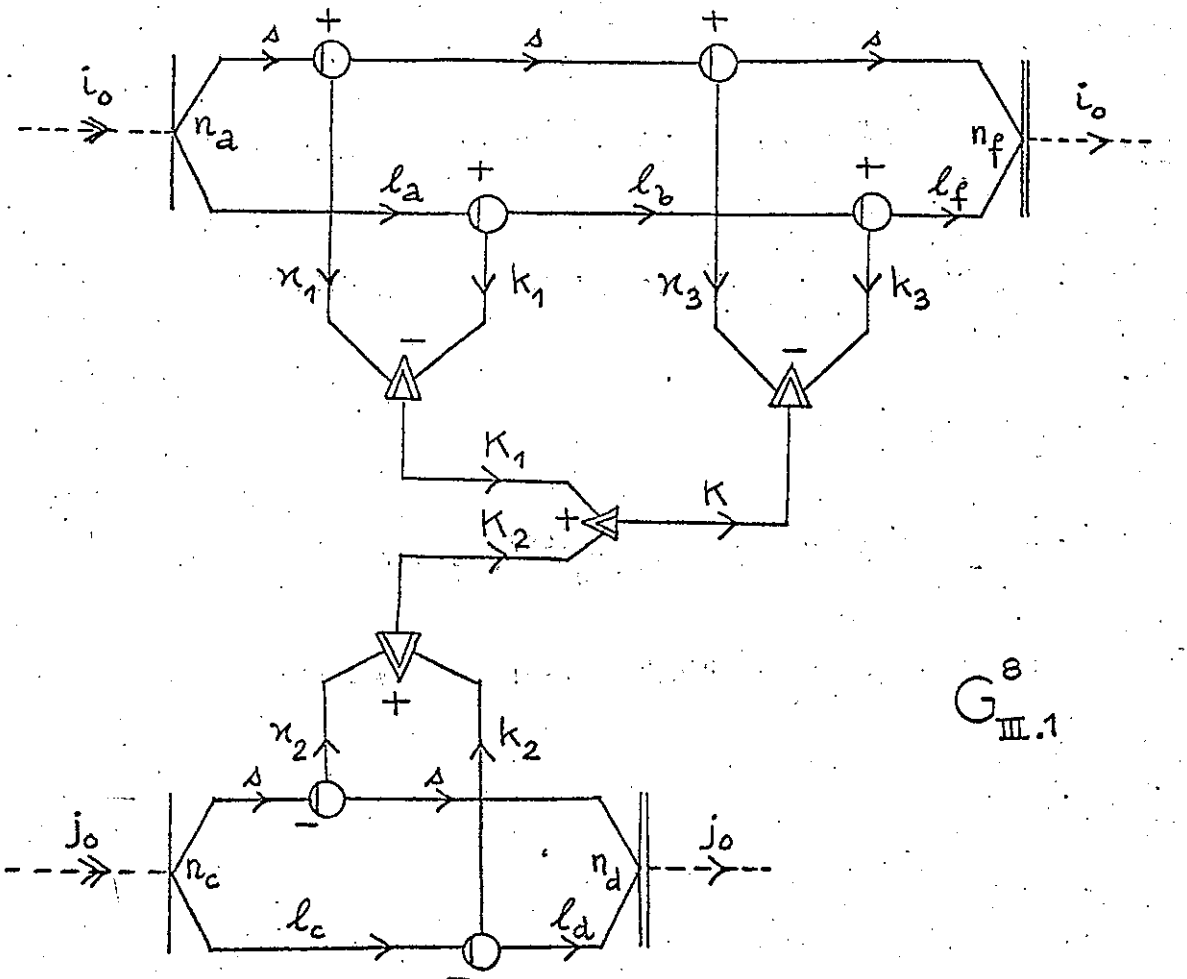
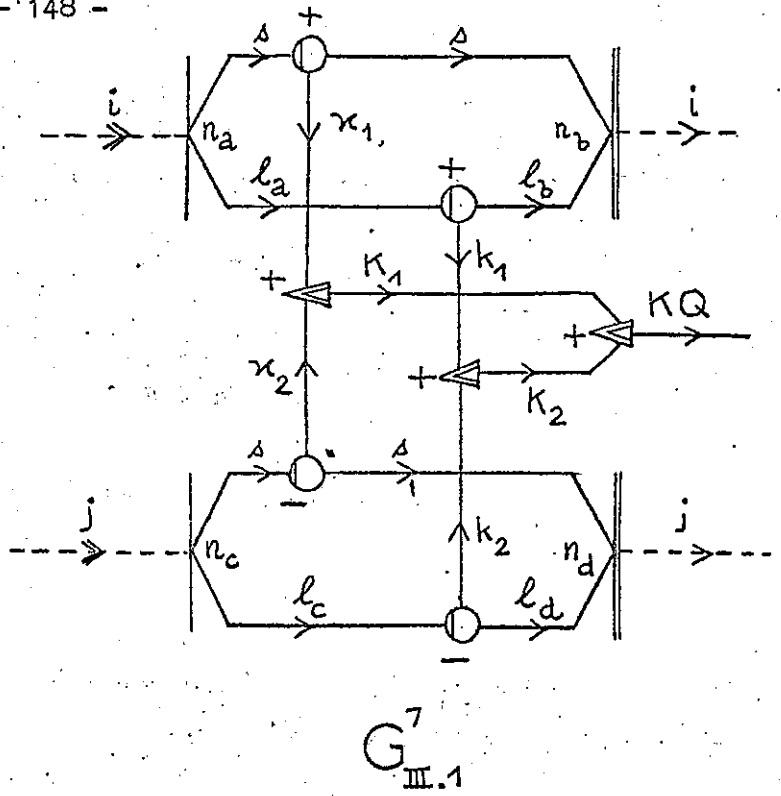
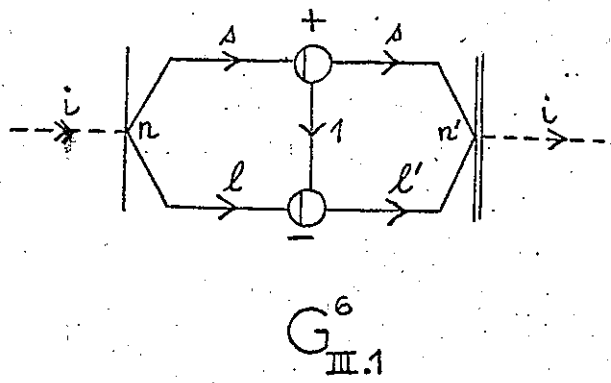
Pour les intégrales F^k et G^k , les termes correspondants de Q' prennent les formes particulières suivantes ¹⁷⁾:

a) $\underline{G^k}(n\ell, n'\ell')$:

$$4 \sum_k [k]^{-1} \sum_{i>j} w_i^{(ok)}(n\ell, n'\ell') \cdot w_j^{(ok)}(n'\ell', n\ell) (-)^{\ell+\ell'} \\ \times (n\ell \parallel C^{(k)} \parallel n'\ell')^2 G^k(n\ell, n'\ell') \text{(III - 1 - 8)}$$

b) $\underline{F^k}(n\ell, n'\ell')$: ($n\ell \neq n'\ell'$)

$$4 \sum_k [k]^{-1} \sum_{i>j} w_i^{(ok)}(n\ell, n\ell) \cdot w_j^{(ok)}(n'\ell', n'\ell') \\ \times (n\ell \parallel C^{(k)} \parallel n\ell) (n'\ell' \parallel C^{(k)} \parallel n'\ell') F^k(n\ell, n'\ell') \\ \text{(III - 1 - 9)}$$



c) $\underline{F}^k (n \ell, n \ell)$:

$$2 \sum_k [k]^{-1} \sum_{i>j} w_i^{(ok)} (n \ell, n \ell) \cdot w_j^{(ok)} (n \ell, n \ell) \\ \times (n \ell \parallel C^{(k)} \parallel n \ell)^2 F^k (n \ell, n \ell) \quad (\text{III} - 1 - 10)$$

Les rangs des opérateurs se couplent entre eux comme les moments angulaires d'un ket. Si l'opérateur est le produit scalaire de deux opérateurs de rang K, les deux branches K correspondantes sont simplement reliées et le graphe est multiplié par le facteur $(-)^K$.

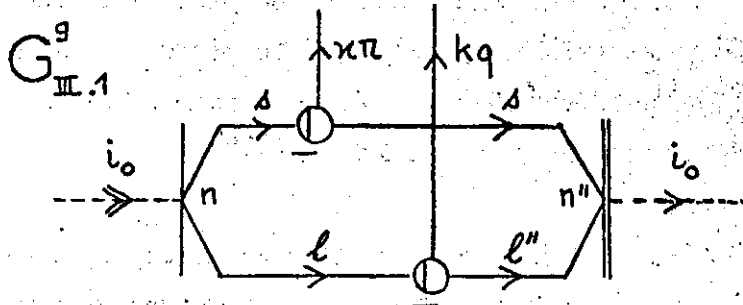
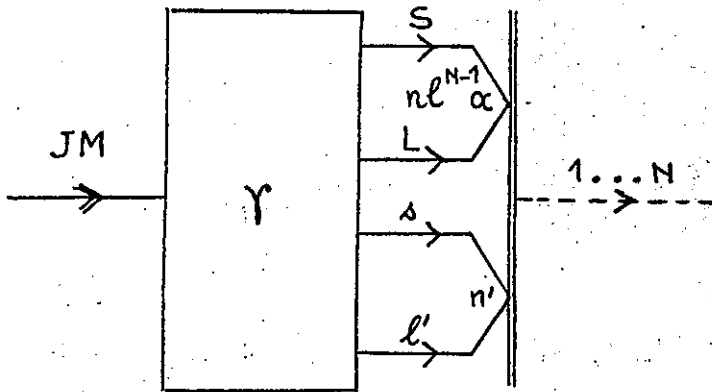
Le sens des flèches pour les rangs des opérateurs $w^{(nk)}$ n'a pas d'importance puisque ces rangs sont entiers. Le signe des noeuds circulaires correspond toujours à l'ordre "bra - op. - ket".

Voici à nouveau deux exemples :

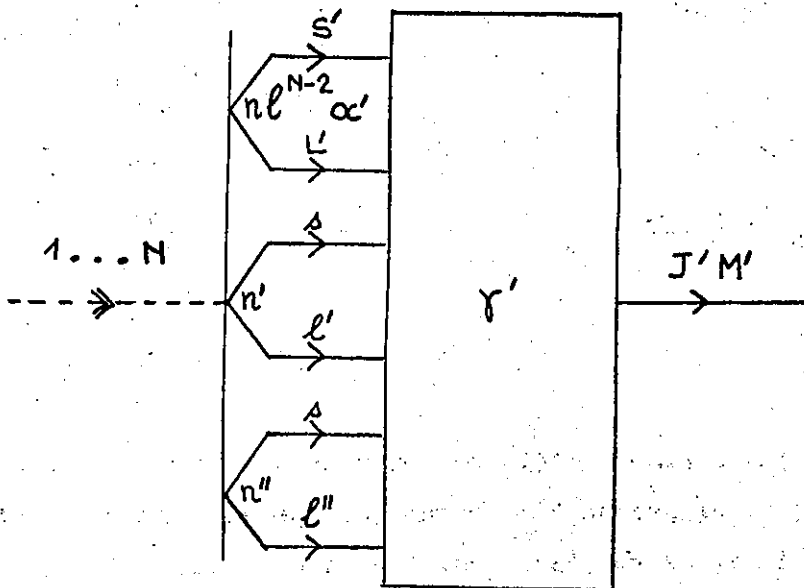
$$w_i^{(1.1)} (n \ell, n' \ell') = G^6 \quad (\text{III} - 1 - 11)$$

$$\{ w_i^{(n_1 k_1)} (n_a \ell_a, n_b \ell_b) \times w_j^{(n_2 k_2)} (n_c \ell_c, n_d \ell_d) \}_Q^{(K_1 K_2)K} = G^7 \\ (\text{III} - 1 - 12)$$

D'après le principe d'indiscernabilité, les termes d'une somme sur les numéros i, j, \dots des électrons sur lesquels agissent les opérateurs ont tous la même contribution; on peut donc les remplacer par l'un quelconque d'entre eux, de numéros i_0, j_0, \dots multiplié par le nombre de termes de la somme. Si plusieurs opérateurs élémentaires agissent sur un même électron i , on intègre immédiate-



$G_{III.1}^{10}$



$G_{III.1}^{11}$

ment les points d'entrée correspondants. Exemple :

$$\sum_{i \neq j}^N [w_i^{(n_1 k_1) K_1} (n_a \ell_a, n_b \ell_b) \times w_j^{(n_2 k_2) K_2} (n_c \ell_c, n_d \ell_d)]^K \cdot w_i^{(n_3 k_3) K} (n_e \ell_e, n_f \ell_f)$$

$$= N (N-1) \delta (n_b n_e) \delta (\ell_b \ell_e) (-)^K G^8 \quad (\text{III - 1 - 13})$$

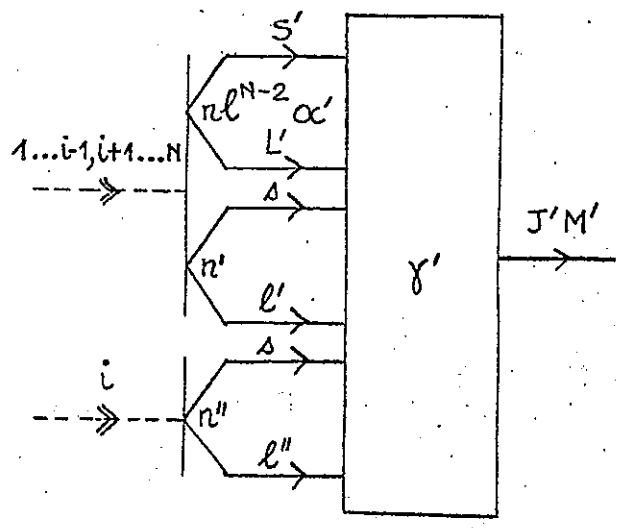
Maintenant que nous savons dessiner très rapidement les 3 graphes qui constituent un élément de matrice, nous allons voir que les règles d'intégration peuvent s'exprimer en général de façon très simple.

III - 1 - 2 - Intégration :

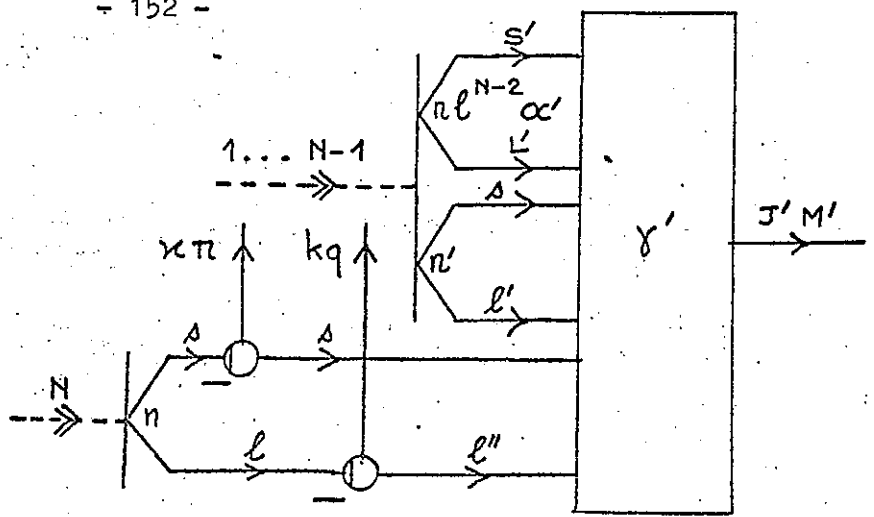
L'intégration des trois graphes composant un élément de matrice se fait après avoir numéroté le bra et le ket. Il apparaît alors des sommes dont les termes sont caractérisés par différentes combinaisons des numéros d'électron; chaque somme est multipliée par un facteur de normalisation et chaque terme est précédé d'un facteur de phase; enfin le résultat est parfois composé de plusieurs termes égaux qu'il faut savoir dénombrer.

Nous allons montrer, à travers deux exemples, qu'en général on peut rendre toutes ces opérations implicites et qu'il n'apparaît plus alors que 3 coefficients numériques et un facteur de phase très faciles à calculer.

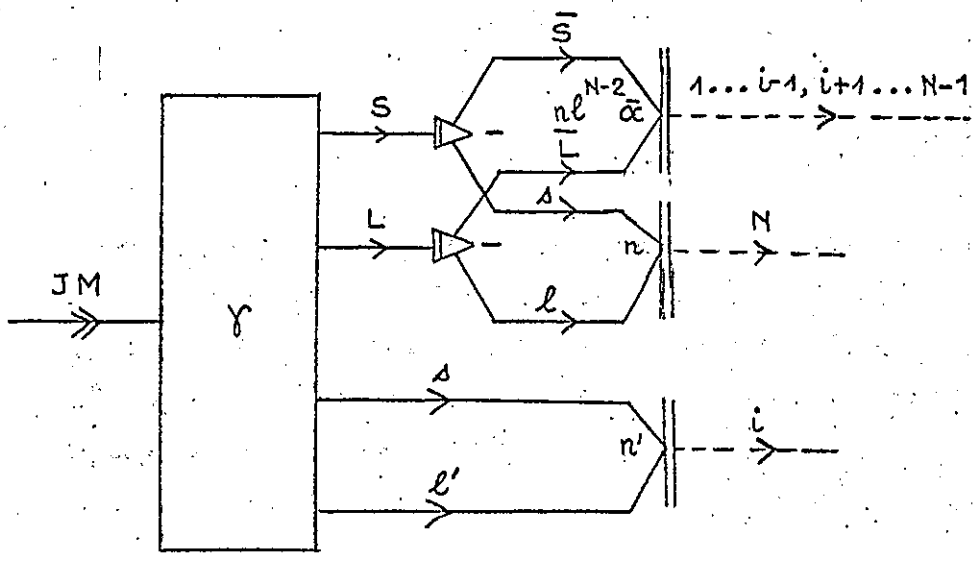
Nous en déduirons une formule valable, de manière générale, pour les opérateurs à n corps.



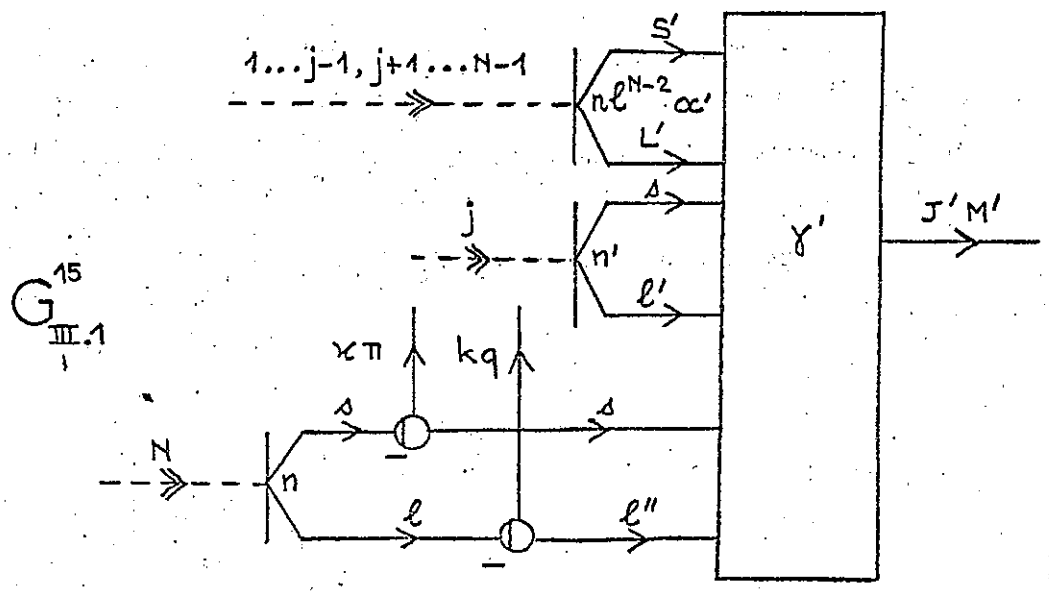
$G_{III.1}^{12}$



$G_{III.1}^{13}$



$G_{III.1}^{14}$



$G_{III.1}^{15}$

III - 1 - 2 - 1 - Premier exemple :

Soit à calculer :

$$\begin{aligned}
 & (n \ell^{N-1} \alpha S L, n' \ell', \gamma, J M | \sum_i^N w_i^{(\mu k)} \pi_q (n \ell, n'' \ell'') | n \ell^{N-2} \alpha' S' L', n' \ell', n'' \ell'', \gamma', J' M') \\
 & = N G^9 G^{10} G^{11} \quad \text{(III - 1 - 14)}
 \end{aligned}$$

Dans le graphe G^{10} , i_0 a une valeur quelconque. Posons $i_0 = N$. La première opération consiste à faire agir l'opérateur sur le ket et pour cela il faut numéroter le ket à l'aide de la relation (I - 1 - 24) :

$$G^{11} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i^N (-)^{i-N} G^{12} \quad \text{(III - 1 - 15)}$$

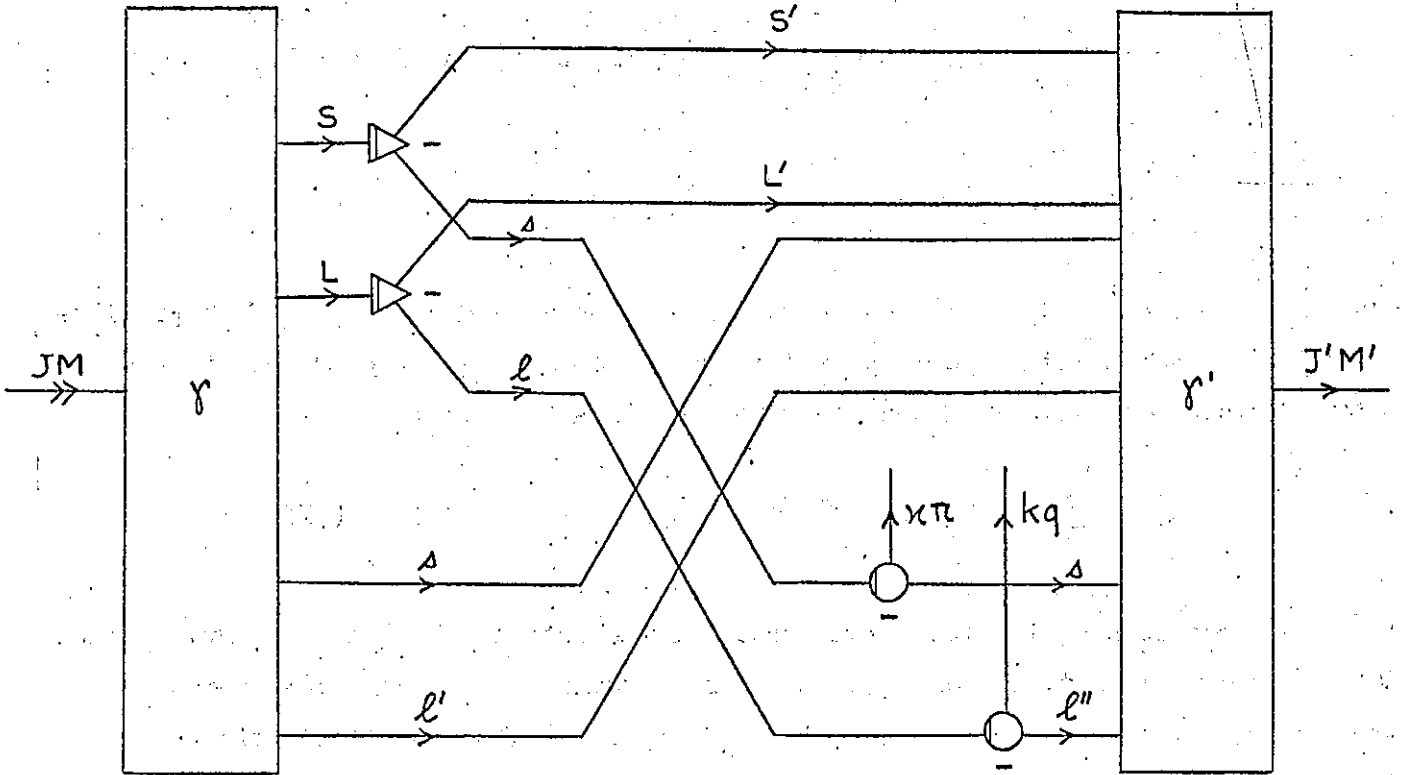
Les électrons équivalents étant groupés, l'électron $n'' \ell''$ ne se trouve qu'une fois dans le ket; en conséquence, le seul terme donnant une contribution non nulle est celui pour lequel : $i = i_0 = N$. Le résultat de l'opération : "opérateur - ket" peut donc se représenter par :

$$G^{10} G^{11} = \frac{1}{\sqrt{N}} G^{13} \quad \text{(III - 1 - 16)}$$

Pour effectuer le produit scalaire, ou intégration, du bra G^9 avec le ket G^{13} , il faut numéroter un électron $n \ell$ du bra et, pour cela, numéroter auparavant l'électron $n' \ell'$ (relations (I - 1 - 24) puis (I - 1 - 32) :

$$G^9 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i^{N-1} (-)^{i-N} \sum_{\bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}} (\ell^{N-2} \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L} + \ell | \ell^{N-1} \alpha S L) G^{14} \quad \text{(III - 1 - 17)}$$

Nous avons supprimé le terme $i = N$ qui donne une contribution nulle puisque



G^{16}
III.1

l'électron N a nécessairement les nombres quantiques $n \ell$. Pour que les chaînes se correspondent deux à deux entre le bra et le ket, il nous faut encore numérotter l'électron $n' \ell'$ dans le ket :

$$G^{10} G^{11} = \frac{1}{\sqrt{[N(N-1)]}} \sum_j^{N-1} (-)^{j-N+1} G^{15} \quad (\text{III} - 1 - 18)$$

On voit immédiatement que les termes de la somme sur i dans (17) et de la somme sur j dans (18) se correspondent deux à deux pour $i = j$; chaque terme donnant une contribution identique, on supprime la somme et on multiplie par le nombre de termes, soit $N-1$. la somme sur $\bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}$, dans (17), disparaît puisque l'intégration introduit les facteurs : $\delta(\bar{\alpha}, \alpha') \delta(\bar{S}, S') \delta(\bar{L}, L')$. Finalement, l'équation (14) devient :

$$(\quad | \quad) = -\sqrt{(N-1)} (\ell^{N-2} \alpha' S' L' + \ell \quad | \quad) \ell^{N-1} \alpha S L \quad G^{16} \quad (\text{III} - 1 - 19)$$

Grâce à cet exemple, nous allons maintenant pouvoir décrire la méthode à suivre dans le cas général.

III - 1 - 2 - 2 - Cas général :

Nous allons montrer que dans le cas général, une intégration se réduit à trois opérations successives :

- la numérotation du bra et du ket, dont on ne retiendra que le facteur de normalisation et les sommes sur les configurations parentes et les c p f,

- la liaison effective entre les graphes, qui introduit les deltas et un facteur numérique supplémentaire,

- le calcul du facteur de phase global.

La première opération consiste à numéroter séparément, à l'aide de la relation (I - 1 - 24), dans le bra et dans le ket tous les points d'entrée correspondants à des électrons présents dans l'opérateur. Dans l'exemple ci-dessus, ceci correspond aux équations (15) et (18) réunies. Nous ne retenons de cette opération que les deux facteurs de normalisation :

$$\left(C_{n_1, n_2, \dots}^N \right)^{-1/2} \quad \text{et} \quad \left(C_{n'_1, n'_2, \dots}^N \right)^{-1/2} \quad (\text{III} - 1 - 20)$$

Les numéros des électrons de l'opérateur sont fixés à une valeur arbitraire i_0, j_0, \dots (cf § III - 1 - 1 - 2). Dans les développements du bra et du ket; seuls les termes où ces numéros apparaissent en face des mêmes nombres quantiques $n \ell$ que dans l'opérateur, donnent une contribution non nulle. Dans l'exemple, le numéro $i_0 = N$ devait correspondre aux nombres quantiques $n \ell$ dans le bra et $n'' \ell''$ dans le ket. L'équation (I - 1 - 32) est utilisée pour numéroter les électrons équivalents. Nous pouvons toujours utiliser l'équation (I - 1 - 23), qui n'introduit qu'un facteur de phase, pour placer le numéro i_0, j_0, \dots en queue de liste et numéroter ainsi correctement l'électron isolé. Nous ne retenons à nouveau de cette opération que les sommations et les coefficients de parenté fractionnelle.

Nous pouvons effectuer, à ce stade du calcul, l'intégration proprement dite qui consiste à rejoindre les branches homologues dans les 3 graphes. Cette opération introduit les deltas de Kronecker sur tous les nombres quantiques présents dans les points d'entrée homologues et sur les moments angulaires dont les branches sont reliées. Dans les développements du bra et du ket, le nombre de termes N' qui contribuent à ce graphe, est le même, ils se correspondent deux à deux : il suffit donc de multiplier le résultat par N' .

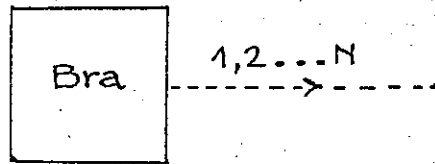
Pour trouver N' considérons les points d'entrée dont les branches relient directement le bra et le ket. Ce sont d'abord ceux de la chaîne de points d'entrée dont les nombres quantiques $n \ell$ n'apparaissent pas dans l'opérateur; soit n_0 le nombre d'électrons de cette chaîne. Ce sont ensuite les points d'entrée des groupes d'électrons équivalents dont un ou plusieurs électrons ont été numérotés par l'équation (I - 1 - 32); soient m_1, m_2, \dots les nombres d'électrons de ces points d'entrée. Si k est le nombre d'électrons de l'opérateur :

$$N' = G_{n_0, m_1, m_2, \dots}^{N-k} \quad (\text{III - 1 - 21})$$

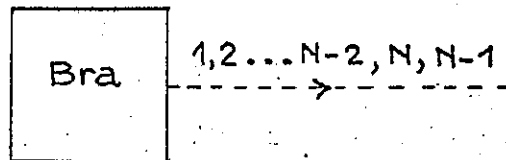
Dans l'exemple : $k = 1, n_0 = 1$ (l'électron $n \ell'$), $m_1 = N-2$ (les électrons $n \ell$ restants) et $N' = N-1$.

Dans les deux opérations ci-dessus, il apparait des facteurs de phase; nous allons montrer qu'on peut en tenir compte par un seul facteur de phase global. Pour cela, choisissons, dans la première décomposition du ket, le terme pour lequel la permutation des numéros des électrons est la permutation identité; soit T_0 ce terme. Choisissons d'autre part pour les numéros des électrons de l'opérateur (i_0, j_0, \dots), les numéros que l'on trouve en queue de liste des points d'entrée correspondant dans le terme T_0 . Dans l'exemple, nous avons ainsi choisi : $i_0 = N$; Dans ces conditions, l'utilisation de l'équation (I - 1 - 32) n'introduit pas de facteur de phase pour ce terme.

Avant même la numérotation du bra, c'est-à-dire sa séparation en plusieurs chaînes, modifions alors l'ordre des numéros placés sur la ligne pointillée; considérons pour chaque point d'entrée du bra le ou les numéros qui apparaissent sur les points d'entrée homologues de l'opérateur ou du terme T_0 ; puis écrivons ces numéros dans l'ordre où ils apparaissent en lisant les points d'entrée du bra de haut en bas. Soit p la parité de la permutation qui permet cette transformation. Dans l'exemple, les numéros apparaissent dans l'ordre



$G_{III.1}^{17}$



$G_{III.1}^{18}$

suisvant :

$$\begin{array}{ll}
 \text{Ket (terme } T_0): n \ell^{N-2} & : 1, 2, \dots N-2 & \text{Bra : } n \ell^{N-2} & : 1, 2, \dots N-2 \\
 n' \ell' & : N-1 & n \ell & : N \\
 n'' \ell'' & : N & n' \ell' & : N-1
 \end{array}$$

L'opération ci-dessus aurait donc consisté à écrire :

$$G^{17} = - G^{18} \quad (\text{III - 1 - 22})$$

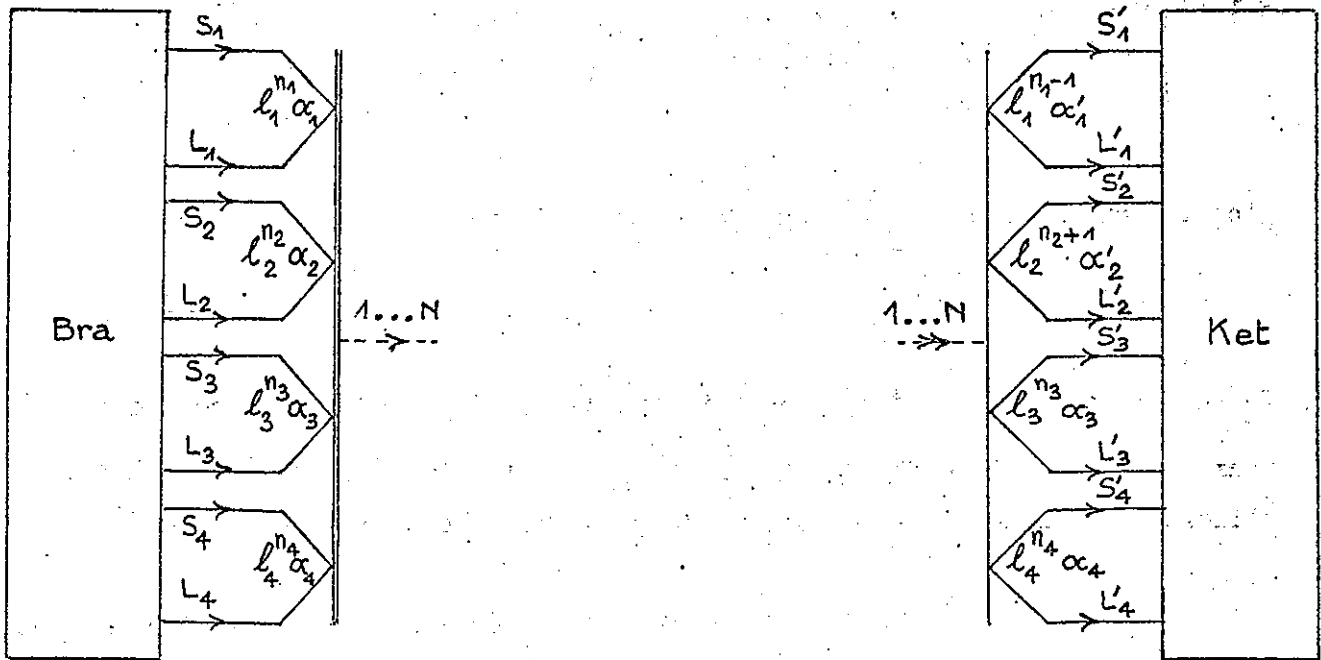
De cette façon, le terme T'_0 , défini pour le bra de la même manière que T_0 pour le ket, est l'homologue du terme T_0 et l'utilisation de (I - 1 - 32) n'introduit pas non plus de facteur de phase pour ce terme.

Les N' termes utiles de chacune des deux décompositions s'obtiennent respectivement à partir de T_0 et de T'_0 par les mêmes permutations sur les numéros des électrons extérieurs à l'opérateur. Les facteurs de phase apparaissent donc au carré et il reste finalement le seul facteur global :

$$(-)^P \quad (\text{III - 1 - 23})$$

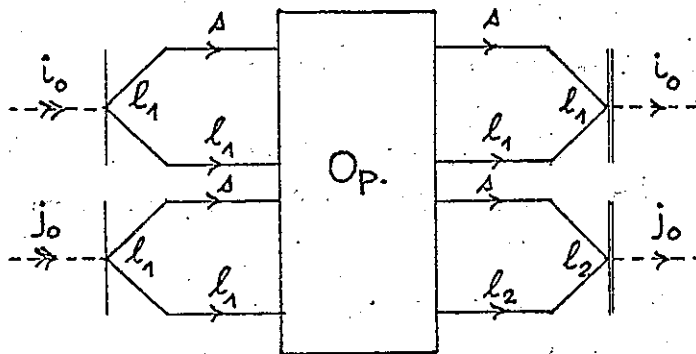
En résumé, l'intégration est constituée par les opérations suivantes :

- multiplication par les deux facteurs de normalisation dûs à la numérotation des groupes d'électrons équivalents dont le nom apparaît dans l'opérateur.
- décomposition des groupes d'électrons précédents en sommes sur les termes parents, avec apparition des $c p f$.
- liaison des branches homologues, avec apparition des facteurs deltas.



$G_{III.1}^{19}$

$G_{III.1}^{21}$



$G_{III.1}^{20}$

- multiplication par N' , nombre de termes identiques issus des décompositions du bra et du ket.

- multiplication par le facteur de phase $(-)^p$, qui exprime la modification de l'ordre des points d'entrée entre le bra et le ket.

Même dans un cas compliqué, cet ensemble de règles reste simple. Pour nous en convaincre, voyons un second exemple :

III - 1 - 2 - 3 - Second exemple :

Soit à intégrer l'élément de matrice :

$$E = N(N-1) / 2 \quad G^{19} \quad G^{20} \quad G^{21} \quad (\text{III - 1 - 24})$$

les sous-couches sont représentées ici par le seul nombre quantique λ .

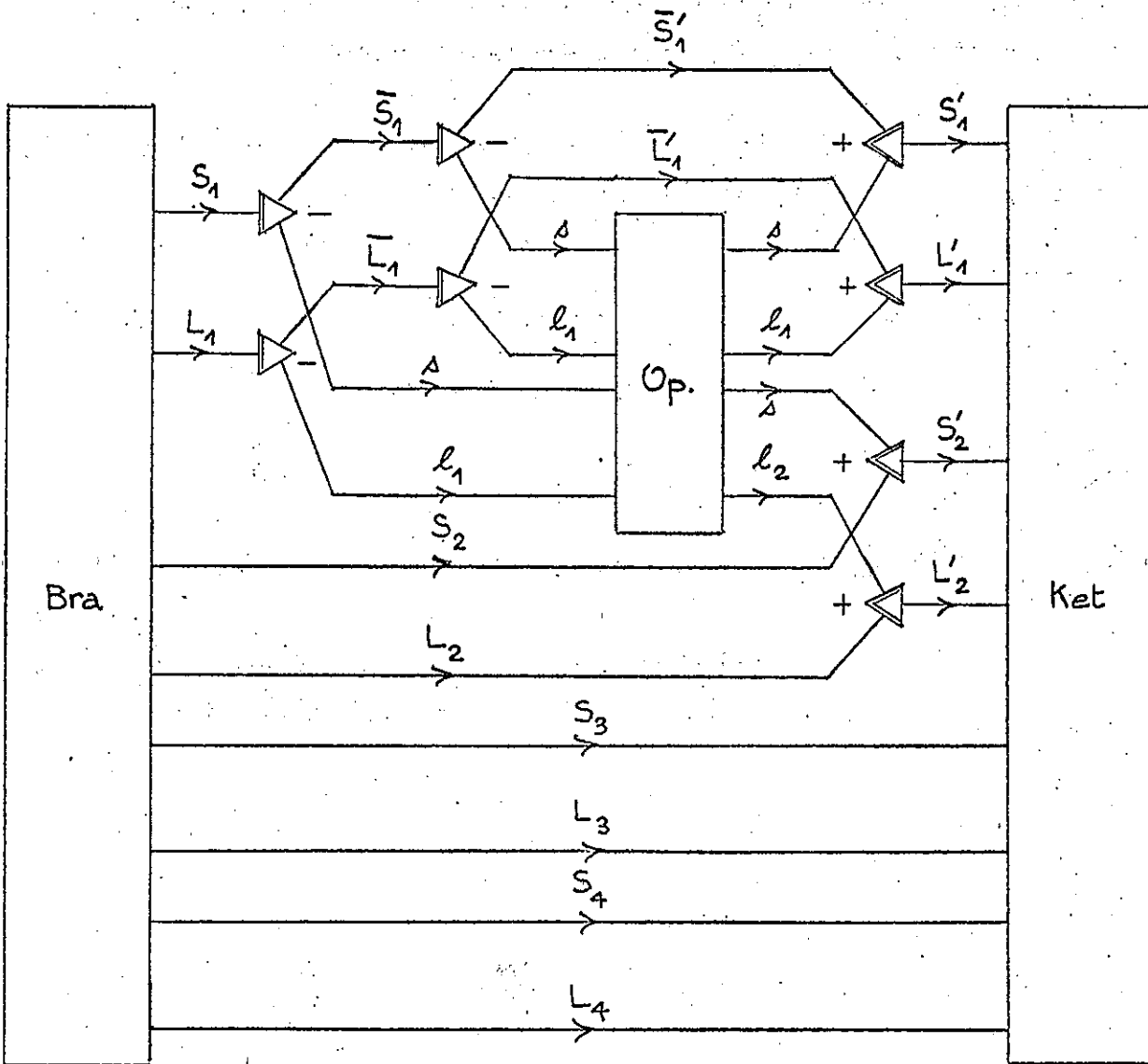
Les facteurs de normalisation N_1 et N_2 sont dus à la numérotation des groupes d'électrons ℓ_1 et ℓ_2 dans le bra et dans le ket :

$$N_1 = \left(C_{n_1, n_2, n_3+n_4}^N \right)^{-1/2} \quad (\text{III - 1 - 25})$$

$$N_2 = \left(C_{n_1-1, n_2+1, n_3+n_4}^N \right)^{-1/2} \quad (\text{III - 1 - 26})$$

Nous utilisons ensuite la relation (I - 1 - 32) pour décomposer les groupes $\ell_1^{n_1}$ dans le bra et $\ell_1^{n_1-1}$ et $\ell_2^{n_2+1}$ dans le ket. Il apparaît les

sommes sur les parents : $\ell_1^{n_1-1} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1$ et les grands-parents : $\ell_1^{n_1-2} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1$.



dans le bra et sur les parents $\ell_1^{n_1-2} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1$ et $\ell_2^{n_2} \bar{\alpha}_2 \bar{S}_2 \bar{L}_2$ dans le ket, avec les c p f correspondants.

L'intégration proprement dite introduit le facteur :

$$N' = C_{n_3+n_4, n_1-2, n_2}^{N-2} \quad (\text{III} - 1 - 27)$$

et provoque la suppression de deux sommes à cause des deltas suivants :

$$\delta(\bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1, \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1) \text{ et } \delta(\alpha_2 S_2 L_2, \alpha_2 S_2 L_2) \quad (\text{III} - 1 - 28)$$

Enfin le facteur de phase $(-)^P$ est donné par la parité de la permutation P:

$$P = \begin{pmatrix} 1 \dots n_1-1 & n_1 & n_1+1 & \dots & n_1+n_2 \\ 1 \dots n_1-1 & n_1+n_2 & n_1 & \dots & n_1+n_2-1 \end{pmatrix} \quad (\text{III} - 1 - 29)$$

On voit facilement que p est de même parité que n_2 .

L'équation (24) devient finalement :

$$E = (-)^{n_2} (n_1-1) N[n_1(n_2+1)] / 2 \delta(\alpha_3 S_3 L_3, \alpha_3 S_3 L_3) \delta(\alpha_4 S_4 L_4, \alpha_4 S_4 L_4) \\ \times \sum_{\substack{\bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 \\ \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1}} (\ell_1^{n_1-2} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 + \ell_1 \dots | \ell_1^{n_1-1} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1) (\ell_1^{n_1-1} \alpha_1 S_1 L_1 + \ell_1 | \ell_1^{n_1} \alpha_1 S_1 L_1) \\ \times (\ell_1^{n_1-2} \bar{\alpha}_1 \bar{S}_1 \bar{L}_1 + \ell_1 | \ell_1^{n_1-1} \alpha_1 S_1 L_1) (\ell_2^{n_2} \alpha_2 S_2 L_2 + \ell_2 | \ell_2^{n_2+1} \alpha_2 S_2 L_2) G^{22}$$

$$(\text{III} - 1 - 30)$$

Ce genre de calcul peut être effectué une fois pour toutes dans le cas général. C'est ce résultat que nous donnons dans le paragraphe suivant.

III - 1 - 2 - 4 - Intégration des opérateurs à n corps :

Les règles ci-dessus permettent d'écrire un élément de matrice sous la forme générale suivante :

$$(\Psi | Op | \Psi') = (-)^P K \sum_{\text{parents}} c p f (\Psi | Op. | \Psi') \text{ numéroté} \quad (\text{III} - 1 - 31)$$

Le coefficient K est le produit de 4 nombres :

$$K = N_0 N_1 N_2 N' \quad (\text{III} - 1 - 32)$$

où : - N_0 est le nombre de termes de la somme exprimant l'opérateur symétrique Op .

- N_1 et N_2 sont les facteurs de normalisation

- N' est le nombre de termes identiques apparaissant dans l'intégration.

Soit N le nombre total d'électrons de Ψ et Ψ' . Nous allons montrer que K peut s'exprimer par une formule générale indépendante de N .

Supposons que l'opérateur s'exprime toujours par :

$$Op = \sum_{i>j>k\dots} Op_{ijk\dots} \quad (\text{III} - 1 - 33)$$

Le nombre de termes de (33) est égal à :

$$N_0 = C_k^N = \frac{N!}{k!(N-k)!} \quad (\text{III} - 1 - 34)$$

où k est le nombre d'électrons sur lesquels porte l'opérateur (opérateur à k corps).

Soient l_1, l_2, \dots les électrons du bra sur lesquels agit l'opérateur et l'_1, l'_2, \dots ceux du ket. Soient n_1, n_2, \dots (resp. n'_1, n'_2, \dots) le nombre d'électrons l_1, l_2, \dots (resp. l'_1, l'_2, \dots) dans le bra (resp. dans le ket). Chaque électron peut apparaître plusieurs fois dans l'opérateur : posons que celui-ci transforme p'_1 électrons l'_1 , p'_2 électrons l'_2, \dots en p_1 électrons l_1 , p_2 électrons l_2, \dots . Nous représentons cet opérateur par la notation symbolique suivante :

$$\left(\begin{matrix} p_1 & p_2 & \dots & p'_1 & p'_2 & \dots \\ l_1 & l_2 & \dots & l_1 & l_2 & \dots \end{matrix} \right) \quad (\text{III} - 1 - 35)$$

Dans ces conditions, les fonctions Ψ et Ψ' contiennent nécessairement les groupes d'électrons suivants :

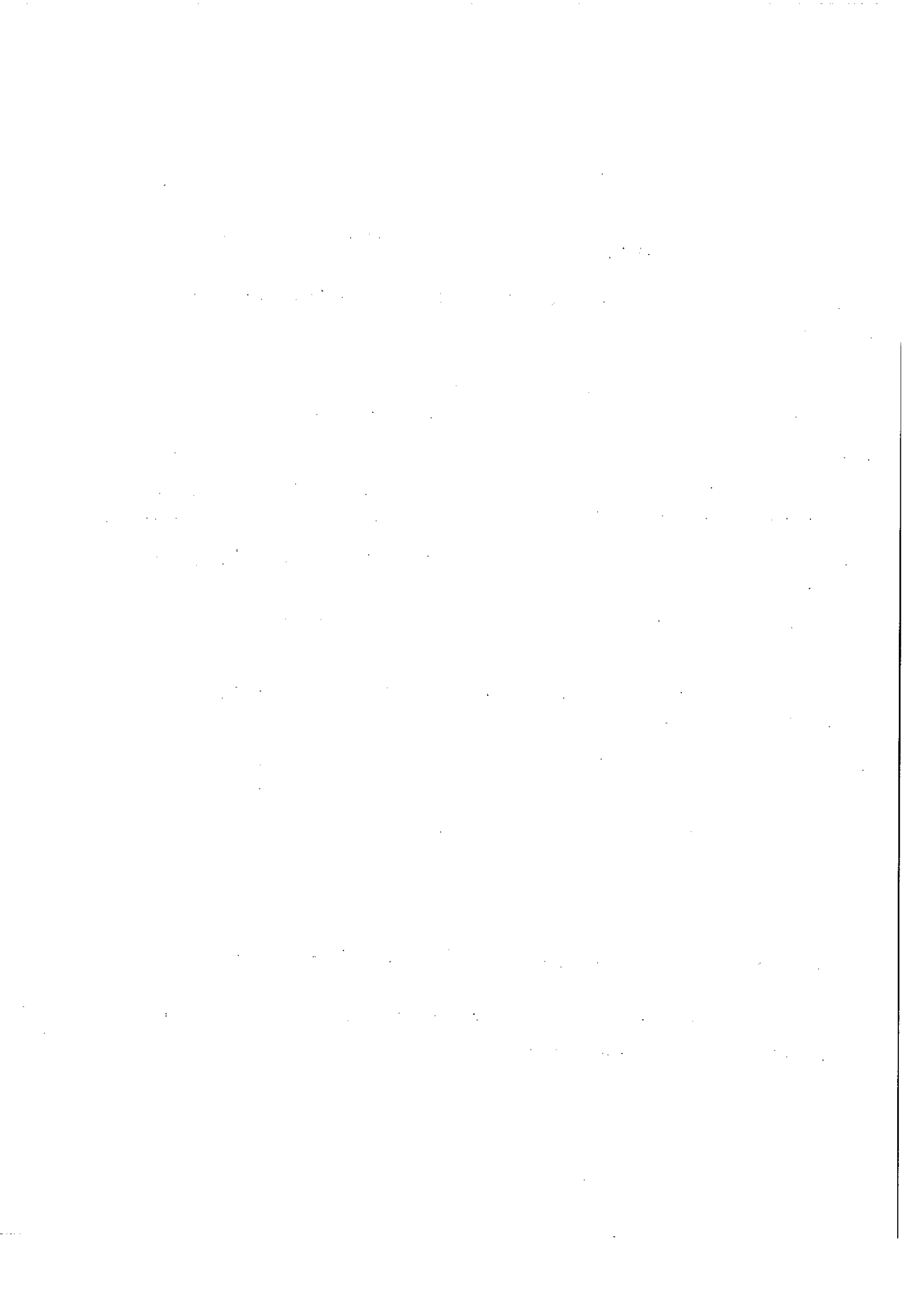
$$(\Psi | = (l_1^{n_1} l_2^{n_2} \dots l_1^{n'_1 - p'_1} l_2^{n'_2 - p'_2} \dots \dots | \quad (\text{III} - 1 - 36)$$

$$| \Psi') = | l_1^{n'_1} l_2^{n'_2} \dots l_1^{n_1 - p_1} l_2^{n_2 - p_2} \dots \dots) \quad (\text{III} - 1 - 37)$$

Posons :

$$n_0 = N - n_1 - n_2 - \dots - (n'_1 - p'_1) - (n'_2 - p'_2) - \dots \quad (\text{III} - 1 - 38)$$

n_0 est le nombre d'électrons non concernés par l'opérateur. Les coefficients N_1, N_2 et N' peuvent alors s'écrire :



$$N_1 = [N! / n_0! n_1! n_2! \dots (n_1 - p_1)! (n_2 - p_2)! \dots]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{III} - 1 - 39)$$

$$N_2 = [N! / n_0! n_1! n_2! \dots (n_1 - p_1)! (n_2 - p_2)! \dots]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{III} - 1 - 40)$$

$$N' = N! / n_0! (n_1 - p_1)! (n_2 - p_2)! \dots (n_1 - p_1)! (n_2 - p_2)! \dots \quad (\text{III} - 1 - 41)$$

En réunissant les formules (34), (39), (40) et (41), on obtient finalement :

$$K = \frac{1}{k!} [n_1! n_2! \dots n_1! n_2! \dots / (n_1 - p_1)! (n_2 - p_2)! \dots (n_1 - p_1)! (n_2 - p_2)! \dots]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III} - 1 - 42)$$

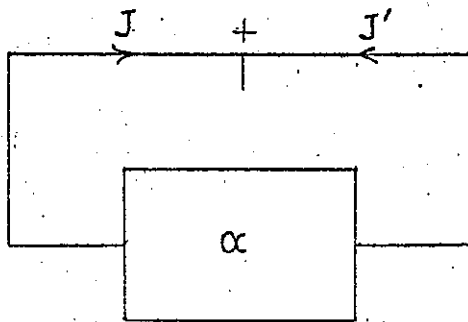
Si l'opérateur agit dans le bra sur un groupe d'électrons $\ell_i^{n_i^a}$ et qu'il agit dans le ket sur un groupe d'électrons équivalents $\ell_i^{n_i^b}$, il n'apparaît qu'un seul rapport $n_i! / (n_i - p_i)!$ dans la formule (42). n_i est alors égal au plus grand des deux nombres n_i^a et n_i^b et p_i est le nombre d'électrons ℓ_i sur lesquels agit l'opérateur, du côté du groupe $\ell_i^{n_i^a}$.

Appliquons par exemple la formule (42) à l'opérateur $(\ell_1^2, \ell_1' \ell_2')$ du paragraphe précédent :

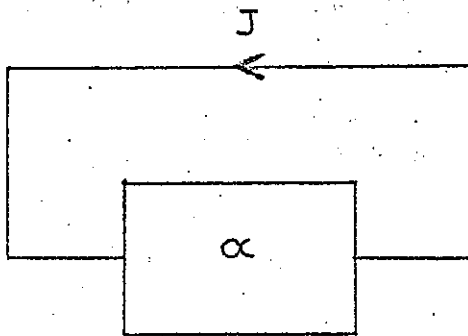
$$K = \frac{1}{2} \sqrt{[n_1 (n_1 - 1) n_1' n_2']} \quad (\text{III} - 1 - 43)$$

On retrouve bien le coefficient de la formule (30).

L'application de la formule (31), dont on sait maintenant calculer très rapidement la phase $(-)^p$ et le coefficient K permet de dessiner, en général du premier coup, le graphe tout intégré de l'élément de matrice. Les opérations qui restent à effectuer sont en général simples. Nous allons maintenant les rappeler.



$G_{III.1}^{23}$



$G_{III.1}^{24}$

III - 1 - 3 - Fermeture et simplification du graphe intégré :

Dans ce paragraphe, nous allons seulement rappeler les différentes étapes du calcul d'un graphe intégré :

- a) fermeture : A ce stade du calcul, on peut déjà avoir le produit de plusieurs graphes différents; tout ce que nous dirons s'applique évidemment à chacun des graphes séparément. La fermeture d'un graphe peut toujours se faire à l'aide de la formule (I - 3 - 16); dans la plupart des cas, on peut utiliser les formules plus simples (I - 3 - 18) et (I - 3 - 21). Un graphe où les branches de spin et d'orbite ne se rejoignent qu'aux points d'entrée peut être considéré comme deux graphes séparés (cf § III - 3). Si on veut calculer un élément de matrice réduit, on part directement d'un graphe fermé : formules (I - 3 - 20) et (III - 3 - 8). Mais il faut faire attention que l'élément de matrice réduit d'un opérateur scalaire est donné par :

$$G^{23} = \delta (J J') \hat{J}^{-1} G^{24} \quad (\text{III} - 1 - 44)$$

et non par le simple graphe G^{24} .

- b) suppression des triangles et des cercles : les cercles sont simplement remplacés par leur valeur : formule (I - 2 - 20). La suppression d'un triangle introduit un facteur numérique, un facteur de phase et modifie le signe du noeud : formules (I - 3 - 12) et (I - 3 - 13).
- c) suppression des branches nulles : les noeuds étant polaires, on peut facilement appliquer les formules (I - 3 - 23) et (I - 3 - 24) pour supprimer les noeuds qui sont les extrémités de branches nulles.

Le graphe qu'on obtient alors est celui d'un coefficient $3n-j$, en général réductible. Ce sont les problèmes pratiques que soulève la coupure d'un tel graphe que nous étudions dans le paragraphe suivant.

III - 1 - 4 - Coupure d'un coefficient $3n-j$:

La première opération à faire consiste à se ramener à un coefficient $3n-j$ irréductible en effectuant toutes les coupures non triviales suivant 2 ou 3 branches : formules (I - 3 - 31), (I - 3 - 32) et (I - 3 - 33). Il suffit alors, en général, de comparer les graphes obtenus à ceux des coefficients $3n-j$ tabulés (Exemples : G_{I-3}^{72} , G_{I-3}^{73} , G_{I-3}^{74} , G_{I-3}^{46}); on en déduit le facteur de phase, dû aux changements de signe des noeuds (formule (I - 3 - 2)) ou de sens des branches (formule (I - 1 - 4)), qui nous permet de transformer les derniers graphes en coefficients $3n-j$ dont les formules sont connues.

Cependant, dans certains cas, les $3n-j$ obtenus ne sont pas tabulés ($n \geq 7$). Il faut alors utiliser la formule (I - 3 - 29) pour les exprimer sous forme de $3n-j$ plus simples. Mais il y a un choix possible : à la fois parmi les différentes coupures du graphe (on choisit évidemment les coupures suivant un nombre minimal de branches) et parmi les différents $n-j_m$, c'est-à-dire parmi les différents couplages des branches coupées. Nous donnons, dans ce paragraphe, les règles que JUCYS ⁹⁾ propose pour résoudre ce choix.

Une coupure s'effectue en plusieurs étapes :

- recherche des coupures suivant un nombre de branches minimal.
- choix de la meilleure coupure.
- pour une coupure suivant 4 branches, choix du $4-j_m$ c'est-à-dire du raccordement des branches coupées.

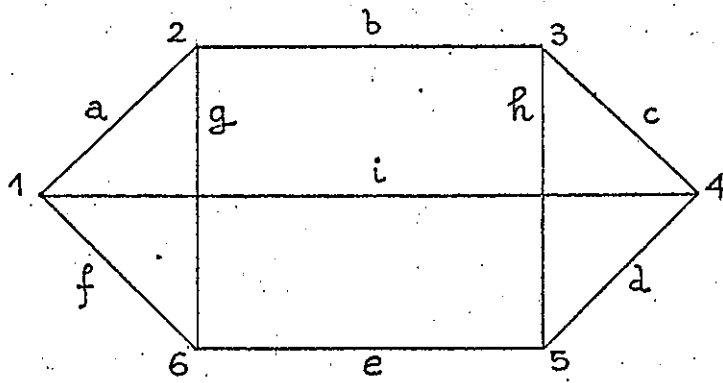
- pour une coupure suivant plus de 4 branches, on se ramène à une coupure suivant 4 branches en utilisant autant de fois qu'il est nécessaire la relation (I - 3 - 34) qui diminue d'une unité le nombre de branches coupées. A chaque fois, on doit choisir le meilleur couple de branches à utiliser.
- pour les deux dernières étapes, on se sert des "distances" entre les noeuds du graphe. Nous verrons donc auparavant comment on les définit et comment on les calcule.

III - 1 - 4 - 1 - Recherche des coupures minimales :

Le procédé de recherche des coupures doit être systématique; en effet, on veut être sûr d'avoir trouvé toutes les coupures suivant un nombre donné de branches.

Le principe en est simple : on explore toutes les possibilités d'isoler k noeuds, k variant de 2 à n pour un $3n-j$ (k est limité à n par raison de symétrie). Pour chaque ensemble de noeuds, on compte le nombre de branches qui les relie au reste du graphe et on conserve les coupures suivant un nombre de branches minimal. On élimine alors les coupures triviales, sauf si elles le sont toutes (cas du $9-j$). On passe alors au choix de la meilleure coupure (prochain paragraphe).

Bien que simple, la recherche des coupures représente un nombre considérable d'opérations (pour un $21-j$, il y a déjà près de 10.000 possibilités de coupures à explorer). Seul l'ordinateur peut réaliser, dans un temps raisonnable, de telles recherches. Indiquons cependant la méthode la plus commode¹⁵⁾. On construit la "matrice d'incidence" du graphe (cf BERGE¹⁸⁾, chap. 15), c'est-à-dire une matrice rectangulaire $2n \times 3n$, dont les lignes correspondent aux noeuds du graphes et les colonnes aux branches. Les éléments r_{ij} de cette matrice sont donnés par :



G²⁵
III.1

$r_{ij} = 1$ si le noeud i est une extrémité de la branche j

$r_i = 0$ sinon. (III - 1 - 45)

Pour compter les branches qui relient un groupe de noeuds au reste du graphe, il suffit alors d'effectuer la "somme logique" (ou intersection) des lignes correspondantes de la matrice: le nombre de 1 du résultat indique le nombre de branches cherchées.

Prenons l'exemple du graphe G^{25} . Sa matrice d'incidence s'écrit :

R =

	a	b	c	d	e	f	g	h	i
1	1					1			1
2	1	1					1		
3			1	1				1	
4				1	1				1
5					1	1		1	
6						1	1	1	

(III - 1 - 46)

Les cases blanches sont des cases nulles.

Effectuons quelques sommes logiques :

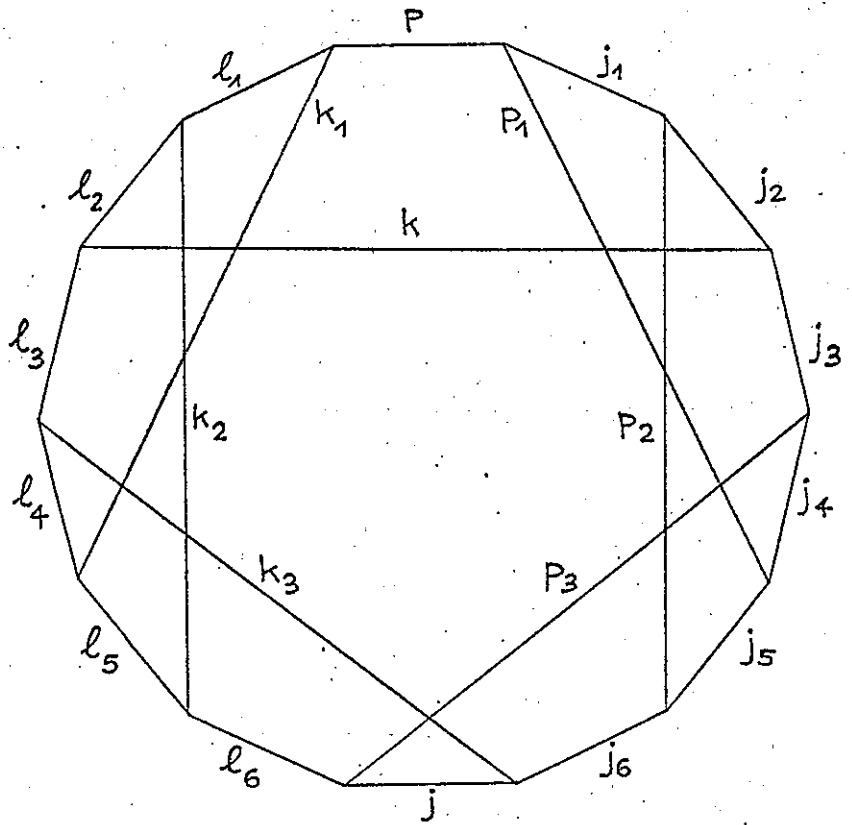
"1+3+5" = 1 1 1 1 1 1 0 0 1 : total 7 branches

"1+2+3" = 0 0 1 0 0 1 1 1 1 : total 5 branches

"1+2+6" = 0 1 0 0 1 0 0 0 1 : total 3 branches

(III - 1 - 47)

On a bien montré que les noeuds 1, 2 et 6 pouvaient être coupés suivant 3 branches.



$G_{III.1}^{26}$

Cette méthode est surtout utile pour un ordinateur. En fait, dans un calcul à la main, la symétrie du graphe étudié permet souvent de trouver les coupures visuellement. Passons maintenant au choix de la meilleure coupure.

III - 1 - 4 - 2 - Choix de la meilleure coupure :

Soit p le nombre de coupures suivant k branches, trouvées dans l'opération précédente. Si $p = 1$, le problème est résolu. Dans le cas contraire, il faut choisir la meilleure d'entre elles.

Le critère de qualité choisi par JUCYS ⁹⁾ est le suivant : si, à partir de plusieurs coupures différentes, on décompose un coefficient $3n-j$ sous la forme d'une somme, sur un ou plusieurs indices, de produit de coefficients $6-j$, la meilleure est celle qui conduit à la somme sur le nombre minimal d'indices.

Suivons la méthode proposée par JUCYS ⁹⁾. Elle utilise la "matrice des branches communes" définie de la façon suivante : c'est une matrice carrée d'ordre p dont les lignes et les colonnes correspondent aux p coupures; chaque élément de la matrice est égal aux nombres de branches communes à la coupure ligne et à la coupure colonne. Exemple : le $21-j$ représenté, à la phase près, par le graphe G^{26} peut être coupé 4 fois suivant 4 branches :

a) $p \ell_2 \ell_4 \ell_6$

b) $p j_2 j_4 j_6$

c) $p k k_3 \ell_6$

d) $p k p_3 j_6$

(III - 1 - 48)

The first part of the document discusses the importance of maintaining accurate records of all transactions and activities. It emphasizes that this is essential for ensuring transparency and accountability in the organization's operations.

Financial Reporting and Analysis

The second section focuses on the process of financial reporting and analysis. It details the various methods used to collect, process, and analyze financial data, highlighting the role of technology in streamlining these processes.

Furthermore, the document discusses the importance of regular financial reviews and audits. It explains how these activities help identify potential risks and areas for improvement, ensuring the organization remains financially sound and compliant with regulatory requirements.

In addition, the text covers the integration of financial data with other organizational systems. This integration allows for a more holistic view of the organization's performance, enabling better decision-making and strategic planning. The document also touches upon the challenges associated with data integration and offers practical solutions to overcome them.

Overall, the document provides a comprehensive overview of financial reporting and analysis, offering valuable insights and practical advice for organizations looking to optimize their financial operations and improve their overall performance.

La matrice des branches communes de ces 4 coupures s'écrit :

	a	b	c	d
a	4	1	2	1
b	1	4	1	2
c	2	1	4	2
d	1	2	2	4

(III - 1 - 49)

Soit α le plus grand élément non diagonal de la matrice. Pour chaque coupure c_i , c'est-à-dire pour chaque ligne de la matrice, nous allons définir une fonction de qualité $S(i)$. Considérons les colonnes dont l'intersection avec la ligne i contient l'élément α . $S(i)$ est le nombre de fois qu'apparaît α dans l'ensemble de ces colonnes. Dans l'exemple :

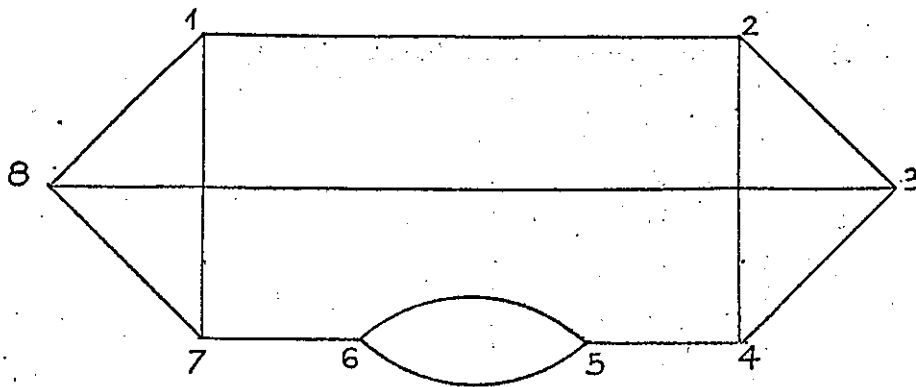
$$S(a) = S(b) = 2 \quad S(c) = S(d) = 3 \quad (\text{III} - 1 - 50)$$

Selon JUCYS ⁹⁾, la ou les coupures correspondant à $S(i)$ maximum sont la ou les meilleures. Ici, les coupures c et d sont les deux meilleures.

Une coupure étant maintenant sélectionnée, nous devons décider de la meilleure manière de raccorder ses branches, c'est-à-dire de choisir le n -jm de la formule (I - 3 - 29). Pour cela nous devons savoir calculer la distance entre 2 noeuds.

III - 1 - 4 - 3 - Calcul de la distance entre 2 noeuds :

Pour ce calcul ¹⁸⁾, nous devons introduire une nouvelle matrice: la "matrice associée" au graphe. C'est une matrice carrée, d'ordre $2n$; les lignes et les colonnes correspondent aux noeuds ; l'élément a_{ij} de cette matrice est



G²⁷
III.1

égale au nombre de branches qui relient les noeuds i et j .

Prenons l'exemple du graphe G^{27} . Sa matrice associée A est la suivante :

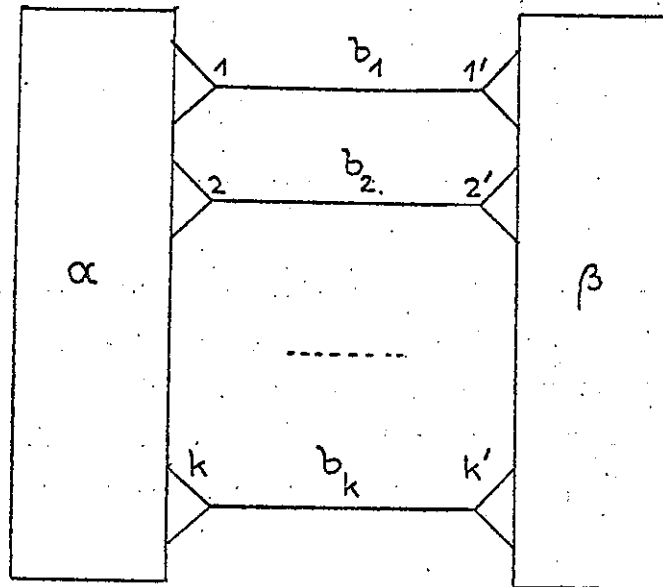
$$A = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \end{matrix} & \begin{bmatrix} & & & & & & 1 & 1 \\ & 1 & & & & & & \\ & 1 & & 1 & 1 & & & \\ & & 1 & & 1 & & & \\ & & & 1 & 1 & & & \\ & & & & 1 & & 2 & \\ & & & & & 2 & & 1 \\ 1 & & & & & & 1 & 1 \\ 1 & & 1 & & & & & 1 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (\text{III} - 1 - 51)$$

Nous allons montrer, par récurrence, que l'élément $a_{ij}^{(p)}$ de la matrice A^p (A élevé à la puissance p) est égal au nombre de chemins de longueur p (longueur = nombre de branches) entre les noeuds i et j . La proposition est vraie pour $p = 1$ par définition de la matrice associée A . Ecrivons alors la valeur de l'élément $a_{ij}^{(p)}$; en supposant que la proposition est vraie pour $p-1$:

$$a_{ij}^{(p)} = \sum_k a_{ik}^{(p-1)} a_{kj} \quad (\text{III} - 1 - 52)$$

Le k ième terme de cette somme est égal au produit du nombre de chemins de longueur $p-1$ entre les noeuds i et k et du nombre de chemins de longueur 1 entre les noeuds k et j ; il est donc bien égal au nombre de chemins de longueur p , reliant i et j et passant par k . La somme (52) représente donc bien le nombre total de chemins de longueur p cherché.

On appelle "distance" d_{ij} entre les deux noeuds i et j , la longueur du chemin le plus court reliant les deux noeuds ; on l'accompagne en général du



G²⁸
III.1

nombre m de chemins de cette longueur: on écrit d_{ij}^m . Pour trouver cette distance, on cherche la plus petite valeur de p pour laquelle :

$$a_{ij}^{(p)} \neq 0 \quad (\text{III} - 1 - 53)$$

La distance d_{ij} est alors égale à p ; le nombre m est égal à l'élément de matrice (53).

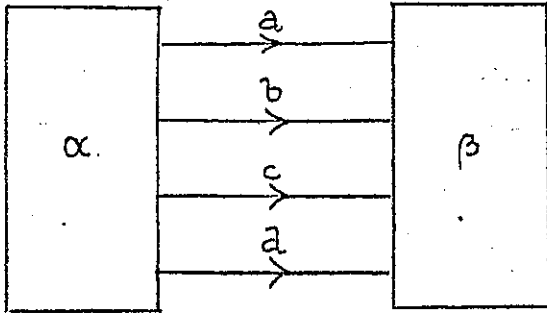
A titre d'exemple, prenons le carré de la matrice (51). On trouve :

$$A^2 = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \end{array} & \begin{array}{|cccccccc} \hline 3 & & 2 & 1 & & 1 & 1 & 1 \\ & 3 & 1 & 1 & 1 & & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 1 & 1 & & 1 & \\ 1 & 1 & 1 & 3 & & 2 & & 1 \\ & 1 & 1 & & 5 & & 2 & \\ 1 & & & 2 & & 5 & & 1 \\ 1 & 1 & 1 & & 2 & & 3 & 1 \\ 1 & 2 & & 1 & & 1 & 1 & 3 \\ \hline \end{array} \end{array} \quad (\text{III} - 1 - 54)$$

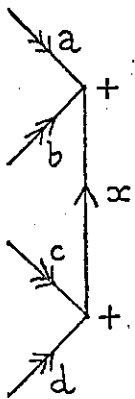
On voit par exemple que la distance entre les noeuds 4 et 6 peut s'écrire :

$$d_{46}^m = 2^2 \quad (\text{III} - 1 - 55)$$

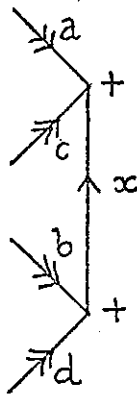
Considérons maintenant le graphe G^{28} dont la meilleure coupure se fait suivant k branches. Les noeuds $1, 2, \dots, k$ et $1', 2', \dots, k'$ sont tous différents; sinon, il existerait une coupure suivant $l < k$ branches, ce qui est contraire à l'hypothèse. A chaque couple de branches b_i, b_j , nous pouvons associer les deux distances d_{ij}^m et $d_{i'j'}^{m'}$, calculées respectivement à l'intérieur des boîtes α et β : les chemins considérés ne peuvent pas utiliser les



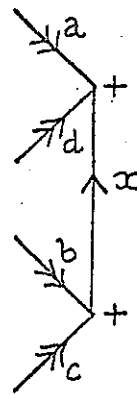
$G_{III.1}^{29}$



$G_{III.1}^{30}$



$G_{III.1}^{31}$



$G_{III.1}^{32}$

branches b_1, b_2, \dots, b_k . Ce sont ces distances qui vont nous permettre de choisir le meilleur coefficient n -jm dans la formule de coupure.

III - 1 - 4 - 4 - Coupure suivant 4 branches :

Les 4 branches a, b, c, d , constituant la meilleure coupure du graphe G^{29} peuvent être raccordées de 3 façons différentes, correspondant chacune à un coefficient 4-jm :

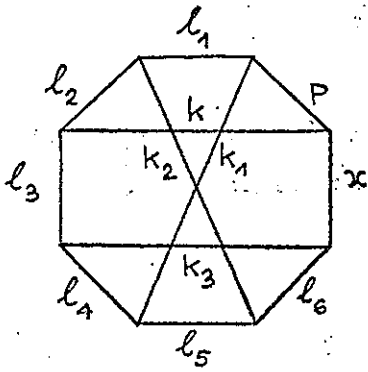
$$\begin{array}{ll} R_1 : a b \text{ et } c d & 4\text{-jm} : G^{30} \\ R_2 : a c \text{ et } b d & 4\text{-jm} : G^{31} \quad (\text{III} - 1 - 56) \\ R_3 : a d \text{ et } b c & 4\text{-jm} : G^{32} \end{array}$$

A chaque R_i , faisons correspondre une grandeur D_i définie à l'aide des distances entre les branches de la coupure :

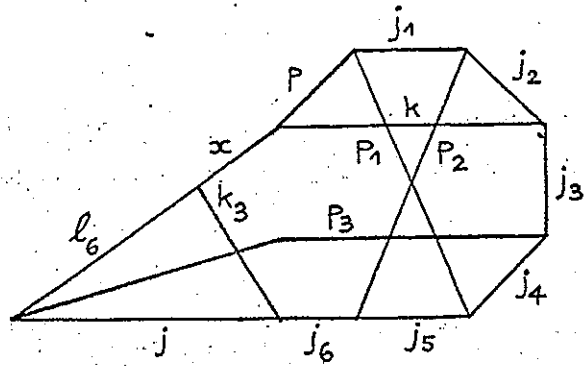
$$\begin{array}{ll} D_1 = d_{ab} + d'_{ab} + d_{cd} + d'_{cd} \\ D_2 = d_{ac} + d'_{ac} + d_{bd} + d'_{bd} & (\text{III} - 1 - 57) \\ D_3 = d_{ad} + d'_{ad} + d_{bc} + d'_{bc} \end{array}$$

La valeur D_i minimale indique le meilleur raccordement; si deux grandeurs D_i sont égales, on choisit celle où apparaît la distance d_{ij} ou d'_{ij} minimale; enfin les nombres m peuvent encore départager les raccordements dont toutes les distances seraient égales.

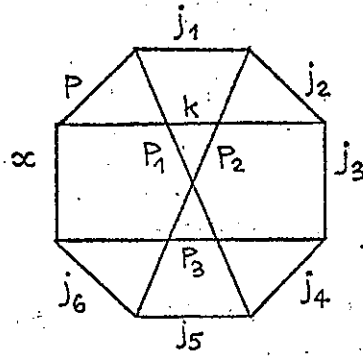
Reprenons l'exemple du graphe G^{26} . Pour la coupure $c) p k k_3 l_6$, on trouve :



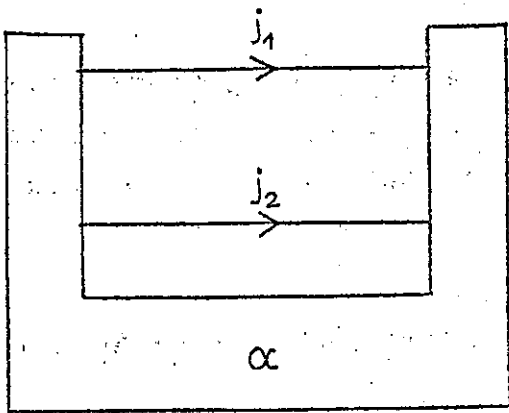
$G_{III.1}^{33}$



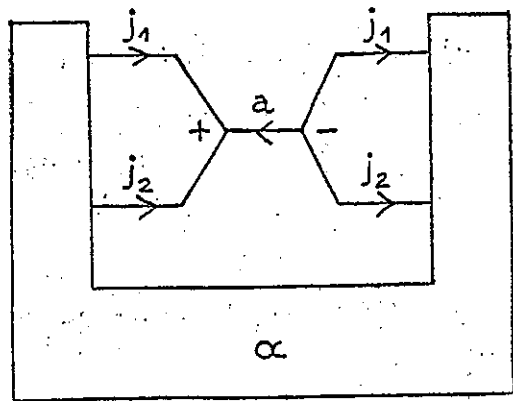
$G_{III.1}^{34}$



$G_{III.1}^{35}$



$G_{I.3}^{64}$



$G_{I.3}^{63}$

$$D p k, k_3 \ell_6 = 2 + 2 + 2 + 1 = 7$$

$$D p k_3, k \ell_6 = 2 + 3^2 + 2 + 2 = 9 \quad (\text{III} - 1 - 58)$$

$$D p \ell_6, k k_3 = 2^2 + 3 + 1 + 3^2 = 9$$

Les nombres m (nombre de chemins) sont omis lorsqu'ils ont la valeur 1. Les équations (58) montrent que le premier raccordement est le meilleur; le graphe G^{26} peut donc se décomposer de la manière suivante :

$$\begin{aligned} G^{26} &= \sum_x [x] G^{33} G^{34} \\ &= \sum_x [x] \left\{ \begin{matrix} p_3 & j_6 & x \\ k_3 & \ell_6 & j \end{matrix} \right\} G^{33} G^{35} \quad (\text{III} - 1 - 59) \end{aligned}$$

Dans ces équations, nous ne nous occupons pas de la phase des coefficients. Le coefficient $6-j$ a été séparé grâce à une coupure du graphe G^{34} suivant les 3 branches $p_3 j_6 x$. On reconnaît dans les graphes G^{33} et G^{35} des $12-j$ de première espèce.

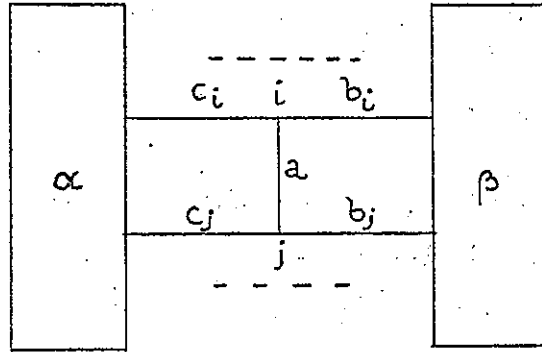
Dans le cas d'une coupure suivant plus de 4 branches, nous allons nous ramener progressivement au cas d'une coupure suivant 4 branches.

III - 1 - 4 - 5 - Coupure suivant plus de 4 branches :

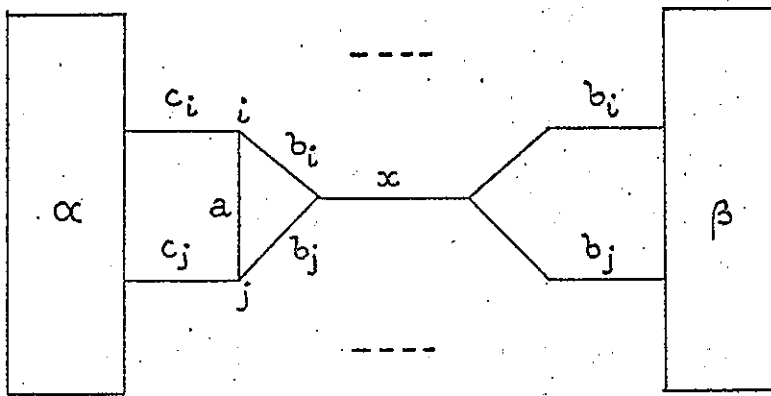
Rappelons l'équation (I - 3 - 34) :

$$G_{I-3}^{64} = \sum_a [a] G_{I-3}^{63} \quad (\text{I} - 3 - 34)$$

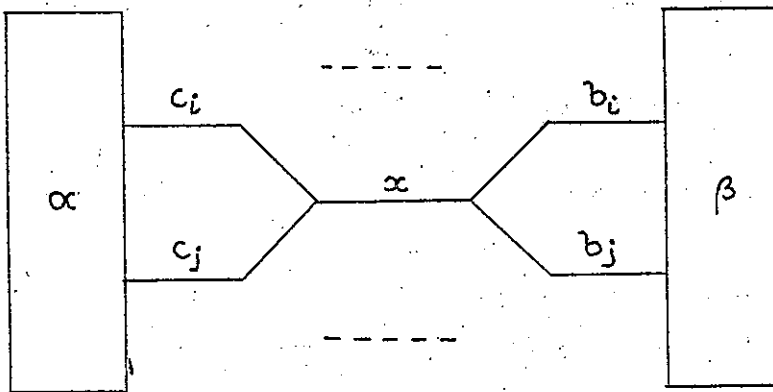
On voit clairement que cette équation permet de passer d'une coupure $j_1 j_2 j_3 \dots j_k$ de G_{I-3}^{64} à la coupure suivant $k-1$ branches : $a j_3 \dots j_k$



G^{36}
III.1



G^{37}
III.1



G^{38}
III.1

de G_{I-3}^{65} . En utilisant cette relation k-4 fois, on se ramène donc à une coupure suivant 4 branches que nous savons traiter. De plus, à chaque opération, si le couple de branches est judicieusement choisi, le $3n-j$ obtenu peut en général s'écrire comme le produit d'un $6-j$ par un coefficient plus simple.

Considérons tous les couples de branches de la coupure et leurs distances $d_{m, I_j}^{I_j}$ et $d_{I_j, m}^{I_j}$. Supposons que pour un couple particulier, $d_{m, I_j}^{I_j} = 1$; on a alors la décomposition suivante (formule (I - 3 - 34)) :

$$G_{36}^{65} = \sum_x [x]_{G_{37}} \quad \text{(III - 1 - 60)}$$

Mais le graphe G_{37}^{65} peut être coupé suivant les 5 branches x, c_1, c_2, c_3 ; Le petit graphe ainsi isolé est un $6-j$:

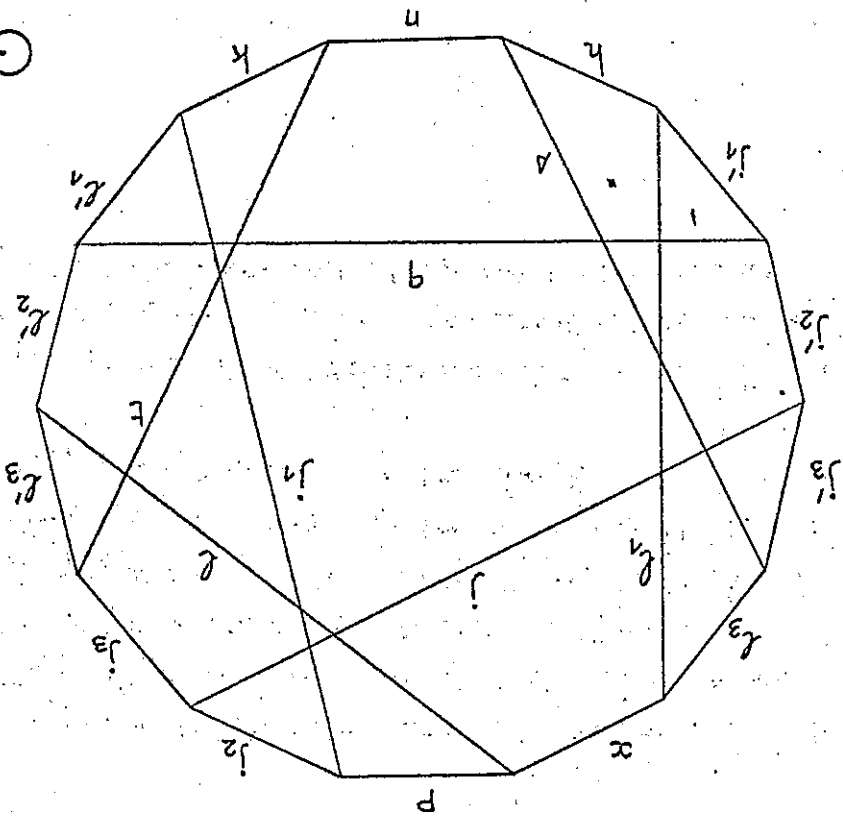
$$G_{36}^{65} = \sum_x [x]_{G_{38}} \left\{ \begin{matrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ b_j & b_j & a \\ a & b_j & b_j \end{matrix} \right\} \quad \text{(III - 1 - 61)}$$

Le coefficient G_{38}^{65} est de même rang que G_{36}^{65} , mais il se coupe au plus suivant k-1 branches.

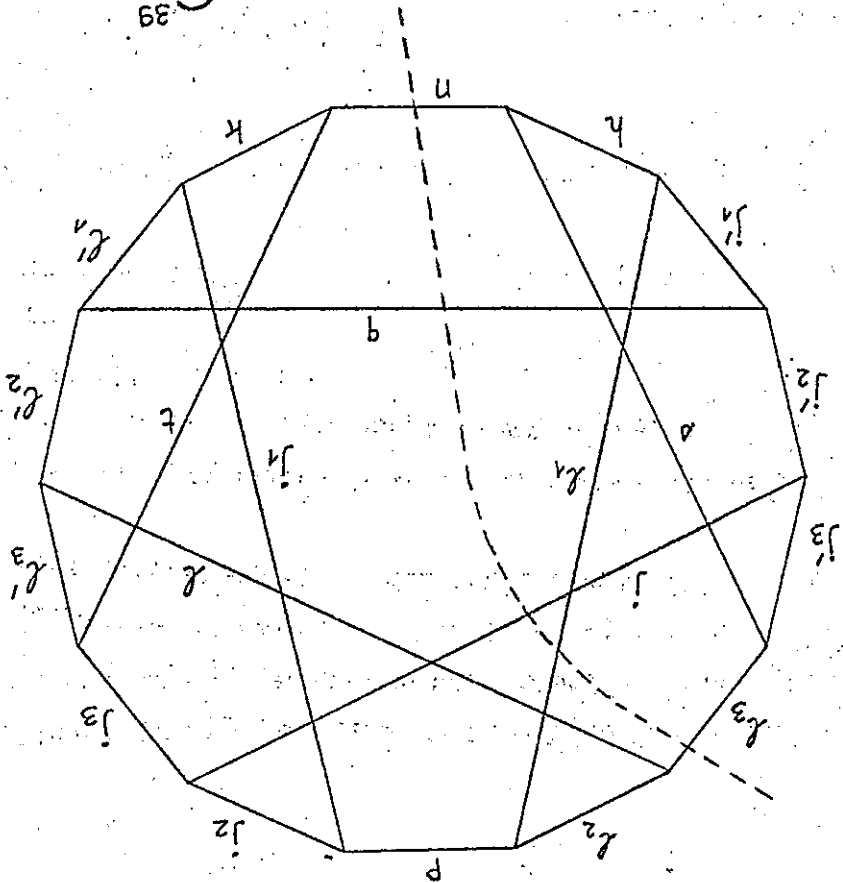
La règle générale est donc la suivante : on dresse le tableau des distances $d_{m, I_j}^{I_j}$ et $d_{I_j, m}^{I_j}$ pour tous les couples de branches de la coupure. Si β est le minimum de toutes les distances obtenues (en général $\beta = 1$) on cherche, parmi les couples pour lesquels $d_{m, I_j}^{I_j} = \beta$ (resp. $d_{I_j, m}^{I_j} = \beta$) ceux de $d_{I_j, m}^{I_j}$ minimal (resp. $d_{m, I_j}^{I_j}$ minimal), puis parmi ceux-ci, ceux de m maximal (resp. m' maximal) et enfin, parmi ces derniers, ceux de m' maximal (resp. m maximal).

Preons un nouvel exemple. Le coefficient $21-j$ G_{39}^{65} ne peut être coupé au minimum que suivant 5 branches. Les 5 coupures possibles suivant 5 branches sont équivalentes ; choisissons l'une d'entre elles ; la coupure $g_2, j, 1, p, n$.

G 40 III.1



G 39 III.1



Afin d'être complets, nous avons décrit ici l'ensemble des règles de coupe introduites par JUCYS (9) pour les coefficients Z_{n-j} de rang élevé. Ces règles nous ont également servi pour l'écriture du programme décrit au chapitre IV. Mais il est évident que dans tous les cas courants, il n'est pas nécessaire d'effectuer des coupures suivant plus de 3 branches. C'est ce que nous allons voir dans le premier des trois exemples complets proposés dans le paragraphe suivant.

G_{40} est un 21-j plus simple que G_{39} puisqu'il possède deux coupures suivant 4 branches : x_j q n et x_{j_1} j_1 n .

$$G_{39} = \sum x \left[\begin{matrix} x \\ x \\ x \\ x \end{matrix} \right] \left\{ \begin{matrix} x \\ x \\ x \\ x \end{matrix} \right\} G_{40} \quad \text{(III - 1 - 63)}$$

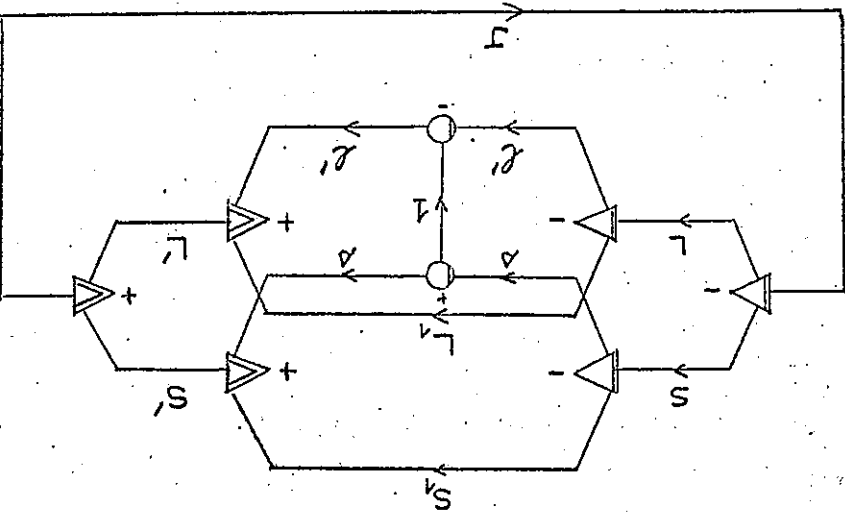
Parmi les 6 couples possédant une des deux distances égale à 1, on voit que seul le couple j_1 j_2 possède une distance égale à 2 dans l'autre partie du graphe. En utilisant la relation (61), nous pouvons écrire :

n						
q						2 2
j_1			0		1 j_2	1 3
j			2 2	0	1 j_2	2 2
j_2			2 1	1 j_2	2 2	1 3
j_3						
q						
n						

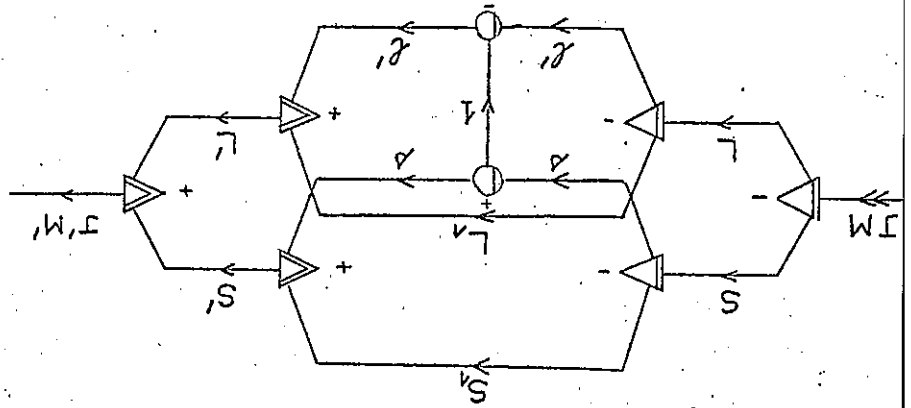
(III - 1 - 62)

Voici le tableau des distances $d_{m,j}^m$ | $d_{m,j}^m$:

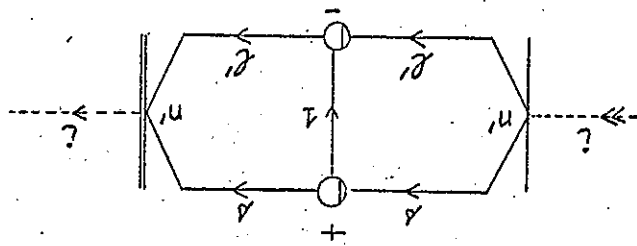
III.2
G₅



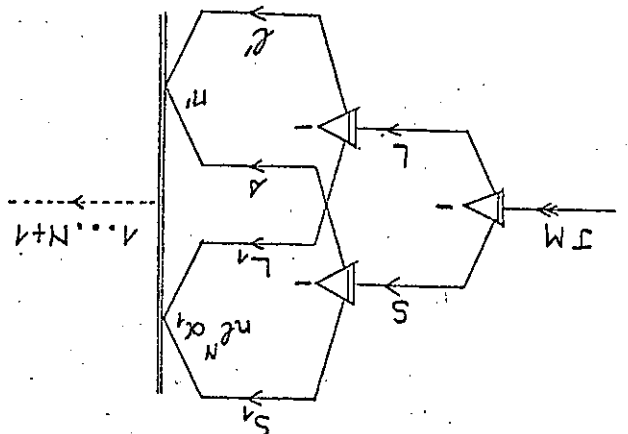
III.2
G₄



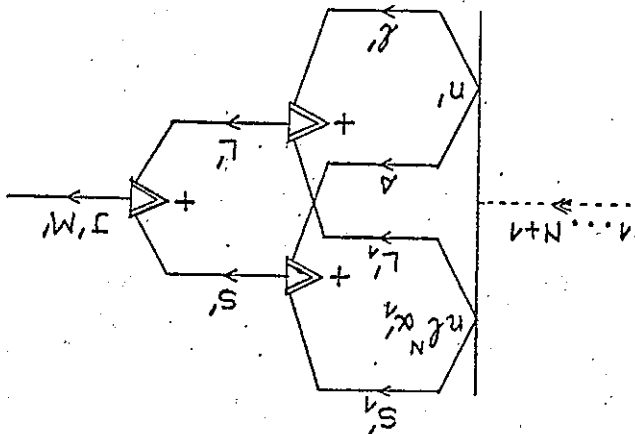
III.1
G₂



III.2
G₁



III.2
G₃



Nous traitons dans ce paragraphe les trois calculs suivants :

- Les coefficients de l'intégrale de spin-orbite $\zeta_{n,l}$ dans la configuration $n^l n^l$.
- L'interaction coulombienne entre les deux configurations $n^l n^l$ et $n^l n^l$; nous prenons ces deux configurations couplées en J .
- une interaction à 3 corps dans des configurations à 5 électrons optiques.

Ces trois exemples ont été choisis pour illustrer le mieux possible tous les aspects de la méthode : le premier donne un exemple de calcul courant ; les deux autres sont plus compliqués afin de faire ressortir les possibilités de la méthode dans des cas un peu extrêmes.

Les calculs étant relativement longs et la méthode ayant été décrite en détail, nous bornons ci-dessous aux commentaires strictement nécessaires.

III - 2 - 1 - Premier exemple -

Soit à calculer le coefficient de l'intégrale de spin-orbite $\zeta_{n,l}$ dans la configuration $n^l n^l$. D'après la relation (III-1-4), ce coefficient est égal à l'élément de matrice :

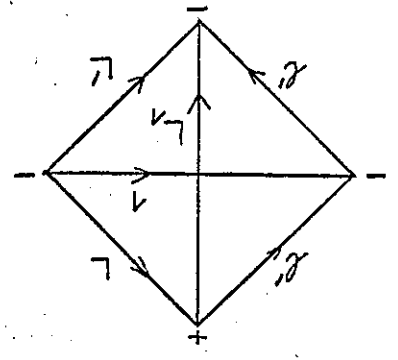
$$E_1 = [r^{l+1}(2l+1)]_{\frac{1}{2}} \sum_{\frac{1}{2}} \alpha_N^l S^l L^l n^l n^l, S^l M^l | \sum_{\frac{1}{2}} \alpha_N^l (n^l n^l, n^l n^l) | n^l n^l, S^l L^l n^l n^l, S^l L^l M^l \rangle$$

$$= [r^{l+1}(2l+1)]_{\frac{1}{2}} \sum_{\frac{1}{2}} \alpha_N^l (n^l n^l, n^l n^l) | n^l n^l, S^l L^l n^l n^l, S^l L^l M^l \rangle \quad \text{(III-2-1)}$$

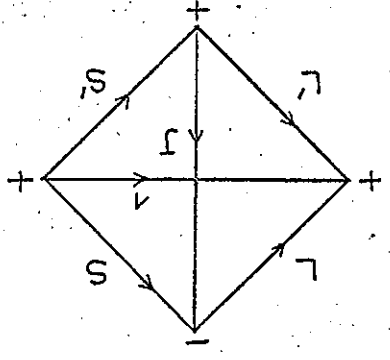
Pour effectuer l'intégration, on utilise la formule (III-1-31) dans laquelle :

$$(-)^p = 1 \quad \text{et} \quad K = 1 \quad ; \quad \text{(III-2-2)}$$

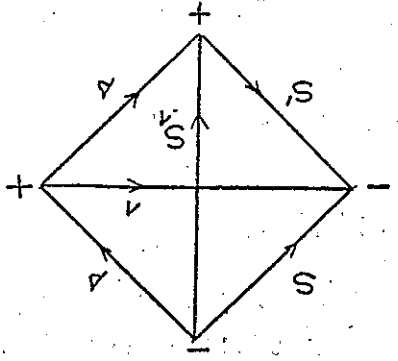
$G_{8, III.2}$



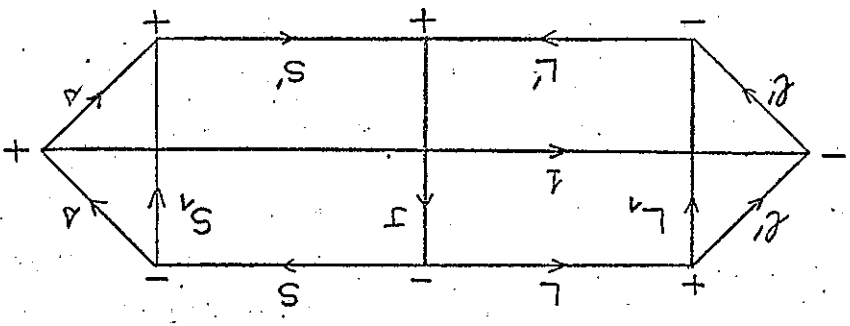
$G_{9, III.2}$



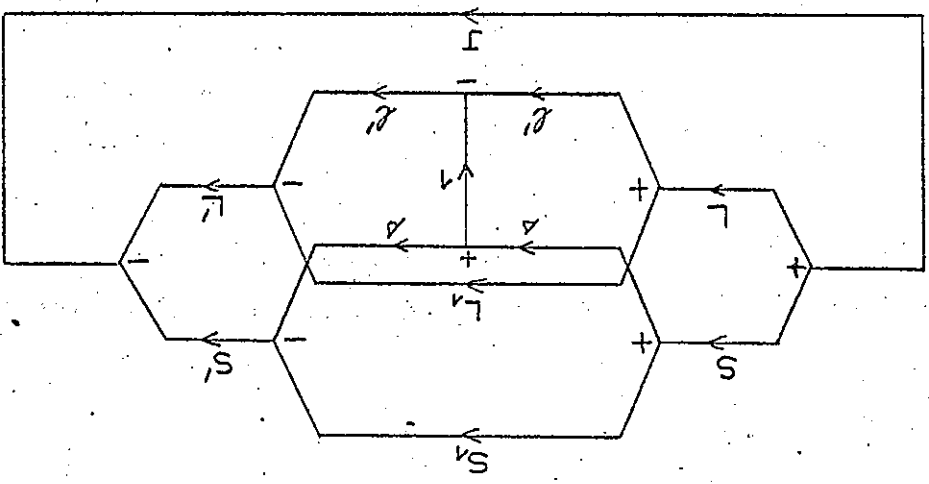
$G_{10, III.2}$



$G_{7, III.2}$



$G_{6, III.2}$



Il n'y a pas de somme sur des parents; l'intégration proprement dite introduit des deltas sur les termes de n^N . Finalement :

$$E_1 = - [\delta'(\delta'+1) (2\delta'+1)/6]^{\frac{1}{2}} \delta(\alpha_1 \alpha_1') \delta(S_1, S_1') \delta(L_1, L_1') \delta^4 \quad (\text{III-2-3})$$

Le graphe G^4 est fermé à l'aide de (I-3-21) :

$$G^4 = \delta(J, J') \delta(M, M') [J]^{-1} G_5^4 \quad (\text{III-2-4})$$

On supprime alors les cercles et les triangles :

$$G^5 = \delta [J] \delta(L_1, L_1') \delta(L_1 + \delta'_1 + S_1 + L_1 + S_1') G_6^5 \quad (\text{III-2-5})$$

$$G^4 = \delta(J, J') \delta(M, M') \delta(S_1, S_1') \delta(L_1, L_1') G_6^4 \quad (\text{III-2-6})$$

Le graphe G_6^5 est redessiné pour faire apparaître deux coupures suivantes δ branches :

$$G_6^5 = G_7^6 \quad (\text{III-2-7})$$

Les coupures sont effectuées en prenant soin qu'à chaque fois les δ branches coupées soient orientées dans le même sens :

$$G_6^5 = (-)_{2S} G_8^6 G_9^6 G_{10}^6 \quad (\text{III-2-8})$$

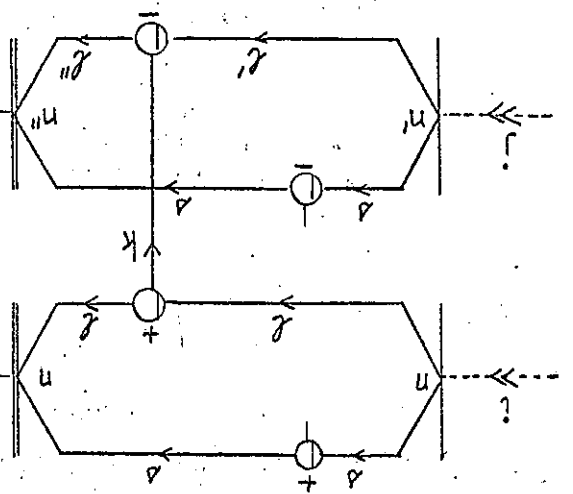
Les δ dernières graphes se transforment en coefficients $6 - j$ en modifiant les signes de certains noeuds et le sens de certaines flèches :

$$G_6^5 = (-)_{S_1 + L_1 + S_1' + J_1 + S_1' + L_1' + J_1' + S_1' + L_1'} \left\{ \begin{array}{l} L_1 \\ S_1 \\ L_1' \\ S_1' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} L_1 \\ S_1 \\ L_1' \\ S_1' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} L_1 \\ S_1 \\ L_1' \\ S_1' \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} L_1 \\ S_1 \\ L_1' \\ S_1' \end{array} \right\} \quad (\text{III-2-9})$$

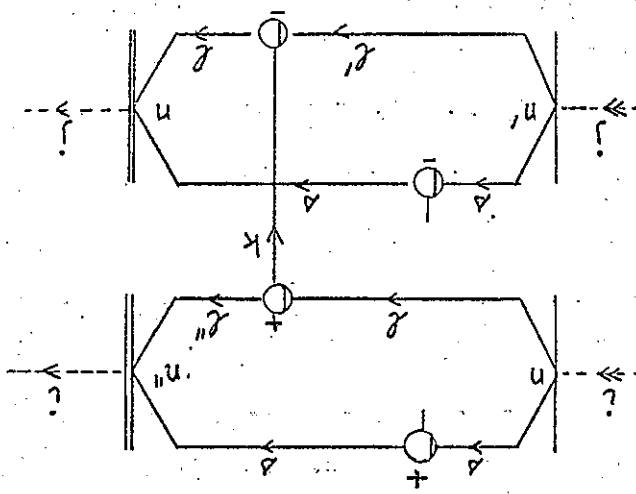
En prenant les formules (3), (6) et (9), il vient finalement :

$$E_1 = \delta(\alpha_1 \alpha_1') \delta(S_1, S_1') \delta(L_1, L_1') \delta(J, J') \delta(M, M') (-)_{S_1 + L_1 + S_1' + J_1 + S_1' + L_1' + J_1' + S_1' + L_1'} \quad (\text{III-2-10})$$

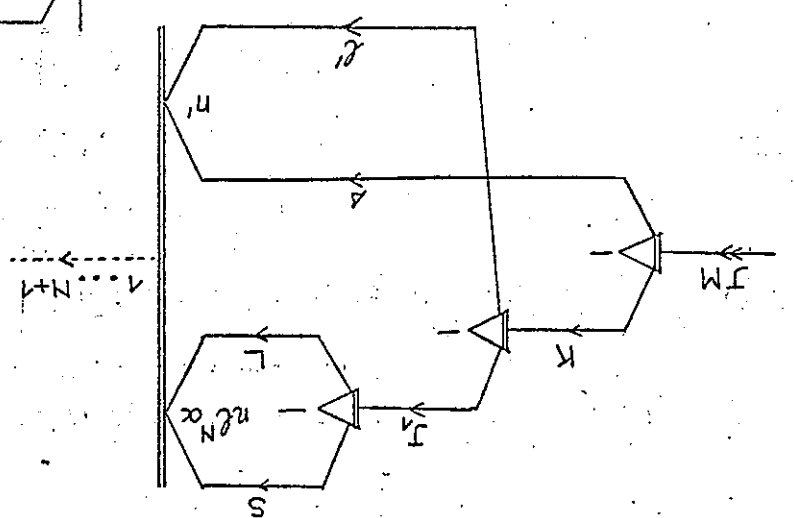
G¹² III.2



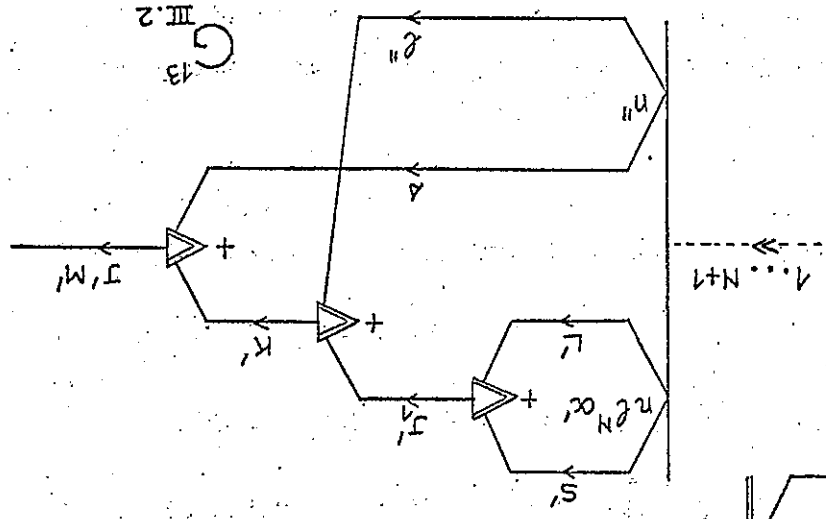
G¹⁴ III.2



G¹¹ III.2



G¹³ III.2



Nous voyons que, dans un cas simple, le calcul graphique complet est extrêmement rapide.

III - 2 - 2 - Deuxième exemple :

Nous voulons calculer ici l'élément de matrice :

$$E_2 = ((n^k_N \alpha \text{SLJ}^1, n^k, s, \text{JM} | Q | n^k_N \alpha \text{S'L'I,J}^1, n^k, s, \text{J'M}') \text{ (III-2-11)})$$

où s est le spin de l'électron n^k dans le bra et n^k dans le ket. L'interaction coulombienne Q peut s'écrire comme la somme d'un opérateur direct Q₁ et d'un opérateur d'échange Q₂ (formule (III-1-7)) :

$$Q = Q_1 + Q_2 = 4 \sum_k [k]^{-1} \left\{ \sum_{1>j} [w^1]^{(ok)}(n^k, n^k) \cdot w^j [w^j]^{(ok)}(n^k, n^k) \right\}$$

$$\times (n^k || C^{(k)} || n^k) (n^k || C^{(k)} || n^k) R_k(n^k, n^k, n^k, n^k)$$

$$+ \sum_{1>j} [w^1]^{(ok)}(n^k, n^k) \cdot w^j [w^j]^{(ok)}(n^k, n^k) [(n^k || C^{(k)} || n^k)] (n^k || C^{(k)} || n^k)$$

$$\text{ (III-2-12) } \left\{ (n^k || C^{(k)} || n^k) R_k(n^k, n^k, n^k, n^k) \right\}$$

Solent Q₁ et Q₂ les deux sommations sur i > j des produits scalaires d'opérateurs élémentaires. Dans ces conditions :

$$\text{ (Bra } | Q_1 | \text{Ket) = (-)}^k \sum_{1>j} G_{11} G_{12} G_{13}$$

(III-2-13)

$$\text{ (Bra } | Q_2 | \text{Ket) = (-)}^k \sum_{1>j} G_{11} G_{14} G_{13}$$

(III-2-14)

L'intégration s'effectue toujours à l'aide de (III-1-31) :

$$K = \frac{2}{N}$$

$$(-)^p = 1$$

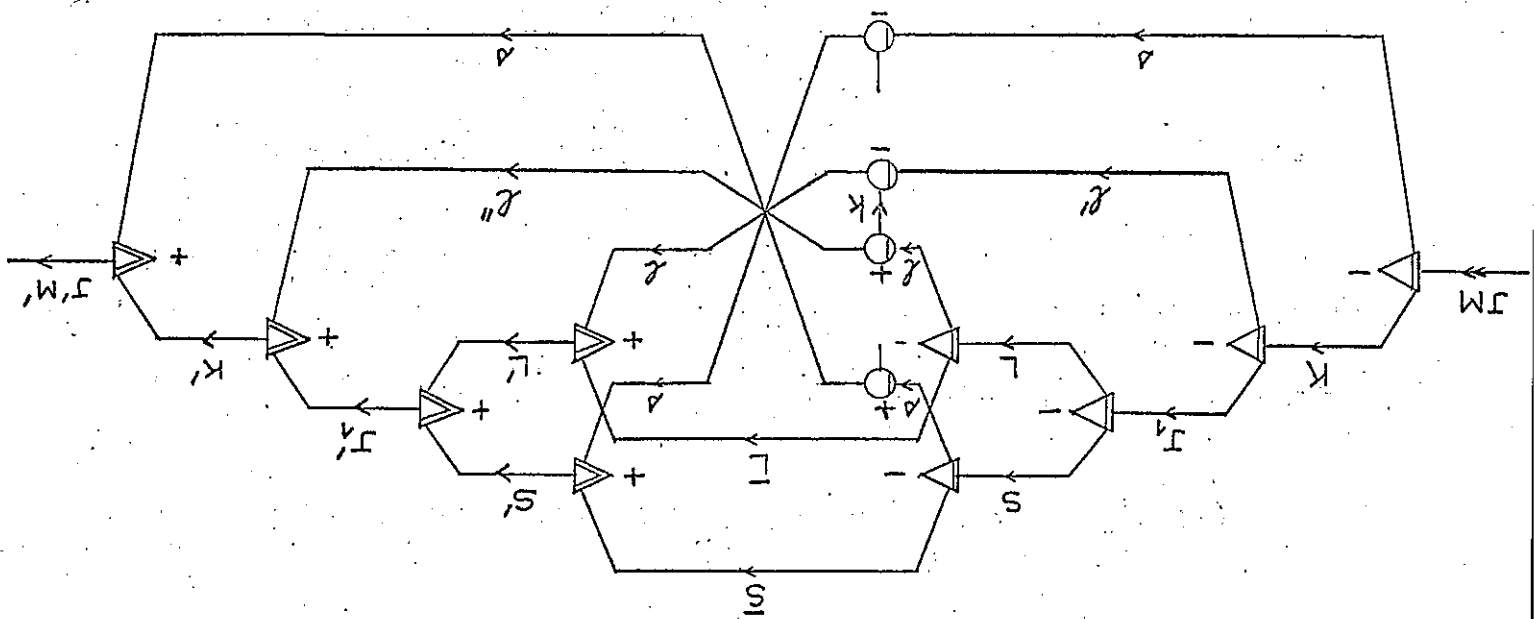
pour Q₁

$$(-)^p = -1$$

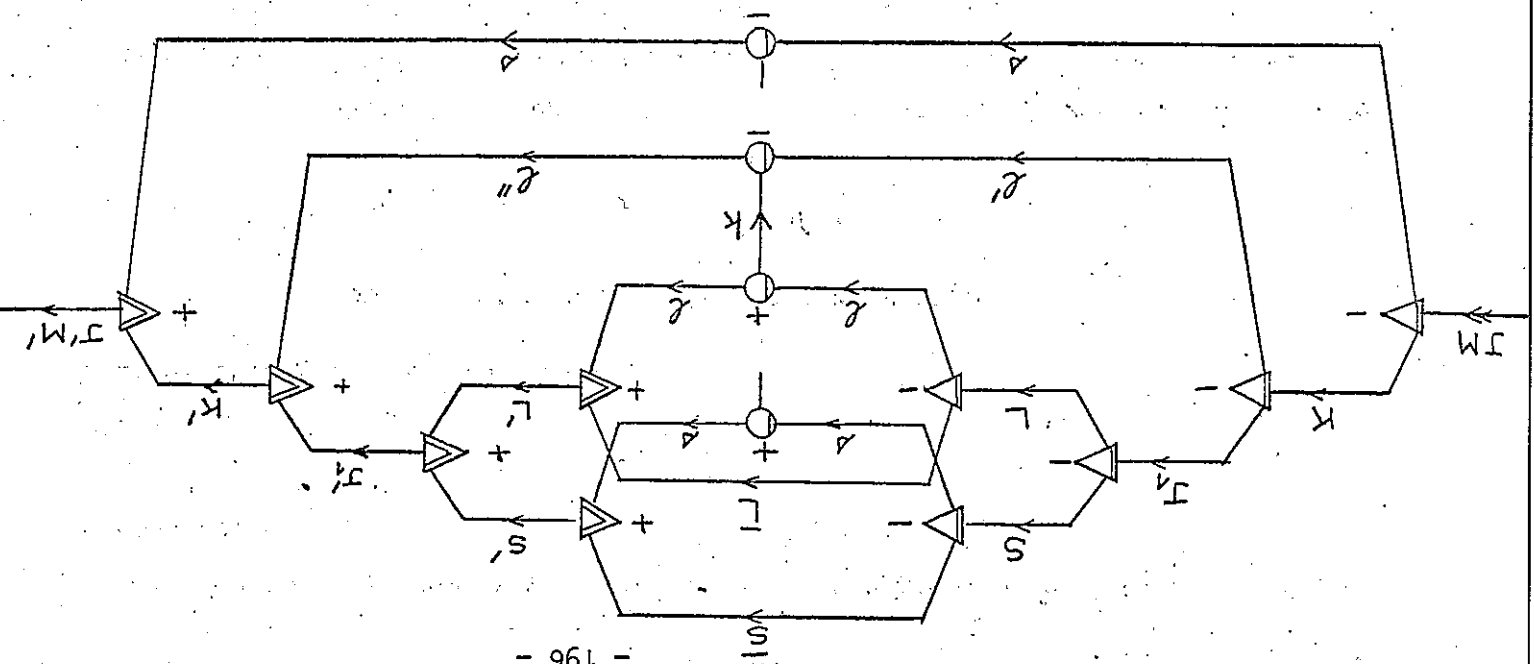
pour Q₂

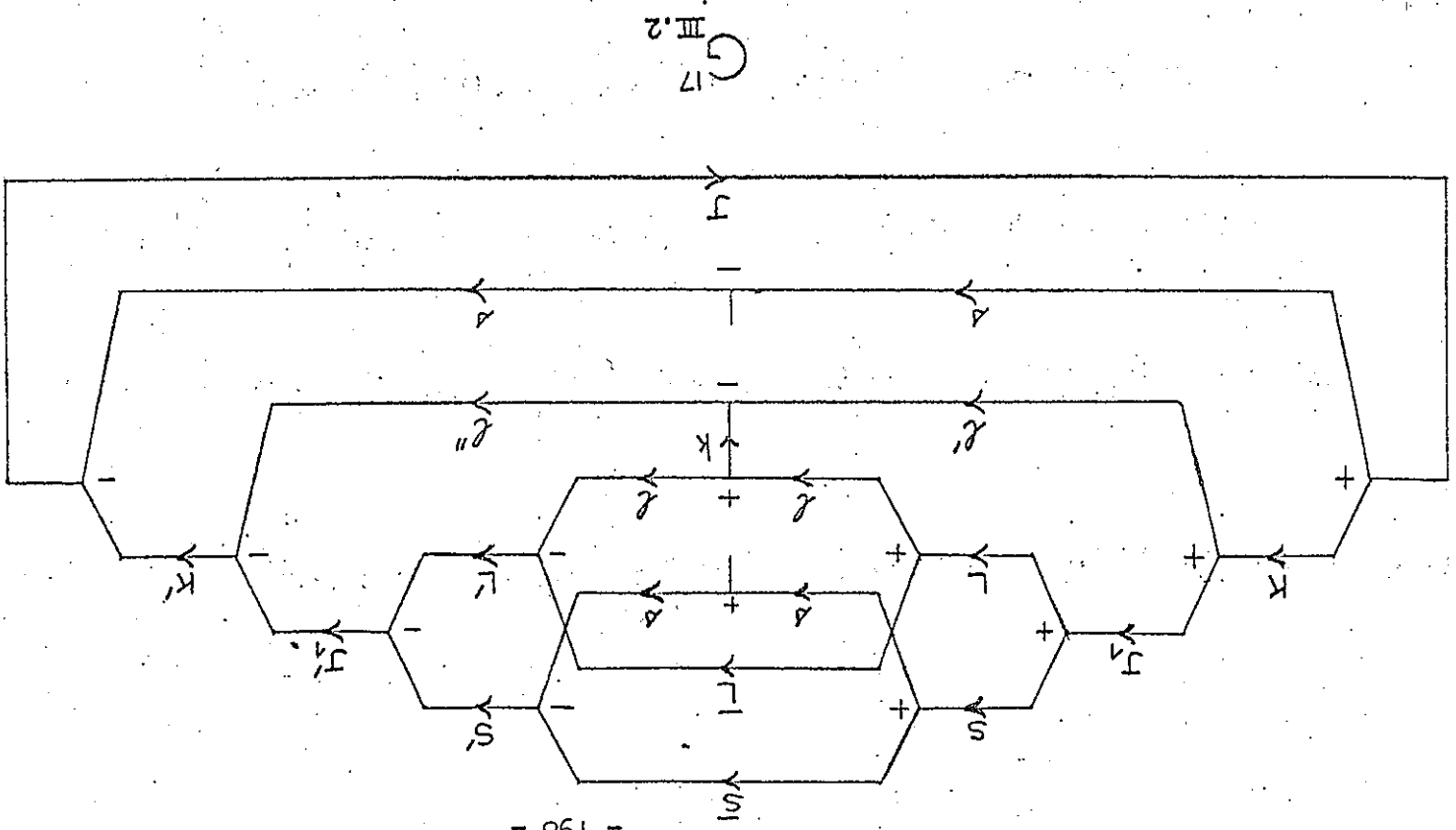
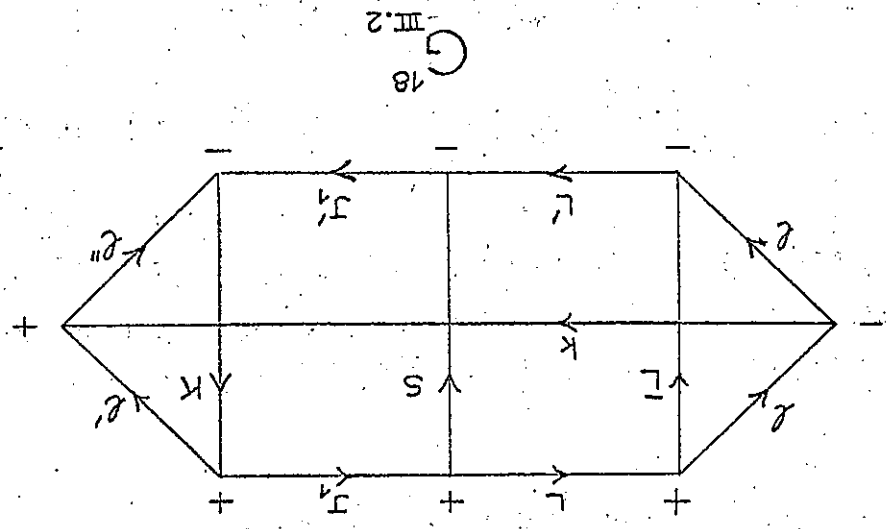
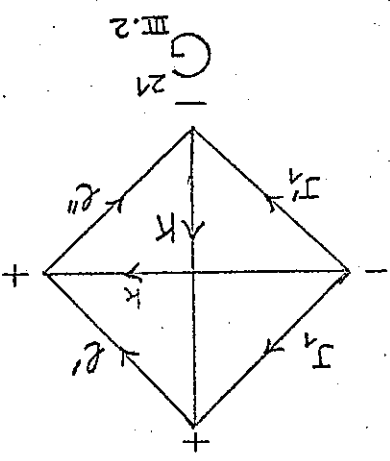
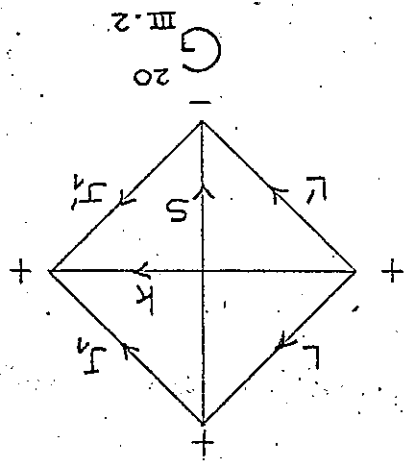
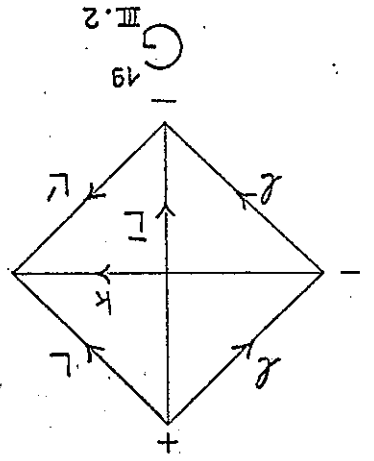
(III-2-15)

16
III.2



15
III.2





Enfin, le graphe G_{18} est égal, au facteur de phase près, au produit de

3 6 - j :

$$G_{18}^{(-)} = G_{21}^{(-)} G_{19} G_{20} G_{21}$$

$$= (-) \begin{matrix} S+I+L+L'+J'+J'+K+L'+K \\ L \quad K \quad L' \\ L \quad K \quad L' \\ L' \quad S \quad L \\ J' \quad K \quad J' \\ J' \quad K \quad J' \\ L \quad K \quad L' \\ L \quad K \quad L' \end{matrix} \quad (III-2-20)$$

Finalement :

$$(Bra | q_1 | Ket) = \frac{1}{N} \delta(S, S') \delta(K, K') \delta(J, J') \delta(M, M') \delta(K, s, J)$$

$$\times (-) \begin{matrix} S+I+L'+J'+J'+K+L'+L' \\ J' \quad K \quad J' \\ J' \quad K \quad J' \\ L' \quad S \quad L \\ L' \quad K \quad L' \end{matrix} [K] \begin{matrix} J' \quad J' \quad J' \quad J' \\ L' \quad L' \quad L' \quad L' \end{matrix} \begin{matrix} L' \quad S \quad L \\ L' \quad K \quad L' \end{matrix}$$

$$\times \sum_{\alpha_{SL}} (-) \begin{matrix} N \\ N-1 \end{matrix} \alpha_{SL} + \delta \{ \{ n \alpha_{SL} \} (n \alpha_{SL}) (n \alpha_{SL}) + \delta \{ \{ n \alpha_{SL} \} (n \alpha_{SL}) \} \} \begin{matrix} L \quad K \quad L' \\ L \quad K \quad L' \end{matrix}$$

(III-2-21)

Effectuons maintenant les mêmes opérations sur l'élément de matrice de l'équation (17). Après fermeture et suppression des cercles, des triangles et des extrémités de la branche nulle, on obtient :

$$(Bra | q_1 | Ket) = \frac{1}{N} (-)^{k+1} \sum_{\alpha_{SL}} (n \alpha_{SL}) \begin{matrix} N \\ N-1 \end{matrix} \alpha_{SL} + \delta \{ \{ n \alpha_{SL} \} (n \alpha_{SL}) \} \begin{matrix} N \\ N \end{matrix} \alpha_{SL} \quad (III-2-22)$$

(III-2-22)

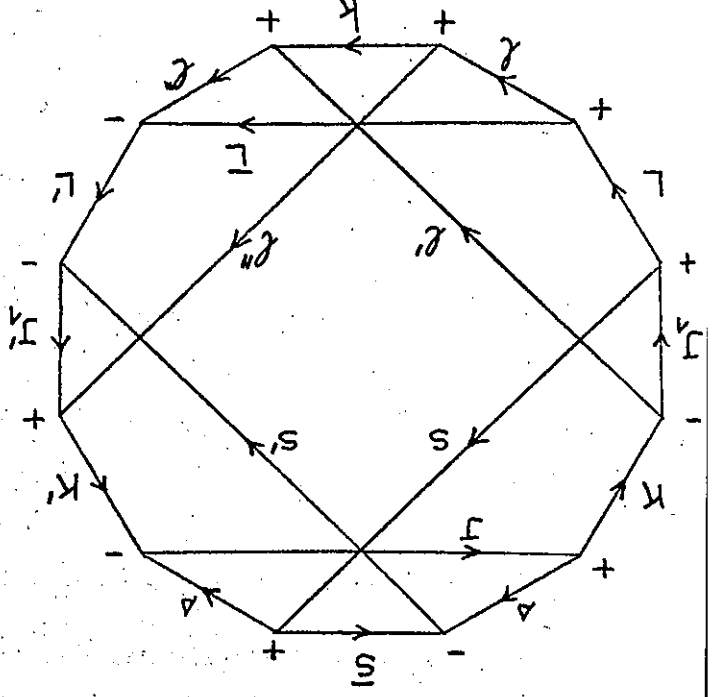
$$\times \delta(J, J') \delta(M, M') [K] \begin{matrix} K \quad J' \quad S \quad L \quad K \quad J' \quad S \quad L \quad L' \\ J' \quad J' \quad S \quad L \quad J' \quad J' \quad S \quad L \quad L' \end{matrix} (-)^{2(s+s'+S'+J'+K')} G_{22}$$

Le graphe G_{22} peut se dessiner autrement :

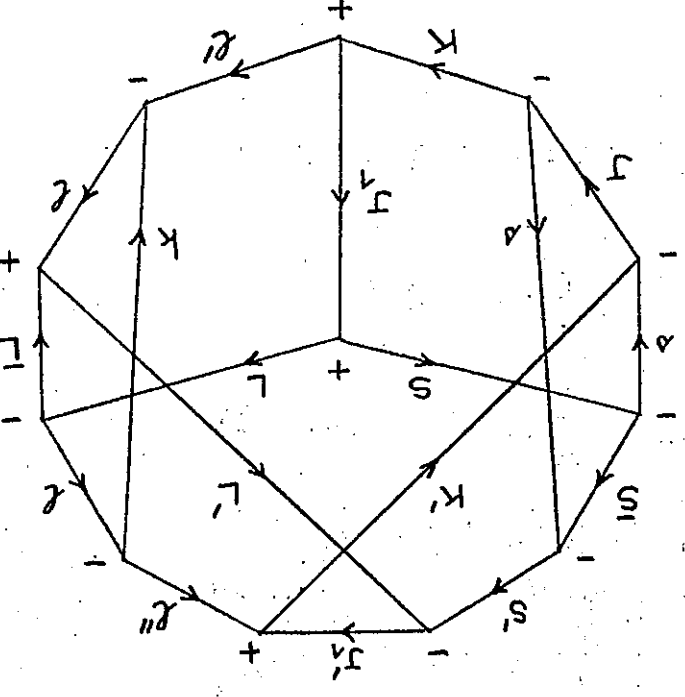
$$G_{22} = G_{23}$$

(III-2-23)

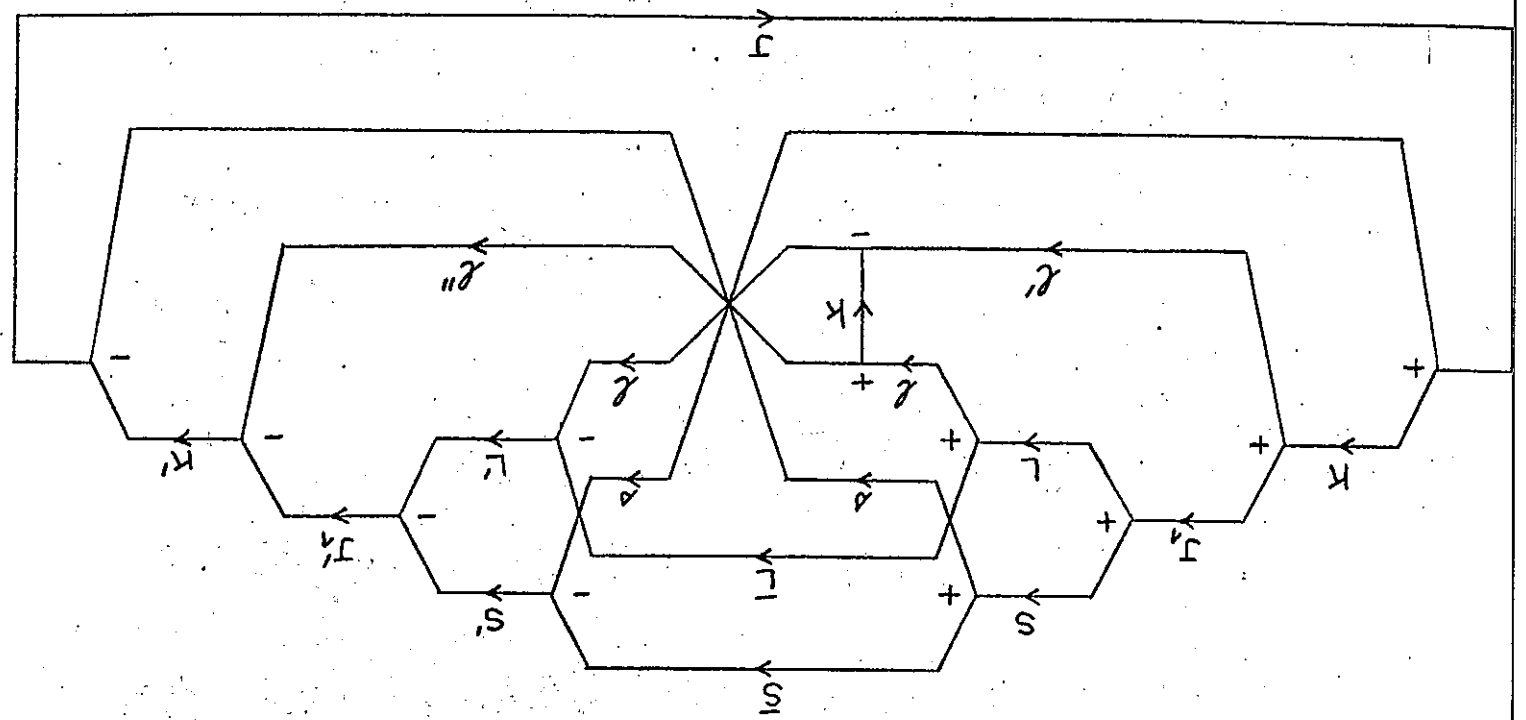
G₂₃
III.2



G₂₄
III.2



G₂₂
III.2



G_{23} est un coefficient $18 - j$ irréductible. Il n'apparaît pas explicitement sous cette forme dans la table des $18 - j$ de JUCYS³⁾ (Appendice 3). Cependant, dans son second livre⁶⁾, Jucys indique, pour chaque $18 - j$, plusieurs possibilités de dessin : le graphe G_{23} s'y trouve le numéro $28 I_1^4$ (p. 210); ceci permet de le dessiner à nouveau sous la forme indiquée par JUCYS³⁾ (figure

A.3.7) :

$$G_{22} = G_{24} \quad (\text{III-2-24})$$

Nous pouvons maintenant calculer le facteur de phase qui le sépare du $18 - j$

standard :

$$G_{22} = (-)^{\bar{S} + \bar{L} + 2S + \bar{L} + \bar{J} + \bar{K}' + \bar{J}' + \bar{L}' + \bar{K}'' + 1} \begin{pmatrix} s & \bar{S} & s & J \\ K & S' & S & K' \\ \bar{L}' & L' & J' & \bar{L}'' \\ \bar{L} & L & J & K \end{pmatrix} \quad (\text{III-2-25})$$

Celui-ci est donné par la formule (A.4.7) de JUCYS³⁾; en la combinant avec

(25), on obtient :

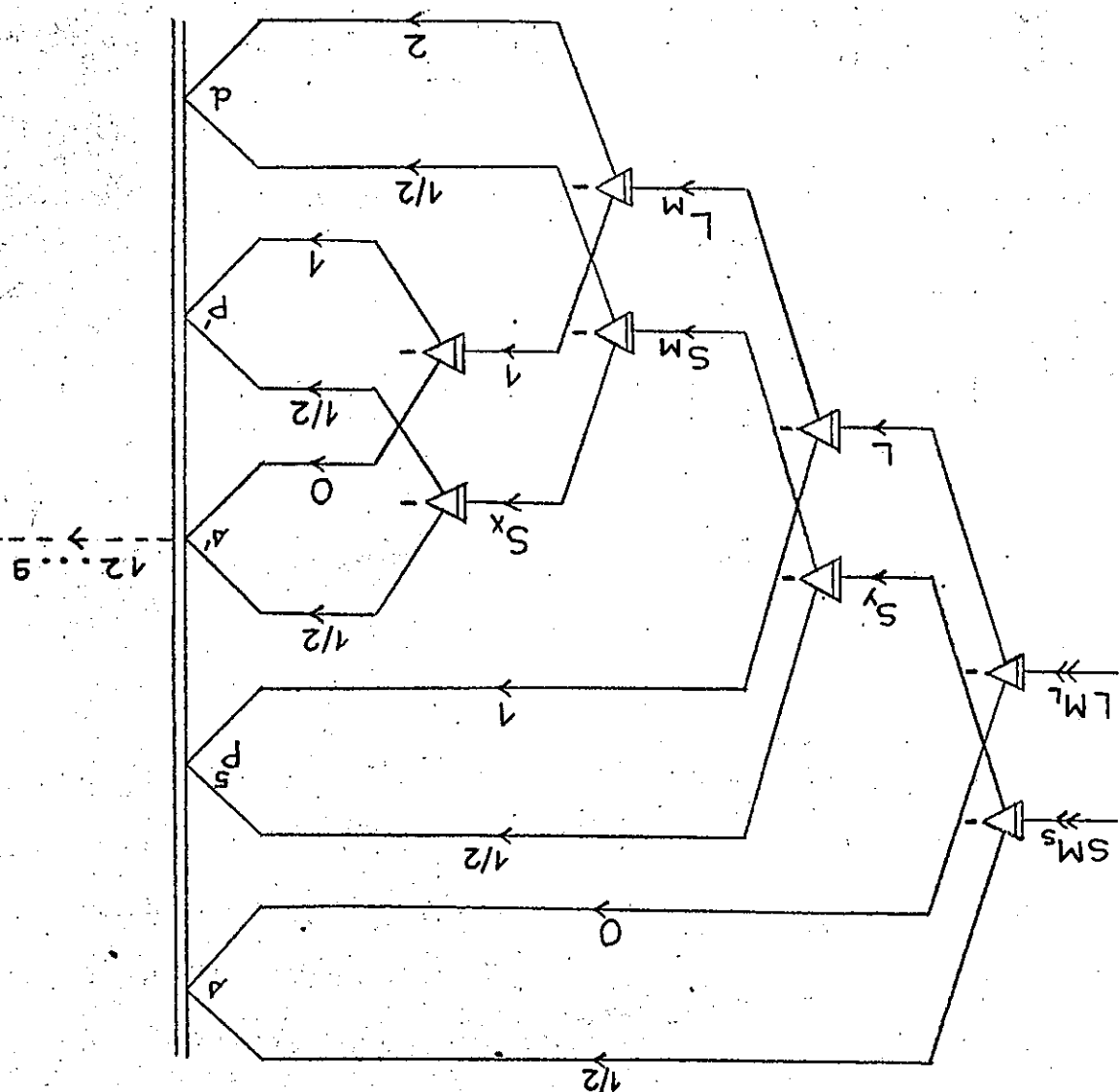
$$G_{22} = (-)^{\bar{S} + \bar{L} + S + S' + K + K' + J + \bar{L} + \bar{L}''} \sum_x [x] \begin{pmatrix} K & \bar{L}' & J' \\ L & S & x \\ S' & L' & J' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S' & L' & J' \\ S & K' & J \\ \bar{L} & L & \bar{L}'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S & S' & s \\ S & K' & J \\ L & L' & \bar{L}'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & x & \bar{L}' \\ L & L' & \bar{L}'' \\ L & x & \bar{L}' \end{pmatrix} \quad (\text{III-2-26})$$

Finalement :

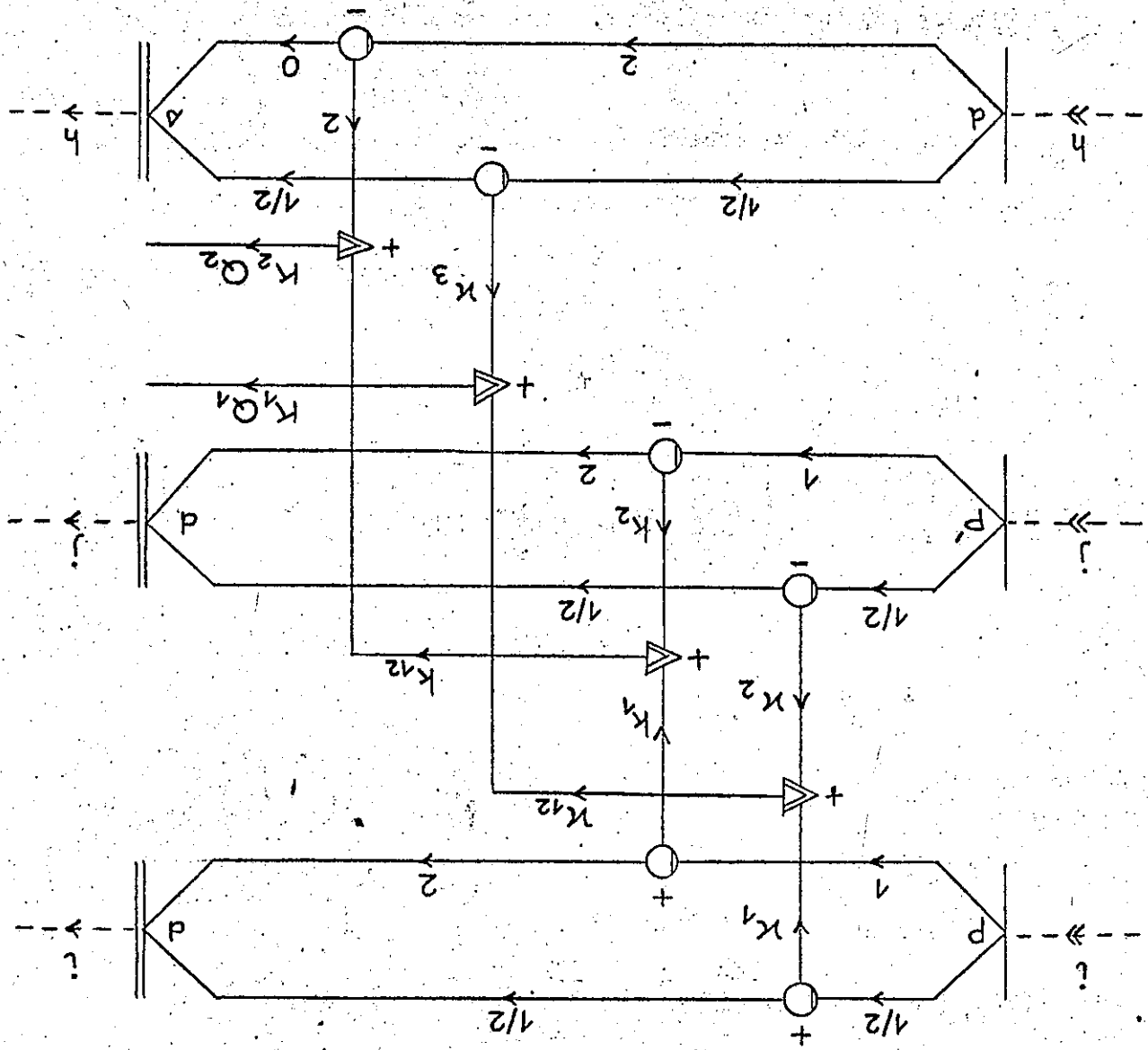
$$\langle \text{Bra} | G_{22} | \text{Ket} \rangle = \frac{2}{N} \delta(J, J') \delta(M, M') (-)^{S + S' + K + K' + J + \bar{L} + \bar{L}'' + K}$$

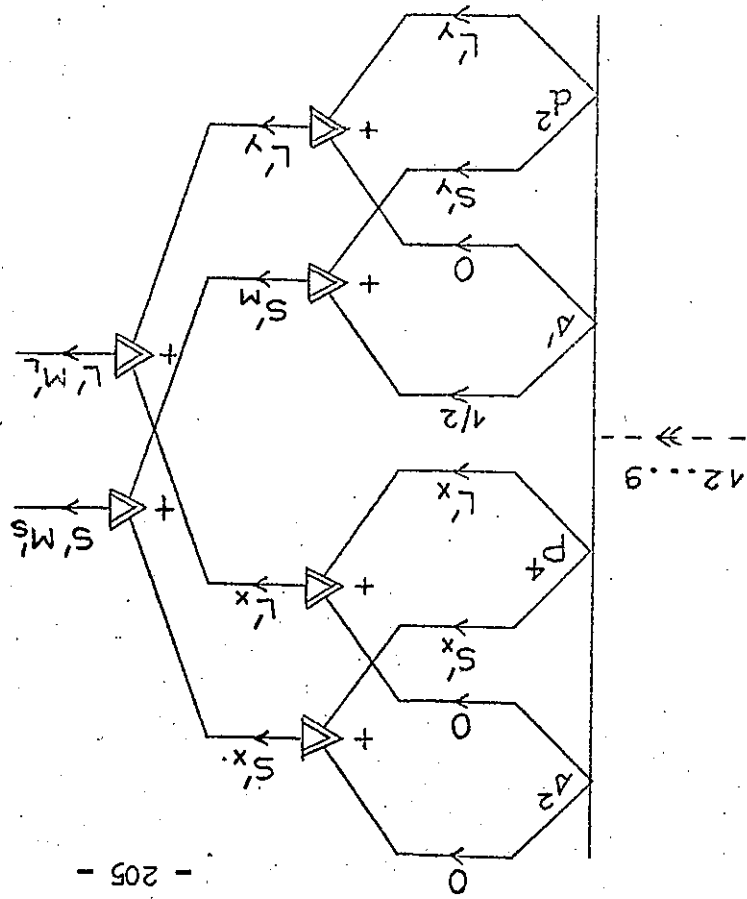
$$\sum_{\bar{L}''} \frac{2}{N} \alpha_{N-1}^{\bar{L}''} (n \bar{L}'' \alpha_{SL}) (n \bar{L}'' \alpha_{SL}) (n \bar{L}'' \alpha_{SL}) (-)^{\bar{S} + \bar{L}''} \begin{pmatrix} S & S' & s \\ S & K' & J \\ \bar{L} & L' & \bar{L}'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S & x & K \\ S & K' & J \\ \bar{L} & L' & \bar{L}'' \end{pmatrix} \times \sum_x [x] \begin{pmatrix} K & \bar{L}' & J' \\ L & S & x \\ S' & L' & J' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S' & L' & J' \\ S & K' & J \\ L & L' & \bar{L}'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & x & \bar{L}' \\ L & L' & \bar{L}'' \\ L & x & \bar{L}' \end{pmatrix} \quad (\text{III-2-27})$$

25
G
III.2

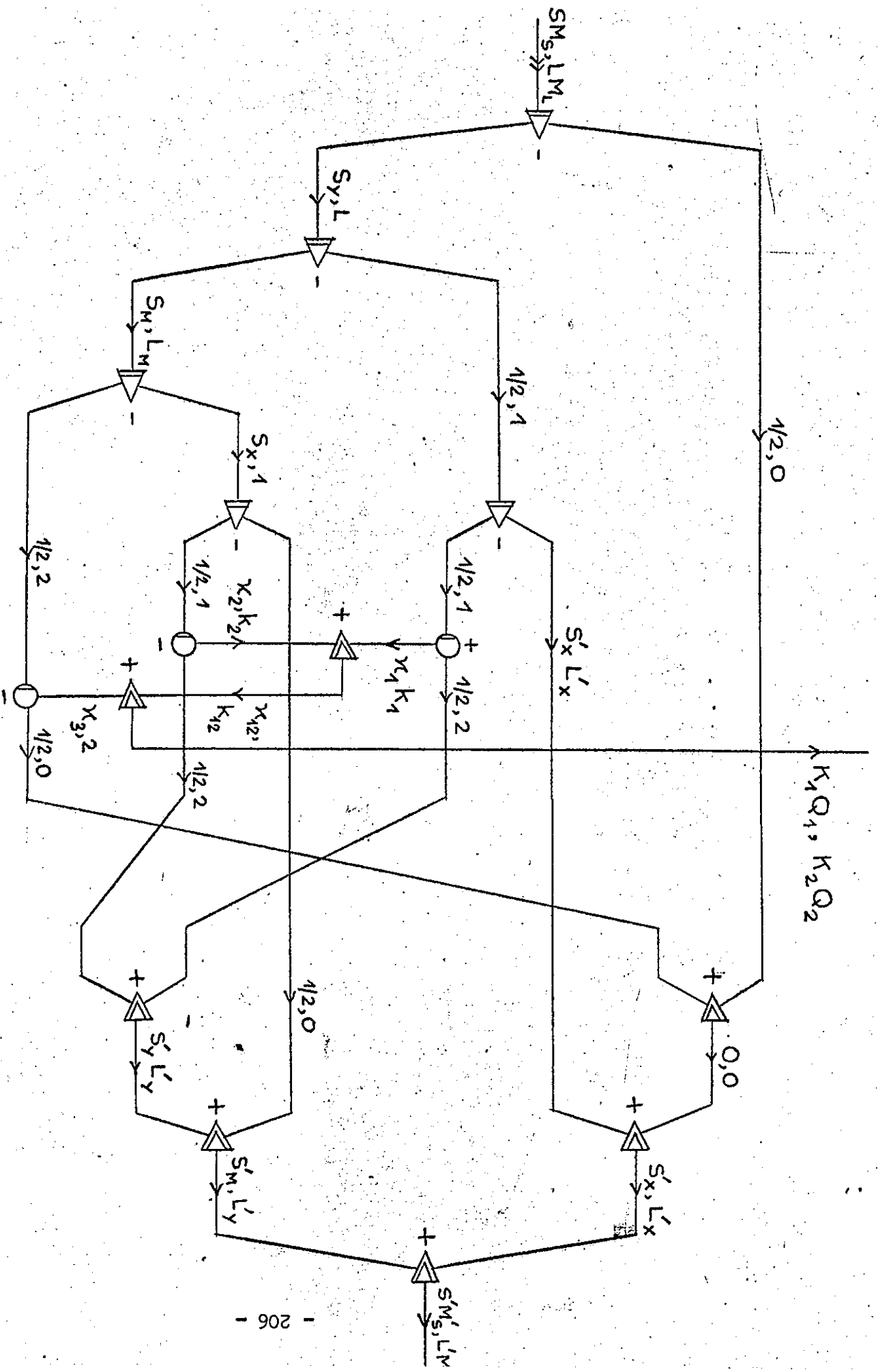


26
III.2





G 27 III.2



28
 G
 III. 2

Cet exemple consiste à calculer l'élément de matrice :

$$E_3 = \langle \Psi | Op. | \Psi \rangle \quad \text{(III-2-29)}$$

dont nous allons examiner successivement les 3 parties :

$$|\Psi\rangle = (s, p, d) S_P, d) S_L, S_L, S_M, S_T, S_M, S_T | \quad \text{(III-2-30)} = G^{25}$$

$$Op. = \sum_{1 > j > h} \left\{ [W_{1k}^{1k}] (pd) \times W_{2k}^{2k} (pd) \right] (n_{12k}^{12k}) \times W_{3h}^{3h} (ds) \left. \right\} \begin{matrix} K_1 \\ K_2 \\ K_1 \\ K_2 \end{matrix} \quad \text{(III-2-31)}$$

$$\sum_{1 > j > h} G^{26}$$

$$|\Psi_1\rangle = |s_2, p_4 S_L^x, L_L^x, (s_1, d_2 S_L^y, L_L^y, S_L^M, S_L^M, S_L^T, S_L^T, S_L^M, S_L^T) = G^{27} \quad \text{(III-2-32)}$$

Appliquons la formule (III-1-31) :

- La phase est égale au facteur $(-)^p$ où p est la parité de la perturbation :

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ 1 & 9 & 2 & 3 & 4 & 5 & 7 & 6 & 8 \end{pmatrix} \quad \text{(III-2-33)}$$

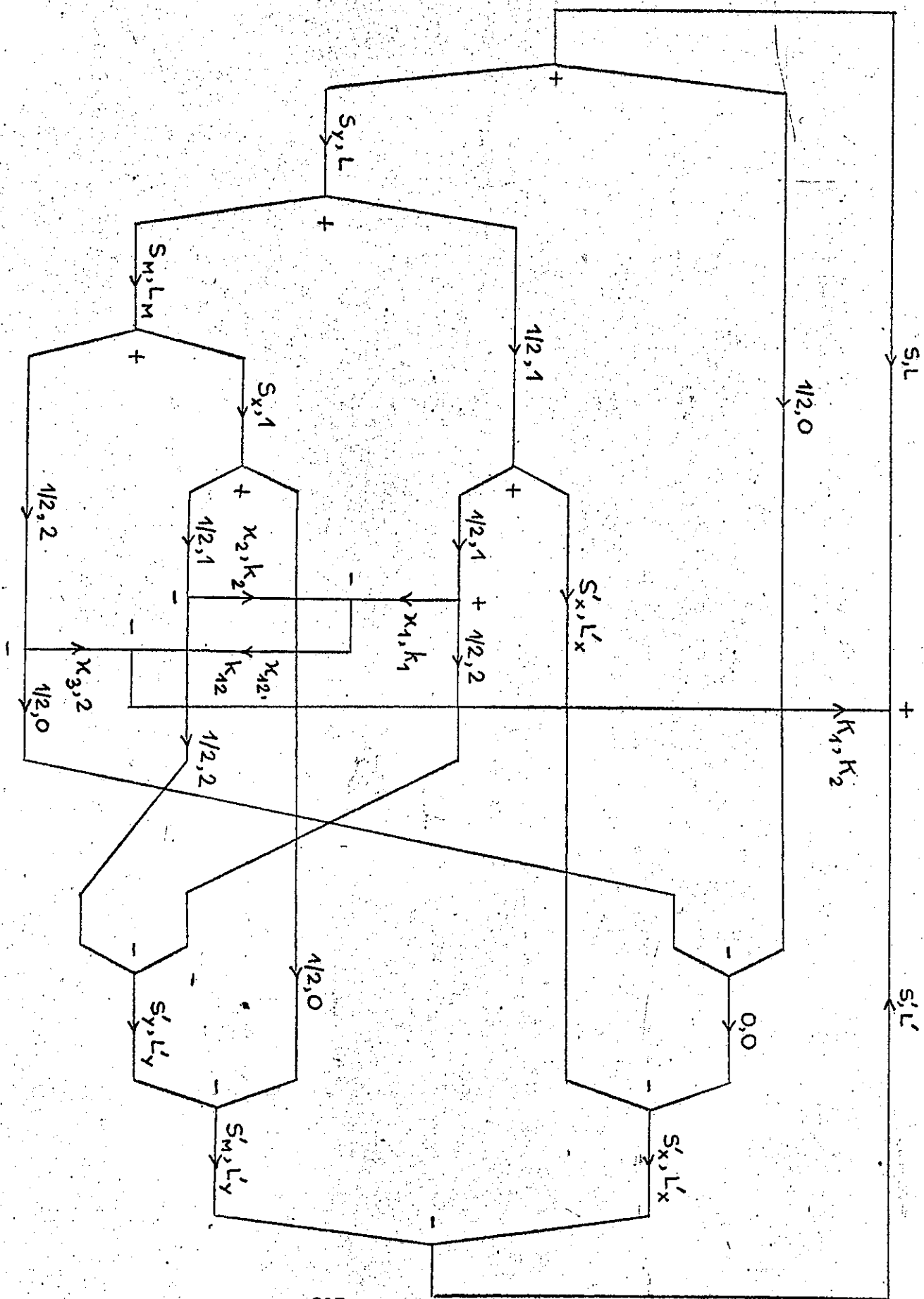
qui est paire.

- Le coefficient K est donné par la formule (III-1-42) :

$$K = \frac{1}{2^7} \left(\frac{5!}{4!} \times \frac{1!}{0!} \times \frac{1!}{2!} \times \frac{1!}{2!} \times \frac{1!}{2!} \right) = \frac{6}{2^7} \quad \text{(III-2-34)}$$

- La sommation porte sur les termes $p_4 S_L$ et il apparaît le coefficient de parenté fractionnelle ${}^{2b)}$:

$$\langle p_4 S_L + p_5 S_L + p_6 S_L \rangle = \frac{S_L}{2^7} \quad \text{(III-2-35)}$$



G_{29}
 $G_{III.2}$

- enfin l'intégration proprement dite introduit les facteurs :

$$\delta(S'_i \bar{S}) \delta(L'_i \bar{L}) \quad (III-2-36)$$

qui supprime la sommation précédente .

On obtient donc :

$$E_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \prod_{G_{28}} S'_i L'_i \prod_{G_{28} \text{ spin}} x \prod_{G_{28} \text{ orbite}} \quad (III-2-37)$$

Les deux graphes G_{28} , de spin et d'orbite, sont ici séparés et identifiées aux noms des branches près. Nous les avons représentés dans le même graphe, en indiquant quant auprès de chaque branche les noms qui lui correspondent dans chacun des deux graphes.

La suppression des triangles et des cercles ainsi que la fermeture des deux graphes introduit un coefficient numérique :

$$E_2 = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}} (-)^{S-M_S+L-M_L} \begin{pmatrix} S & K_1 & S'_1 \\ S & K_2 & L'_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -M_S & 0 & 1 \\ -M_L & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & K_2 & L'_1 \\ -M_L & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

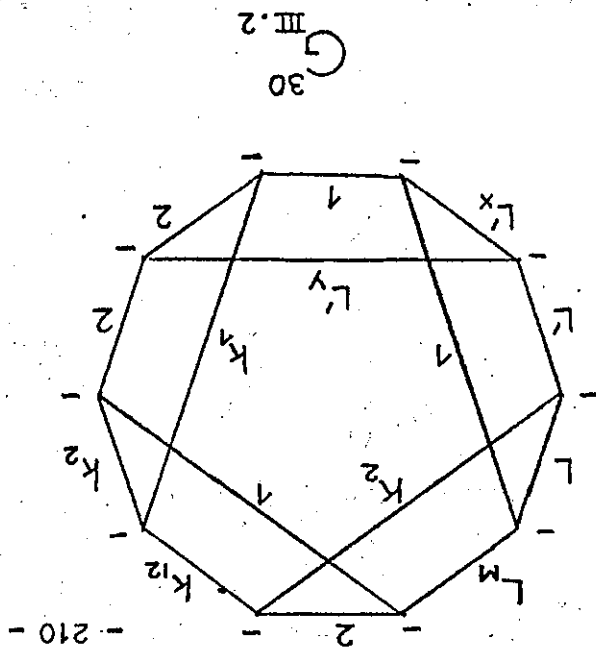
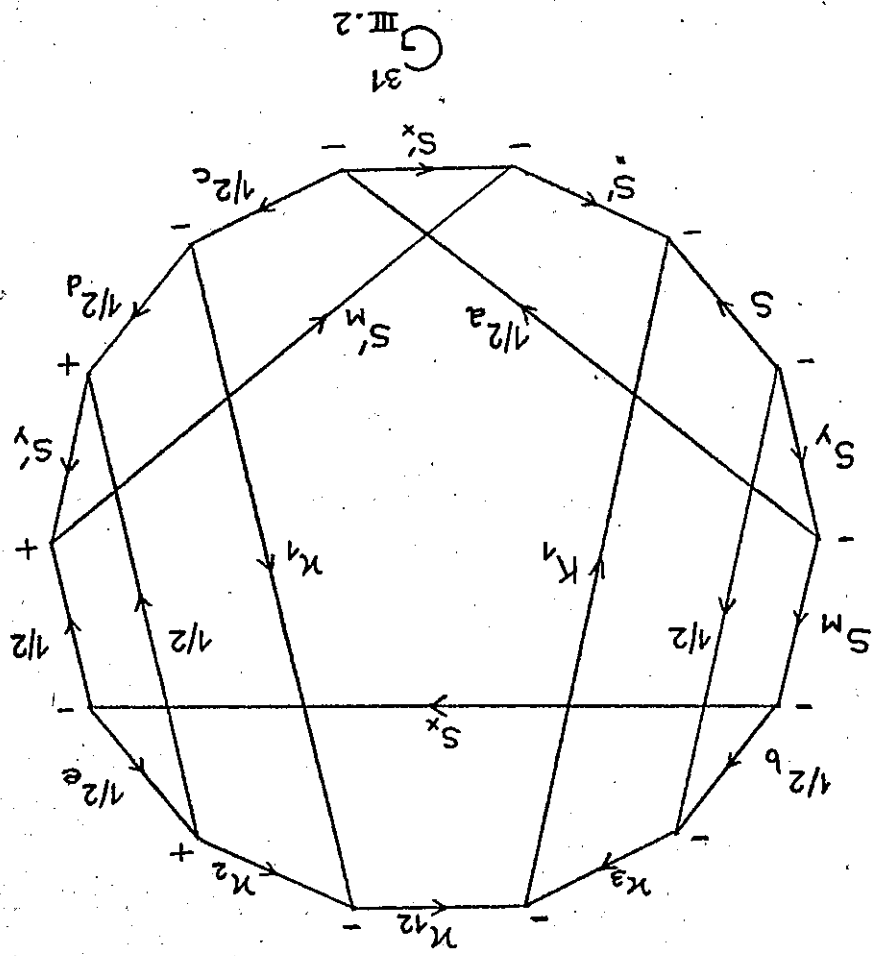
$$\times \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i \prod_{S'_i} S'_i$$

(III-2-38)

Occupons-nous maintenant séparément de chacun des deux graphes. Après suppression des branches nulles, le graphe d'orbite est le plus simple; en supprimant les flèches, car tous les moments angulaires d'orbite sont entiers; on obtient :

$$G_{29}^{\text{orbite}} = \frac{1}{\sqrt{15}} (L'_1 L'_1 L'_1)^{-1} G_{30} \quad (III-2-39)$$

Le dernier graphe est un coefficient 15 - j de première espèce (figure 20.2b de JUCYS³), donné par la formule (17.1) (même référence) :



$$G^{30} = \sum_x [x] (-)^{L+L'+L''+L''' + L_M + k_1 + k_2 + k_{12} + 1}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} L'_x & L'_y & L' \\ x & 1 & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & L' & K_2 \\ x & L_M & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k_{12} & 2 & K_2 \\ L_M & x & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k_1 & k_2 & k_{12} \\ 1 & x & 2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 2 & 2 & L'_y \\ x & 1 & k_1 \end{matrix} \right\} \quad (\text{III-2-40})$$

Pour le graphe de spin, on obtient de même :

$$G_{\text{spin}}^{29} = - \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S}'_x^{-1} G^{31} \quad (\text{III-2-41})$$

Ce graphe est un $21 - j$. Il possède 6 coupures suivant 4 branches, qui sont :

$$\begin{array}{ll} \text{a) } \kappa_{12} S_x \frac{1}{2}_a S' & \text{d) } \kappa_{12} S_x S'_M \frac{1}{2}_c \\ \text{b) } \kappa_3 S_x \frac{1}{2}_a S & \text{e) } \kappa_2 S_x S'_M \frac{1}{2}_d \\ \text{c) } \kappa_{12} \frac{1}{2}_b S_y S' & \text{f) } \kappa_{12} \frac{1}{2}_c \frac{1}{2}_e S'_y \end{array} \quad (\text{III-2-42})$$

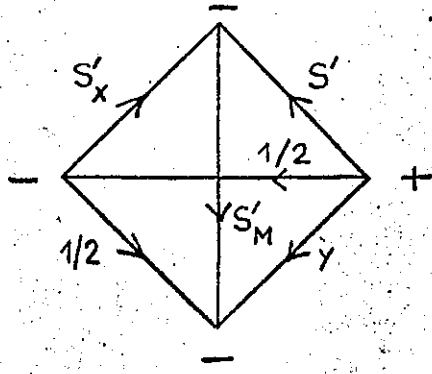
Les branches $\frac{1}{2}$ qui interviennent dans les coupures, ont été indicées sur le graphe G^{31} et dans (42) pour qu'on puisse les distinguer. Ecrivons la matrice des branches communes :

	a	b	c	d	e	f
a	4	2	2	2	1	1
b	2	4	0	1	1	0
c	2	0	4	1	0	1
d	2	1	1	4	2	2
e	1	1	0	2	4	0
f	1	0	1	2	0	4

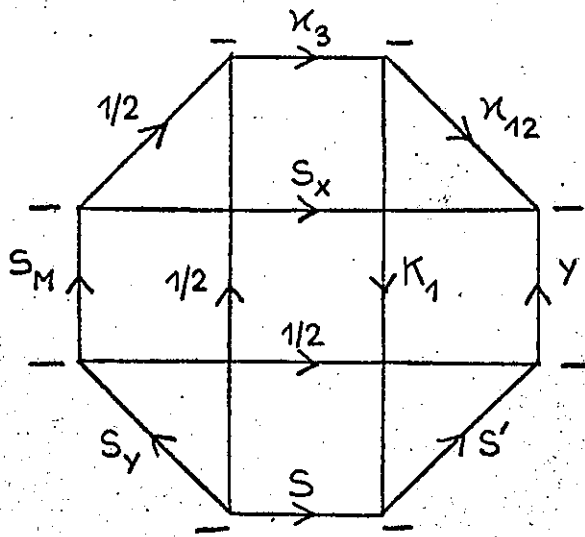
(III-2-43)

La fonction de qualité des différentes coupures prend les valeurs suivantes :

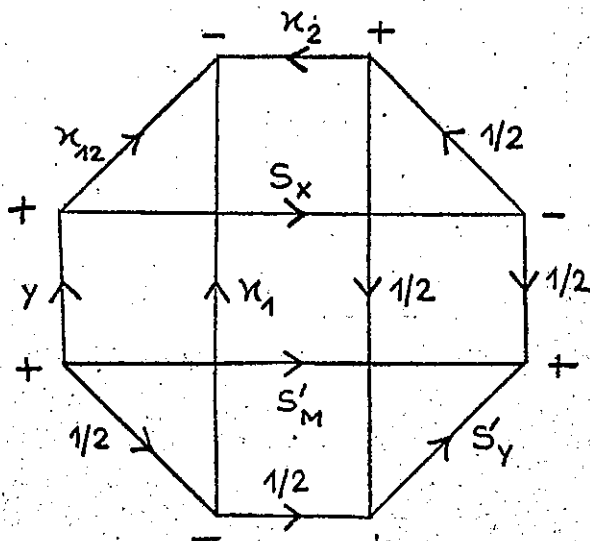
$$S(a) = S(d) = 5 \quad S(b) = S(c) = S(e) = S(f) = 3 \quad (\text{III-2-44})$$



$G_{III.2}^{32}$



$G_{III.2}^{33}$



$G_{III.2}^{34}$

Les deux coupures a et d sont donc les meilleurs. Choisissons la coupure a. Nous avons maintenant 3 possibilités de raccordement, dont les "distances" s'écrivent :

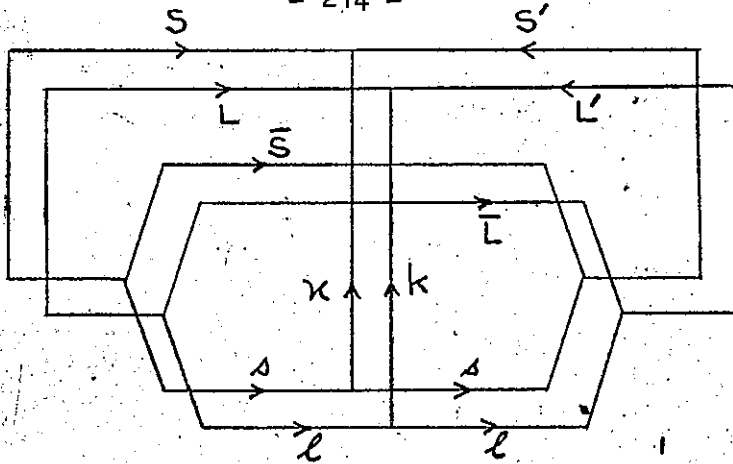
$$\begin{aligned}
 D_{n_{12} S_x, \frac{1}{2} S'} &= 2 + 2 + 2 + 1 = 7 \\
 D_{n_{12} \frac{1}{2}, S_x S'} &= 3^3 + 2 + 3^3 + 2 = 10 \\
 D_{n_{12} S', S_x \frac{1}{2}} &= 1 + 3 + 1 + 3 = 8 \quad (\text{III-2-45})
 \end{aligned}$$

Nous choisissons donc le premier raccordement. Il conduit à exprimer le $21 - j$ G^{31} sous la forme d'une somme de produits d'un $6 - j$ et de deux $12 - j$ de seconde espèce :

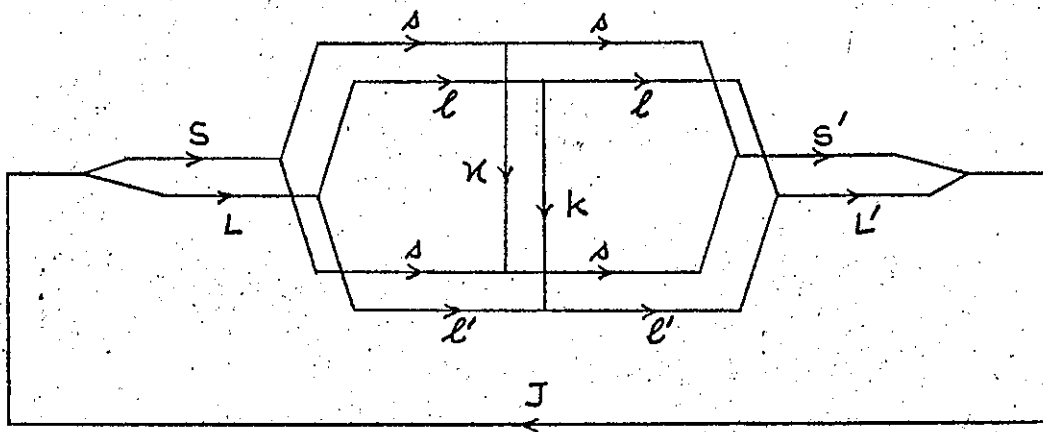
$$\begin{aligned}
 G_{\text{spin}}^{29} &= - \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S}'_x^{-1} \sum_y [y] G^{32} G^{33} G^{34} \quad (\text{III-2-46}) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S}'_x^{-1} (-)^{S_x + S'_x + S_M + S'_M + S + n_1 + n_3 + n_{12} + K_1 + \frac{1}{2}} \sum_y [y] \left\{ \begin{matrix} S'_x & S'_M & S' \\ y & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \\
 &\quad \times \begin{bmatrix} S_y & \frac{1}{2} & S' & n_{12} \\ \frac{1}{2} & S & S_x & n_3 \\ S_M & y & \frac{1}{2} & K_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & n_{12} & S'_y & \frac{1}{2} \\ S'_M & \frac{1}{2} & S_x & n_2 \\ y & \frac{1}{2} & n_1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{III-2-47})
 \end{aligned}$$

En rassemblant les équations (38), (39), (40) et (47), on obtient finalement :

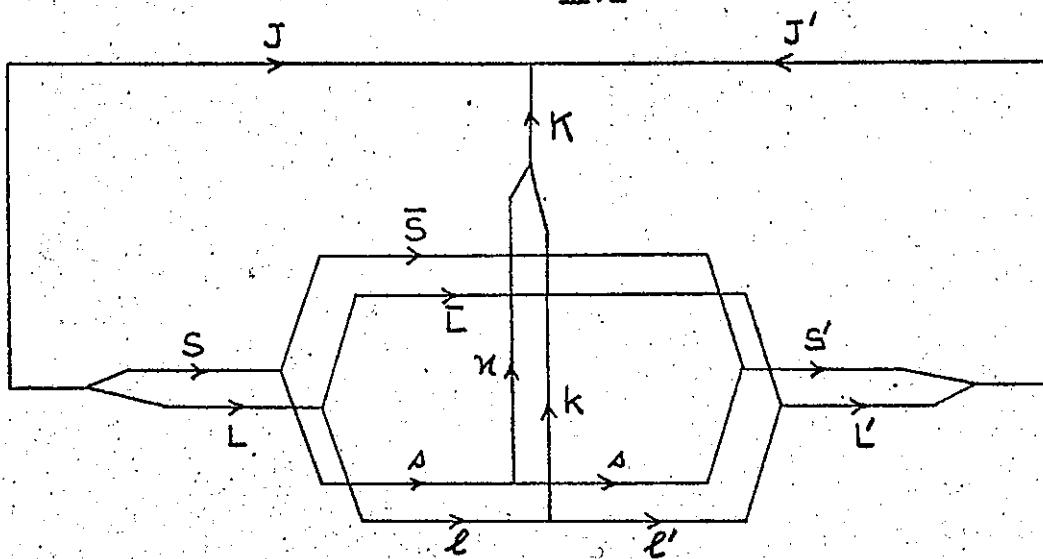
$$\begin{aligned}
 E_3 &= \frac{1}{3\sqrt{2}} (-)^{S-M_S + L-M_L} \begin{pmatrix} S & K_1 & S' \\ -M_S & Q_1 & M'_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & K_2 & L' \\ -M_L & Q_2 & M'_L \end{pmatrix} (-)^{S+S_x + S_M + S'_x + S'_M + L+L_M + L'+L'_x + L'_y} \\
 &\times (-)^{n_1 + k_1 + k_2 + n_3 + n_{12} + k_{12} + K_1 + K_2 + \frac{1}{2}} \hat{S}_y \hat{S}_M \hat{S}'_x \hat{S}'_M \hat{S}'_y \hat{S}'_M \hat{L}_M \hat{L}'_M \hat{L}'_x \hat{L}'_y \hat{n}_1 \hat{n}_2 \hat{n}_3 \hat{n}_{12} \hat{k}_1 \hat{k}_2 \hat{k}_{12} \hat{K}_1 \hat{K}_2 \\
 &\times \sum_x [x] \left\{ \begin{matrix} L'_x & L'_y & L' \\ x & 1 & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & L' & K_2 \\ x & L_M & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k_{12} & 2 & K_2 \\ L_M & x & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k_1 & k_2 & k_{12} \\ 1 & x & 2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 2 & 2 & L'_y \\ x & 1 & k_1 \end{matrix} \right\} \\
 &\times \sum_y [y] \left\{ \begin{matrix} S'_x & S'_M & S' \\ y & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \begin{bmatrix} S_y & \frac{1}{2} & S' & n_{12} \\ \frac{1}{2} & S & S_x & n_3 \\ S_M & y & \frac{1}{2} & K_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & n_{12} & S'_y & \frac{1}{2} \\ S'_M & \frac{1}{2} & S_x & n_2 \\ y & \frac{1}{2} & n_1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{III-2-48})
 \end{aligned}$$



$G^1_{III.3}$



$G^2_{III.2}$



$G^3_{III.3}$

Cet exemple, malgré sa complexité inhabituelle, n'a pas posé de problèmes particuliers : il a suffi d'appliquer très systématiquement les règles établies.

Mais cet exemple a été simplifié par la séparation totale des branches de spin et d'orbite, ce qui a conduit au produit de deux graphes après l'intégration. Cette séparation est due au couplage LS dans les fonctions et à l'existence d'opérateurs tensoriels doubles non couplés. Au contraire, dans l'exemple précédent, nous avons pu remarquer que le couplage Jℓ complique énormément les éléments de matrice d'un opérateur simple.

La corrélation entre la proximité du couplage LS et la simplicité des graphes est générale; nous allons la détailler un peu au paragraphe suivant.

III - 3 - STRUCTURE GRAPHIQUE EN COUPLAGE LS -

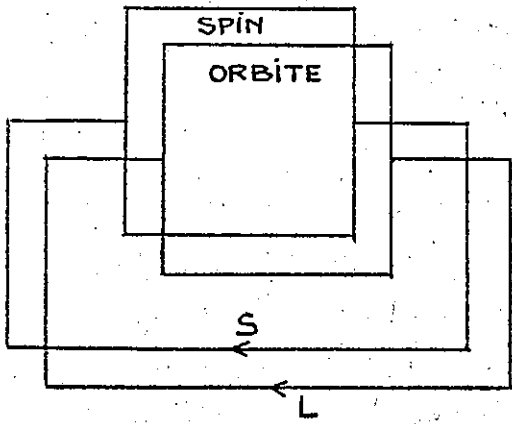
Dans les fonctions d'onde et les opérateurs que nous avons utilisés dans cette méthode, les moments angulaires de spin et d'orbite élémentaires sont toujours précisés. Ceci se traduit graphiquement par le fait que les deux branches de spin et d'orbite se rejoignent toujours à chaque point d'entrée.

Cette propriété confère au couplage LS un rôle particulier : les graphes qu'on obtient ont une structure spéciale. Prenons quelques exemples de graphes intégrés (nous ne faisons apparaître que la structure des graphes, qui seule nous intéresse pour le moment) :

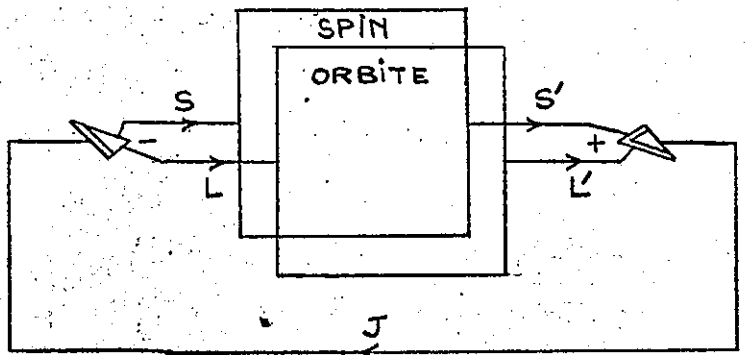
$$(n\ell^N \alpha SL \parallel W^{(\kappa k)}(n\ell, n\ell) \parallel n\ell^N \alpha' S' L') \rightarrow G^1 \quad (\text{III-3-1})$$

$$((n\ell, n'\ell') SLJ \parallel W^{(\kappa k)}(n\ell, n\ell) \cdot W^{(\kappa k)}(n'\ell', n'\ell') \parallel (n\ell, n'\ell') S' L' J') \rightarrow G^2 \quad (\text{III-3-2})$$

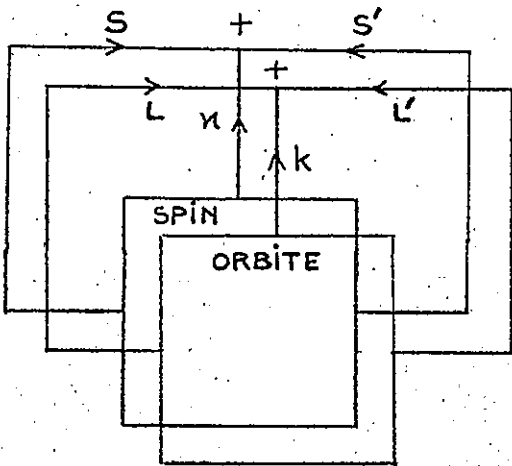
$$(n\ell^N \alpha SLJ \parallel W^{(\kappa k)K}(n\ell, n'\ell') \parallel (n\ell^{N-1} \bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}, n'\ell') S' L' J') \rightarrow G^3 \quad (\text{III-3-3})$$



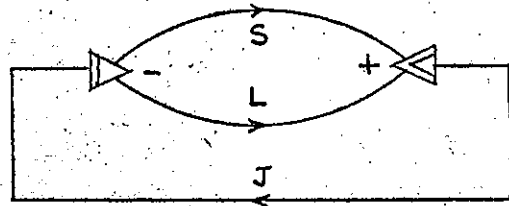
$G_{III.3}^4$



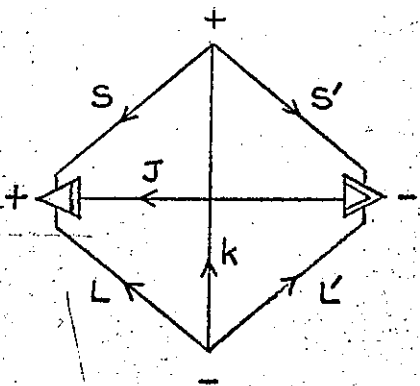
$G_{III.3}^5$



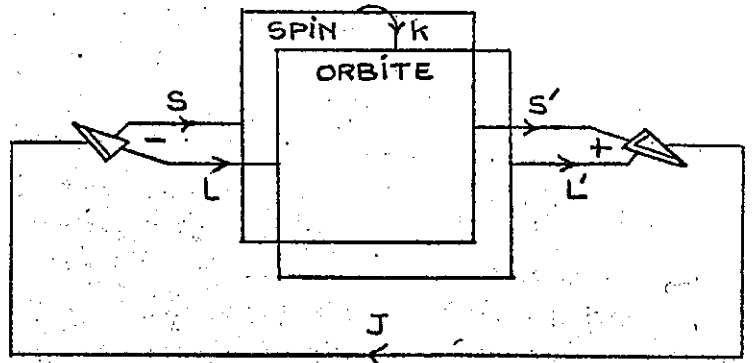
$G_{III.2}^7$



$G_{III.3}^6$



$G_{III.3}^9$



$G_{III.3}^8$

Les flèches indiquent que le calcul des éléments de matrice donne lieu à un graphe ayant la structure indiquée.

Les graphes G^1 à G^3 ont été représentés en perspective de façon à faire apparaître deux plans parallèles : un pour les branches de spin et un pour les branches d'orbite. Dans les graphes G^2 et G^3 ces plans sont rejoints par un nombre réduit de branches (J, K, J') . Les graphes contenus dans chaque plan peuvent devenir extrêmement compliqués; si le couplage entre les branches de spin et d'orbite n'est effectué qu'au niveau des moments angulaires totaux, la structure hors-plan ou inter-plan reste simple.

Dans les cas simples, on peut établir graphiquement des formules générales, en enfermant les graphes de chaque plan dans des boîtes; le but de ces formules est de séparer le graphe initial en deux graphes correspondant aux deux plans de spin et d'orbite. L'opérateur $T^{(\kappa k)}$ qui apparaît dans les formules suivantes est une combinaison quelconque d'opérateurs tensoriels doubles; T est un opérateur scalaire respectivement pour le spin et pour l'orbite. Nous allons calculer les éléments de matrice des 4 opérateurs suivants :

$$T, T^{(\kappa k)}, T^{(k.k)} \text{ et } T^{(\kappa k)K} \quad (\text{III-3-4})$$

sur deux bases de fonctions : $|\gamma SLM_{S'L}^M\rangle$ et $|\gamma SLJM\rangle$. Pour 5 d'entre eux, nous partions directement des éléments de matrice réduits; pour les 3 autres, ceux-ci ne sont pas définis : nous calculerons donc les éléments de matrice eux-mêmes.

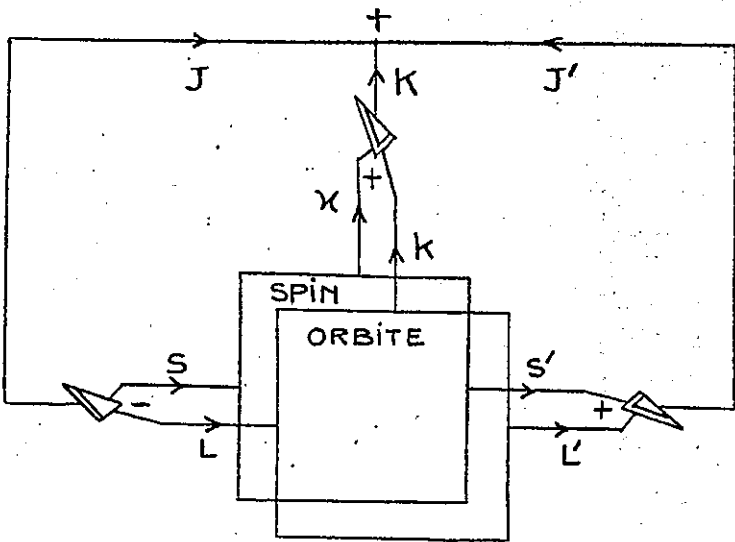
$$1a : (\gamma SL || T || \gamma' S' L') = \delta(SS') \delta(LL') \hat{S}^{-1} \hat{L}^{-1} G^4 \quad (\text{III-3-5})$$

Le graphe G^4 est déjà décomposé en un produit de 2 graphes.

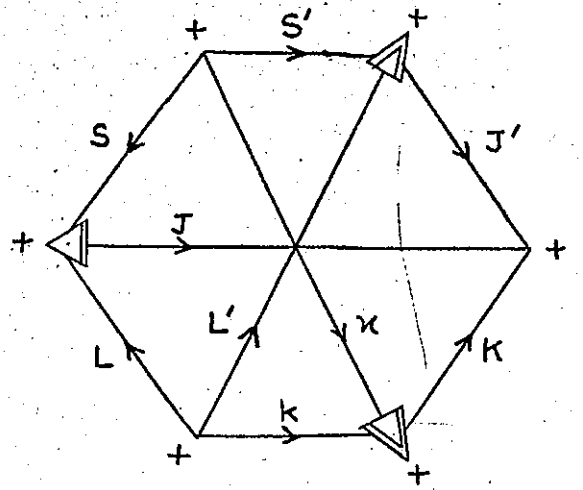
$$1b : (\gamma SLJ || T || \gamma' S' L' J') = \delta(JJ') \hat{J}^{-1} G^5 \quad (\text{III-3-6})$$

Le graphe G^5 peut être coupé deux fois suivant 2 branches (S, S') et (L, L') :

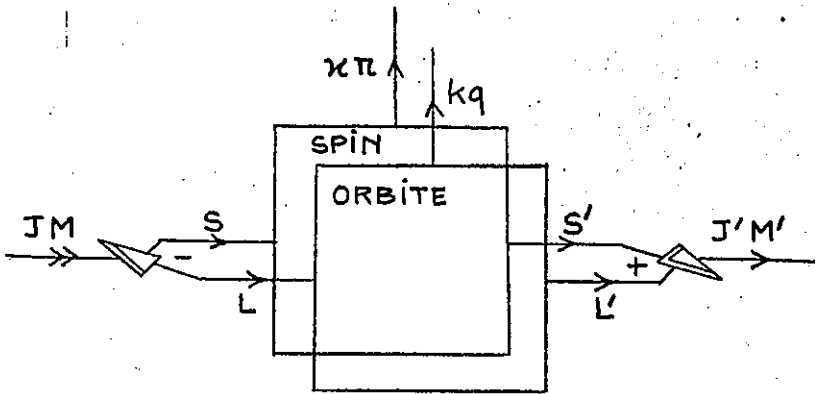
$$\begin{aligned} (\gamma SLJ || T || \gamma' S' L' J') &= \delta(SS') \delta(LL') \delta(JJ') ([S][L] \hat{J})^{-1} G^4 G^6 \\ &= \delta(SS') \delta(LL') \delta(JJ') \delta(S, L, J) (\hat{J}/[S][L]) G^4 \quad (\text{III-3-7}) \end{aligned}$$



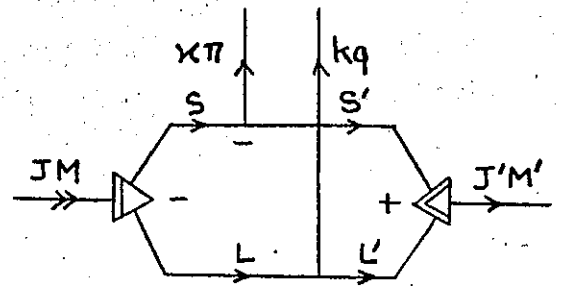
$G_{III.3}^{10}$



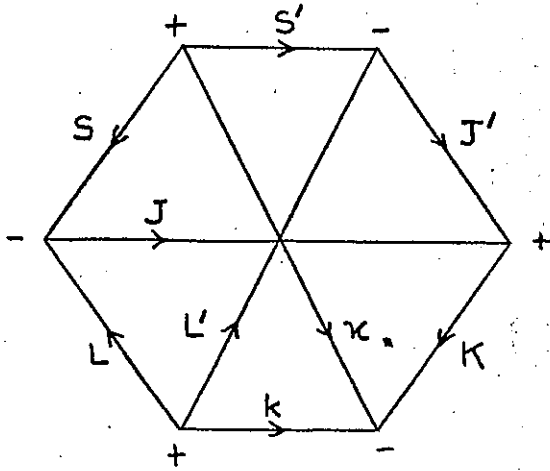
$G_{III.3}^{11}$



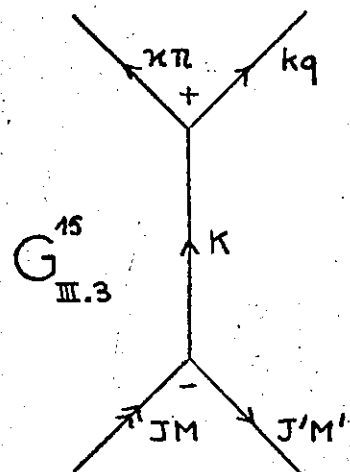
$G_{III.3}^{12}$



$G_{III.3}^{13}$



$G_{III.3}^{14}$



$G_{III.3}^{15}$

$$2a : (\gamma SL \parallel T^{(\kappa k)} \parallel \gamma' S' L') = G^7 \quad (\text{III-3-8})$$

Le graphe G^7 est déjà décomposé en un produit de 2 graphes.

$$3b : (\gamma SLJ \parallel T^{k.k} \parallel \gamma' S' L' J') = \delta(JJ') \hat{j}^{-1} (-)^k G^8 \quad (\text{III-3-9})$$

Le graphe G^8 peut être coupé deux fois suivant 3 branches : $(S k S')$ et $(L k L')$:

$$\begin{aligned} (\gamma SLJ \parallel T^{k.k} \parallel \gamma' S' L' J') &= \delta(JJ') \hat{j}^{-1} (-)^{2S+k} G^7 G^9 \\ &= \delta(JJ') \hat{j} (-)^{S'+L+J} \left\{ \begin{array}{ccc} S & L & J \\ L' & S' & k \end{array} \right\} G^7 \end{aligned} \quad (\text{III-3-10})$$

où on a fait $\kappa = k$ dans le graphe G^7 .

$$4b : (\gamma SLJ \parallel T^{(\kappa k)K} \parallel \gamma' S' L' J') = G^{10} \quad (\text{III-3-11})$$

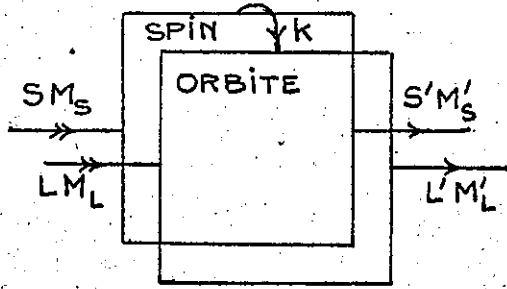
Le graphe G^{10} peut être coupé deux fois suivant 3 branches : $(S \kappa S')$ et $(L k L')$:

$$\begin{aligned} (\gamma SLJ \parallel T^{(\kappa k)K} \parallel \gamma' S' L' J') &= (-)^{2S} G^7 G^{11} \\ &= \hat{j} \hat{K} \hat{j}' \left\{ \begin{array}{ccc} S & L & J \\ S' & L' & J' \\ \kappa & k & K \end{array} \right\} G^7 \end{aligned} \quad (\text{III-3-12})$$

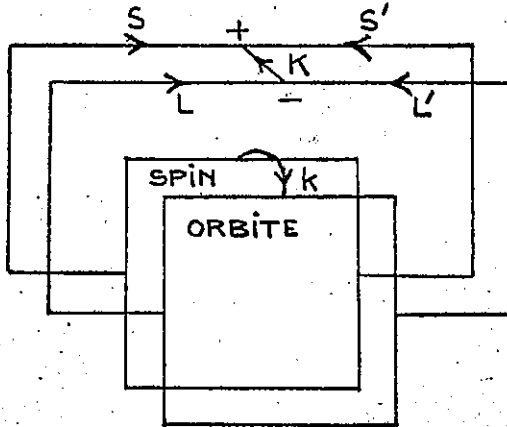
Pour écrire les éléments de matrice réduits des 5 formules ci-dessus, nous avons utilisé les relations (I-3-20) et (III-1-44), en utilisant le fait que dans certains cas (1a et 2a) le graphe était déjà décomposé en deux graphes indépendants.

Les équations (10) et (12) sont les analogues des formules (3.36) et (3.35) respectivement de JUDD⁴⁾.

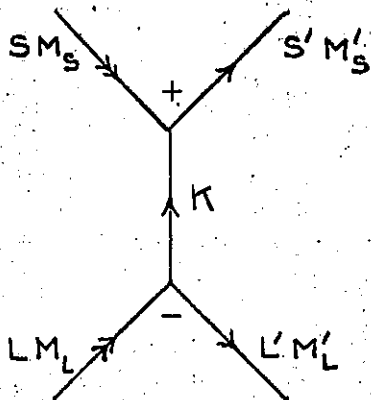
Pour les 3 autres cas, les éléments de matrice réduits ne sont pas définis.



$G_{III.3}^{16}$



$G_{III.3}^{17}$



$G_{III.3}^{18}$

$$2b : (\gamma \text{ SLJM} | T_{\pi q}^{(\kappa k)} | \gamma' S' L' J' M') = G^{12} \quad (\text{III-3-13})$$

Le graphe G^{12} peut être coupé deux fois suivant 3 branches : (S κ S')
et (L k L') :

$$(\gamma \text{ SLJM} | T_{\pi q}^{(\kappa k)} | \gamma' S' L' J' M') = (-)^{2S} G^7 G^{13} \quad (\text{III-3-14})$$

Le graphe G^{13} a 4 branches libres : il peut être fermé à l'aide d'un
4 - jm (formule (I-3-16)) :

$$\begin{aligned} (\gamma \text{ SLJM} | T_{\pi q}^{(\kappa k)} | \gamma' S' L' J' M') &= G^7 \sum_K [K] \hat{J} \hat{J}' G^{14} G^{15} \\ &= \hat{J} \hat{J}' G^7 \sum_{KQ} [K] (-)^{K-Q} \begin{pmatrix} K & k & \kappa \\ -Q & q & \pi \end{pmatrix} (-)^{J-M} \begin{pmatrix} J & K & J' \\ -M & Q & M' \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} S & L & J \\ S' & L' & J' \\ \kappa & k & K \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (\text{III-3-15})$$

$$3a : (\gamma \text{ SLM}_{S'L} | T^{k.k} | \gamma' S' L' M' M') = (-)^k G^{16} \quad (\text{III-3-16})$$

Le graphe G^{16} ne peut pas être coupé car le sens des branches libres est
inchangeable; mais on peut le fermer de la même manière que ci-dessus :

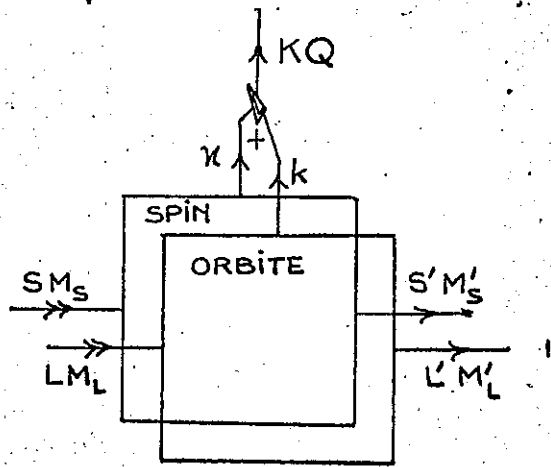
$$(\gamma \text{ SLM}_{S'L} | T^{k.k} | \gamma' S' L' M' M') = (-)^k \sum_K [K] G^{17} G^{18} \quad (\text{III-3-17})$$

Le graphe G^{18} peut être coupé suivant les 2 branches k, K :

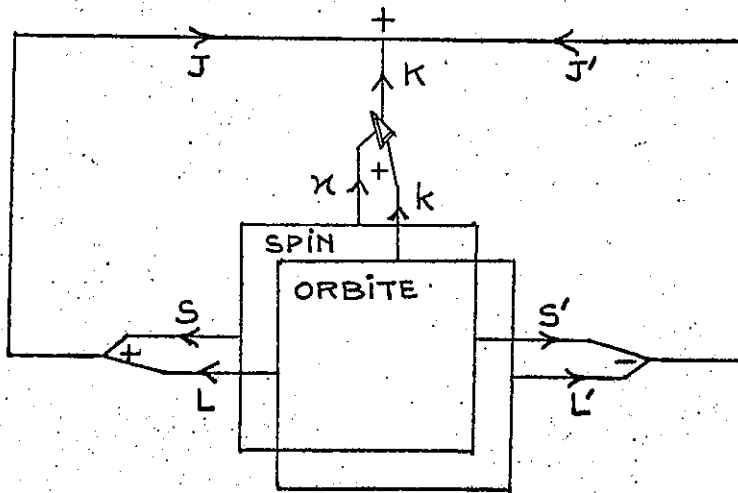
$$(\gamma \text{ SLM}_{S'L} | T^{k.k} | \gamma' S' L' M' M') = (-)^{S-M_S+L-M_L} G^7 \sum_q (-)^q \begin{pmatrix} L & k & L' \\ -M_L & q & M'_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S & k & S' \\ -M_S & q & M'_S \end{pmatrix} \quad (\text{III-3-18})$$

$$4a : (\gamma \text{ SLM}_{S'L} | T_Q^{(\kappa k)K} | \gamma' S' L' M' M') = G^{19} \quad (\text{III-3-19})$$

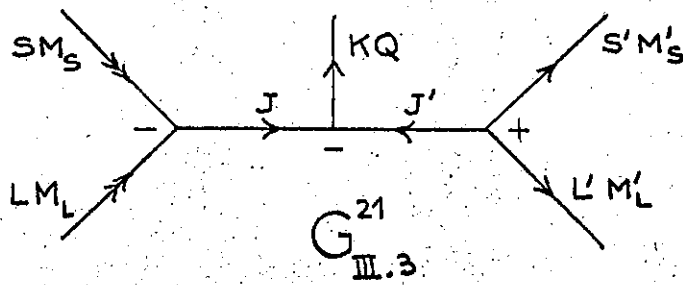
Ici non plus, nous ne pouvons pas couper le graphe G^{19} .



$G_{III.3}^{19}$



$G_{III.3}^{20}$



$G_{III.3}^{21}$

La formule (I-3-16) s'applique donc :

$$(\gamma \text{ SLM}_{S'L} | T_Q^{(\kappa k)K} | \gamma' \text{ S'L'M'M'}) = \sum_{JJ'} [J][J'] G^{20} G^{21} \quad (\text{III-3-20})$$

G^{20} est coupé deux fois suivant 3 branches (S κ S') et (L k L') et G^{21} est décomposé en coefficients 3 - jm :

$$(\gamma \text{ SLM}_{S'L} | T_Q^{(\kappa k)K} | \gamma' \text{ S'L'M'M'}) = \hat{K} G^7 \sum_{\substack{JM \\ J'M'}} [J][J'] \\ \times (-)^{S-M_S+L-M_L} \begin{pmatrix} J & L & S \\ M-M_L & -M_S \end{pmatrix} (-)^{J-M+J'-M'} \begin{pmatrix} J & K & J' \\ -M & Q-M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & L' & S' \\ M' & M'_L & M'_S \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} S & L & J \\ S' & L' & J' \\ \kappa & k & K \end{Bmatrix} \quad (\text{III-3-22})$$

Lorsque l'intégration n'est pas encore effectuée, les deux plans de spin et d'orbite sont reliés par les points d'entrée; on peut cependant appliquer les formules ci-dessus comme si ces liens n'existaient pas. En effet, l'intégration consiste à relier les branches des points d'entrée spin à spin et orbite à orbite; si donc on n'introduit pas de projecteur couplant le spin et l'orbite, on peut ignorer les liens existant dans les points d'entrée. Le même raisonnement permet de faire des coupures séparément dans les deux plans, avant ou après intégration, lorsqu'ils ne sont pas reliés par d'autres branches que celles des points d'entrée.

III - 4 - CONCLUSION -

Dans ce chapitre, nous avons décrit une suite de règles simples permettant le calcul systématique d'un élément de matrice quelconque.

Dans les cas courants, le calcul est alors très rapide, comme nous l'avons vu avec l'exemple du paragraphe III-2-1. En utilisant les formules (III-1-31) et (III-1-42), qui remplacent tout le calcul de l'intégration, on peut, dans la plupart des cas, dessiner directement le graphe après intégration. Celui-ci se ramène alors très simplement au graphe d'un coefficient $3n - j$.

Dans certains cas compliqués, on peut être amené à utiliser les règles de coupure de Jucys afin de décomposer un $3n - j$ irréductible de rang élevé.

Cependant, lorsqu'on a de nombreuses formules à calculer, le travail et les risques d'erreur restent importants. C'est pourquoi nous avons réalisé un programme qui établit automatiquement les formules des éléments de matrice pour la plupart des cas envisageables. Ce programme utilise la méthode pratique décrite dans ce chapitre. Nous allons maintenant voir, dans le dernier chapitre, ses principales caractéristiques.

CHAPITRE IV

PROGRAMME "SUPRAC" D'ETABLISSEMENT AUTOMATIQUE DES FORMULES

Un des buts que nous nous étions fixés au début de ce travail était de réaliser un programme capable d'établir, à l'aide de la méthode graphique décrite dans les chapitres précédents, la formule d'un élément de matrice aussi général que possible.

Une première version de ce programme, écrite en Fortran, est actuellement en exploitation sur l'UNIVAC 1108 de la Faculté des Sciences d'Orsay.

Nous n'avons pas l'intention de faire, dans ce chapitre, la description complète du programme, ni d'en donner le mode d'emploi. Nous nous limiterons à un aperçu général de ses principales possibilités et à un exposé rapide de quelques problèmes qui se sont posés au cours de sa mise au point.

Nous allons suivre le plan suivant :

- dans un premier paragraphe, nous décrivons la conception et l'organisation générale du programme ainsi que les conventions employées pour coder en mémoire les différents types d'information utilisés.
- dans un deuxième paragraphe, nous étudions, sur un plan beaucoup plus technique, quelques sous-programmes caractéristiques.
- enfin, dans un troisième paragraphe, nous donnons quelques indications sur la présentation et la normalisation du programme.

IV - 1 - CONCEPTION ET ORGANISATION GENERALE DU PROGRAMME -

La méthode graphique exposée au chapitre précédent comprend plusieurs phases successives pour le calcul d'un élément de matrice : représentation graphique, intégration, résolution. Chacune de ces phases peut encore se décomposer en opérations plus simples. Chacune de ces opérations est réalisée par un des sous-programmes dont l'ensemble constitue le programme SUPRAC.

Nous allons d'abord voir comment cet ensemble de sous-programme est organisé; de façon à réaliser un calcul effectif. Nous verrons ensuite comment les informations, graphiques et analytiques, qu'ils utilisent ont été codées et rangées en mémoire.

IV - 1 - 1 - Description et organigramme général -

Reprenons les différentes phases de l'établissement de la formule d'un élément de matrice; comme dans tous les programmes, il s'en ajoute ici deux autres: la lecture ou décodage des données et l'impression des résultats. Finalement le travail du programme se divise en 4 parties :

- le décodage des données et le codage graphique en mémoire : ces deux opérations ne se distinguent pas l'une de l'autre, en pratique.
- l'intégration des graphes constituant les éléments de matrice indiqués dans les données.
- la résolution du ou des graphes obtenus à l'aide des opérations de fermeture, simplification, coupure puis leur interprétation sous forme de coefficients \sum_{n-j} .
- enfin l'impression des résultats.

L'organigramme A représente la structure générale du programme : les rectangles contiennent les principales opérations réalisées par le programme; en face de chacune d'elles se trouvent les noms des principaux sous-programmes utilisés (et de leurs propres sous-programmes précédés d'un tiret); les petits losanges corres-

pendent à des aiguillages dépendant d'un test; le carré indique la fin de la boucle sur les éléments de matrice; enfin les cercles numérotés permettent le passage d'une page à l'autre.

L'organigramme A suit à peu près le plan ci-dessus : un certain nombre de bras et d'opérateurs sont d'abord lus, codés et rangés en mémoire; ensuite les ket sont à leur tour lus, codés et rangés; mais après la lecture de chacun d'eux, le programme établit les formules de tous les éléments de matrice que la connaissance de ce ket rend possible (on ne range ainsi qu'un seul ket à la fois).

Le rôle des sous-programmes cités dans A est donné dans le tableau IV - 1. On voit que chaque sous-programme a une fonction bien déterminée (il en existe encore une quinzaine d'autres, remplissant des fonctions mineures). Sauf quelques cas particuliers, tous ces sous-programmes sont indépendants les uns des autres; ils communiquent entre eux par l'intermédiaire d'une zone commune de la mémoire (en Fortran: zone COMMON) à laquelle ils ont presque tous accès et qui contient les deux types d'information importants du programme :

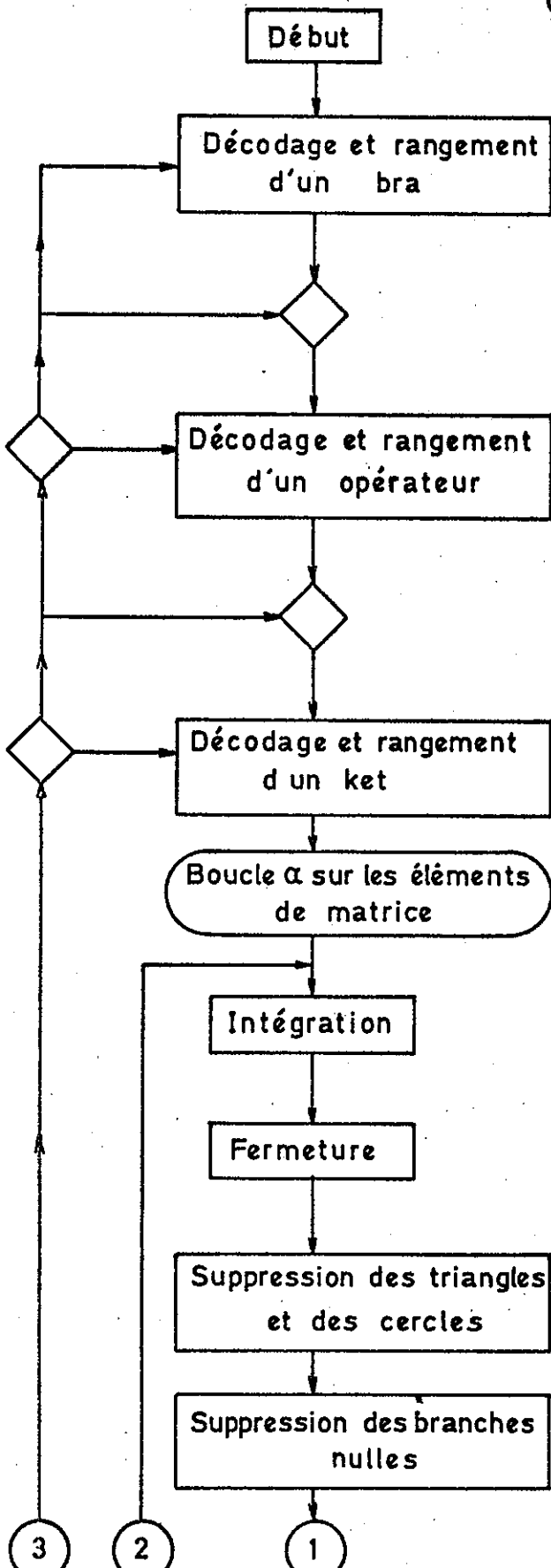
- la description des graphes présents dans la mémoire
- le contenu des formules en cours d'établissement.

Cette écriture "modulaire" permet une grande souplesse d'utilisation : on peut comparer cet ensemble à un langage dont les sous-programmes seraient les "mots"; suivant le but recherché, on peut les assembler de manière différente et réaliser un programme principal bien adapté au cas choisi : le programme principal que nous avons écrit n'est qu'une possibilité parmi d'autres; on pourrait par exemple réaliser un programme de construction systématique des graphes des coefficients $\sum n - j$ et d'établissement de leurs formules; on pourrait aussi écrire un programme de simplification d'une formule par construction et résolution du graphe correspondant; etc... (dans certains cas, le "langage" devrait s'enrichir de quelques "mots").

Les sous-programmes qui constituent SUPRAC peuvent être classés en plusieurs catégories :

Organigramme A

Organigramme général de SUPRAC



BRAKET : (option Bra)

- NSPDF
- SPLG
- TERMLS

ØPER :

- NSPDF
- SPLØP
- SYSTW

BRAKET : (option Ket)

- NSPDF
- SPLG
- TERMLS

SEPAR :

- SEPCH

INTEGR :

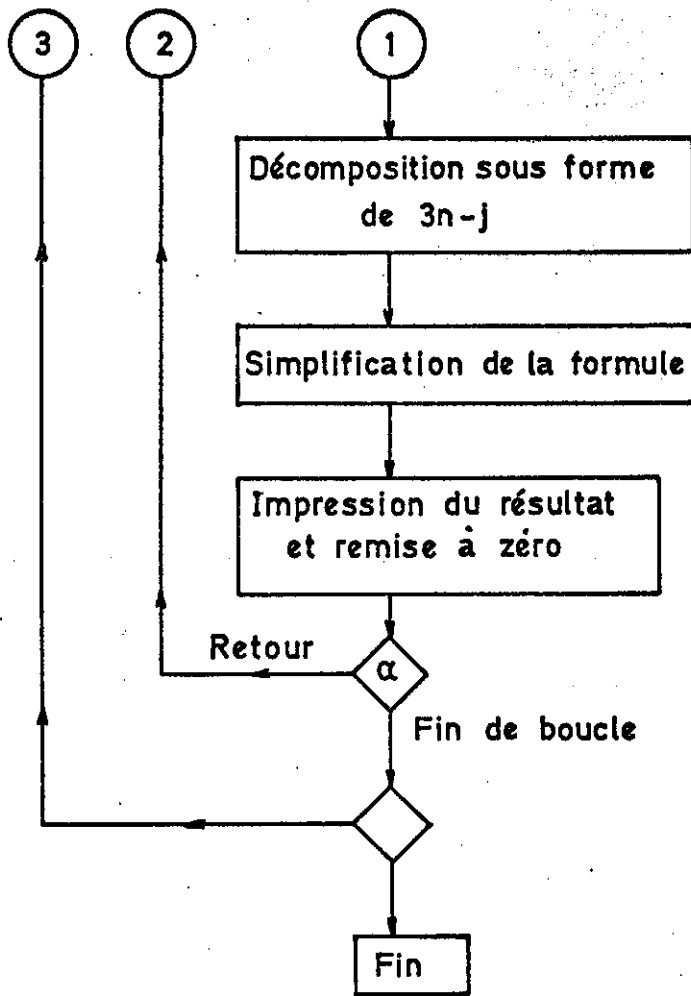
FERMER :

JUCYS :

- SUPTRI
- CERMAR

RECHO :

- SUPRO



DECOMP :

- CØUPUR
- CØUPØ
- FØRMUL
- SEPGR

SIMPL :

ERRSUP :

EFFRS :

TABLEAU IV - 1

LISTE DES PRINCIPAUX SOUS-PROGRAMMES

BRACKET	:	Décodage d'un bra ou d'un ket.
CERMAR	:	Suppression d'un noeud circulaire.
CØUPUR	:	Recherche et réalisation de la meilleure coupure d'un graphe.
CØUPO	:	Recherche et réalisation d'une coupure suivant 0 branches, dans un graphe dont on ignore qu'il est déjà constitué de deux graphes séparés.
DECØMP	:	Décomposition d'un graphe en coefficients $3 n - j$.
EFFRS	:	Remise à zéro des mémoires où est rangée la formule.
ERRSUP	:	Impression des résultats.
FERMER	:	Fermeture d'un graphe.
FØRMUL	:	Interprétation du graphe d'un coefficient $3 n - j$.
INTEGR	:	Intégration des graphes d'un bra, d'un ket et d'un opérateur éventuellement.
JUCYS	:	Transformation d'un graphe en graphe de Jucys par suppression des triangles et des cercles.
NSPDF	:	Décodage du nom d'un électron.
ØPER	:	Décodage d'un opérateur.
RECHO	:	Recherche des branches nulles d'un graphe.
SEPAR	:	Préparation des graphes du bra et du ket pour leur intégration.

SEPCH : Numérotation des points d'entrée d'une chaîne.

SEPGR : Séparation effective de deux graphes (utilisé après CØUPUR et CØUPO).

SIMPL : Simplification de la formule.

SPLG : Décodage d'un groupe de nombres quantiques.

SPLØP : Décodage des rangs d'un opérateur.

SUPRO : Suppression d'une branche nulle.

SUPTRI : Suppression d'un noeud triangulaire.

SYSTW : Construction du graphe d'un opérateur élémentaire w .

TERMLS : Décodage d'un terme écrit en notation spectroscopique.

a) les programmes de décodage :

Ces programmes ont été écrits de façon à donner une très grande souplesse à l'écriture des données de SUPRAC. Prenons l'exemple du paragraphe III-2-1. Voici quel serait le contenu, perforé effectivement, de la carte donnée :

((3D4 : S1,L1;4F)S,L,J,MJ/W(1.1)(4F,4F)/(3D4 : S'1,L'1;4F)S',L',J',MJ') \$.

On voit que les différences avec l'écriture mathématique ordinaire ne sont pas grandes : la valeur des moments angulaires des électrons a été précisée; tout est écrit sur une seule ligne et en majuscules; enfin, un nombre réduit de signes conventionnels, faciles à retenir, permet au programme de savoir où il se trouve dans l'élément.

Nous avons rencontré, dans l'écriture de ces programmes, les mêmes problèmes, mais à une échelle beaucoup plus petite, que ceux rencontrés dans l'écriture d'un programme de traduction d'un langage symbolique (compilateur). Nous avons été amenés à définir la grammaire du langage employé; elle nous a servi à écrire le mode d'emploi détaillé du programme (à la fois "vocabulaire" et "manuel de syntaxe"); elle nous a aussi servi à mieux tester les erreurs de données.

En effet, une des caractéristiques de ce type de programmes est le très grand nombre de tests nécessaires au "filtrage" des données : chaque suite de caractères ou de mots donnés est comparé aux règles de syntaxe du langage et le programme s'arrête, en imprimant un diagnostic, s'il trouve une différence. Nous en verrons un exemple au paragraphe IV-2-1-.

b) les programmes de traitement graphique :

Ces programmes sont ceux qui utilisent et modifient les graphes en mémoire; ils réalisent les opérations d'intégration, de fermeture, de coupure et quelques autres moins importantes; ce sont en général des programmes longs et complexes.

L'écriture de chacun de ses programmes a posé des problèmes spéciaux; nous en verrons un exemple avec le début du sous-programme CØUPUR (§ IV-2-2-). Mais la

simplicité de leur écriture et de leur mise au point dépend essentiellement des différents modes de représentation des graphes en mémoire.

c) les programmes de rangement des éléments de la formule :

Le rangement dans la formule d'un facteur supplémentaire est en général effectué par les programmes de la catégorie précédente eux-mêmes. Par exemple, le programme de changement de sens d'une branche j rajoute lui-même le facteur $(-)^{2j}$ à la formule.

Cependant il existe quelques programmes spécialisés dans cette fonction : pour les facteurs delta et pour les coefficients $3n - j$. Ce dernier programme (nommé FORMUL) est plus compliqué; en effet, il est chargé d'identifier et de ranger de la façon la plus simple possible les $3n - j$. Nous l'étudierons plus en détail au paragraphe IV-2-3.

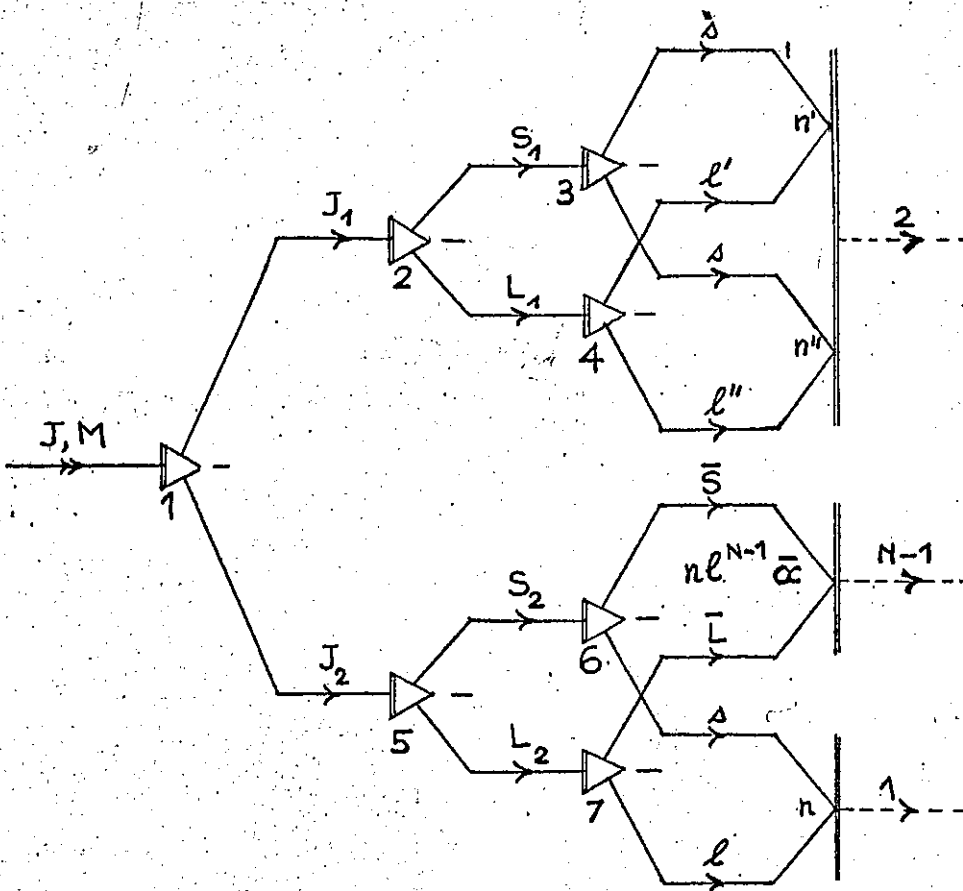
d) les programmes d'utilisation de la formule :

Deux programmes de ce groupe sont importants :

- le programme de simplification de la formule (nommé SIMPL); son rôle est, par exemple, de supprimer les facteurs de phase égaux à 1 $((-)^{4j}$ par exemple), de calculer explicitement les coefficients entièrement numériques, etc...
- le programme d'impression ERRSUP dont le rôle sera précisé plus loin.

Une autre façon de classer les sous-programmes de SUPRAC consiste à distinguer la nature des liens qui les unissent au reste du programme :

- la première catégorie comprend les sous-programmes chargés d'une fonction longue ou difficile; ils utilisent quelques sous-programmes pour des problèmes limités; ce sont en général des sous-programmes importants (plusieurs centaines d'instructions environ). On trouve dans cette catégorie



G^1
IV.1

- des sous-programmes comme SPLG, SPLØP, CØUPUR, FØRMUL, ERRSUP, etc...
- dans la seconde catégorie nous classons le programme principal et des sous-programmes du type BRAKET, DECØMP, JUCYS, etc... . Leur fonction est vaste et pour l'exécuter ils font de nombreux appels aux sous-programmes de la première catégorie; certains sont même seulement constitués d'une suite d'appels. Ils sont en général de taille moyenne.
 - enfin la troisième catégorie est constituée des petits sous-programmes dont le rôle est très limité, même s'il est logiquement complexe et qui n'ont pas eux-mêmes de sous-programmes. Nous en ferons une étude un peu plus détaillée au paragraphe IV-2-4.

Voyons maintenant sous quelle forme est codée l'information utilisée par la plupart de ces programmes : commençons par les graphes.

IV - 1 - 2 - Codage des graphes en mémoire -

Considérons le graphe G^1 , dans lequel nous n'avons indiqué, sur les lignes d'espace, que le nombre d'électrons auxquels elles correspondent; cette information est en effet suffisante pour appliquer les règles d'intégration du chapitre III .

Ce graphe contient 5 catégories d'éléments :

- les branches
- les noeuds
- les points d'entrée
- les chaînes
- les électrons (où plutôt les noms différents d'électrons).

Une manière condensée de décrire ce graphe pourrait être, par exemple, de dresser la liste des noeuds et des chaînes du graphe et d'indiquer pour chacun d'eux ses caractéristiques; on pourrait par exemple donner :

- pour chaque noeud :

- son genre : triangulaire, circulaire ou polaire
- le nom et le sens de ses branches ainsi que leur ordre de lecture (ou signe du noeud) et la nature du tiret par lequel elles sont reliées au noeud (sauf pour les noeuds polaires)

- pour chaque chaîne :

- le nombre d'électrons
- les points d'entrée qui la constituent, leur ordre et, pour chacun d'eux, le nom et le nombre de ses électrons et le nom de ses branches.

Cette description contient toute l'information du graphe; elle est donc à priori suffisante pour un programme. Mais nous allons voir qu'elle conduit à des programmes beaucoup plus compliqués et beaucoup plus lents que la description que nous avons choisie et que nous indiquerons ensuite.

Supposons que nous voulions connaître les numéros des 3 noeuds entourant le noeud 5 (c'est le genre de questions que le programme se pose fréquemment). Nous devons, si nous utilisons la description ci-dessus, parcourir, pour chacune des 3 branches du noeud 5, l'ensemble des 7 noeuds du graphe et comparer, pour chacun d'eux, le nom ou le numéro des 3 branches qui l'entourent à ceux des branches du noeud 5; ceci suppose de plus que le noeud 5 est entouré de 3 noeuds. Dans le cas général, il faut en plus parcourir les chaînes, puis les points d'entrée, et déduire d'une absence de résultat que la branche est libre. Le nombre d'opérations à réaliser est donc déjà important pour une fonction encore très simple.

Nous avons donc choisi un autre mode de représentation, redondant mais beaucoup plus commode et rapide d'emploi que le précédent. Pour chaque graphe, nous dressons les listes des cinq catégories d'éléments qui le constituent; pour chaque élément nous donnons ses propres caractéristiques ainsi que les numéros de tous ceux avec lesquels il a un lien quelconque. Nous donnons comme exemple, dans le tableau IV-2, le codage mémoire du graphe G^1 . Le même problème que ci-dessus (quels sont les numéros des 3 noeuds entourant le noeud 5) reçoit une solution beaucoup plus

TABLEAU IV - 2

REPRESENTATION CODEE EN MEMOIRE DU GRAPHE G_{IV-1}^1

Branches : Nombre : 15

	<u>Nom</u> :	<u>Venant de</u> :	<u>Allant vers</u> :
1	J M	libre; flèche double	noeud 1; double tiret
2	J_1	noeud 1	noeud 2; double tiret
3	S_1	noeud 2	noeud 3; double tiret
4	L_1	noeud 2	noeud 4; double tiret
5	$\frac{1}{2}$	noeud 3	point 1
6	l'	noeud 4	point 1
7	$\frac{1}{2}$	noeud 3	point 2
8	l''	noeud 4	point 2
9	J_2	noeud 1	noeud 5; double tiret
10	S_2	noeud 5	noeud 6; double tiret
11	\bar{S}	noeud 6	point 3
12	$\frac{1}{2}$	noeud 6	point 4
13	L_2	noeud 5	noeud 7; double tiret
14	\bar{L}	noeud 7	point 3
15	l	noeud 7	point 4

Noeuds : Nombre : 7

Genre : Branches (+ sortante; - rentrante)
(l'ordre indique le sens de lecture):

1	Triangle	- 1	+ 2	+ 9
2	Triangle	- 2	+ 3	+ 4
3	Triangle	- 3	+ 5	+ 7
4	Triangle	- 4	+ 6	+ 8
5	Triangle	- 9	+ 10	+ 13
6	Triangle	- 10	+ 11	+ 12
7	Triangle	- 13	+ 14	+ 15

Points d'entrée : Nombre : 4

Electrons

	Nombre	Numéro	Chaîne	Branches
		(dans la liste ci-dessous)		
1	1	2	1	5 6
2	1	3	1	7 8
3	N-1	1	2	11 14
4	1	1	3	12 15

<u>Chaînes</u> :	Nombre :	3	Points d'entrée		
	Nombre d'électrons		Nombre	Numéros	
1	2		2	1	2
2	$N - 1$		1	3	
3	1		1	4	

<u>Electrons</u> :	Nombre :	3	Points d'entrée		
	Nom		Nombre	Numéros	
1	$n\ell$		2	3	4
2	$n'\ell'$		1	1	
3	$n''\ell''$		1	2	

rapide : dans la liste des noeuds, on trouve les numéros des 3 branches entourant le noeud 5 : 9, 10 et 13; dans la liste des branches, on cherche, pour chacune d'elles, la nature et le numéro de l'extrémité qui n'est pas le noeud 5 : on trouve les noeuds 1, 6 et 7.

Un autre avantage très important de ce mode de représentation se trouve dans les possibilités de vérification. En effet, la redondance des informations permet de tester sans arrêt la cohérence des résultats : si, dans l'exemple précédent, une des 3 branches 9, 10 ou 13 n'a pas le noeud 5 parmi ses extrémités, on a détecté une erreur et le programme doit s'arrêter. Ce type de vérification, abondamment utilisé dans SUPRAC, sert à détecter non seulement les erreurs de programme, en particulier au cours de la mise au point, mais aussi certaines erreurs de données qui n'auraient pas été filtrées au cours des tests de décodage.

Le seul inconvénient de cette représentation est la place occupée en mémoire; on est, en effet, obligé, en FORTRAN, de réserver la même place pour tous les graphes petits ou grands, sauf au prix d'une complication trop importante du programme. Mais nous n'avons pas été gênés par cette limite puisque nous avons pu réserver la place d'une quinzaine de graphes ayant une centaine de branches, une soixantaine de noeuds, etc... au maximum.

Voyons maintenant le second type d'informations dont se servent presque tous les sous-programmes : le contenu des formules.

IV - 1 - 3 - Codage d'une formule en mémoire -

Une formule se présente de manière générale sous la forme suivante :

$$\sum_{\Psi_1} \sum_{\Psi_2} \dots \sum_{\Psi_n} (-)^{J_1+J_2+\dots} a\sqrt{b/c} [J_3]^{\alpha_3} \dots \left\{ \begin{matrix} J_4 & J_5 & J_6 \\ J_7 & J_8 & J_9 \end{matrix} \right\} \dots \quad (\text{IV-1-1})$$

Elle est constituée d'une ou plusieurs sommes imbriquées les unes dans les autres, de produits de facteurs : facteurs de phase, numériques, coefficients crochets, $6 - j$, $3 - jm$, $3n - j$, etc...

Au cours d'un calcul, une formule est peu à peu construite par le programme au fur et à mesure de la résolution des graphes correspondants. Ses divers éléments sont indépendants les uns des autres.

La représentation en mémoire est par conséquent assez simple : on dresse la liste des différents éléments de la formule et on range, pour chaque catégorie d'éléments, leur nombre et leur contenu littéral. Si, par exemple, une formule est seulement constituée par les deux coefficients $6 - j$:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} S & L & J \\ L' & S' & 1 \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{array} \right\}$$

on range en mémoire :

- le nombre de $6 - j$: 2
- les noms des variables qui les caractérisent : S, L, J, L', S', 1, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, S, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 1.
Les valeurs numériques constantes sont considérées ici comme des noms de variables et sont rangés sous forme alphanumérique.
- le nombre d'éléments dans les autres catégories : 0 pour chacune.

Pour simplifier nous avons choisi, pour les sommations, la forme (1), où tous les facteurs de la formule sont considérés comme internes à la somme la plus interne. Ce n'est pas difficile de sortir des sommes, à la main, les facteurs qui n'en dépendent pas. Les sommations peuvent ainsi être représentées comme les autres éléments de la formule : on range les $n \Psi_i$, qui les caractérisent, indépendamment du reste de la formule.

Une question se pose maintenant : comment représente-t-on des facteurs du type :

$$(-)^{2L} \quad \text{ou} \quad (-)^{4J} \quad \text{ou} \quad \left[\frac{1}{2} \right] \quad \text{etc...} \quad (\text{IV-1-2})$$

qui peuvent se simplifier? Nous avons vu qu'il existe un sous-programme spécialement chargé de ce genre de simplification (SIMPL). Afin de gagner du temps et de rassembler toutes les opérations de simplification dans le même sous-programme, on

accumule, tant qu'il y a de la place en mémoire, tous les facteurs y compris ceux du type (2) et un appel de SIMPL à la fin du calcul transforme ces derniers en coefficients numériques plus simples. Toutefois, si la place réservée à la formule est trop petite, SIMPL peut être appelé en cours de calcul afin de rendre de nouveau disponible une partie de la mémoire utilisée.

De la même manière que pour les graphes, le programme réserve de la place en mémoire pour plusieurs formules à la fois. Cependant, l'une d'entre elles est privilégiée : celle qui est en cours d'élaboration. L'accès aux autres formules ne peut avoir lieu qu'à travers des programmes spéciaux d'impression ou de recopie.

Nous venons de voir la conception d'ensemble du programme. D'une manière générale, nous avons fait un effort pour rendre cohérents les différentes parties du programme afin de faciliter d'une part la mise au point du programme et de permettre d'autre part la construction d'autres versions.

Nous allons maintenant étudier quelques programmes ou sous-programmes caractéristiques, en entrant beaucoup plus dans le détail de la programmation.

IV - 2 - DESCRIPTION DE QUELQUES SOUS-PROGRAMMES -

Comme nous l'avons annoncé, nous avons choisi de décrire plus en détail un programme de chacune des catégories décrites ci-dessus :

- décodage : nous allons décrire l'organigramme détaillé du programme principal, qui décode la structure générale des données.
- traitement graphique : nous allons étudier la première partie de CØUPUR qui traite de la recherche des coupures minimales.
- rangement des éléments de la formule : nous allons examiner le problème graphique, partiellement résolu dans FØRMUL, concernant l'identification des coefficients $3n - j$.

- petits sous-programmes : nous allons en donner une classification et décrire plus précisément l'un d'entre eux : le sous-programme LECCAR.

Le cas du programme ERRSUP, exemple de programme d'utilisation de la formule, sera vu, d'une manière plus rapide, au paragraphe IV-3.

IV - 2 - 1 - Programme principal -

Nous avons vu dans l'organigramme A (§ IV-1-1) que le programme principal possède deux rôles bien différents : le décodage des bra, ket et opérateurs et leur rangement en mémoire d'une part, l'intégration et la résolution des graphes des différents éléments de matrice désirés d'autre part. C'est essentiellement à la première partie du rôle de ce programme que nous allons nous intéresser ici, à titre d'exemple de programme de décodage des données.

Nous allons d'abord examiner plus attentivement le format des données. Ce format est différent de celui habituellement utilisé en FORTRAN : il est en effet totalement libre, c'est à dire que les données représentant un bra, un opérateur ou un ket sont perforées sur les cartes sans qu'aucune colonne soit imposée; les espacements et les changements de cartes sont libres; seul l'ordre dans lequel on perforé les informations garde un sens pour le programme. Ceci est obtenu grâce à un sous-programme spécial (LECCAR)(cf. § IV-2-5) qui lit chaque carte comme une suite de 80 caractères, puis interprète et regroupe ces caractères sous forme de mots; à chaque appel de LECCAR, on recueille ainsi un mot dont le contenu oriente les choix du programme appelant. Nous allons en voir plusieurs exemples ci-dessous.

Auparavant, examinons les différentes formes que peuvent prendre les données de SUPRAC. La forme générale est la suivante :

$$E + E + \dots \$ \quad (IV-2-1)$$

où E peut prendre une des 14 formes données dans le tableau IV-3. Ces formes permettent un grand nombre de combinaisons de bra, de ket et d'opérateurs :

TABLEAU IV - 3

DONNEES DE SUPRAC

Forme générale : $E + E + \dots$

Formes autorisées de E :

- 1) $(B / O / K)$
- 2) $[(B / + (B / + \dots)] O / K)$
- 3) $(B / [O + O + \dots] / K)$
- 4) $(B / O [/ K) + / K) + \dots]$
- 5) $[(B / O + (B / O + \dots)] / K)$
- 6) $(B / [O / K) + O / K) + \dots]$
- 7) $[(B / + (B / + \dots O / K) + / K) + \dots]$
- 8) $[(B / + (B / + \dots)] [O + O + \dots] / K)$
- 9) $[(B / + (B / + \dots)] O [/ K) + / K) + \dots]$
- 10) $(B / [O + O + \dots] [/ K) + / K) + \dots]$
- 11) $[(B / + (B / + \dots)] [O + O + \dots] [/ K) + / K) + \dots]$
- 12) $[(B / O + (B / O + \dots)] [/ K) + / K) + \dots]$
- 13) $[(B / + (B / + \dots)] [O / K) + O / K) + \dots]$
- 14) $[(B / + (B / + \dots [O + O + \dots] / K) + / K) + \dots]$

B : Bra

O : Opérateur

K : Ket

Les sommes se terminant par des points de suspension ont un nombre quelconque de termes (≥ 1).

- la forme 1 est un élément de matrice ordinaire, sans aucune mise en facteur
- dans les formes 2, 3, 4, 8, 9, 10 et 11, les crochets jouent le rôle habituel des parenthèses : toutes les combinaisons possibles doivent être prises en considération.
- dans les formes 5, 6, 7, 12, 13 et 14, on se limite à certaines combinaisons; par exemple, dans la forme 5, les bra et les opérateurs vont ensemble et seul le ket est en facteur. Dans les formes 7 et 14, ce sont le ou les opérateurs qui sont en facteur; les bra et les ket se correspondent deux à deux.

Le rôle de décodage du programme principal consiste à reconnaître, à l'aide des signes crochets, parenthèses, etc... quelles formes à choisi l'utilisateur et à ranger en conséquence les bra, les opérateurs et les ket; il doit ensuite savoir les retrouver pour construire les éléments de matrice désirés. Il doit de plus "filtrer" toutes les erreurs possibles de l'utilisateur et sortir en erreur s'il en trouve une.

Nous allons voir, dans l'organigramme détaillé B ; la manière dont ceci est réalisé. Le programme commence par l'initialisation des variables suivantes :

- NBRA, NØP, NKET sont respectivement le nombre de bra, d'opérateurs et de ket décodés dans l'élément E en cours de lecture (cf. formule (1)).
- GENRE distingue certaines des formes du tableau IV-3 :
 - = 1 : formes 5 et 12
 - = 2 : formes 6 et 13
 - = 3 : formes 7 et 14
 - = 0 : toutes les autres formes .
- NGR0 est le nombre de places de graphes occupées en mémoire ; on réserve 5 places au départ qui servent au calcul des éléments eux-mêmes. Les placés suivantes servent au rangement des bra et des opérateurs.

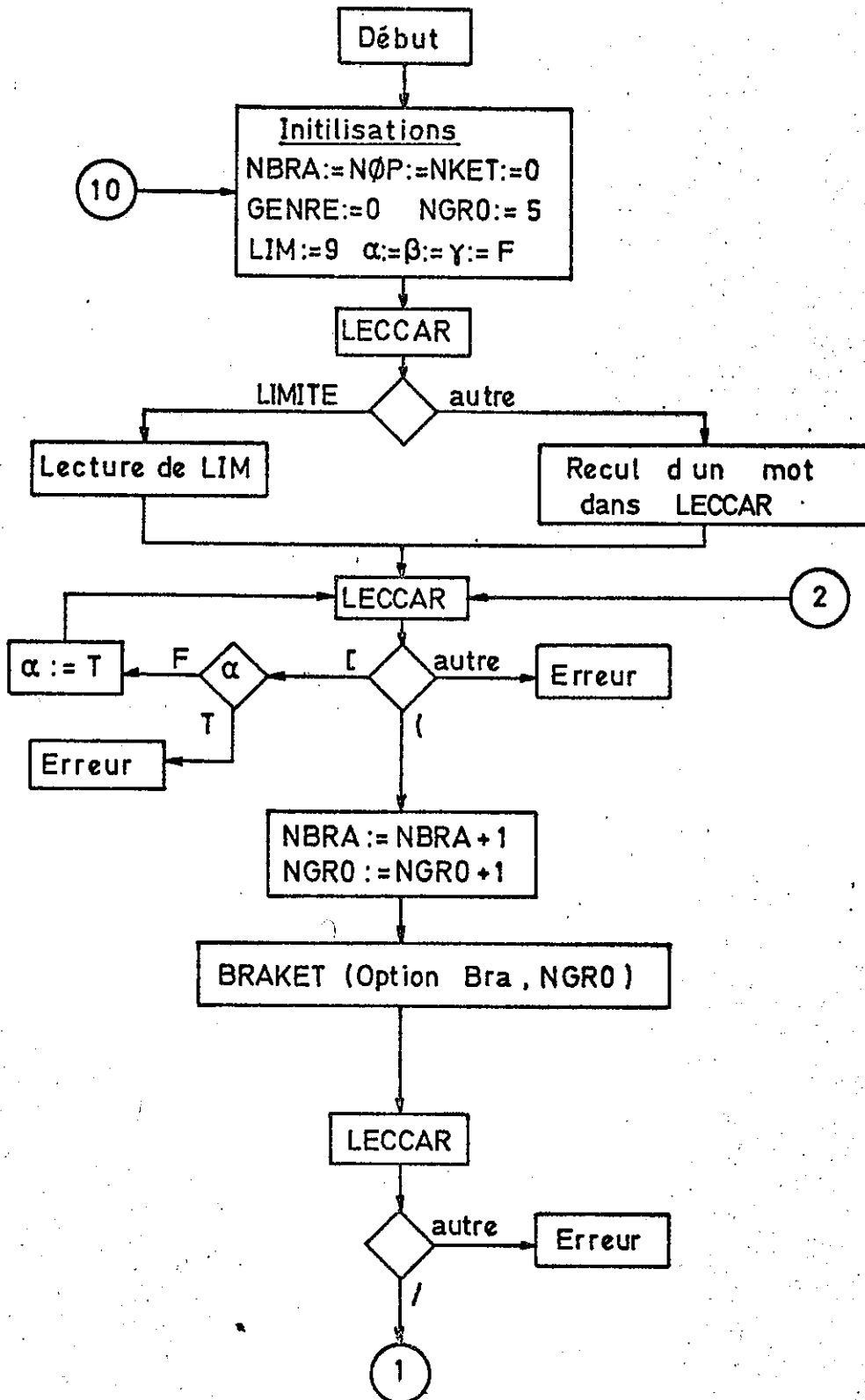
- LIM indique le rang maximum des $3n - j$ autorisés dans la formule finale.
- α , β , γ sont des variables logiques qui prennent la valeur T (True) si on se trouve à l'intérieur de crochets :
 - α : crochets commençant par des bra (2,5,7,8,9,11,12,13,14)
 - β : crochets commençant par des opérateurs (3,6,8,10,11,13,14)
 - γ : crochets commençant par des ket (4,9,10,11,12).

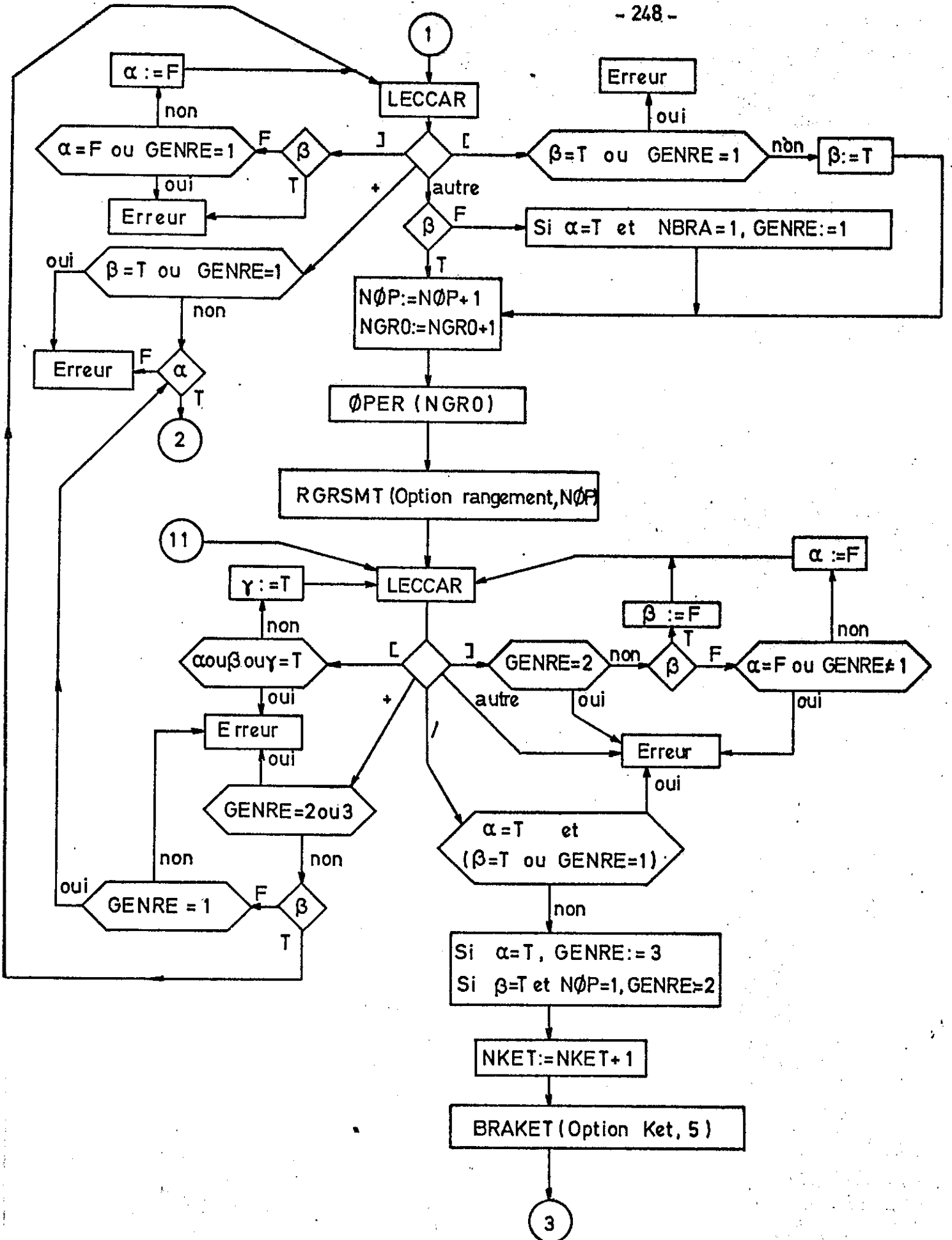
On trouve ensuite deux appels successifs de LECCAR. Le premier sert éventuellement à charger une nouvelle valeur de LIM. Le second lit le ou les caractères qui précèdent un bra : ce ne peut être qu'un crochet ouvrant qui provoque $\alpha := T$ ou une parenthèse ouvrante qui débute le bra lui-même. Celui-ci est décodé et rangé à la place NGRO, incrémenté de 1, par le programme BRAKET. Un appel de LECCAR lit la barre qui termine le bra. Un autre appel de LECCAR interprète les caractères suivants; on peut revenir alors sur la lecture d'un autre bra (+), fermer les crochets α et relire un caractère, ouvrir des crochets β ou enfin lire directement un opérateur. Ceci est réalisé par \emptyset PER qui place le graphe correspondant à la place suivante en mémoire (NGRO est incrémenté de 1). Le facteur de phase qui accompagne éventuellement le graphe de l'opérateur (produit scalaire) constitue le début d'une formule qui est rangée par RGRSMT dans une des places disponibles (cf. § IV-1-3). Un nouvel appel de LECCAR permet, selon les cas de revenir sur la lecture d'un bra, d'un opérateur, d'un autre caractère jusqu'à la lecture d'une barre débutant un ket. Celui-ci est encore interprété par BRAKET mais placé à la place 5 (on n'a toujours qu'un seul ket à la fois en mémoire).

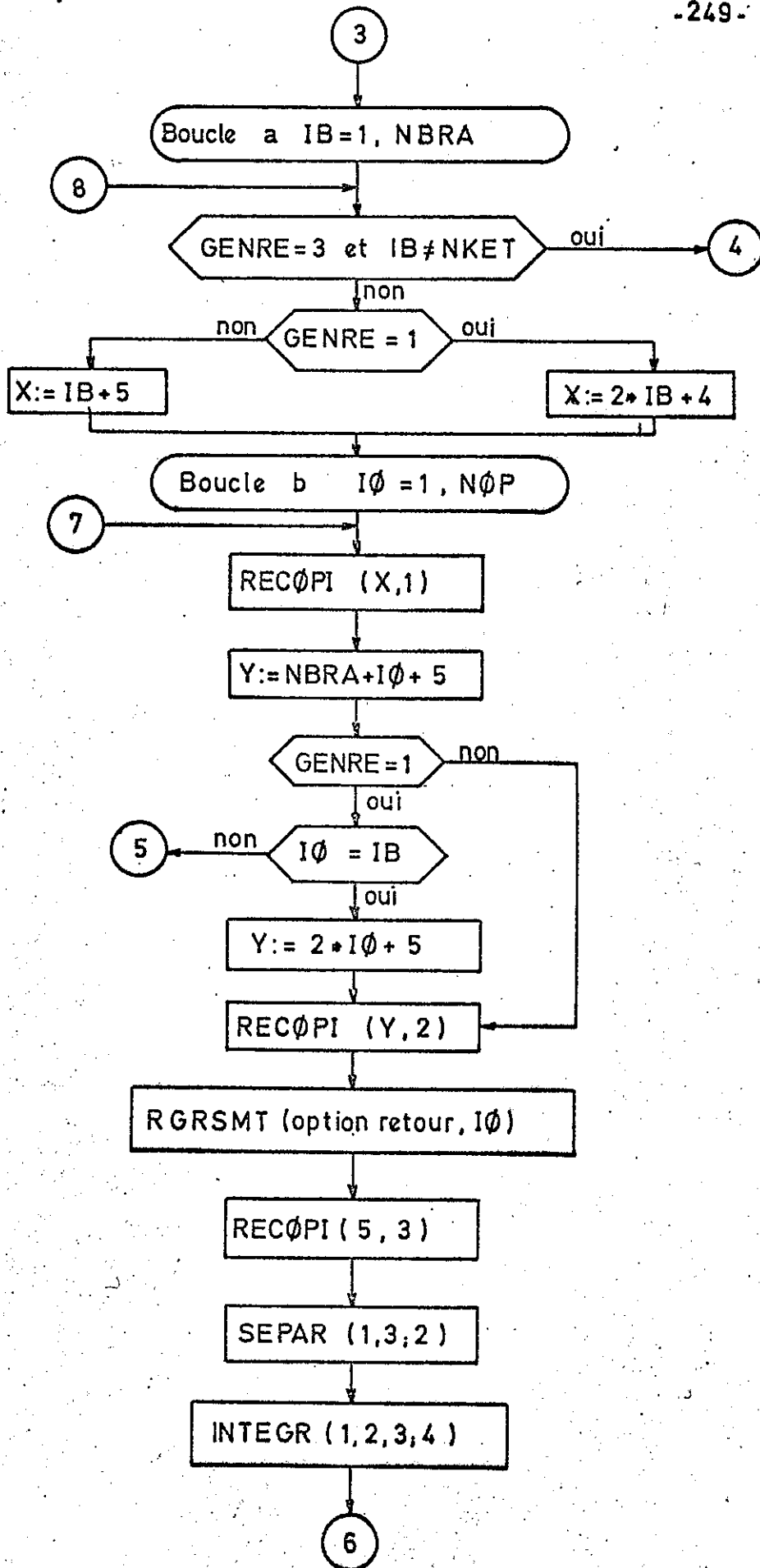
C'est alors que débutent les deux boucles a et b qui décrivent respectivement les bra et les opérateurs présents en mémoire. Pour chaque élément de matrice, le bra est recopié de la place X à la place 1, l'opérateur de la place Y à la place 2 et le ket de la place 5 à la place 3 : les graphes sont modifiés par les programmes d'intégration aux places 1, 2, 3 mais restent intacts pour les éléments de matrice suivants aux places X, Y, 5. SEPAR et INTEGR préparent et réalisent l'intégration dont le résultat se trouve à la place 4. Ensuite une option spéciale

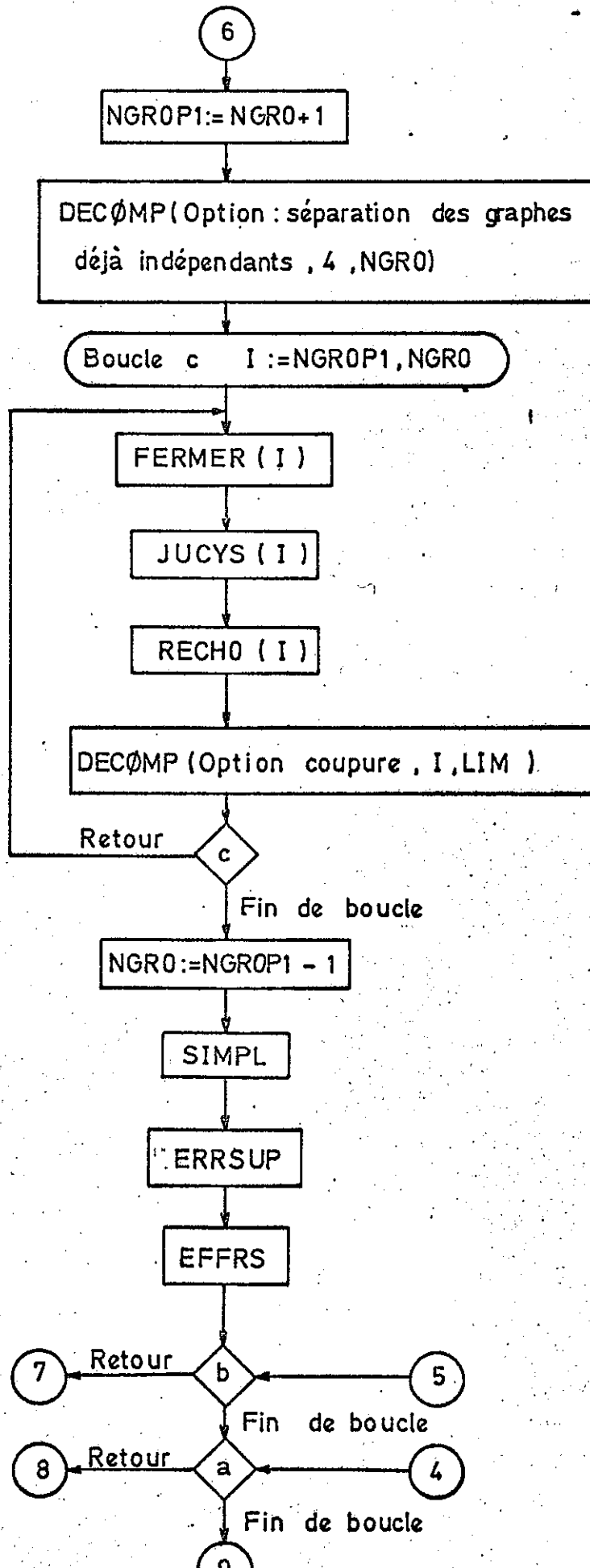
Organigramme B

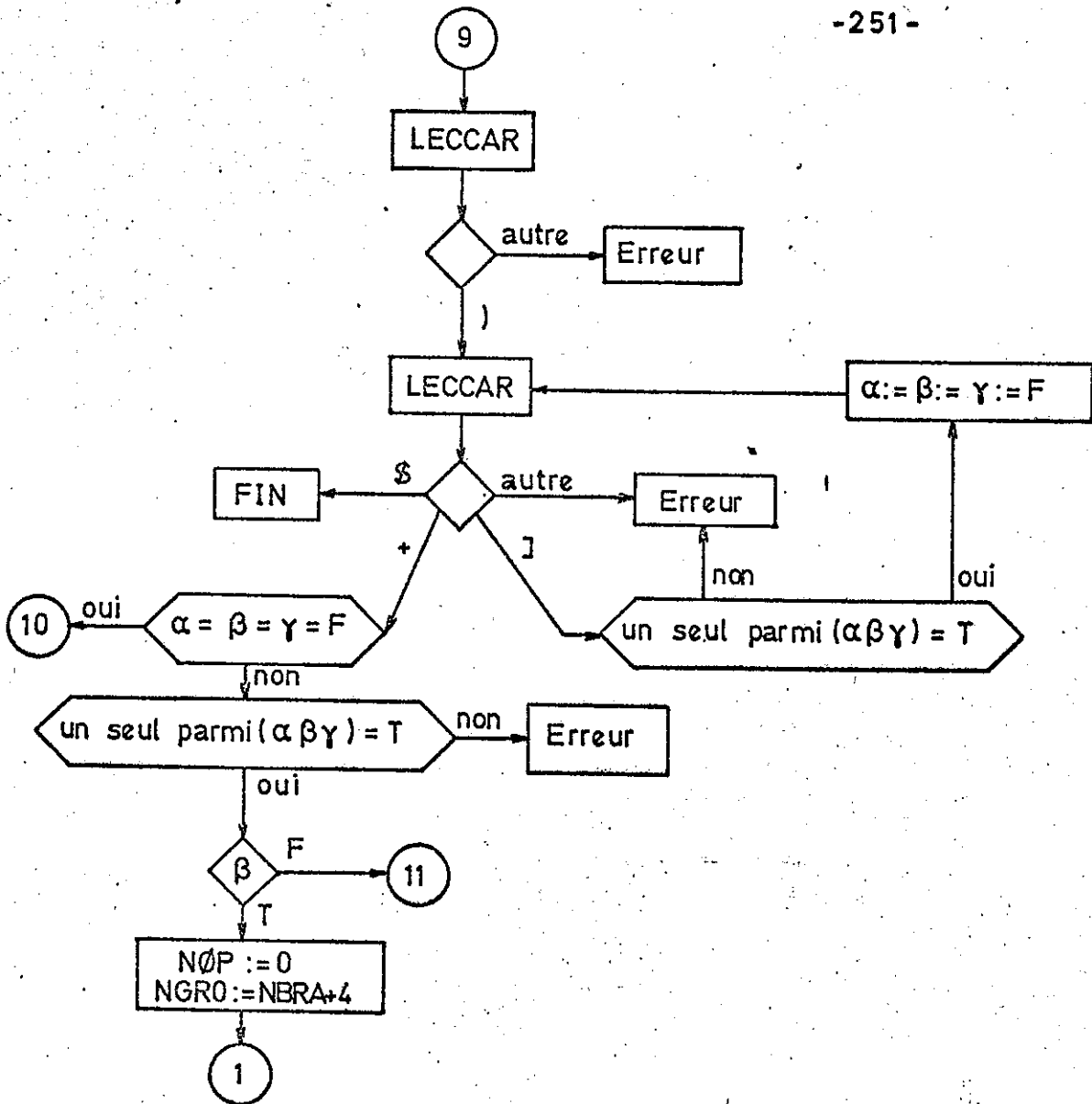
Organigramme détaillé du programme principal



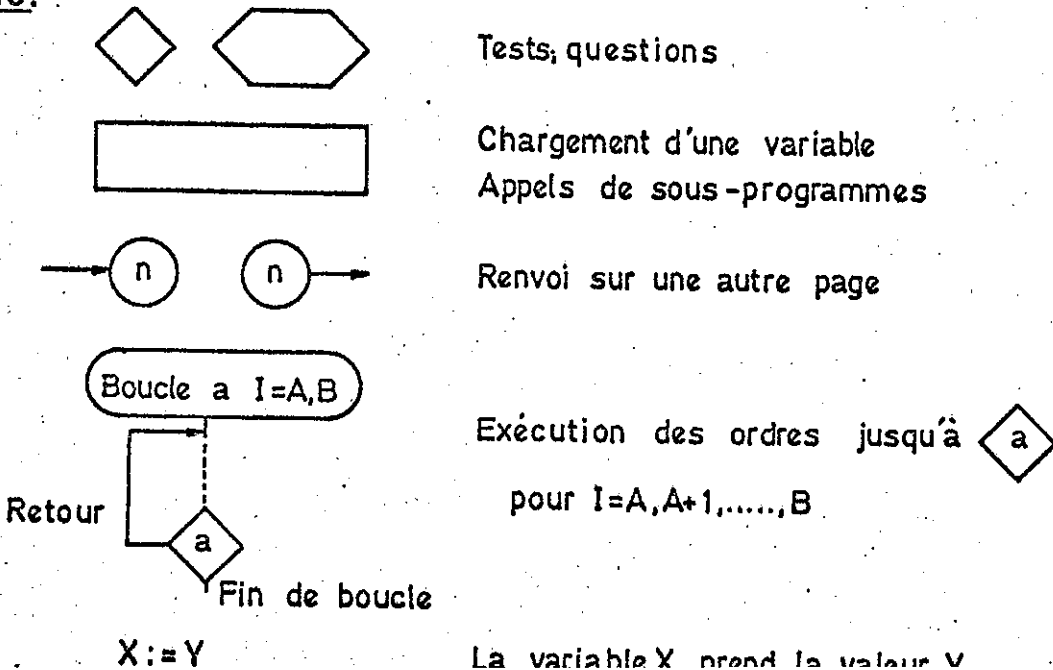








Légende:



de DECØMP permet de séparer, s'il y a lieu, le graphe 4 en plusieurs graphes (cas de la séparation totale des deux plans de spin et d'orbite); ces graphes sont placés à partir de la place NGROP1 jusqu'à NGRO incrémenté d'autant. Chacun des graphes obtenus est alors résolu indépendamment; DECØMP utilise cette fois CØUPUR et FORMUL pour transformer complètement le graphe I en une partie de la formule. NGRO est ramené à sa valeur initiale, puis la formule est simplifiée et imprimée et ses compteurs sont remis à zéro (EFFRS). Lorsque ce travail est réalisé pour tous les éléments de matrice utilisant le ket présent en mémoire (place 5), un autre appel de LECCAR permet, selon les cas, de reprendre l'organigramme soit au début (retour par 10) soit à la lecture d'un nouvel opérateur ou d'un nouveau ket, ou bien de terminer l'exécution (\$).

Il faut remarquer dans cet organigramme la très grande quantité de tests destinés à ne pas laisser à l'utilisateur la possibilité d'une seule erreur de "syntaxe" des données. Ceci est tout à fait caractéristique des programmes de décodage. D'autre part, on voit mieux maintenant le rôle que jouent les différentes places réservées en mémoire pour les graphes et pour les formules.

Passons maintenant à un sous-programme particulier (CØUPUR) pour lequel nous avons dû résoudre un problème de programmation original.

IV - 2 - 2 - Sous-programme CØUPUR -

Etant donné un graphe de Jucys, ouvert ou fermé, le sous-programme CØUPUR est chargé de trouver soit une coupure suivant 3 branches ou moins, soit les coupures suivant le nombre minimal de branches; dans ce cas, il doit choisir la meilleure et dans tous les cas l'effectuer, c'est à dire créer les sommes, les noeuds et les branches nécessaires.

Nous nous intéressons seulement ici à la première partie : la recherche des coupures, en nous limitant au cas d'un graphe fermé. Nous avons vu au paragraphe III-1-4-1 que cette recherche doit être systématique, afin d'être sûr de trouver toutes les coupures suivant le nombre minimal de branches. Le nombre

d'essais pouvant être très grand il faut trouver un algorithme qui compte de façon très rapide le nombre de branches coupées; d'autre part, il faut savoir décrire toutes les combinaisons de 2, 3, ... n noeuds possibles : ce problème se ramène à l'écriture d'une série de boucles imbriquées dont le nombre est variable.

Ceci est résolu dans l'organigramme C, qui décrit le début du sous-programme CØUPUR. La signification des variables employées a été rassemblée dans le tableau IV-4. Le programme décrit toutes les combinaisons possibles des 2 n noeuds p à p, p variant de 2 à n. Pour cela, on trouve d'abord une boucle sur NNI (= p) (retour par 9), qui varie de 2 à NNEUO/2 (= n). On trouve ensuite NNI boucles imbriquées les unes dans les autres; les indices de chaque boucle sont les numéros des noeuds séparés qui varient de 1 à n pour le premier, de la valeur du premier + 1 à n pour le second, etc... . Comme le nombre de boucles est variable, elles ne peuvent pas apparaître explicitement. En fait, une boucle est constituée :

- d'une "tête de boucle" où l'on donne sa valeur minimale à l'indice.
- d'un "début de boucle" où l'on incrémente l'indice de la valeur du pas
- d'une "fin de boucle" où l'on compare la valeur de l'indice à sa valeur maximale et où l'on revient, s'il y a lieu, vers le début de boucle.

Pour une série de boucles imbriquées, on commence par les têtes et les débuts de toutes les boucles successivement; après le corps de la boucle la plus interne, on parcourt les queues de boucles dans l'ordre inverse, en s'arrêtant dès qu'on rencontre une boucle qui n'est pas terminée (indice < maximum) et en revenant au début de la boucle correspondante. C'est la structure adoptée ici : une première boucle sur l'indice IBN permet de parcourir les têtes et les débuts des NNI boucles imbriquées; une seconde boucle, placée à la fin de l'organigramme, parcourt les queues de boucle et revient sur le début s'il y a lieu (par le renvoi 8).

Le comptage des branches coupées utilise une série de variables logiques; correspondant aux différentes branches du graphe. On commence par donner la valeur

TABLEAU IV - 4

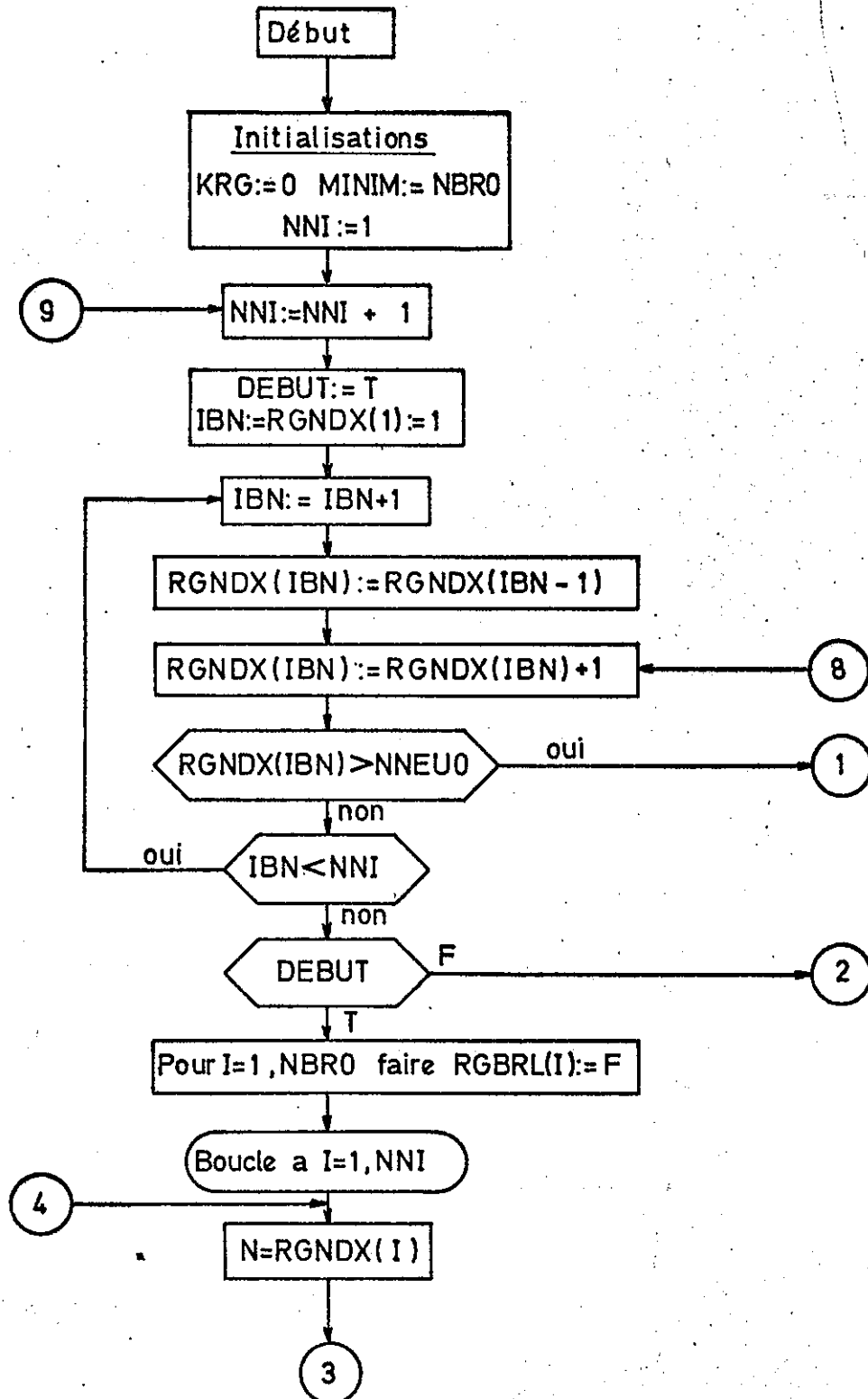
SIGNIFICATION DES VARIABLES DE L'ORGANIGRAMME C

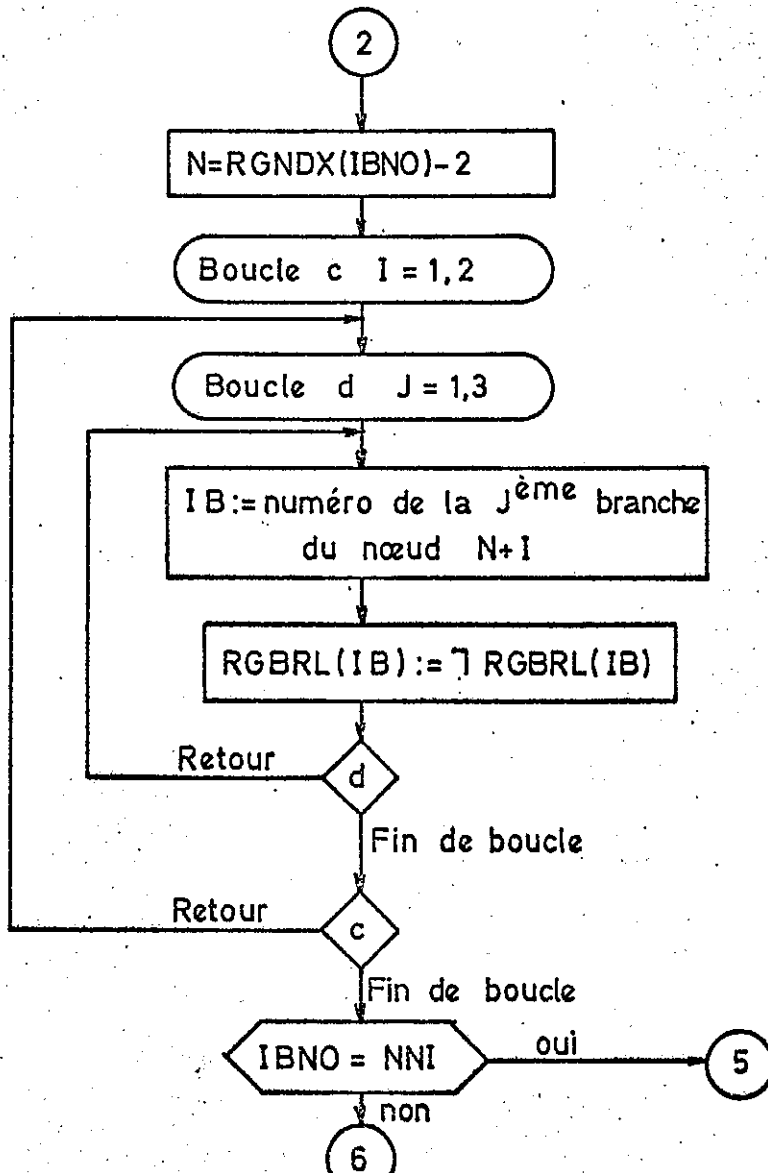
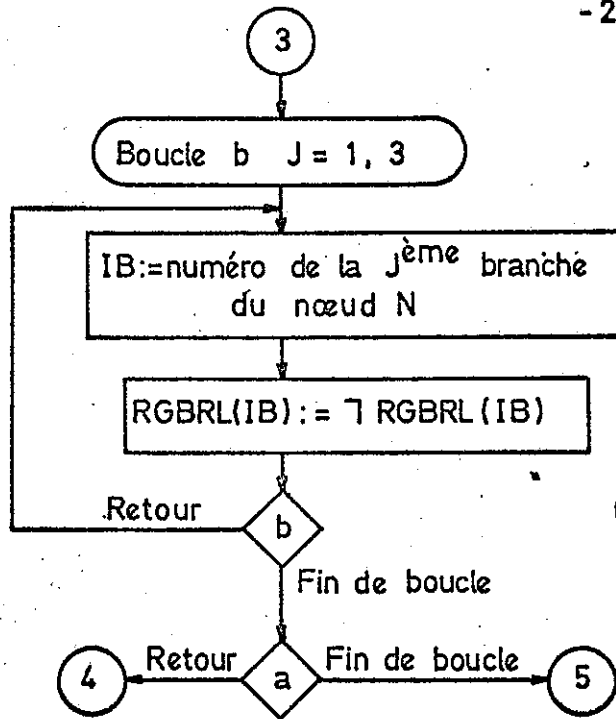
DEBUT	: Variable logique. Prend la valeur T pour la première combinaison de NNI noeuds et prend la valeur F pour les autres.
IBN	: Compteur des boucles imbriquées, indiquant les noeuds séparés.
IBNO	: Mémoire de rangement de IBN en fin de boucle.
KRG	: Compteur des coupures rangées en mémoire.
MINIM	: Nombre de branches des coupures minimales trouvées.
NBRO	: Nombre de branches du graphe.
NCØUP	: Compteur des branches coupées.
NNEUO	: Nombre de noeuds du graphe.
NNI	: Nombre de noeuds séparés.
RGBRL (I)	: Variable logique qui prend la valeur T si la branche I est coupée.
RGNDX (I)	: Numéro du Ième noeud séparé.

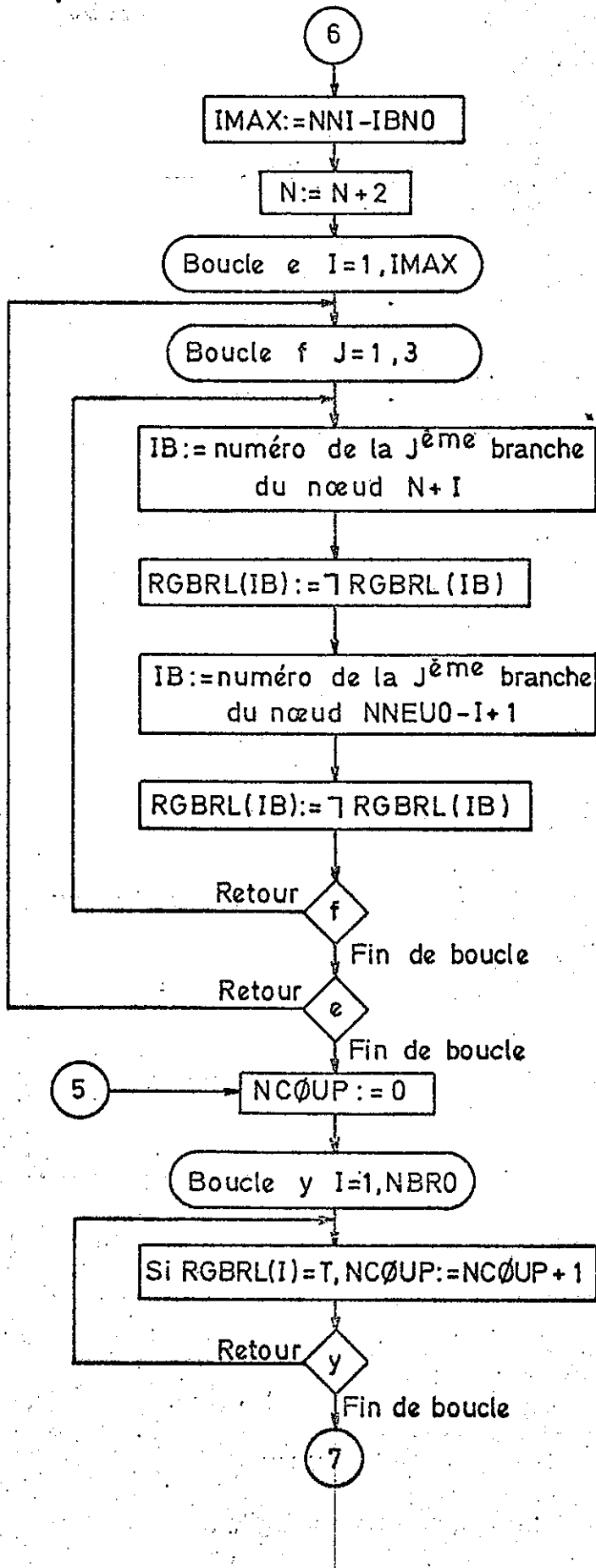
Organigramme C

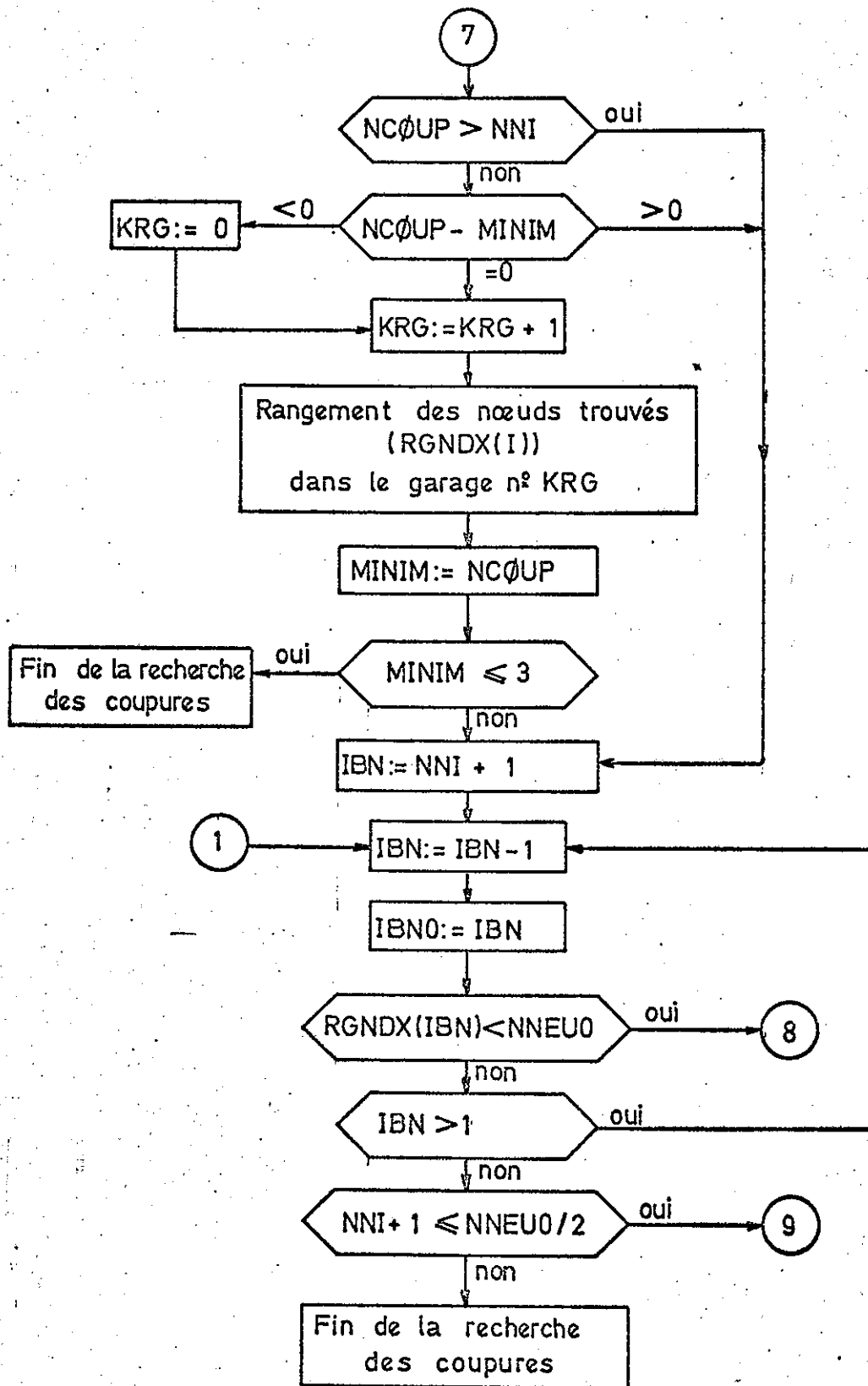
Début du programme CØUPUR

Légende : voir organigramme B









Le signe 7 représente la négation logique.

Si $A=T$, $\neg A=F$ et réciproquement.

F à toutes ces variables puis, pour chaque noeud séparé, on change la valeur des variables attachées aux 3 branches qui s'y rejoignent; à la fin de l'opération, seules les branches coupées correspondent à des valeurs T. Quand on passe d'une combinaison à une autre (DEBUT = F), il suffit de savoir quels sont les noeuds qui ont été échangés et de recommencer la même opération pour ces seuls noeuds. On obtient ainsi une méthode extrêmement rapide de comptage des branches coupées, qui utilise au maximum le fait que les combinaisons de noeuds se suivent de façon régulière et se déduisent simplement les unes des autres.

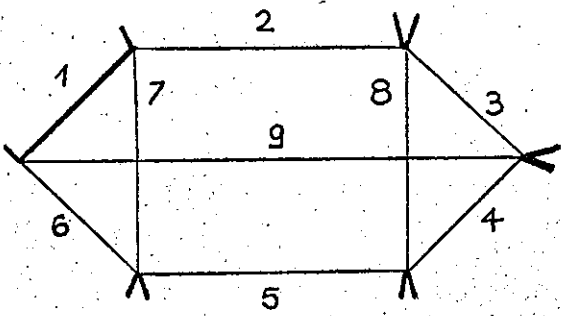
La suite du programme utilise, sans problèmes particuliers, les règles pratiques de coupure de Jucys décrites au chapitre III. Lorsque le rang des $3n - j$ obtenus est suffisamment faible, il faut les identifier. C'est le problème que nous allons discuter dans le paragraphe suivant.

IV - 2 - 3 - Sous-programme FØRMUL -

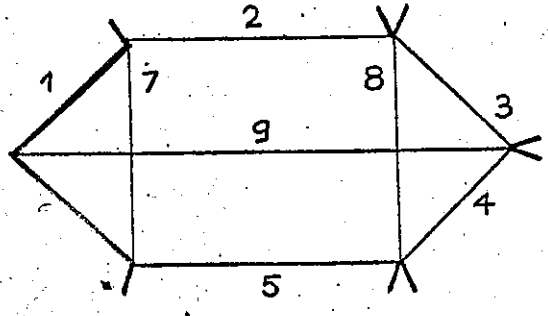
Le problème rencontré dans FØRMUL est très différent de ceux rencontrés jusqu'ici : il s'agit d'identifier un coefficient $3n - j$ irréductible et de le décrire de la façon la plus commode possible pour l'utilisateur.

Pour les $6 - j$ et les $9 - j$, qui sont uniques de leur rang, le problème de l'identification ne se pose pas : il suffit de connaître le nombre des branches. Pour $n > 3$, le nombre de $3n - j$ augmente très vite avec n (cf. tableau I-1). La nomenclature actuellement utilisée par JUCYS¹⁵⁾ consiste à repérer les $3n - j$ par le nombre de coupures suivant 4, 5, ... n branches; ce critère n'est déjà plus suffisant pour distinguer tous les $18 - j$. Les $18 - j$ et les $21 - j$ peuvent se distinguer par le nombre de zéros par ligne dans les matrices de branches communes (cf. § III-1-4-2); pour les $24 - j$, il faut indiquer en plus le nombre de circuits hamiltoniens.

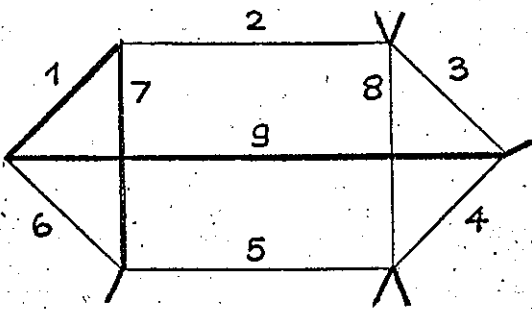
Finalement, l'identification d'un coefficient $3n - j$ par de telles méthodes est très compliquée et il ne nous a pas semblé utile, dans ces conditions, d'indiquer l'"espèce" des coefficients rencontrés mais seulement de permettre à l'utilisateur un dessin rapide de ses graphes.



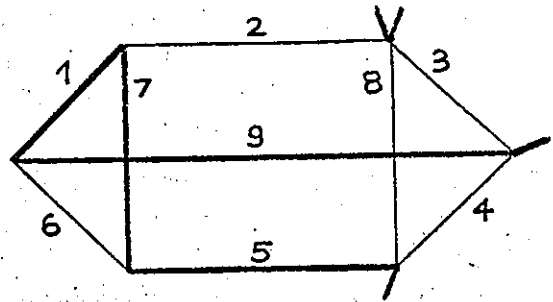
$G^1_{IV.2}$



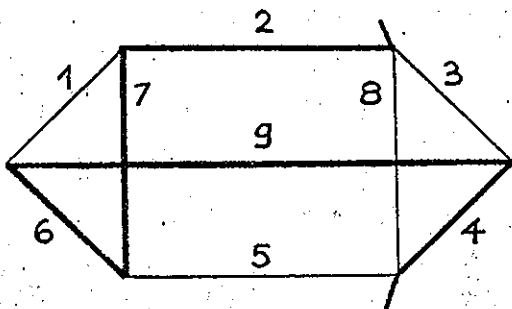
$G^2_{IV.2}$



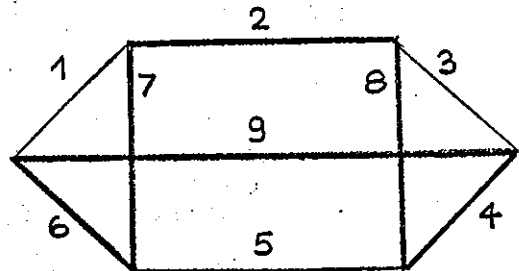
$G^3_{IV.2}$



$G^4_{IV.2}$



$G^5_{IV.2}$



$G^6_{IV.2}$

Aussi bien dans ce but que pour identifier les différentes branches d'un $6 - j$ et d'un $9 - j$, nous avons décidé d'utiliser un circuit hamiltonien du graphe. Pour cela nous avons utilisé la méthode dite des "chaînes alternées" décrite par BERGE ¹⁸⁾ pour un cas un peu plus général. Partant d'un graphe non orienté, Berge cherche un graphe partiel dans lequel le degré du noeud x (c.a.d. le nombre de branches se rejoignant en x) serait donné par une fonction $f(x)$. Ici $f(x) = 2$ pour tout x .

Dans notre cas particulier, voyons ce que devient la méthode : c'est une méthode itérative; pour une certaine itération, certaines branches du graphe seront rendues épaisses, d'autres fines. Considérons pour cela un noeud spécial supplémentaire a et joignons chaque noeud du graphe au noeud a par un nombre de branches épaisses tel que, pour chaque noeud, le nombre de branches épaisses soit toujours égal à 2. Cherchons alors une chaîne partant de a et revenant en a , faite de branches épaisses et fines alternées. Si nous en trouvons une, changeons l'épaisseur de toutes les branches de la chaîne et recommençons l'opération. Si nous ne trouvons pas de chaîne alternée, Berge démontre que les branches épaisses du graphe constituent le plus grand circuit de degré 2 qu'on puisse trouver dans le graphe. S'il existe, on a donc trouvé un circuit hamiltonien. La première itération s'obtient en épaississant une branche quelconque.

Prenons comme exemple le graphe G^1 . Le noeud a est considéré comme étant à l'infini. Voici successivement les numéros des branches utilisées pour la chaîne alternée et les graphes obtenus à chaque itération :

G^1 ; 6; G^2 ; 7,6,9; G^3 ; 5; G^4 ; 2, 1, 6, 5; 4; G^5 ; 8; G^6

Dans G^6 , le noeud a n'est plus relié au graphe; il n'y a donc plus de chaînes alternées. On a bien, en effet, un circuit hamiltonien.

On remarque que le procédé converge nécessairement puisqu'à chaque itération le nombre de branches épaisses du graphe lui-même augmente d'une unité. On ne converge pas cependant toujours vers un circuit hamiltonien; dans l'exemple ci-dessus on aurait pu converger vers le double circuit constitué par les branches

1, 6, 7, 3, 4, 8. Dans le programme, lorsqu'on s'en aperçoit, on recommence l'ensemble des itérations en modifiant le numéro de la première ligne épaissie; on finit en général par trouver un circuit hamiltonien unique.

En opposition aux deux sous-programmes que nous venons de voir, nous allons maintenant examiner les différents "petits sous-programmes" utilisés dans SUPRAC.

IV - 2 - 4 - Petits sous-programmes -

Nous avons parlé, au paragraphe IV-1, des petits sous-programmes, chargés d'une fonction précise et qui n'ont pas eux-mêmes de sous-programmes.

Ils peuvent se classer en 4 groupes suivant leur plus ou moins grande dépendance à l'égard de la méthode graphique:

- a) On trouve d'abord les sous-programmes qui, bien que simples, font partie intégrante de la méthode. On peut citer, par exemple :
 - les sous-programmes de changement de sens d'une branche ou de changement de signe d'un noeud.
 - les sous-programmes d'addition d'un delta dans la formule.
- b) On trouve ensuite une série de sous-programmes qui se définissent encore en fonction des graphes mais qui ne sont justifiés que par l'aspect programmé de la méthode. Ce sont les 3 sous-programmes de manipulation des zones de mémoire :
 - RECØPI : recopie d'un graphe
 - RGRSMT : rangement ou rappel d'une formule dans les mémoires annexes réservées à cet effet (cf. § IV-1-3)
 - EFFRS : remise à zéro de la formule; et les 2 sous-programmes d'impression:
 - ERRSUP : impression des graphes et de la formule principale.
 - LTRSMT : impression des formules rangées.

c) On trouve maintenant des sous-programmes dont la définition est indépendante de la méthode graphique mais dont le rôle est trop particulier pour qu'on puisse les trouver dans une bibliothèque de programmes. Citons, par exemple :

- FACTØR : ce programme calcule $n!$ en "notation Rotenberg"; nous nommons ainsi la représentation utilisée par ROTENBERG et coll²⁰⁾ pour décrire de manière exacte des nombres irrationnels de la forme $a\sqrt{b/c}$, où a, b, c peuvent prendre de très grandes valeurs. Elle consiste à représenter un nombre par les puissances de ses facteurs premiers. Elle permet également de représenter de très grands entiers dont la valeur ne serait pas contenue par un mot machine (c'est notre cas ici).
- ALFDE : ce programme transforme un nombre entier ou demi-entier (indiqué par le double de sa valeur) en un mot alphanumérique qui le représente .
- PØSEM : ce programme place un M devant un mot alphanumérique de 5 lettres donné. Il sert à donner un nom aux nombres quantiques magnétiques, lorsque c'est nécessaire.

Tous les sous-programmes de ce groupe ont un point commun : aucun n'a accès à la zone commune de mémoire où sont rangés les graphes et les formules. Ils peuvent être programmés indépendamment des autres programmés.

d) Il reste enfin les sous-programmes que nous avons emprunté à la bibliothèque de programmes scientifiques du centre de calcul d'Orsay. Ils sont au nombre de deux* :

- INTALF : qui donne la valeur entière d'un nombre écrit en alphanumérique.
- LECCAR : que nous avons réécrit pour notre cas particulier à partir du sous-programme WDREAD écrit pour la bibliothèque d'Orsay par TAUPIN²¹⁾.

Ce dernier sous-programme va faire l'objet du paragraphe suivant, car son importance est très grande dans la définition de nos "formats libres".

IV - 2 - 5 - Sous-programme LECCAR -

Le rôle principal de LECCAR est d'analyser les cartes données, caractère par caractère et de transmettre à chaque appel un mot défini de la façon suivante:

- il est constitué d'1 à 6 caractères consécutifs non blancs.
- le mot se termine
 - si on rencontre un caractère blanc ou la fin de carte.
 - si la nature des caractères change; la nature d'un caractère est définie de la façon suivante : chiffre : 1, lettre : 2; autre : 3.
- la règle précédente souffre 3 exception :
 - si l'argument logique ADM a la valeur T, on autorise 1 changement de nature : 1 ↔ 2.
 - le caractère /, placé entre un chiffre et un 2, est considéré comme un chiffre.
 - l'apostrophe a la nature du caractère qui la précède.
- les mots de plus de 6 caractères sont lus en entier, mais seuls les 6 premiers caractères sont transmis.
La nature du premier caractère du mot est également transmise; les fins de cartes sont transmises comme des mots blancs de nature 4.

Tout ceci se retrouve dans l'organigramme D. Outre la variable logique ADM déjà citée, les arguments de LECCAR sont :

(*) la très grande richesse de la bibliothèque d'Orsay n'est pas ici en cause, mais seulement l'aspect très particulier de notre méthode.

- DL : variable logique qui indique, si elle vaut T , qu'on désire à nouveau le dernier mot transmis (relecture).
- MØT : argument de retour; mot alphanumérique transmis.
- NAT : argument de retour; nature du mot transmis.

L'option de relecture (DL) impose qu'à chaque appel normal (DL = F) on range le mot et la nature transmis dans des mémoires de réserve (MØTO et NATO); c'est le contenu de ces mémoires qui est transmis si DL = T . La définition des mots donnée ci-dessus explique facilement le reste de l'organigramme : les valeurs extrêmes de CC (indice des caractères de la carte en cours d'interprétation) provoquent soit la sortie de fin de carte, soit la lecture et l'impression d'une nouvelle carte; les caractères blancs sont sautés ou terminent la lecture suivant que NAT = 0 ou pas; la nature du caractère précédent est rangée dans NATP; etc...

On pourrait, si le besoin s'en faisait sentir, ajouter bien d'autres options à ce programme, en gardant son principe essentiel qui consiste à transmettre les données mot par mot, indépendamment du support externe dont ils proviennent (on pourrait lire ainsi une bande écrite en code caractère) et du format employé.

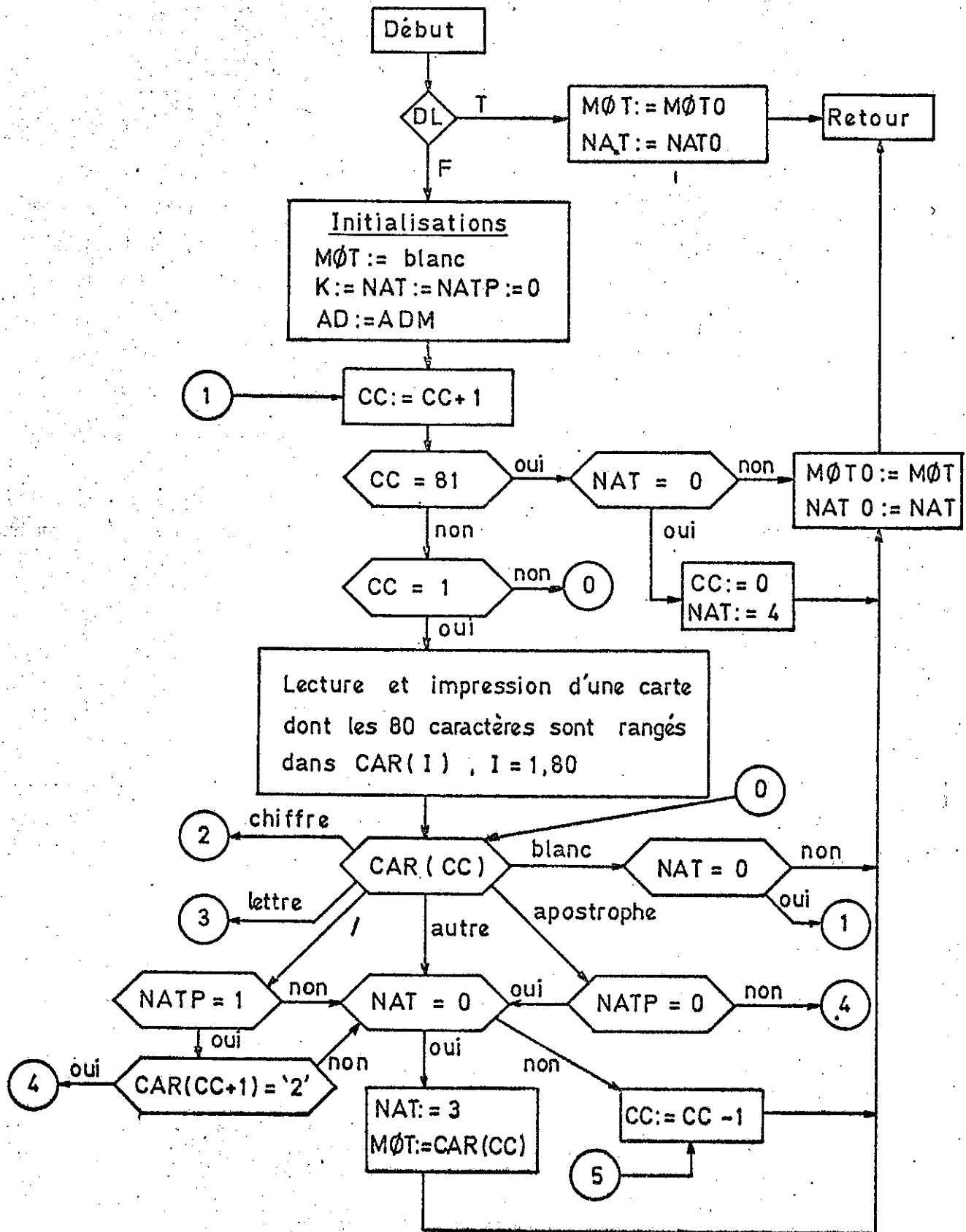
Contrairement à ce qu'on pourrait penser, la complexité relative d'un tel programme et son emploi fréquent ne représentent pas de grosses pertes de temps. En effet, même dans un programme de décodage très complexe, il y a rarement des boucles utilisées un grand nombre de fois; la complexité n'est due qu'au très grand nombre d'options possibles dont on n'utilise qu'une seule à chaque appel.

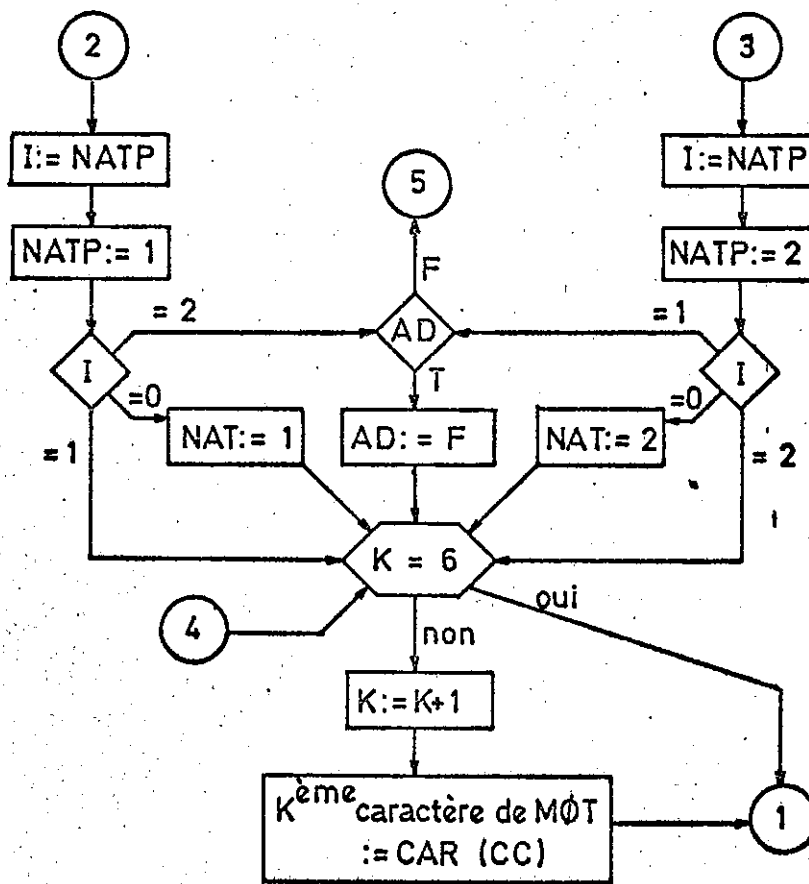
La description de ces quelques sous-programmes nous a permis de montrer quelques-uns des problèmes d'"analyse" que nous avons rencontrés.

D'autres problèmes plus spécifiquement rattachés à la "programmation" peuvent apparaître :

Organigramme D

Organigramme de LECCAR





- moyens de repérage rapide des ordres du programme,
- recherche des erreurs, etc...

Ces problèmes peuvent en partie être résolus par une écriture systématique du programme.

Nous allons décrire très rapidement dans le paragraphe suivant les principales conventions que nous avons utilisées dans ce but.

IV - 3 - ECRITURE ET PRESENTATION DU PROGRAMME -

Le premier problème de programmation abordé dans ce paragraphe est celui du langage. Ceci nous amène tout naturellement au problème général de la systématisation de l'écriture d'un gros programme et au problème plus particulier de la recherche des erreurs.

Le programme SUPRAC est écrit en Fortran V UNIVAC et se trouve en exploitation au centre de calcul de la Faculté des Sciences d'Orsay. L'utilisation du langage Fortran rend théoriquement possible son emploi sur un grand nombre d'autres ordinateurs. Cependant les divers langages Fortran proposés par les constructeurs, tout en devenant de plus en plus puissants, s'éloignent de plus en plus du Fortran IV standard; à cause de cela, même un programme écrit en Fortran nécessite maintenant une traduction, relativement difficile, pour pouvoir passer sur un autre ordinateur que celui pour lequel il a été conçu.

On peut donc se poser la question de savoir s'il faut se priver pour cela des multiples possibilités qu'offrent les Fortran modernes. Nous ne le pensons pas à condition qu'une écriture très systématique vienne simplifier au maximum le passage d'un Fortran dans un autre. Ce sont les conclusions auxquelles est arrivée la revue "Computer Physics" ²²⁾ qui recommande également de regrouper, dans des sous-programmes séparés, tous les passages qui utilisent des caractéristiques de l'ordinateur lui-même : manipulation de bits, utilisation de la table de caractères, etc...

Pour rendre l'écriture et l'utilisation de SUPRAC plus systématiques, nous avons adopté un certain nombre de règles dont voici les principales :

- utilisation d'un grand nombre de commentaires (environ 1 pour 10 ordres).
- mise en ordre croissant des numéros d'expressions
- choix systématique des noms des variables. Par exemple : un numéro commence par NU...; un nom commence par NØ...; etc...
- utilisation de nombreuses sorties erreurs, regroupées en fin de programme et accompagnées de diagnostics clairs (indiquant en particulier le nom du sous-programme concerné).

Nous avons d'autre part été beaucoup aidé par une procédure spéciale au Fortran V Univac : la procédure INCLUDE qui permet d'écrire une seule fois une partie commune à plusieurs sous-programmes. Nous l'avons utilisée pour les déclarations de variables et de COMMON; nous avons ainsi la possibilité de modifier très rapidement cette partie importante du programme et l'assurance que ces déclarations sont identiques dans tous les sous-programmes.

Cette systématique, en simplifiant l'écriture, a été aussi très utile à la mise au point du programme et à la recherche des erreurs. Ce travail a été également facilité par l'aspect modulaire du programme qui permet la mise au point séparée de programmes de dimensions modestes. Enfin l'utilisation du sous-programme ERRSUP a été très efficace dans la recherche des erreurs.

ERRSUP a d'abord été écrit pour imprimer, à la suite d'un diagnostic d'erreur, le contenu de la partie commune de la mémoire : les graphes et la formule présents. Par la suite, au cours des tests des sous-programmes, l'existence d'ERRSUP a beaucoup simplifié la recherche des erreurs : en intercalant, dans le sous-programme défectueux, de nombreux appels d'ERRSUP, on peut suivre le chemin suivi par l'ordinateur en connaissant à tout moment le contenu de la mémoire. Enfin, ERRSUP est même employé pour l'impression, dans le programme principal, des résultats eux-mêmes.

Nous voyons par ces quelques exemples que les problèmes techniques posés par l'écriture et la présentation d'un gros programme ne doivent pas être négligés car ils conditionnent la rapidité et la facilité de sa mise au point et donc sa qualité.

IV - 4 - CONCLUSION -

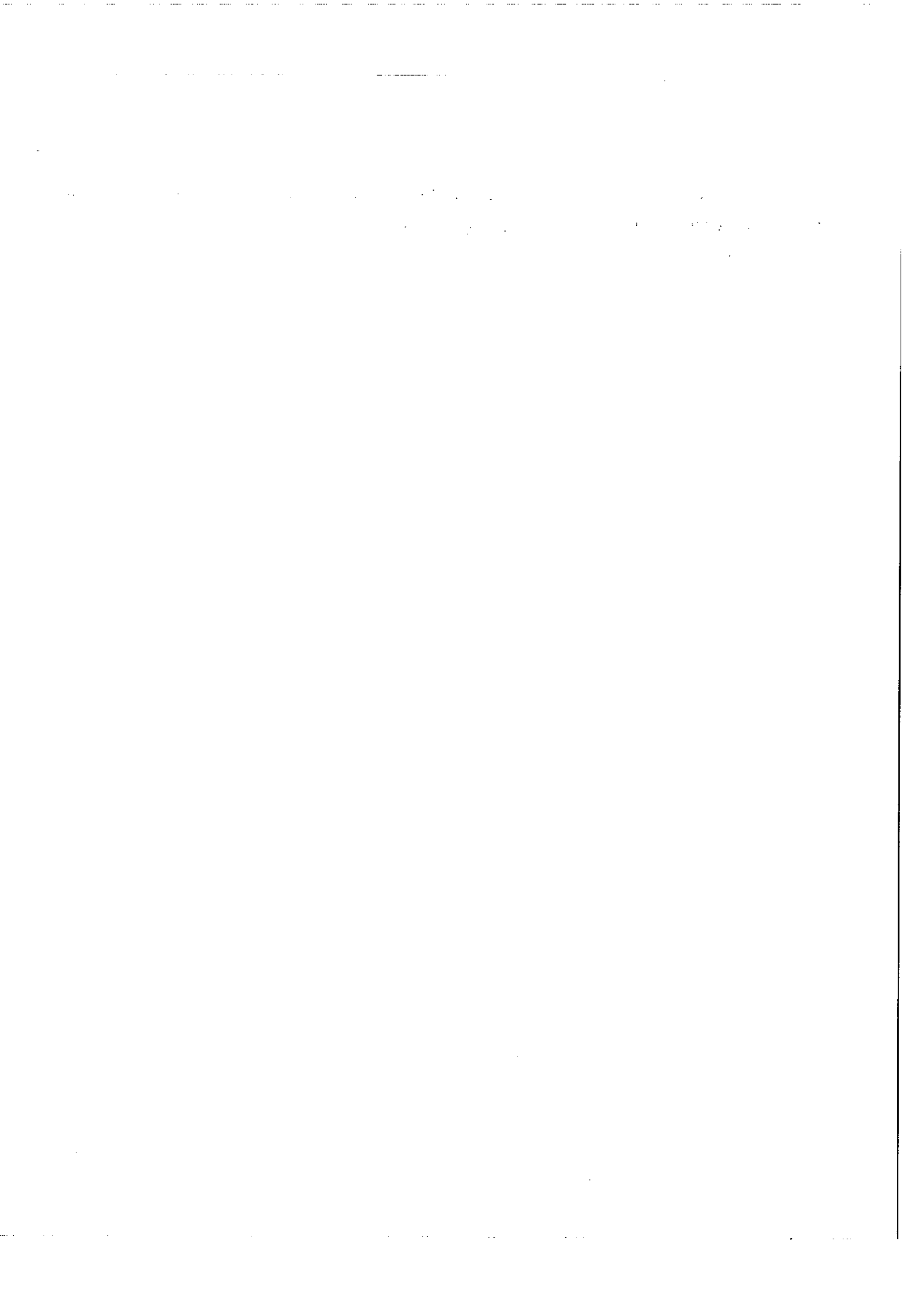
Le programme SUPRAC que nous venons de décrire a demandé, malgré la systématique de son écriture, un très gros travail de réalisation et de mise au point.

Mais, comme tous les programmes de cette taille (il comporte près de 4000 instructions Fortran), il pose déjà de nombreux problèmes.

- un programme de cette importance, comportant un très grand nombre d'options, peut difficilement être testé pour tous les cas possibles; les erreurs sont en conséquence presque impossibles à supprimer totalement. Déjà quelques-unes ont été signalées.
 - au cours de l'écriture, nous avons choisi délibérément de nous limiter dans le choix des options, afin d'aller plus vite. Le couplage (JK) est par exemple interdit dans l'état actuel du programme.
 - enfin l'écriture d'autres versions (ou programmes principaux) serait souhaitable : simplification d'une formule donnée par exemple. Ceci entraînerait l'extension du "vocabulaire" employé par l'écriture de quelques nouveaux sous-programmes.
- Tous ceci représente l'essentiel du travail de "maintenance" inséparable de tout programme "vivant".

Cependant, il semble que, malgré ses imperfections, SUPRAC puisse être utilisé dans un très grand nombre de cas; il devrait être particulièrement utile pour le calcul des éléments de matrice des opérateurs utilisés actuellement en spectroscopie atomique : interactions magnétiques de spin-spin, spin-autre-orbite, interac-

tions à 3 corps, etc... . Un petit travail de normalisation sera simplement nécessaire pour assurer sa diffusion parmi les utilisateurs éventuels.



- CONCLUSION -

Ce travail a permis de faire progresser la méthode graphique proposée par JUCYS ³⁾ et EL-BAZ ⁷⁾ aussi bien sur le plan des principes que sur le plan de son utilisation pratique. Il reste cependant des progrès importants à réaliser dans ces deux domaines.

Sur le plan des principes nous avons d'abord développé la méthode mise au point par El-Baz. Ces développements sont importants dans deux domaines : la représentation de l'antisymétrie des fonctions d'onde et celle des opérateurs tensoriels irréductibles. D'autres parts, les définitions adoptées ont été justifiées par l'emploi de la seconde quantification dont nous proposons une représentation graphique complète. Outre la cohérence introduite ainsi dans la méthode, nous pensons avoir encore facilité l'emploi de la seconde quantification en spectroscopie atomique.

Les progrès réalisés ont une importance particulière dans le calcul pratique des éléments de matrice à l'aide de l'algèbre de Racah. Nous avons fait dans ce domaine un gros effort de simplification afin de présenter une méthode la plus automatique possible : l'antisymétrie des fonctions d'onde s'introduit à l'aide d'une seule formule générale très simple, qui permet le dessin direct du graphe représentant un élément de matrice; ce graphe est alors utilisable de 2 manières :

- en appliquant simplement les règles de coupure, à sa structure, on peut connaître très rapidement les coefficients $3n-j$ contenus dans la formule.
- en utilisant une suite de règles simples et systématiques, on obtient la formule complète : sommation, facteurs de phase, coefficients numériques, etc...

Rappelons que l'intérêt de la méthode graphique dans ce domaine est d'obtenir toujours la formule dans laquelle le nombre de sommes est réduit au minimum.

L'effort fait pour rendre la méthode systématique a permis l'écriture du programme SUPRAC. Celui-ci doit permettre de rendre simple et automatique l'emploi des opérateurs compliqués dont les spectroscopistes ont maintenant besoin.

Il reste cependant encore beaucoup à faire. Sur le plan théorique, il faudrait chercher à représenter graphiquement d'autres couplages que le couplage LS de base, ainsi que les opérateurs correspondants. On peut citer le couplage jj pur et le couplage LL introduit par JUDD²³⁾. La représentation des opérateurs trou-particule et trou-trou semble être également une possibilité intéressante : les graphes des opérateurs annihilation-crédation devraient permettre d'obtenir des résultats dans ce domaine.

Sur le plan pratique, c'est essentiellement l'extension du programme qui est souhaitable. Elle peut se faire principalement suivant deux directions :

- la traduction sous forme de programmes des développements théoriques que nous n'avons pas introduits dans SUPRAC : seconde quantification, couplage $(JL)K$, etc....
- l'automatisation encore plus poussée du calcul des éléments de matrice de l'hamiltonien : on pourrait réduire les données aux simples noms des configurations utilisées et à la description de l'hamiltonien sous sa forme habituelle; on pourrait aussi transmettre directement les résultats aux programmes de calcul numérique des formules réalisés au Laboratoire²⁴⁾.

Le grand intérêt des méthodes graphiques dans tous les domaines où l'algèbre de Racah est utilisée vient de la possibilité qu'elles offrent de supprimer totalement les découplages et recouplages nécessaires dans les calculs

analytiques. Nous espérons avoir montré dans ce travail tout le parti qu'on peut en tirer dans le domaine particulier de la spectroscopie atomique.

-:-:-

B I B L I O G R A P H I E

- 1) E. U. CONDON et G. H. SHORTLEY, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, New-York, 1935.
- 2) G. RACAH, a) Phys. Rev., 62, 438 (1942)
b) Phys. Rev., 63, 367 (1943).
- 3) A. P. JUCYS (ou YUTSIS), I. B. LEVINSON et V. V. VANAGAS, Mathematical Apparatus of the Theory of Angular Momentum, Israël Program for Scientific Translations, Jerusalem, 1962. (Edition originale en russe, 1960, Vilnius).
- 4) B. R. JUDD, Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, Mc Graw-Hill Book Co. Inc., New-york, 1963.
- 5) U. FANO, F. PRATS et Z. GOLDSCHMIDT, Phys. Rev. 129, 2643 (1963).
- 6) A. P. JUCYS et A. A. BANDZAITIS, Judėjimo Kiekio Momento Teorija Kvantinėje Mechanikoje, Vilnius, 1965.
- 7) E. EL-BAZ, Traitement graphique de l'algèbre des moments angulaires, Masson et C^{ie}, Paris, 1969.
- 8) B. R. JUDD, Second Quantization and Atomic Spectroscopy, The Johns Hopkins Press, Baltimore, 1967.
- 9) P. D. RUMŠAS, A. A. BANDZAITIS et A. P. JUCYS, Liet. Fiz. Rink., 5, 197 (1965).
- 10) U. FANO et G. RACAH, Irreducible Tensoriel Sets, Academic Press Inc., New-York, 1959.

- 11) S. FENEUILLE, J. de Physique, 28, 61 (1967).
- 12) et 13) A. MESSIAH, Mécanique Quantique, Dunod, Paris, 1962.
- 14) E. P. WIGNER, Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra, Academic Press Inc., New-York, 1959.
- 15) P. D. RUMŠAS et A. P. JUCYS, Liet. Fiz. Rink..., 5, 185 (1965).
- 16) P. J. REDMOND, Proc. Roy. Soc., A222, 84 (1954).
- 17) S. FENEUILLE, Communication personnelle.
- 18) C. BERGE, Théorie des graphes et ses applications, Dunod, Paris, 1967.
- 19) A. SUREAU, Thèse de doctorat, Paris, 1970.
- 20) M. ROTENBERG, R. BIVINS, N. METROPOLIS et J. K. WOOTEN, The 3 - j and 6 - j symbols, Crosby Lockwood and Son Ltd, Londres, 1959.
- 21) Orsay 's Library, Centre de Calcul de la Faculté des Sciences d'Orsay, 1968.
- 22) Instructions to authors, Computer Phys. Comm., 1, 1 (1970).
- 23) B. R. JUDD, Phys. Rev., 162, 28 (1967).
- 24) Y. BORDARIER et A. CARLIER, Colloque de Spectroscopie Atomique, Paris-Orsay, 1969 .

