

N° d'ordre :

THÈSE

présentée à la
Faculté des Sciences d'Orsay

pour obtenir

Le Titre de Docteur 3 ème Cycle

par

Annik CARLIER

THESE : Contribution à l'étude théorique des spectres d'arc et
d'étincelle du samarium.

Soutenue le

1967 devant la Commission d'Examen

M. P. JACQUINOT.....Président

MM. J. BROCHARD..... }
C. MOSER..... } Examineurs

J. BLAISE.....Invité

ORSAY 1967

I N T R O D U C T I O N

- La classification et l'interprétation théorique des spectres des atomes complexes constituent une des activités du Laboratoire Aimé Cotton. Plusieurs études ont déjà été faites, d'autres se poursuivent actuellement sur des atomes appartenant aux séries des Actinides et des Lanthanides. C'est dans cette dernière série que se classe le Samarium, dont le spectre fait ici l'objet de notre étude.

- Les méthodes utilisées entraînent des calculs beaucoup trop lourds pour être faits à la main. Y. BORDARIER avait donc mis au point un programme fonctionnant sur Cab 500 [1]

Les temps de calcul se sont bientôt révélés trop longs et la place en machine insuffisante et j'ai été amenée à participer avec Y. BORDARIER à la traduction en langage symbolique FORTRAN et à l'amélioration de nos programmes qui fonctionnent maintenant sur l'UNIVAC 1107, la puissante calculatrice de la Faculté des Sciences d'Orsay.

- Nous avons alors été en mesure d'entreprendre l'explication des spectres d'arc et d'étincelle du Samarium (Sm I et Sm II), par l'étude des configurations profondes.

- Le plan général est le suivant :

- 1ère partie :

DESCRIPTION DE LA METHODE UTILISEE ET DE LA CHAINE DE PROGRAMMES NECESSAIRE

- I) Principes de la méthode
- II) Chaîne de programmes adaptée
- III) Principes de fonctionnement du programme "AGENAC"

Une description plus détaillée est donnée en Appendice.

- 2ème partie :

ETUDE THEORIQUE DU SAMARIUM

- Introduction

- 1°) Etat de la classification du Samarium
- 2°) Limitation des bases de calcul

- Sm II

- I) Configurations paires $4f^6 5d - 4f^6 6s$
- II) Configurations impaires $4f^6 6p - 4f^5 5d 6s$

- Sm I

- I) Configurations paires - $4f^6 5d 6s$
- $4f^6 6s 7s$
- II) Configurations impaires : $4f^6 6s 6p - 4f^5 5d 6s^2$

- Conclusion sur l'ensemble des interprétations des spectres

- Conclusion

- Appendice

Description plus détaillée du programme "AGENAC"

1ère Partie : METHODE ET PROGRAMMES

I) Principes de la méthode :

RACAH, par ses travaux sur les opérateurs tensoriels, a considérablement allégé l'écriture et les calculs des anciennes méthodes de SLATER décrites par CONDON et SHORTLEY, rendant ainsi possible l'étude des configurations à électrons équivalents des atomes complexes [2]

Malgré tout, les calculs restent très importants et nécessitent l'utilisation d'une chaîne de programmes.

Un exposé très clair de ces méthodes a été fait par B.R. JUDD dans son livre O.T.I.A.S. [3], exposé qui nous a apporté une aide considérable dans notre travail.

Nous ne pouvons pas expliquer ici en détail les principes de la méthode et nous nous contenterons d'en rappeler les grandes lignes.

- les niveaux d'énergie d'un atome sont les valeurs propres d'un hamiltonien que l'on peut séparer en deux parties

$$H' = H_0 + H$$

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

$$H = \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \left[\zeta(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i - U(r_i) \right]$$
 l'hamiltonien perturbateur

- avec $N =$ nombre d'électrons
- $\vec{p}_i =$ quantité de mouvement du $i^{ème}$ électron
- $r_i =$ distance du $i^{ème}$ au noyau supposé ponctuel et infiniment lourd
- $r_{ij} =$ distance mutuelle des deux électrons i et j

$$\zeta(r) = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2 r} \frac{dU}{dr}$$

$$Q = \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad \text{représente l'interaction coulombienne}$$

$$\Lambda = \sum_{i=1}^N \xi(\kappa_i) \vec{\ell}_i \cdot \vec{s}_i \quad \text{représente l'interaction spin-orbite}$$

- les valeurs propres de H_0 représentent les énergies des configurations caractérisées par les nombres quantiques n et l de chaque électron

$$H_0 \psi = E \psi \quad \text{avec} \quad E = \sum_i E_i(n_i, l_i)$$

Appelons k_i un ensemble $(n_i, l_i, m_{li}, m_{si})$

$$\varphi_j(k_i) = \frac{R(n_i, l_i)}{r_j} Y_{l_i, m_{li}}(\theta_j, \varphi_j) \delta(\sigma_j, m_{si}) \quad \text{est une fonction d'onde monoélectro-}$$

nique.

Alors les fonctions propres Ψ de H_0 sont données par les déterminants

$$\text{soit } \Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(k_1) & \dots & \varphi_n(k_n) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(k_n) & \dots & \varphi_n(k_n) \end{vmatrix} \quad \left\{ k_1 \dots k_n \right\}$$

les Ψ sont complètement antisymétriques.

- au premier ordre de la théorie des perturbations, on néglige les interactions entre configurations et on étudie l'action de H perturbateur sur la configuration considérée. La très forte dégénérescence ci-dessus est levée et la configuration se sépare en niveaux d'énergie. Ils sont donnés par diagonalisation de la matrice de l'opérateur H construite sur les états de cette configuration. Les vecteurs propres représentent la composition du niveau réel sur la base choisie.

Les états de base sont ceux d'un couplage limite choisi à priori (LS par exemple), c'est-à-dire qu'ils sont des combinaisons linéaires particulières des fonctions propres $\left\{ k_1 \dots k_n \right\}$ ci-dessus correspondant à la configuration considérée. Ils sont caractérisés par un ensemble de nombres quantiques, dont le nombre J en particulier.

Les éléments de matrice de H sont nuls entre des états de J différents et la matrice de H va se décomposer en autant de sous-matrices qu'il existe

de valeurs de J dans la configuration.

--le problème maintenant est donc de calculer les éléments de matrices de H entre les états $\Psi(\alpha_1 S_1 L_1 J M_J) \dots \Psi(\alpha_n S_n L_n J M_J)$ de la configuration.

On va pour cela utiliser les méthodes de RACAH :

On peut exprimer H sous forme d'opérateurs tensoriels dont l'action sur les états de couplage limite est relativement simple. On a $H = Q + \Lambda + U$

$$\text{ou } \Lambda = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i \quad \text{est déjà sous la forme cherchée}$$

$$Q = e^2 \sum_{i>j=1}^N \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_{ij}^k}{r_{ij}^{k+1}} \begin{pmatrix} k & k \\ c_i & c_j \\ m & m' \end{pmatrix}$$

$$U = \sum_{i=1}^N u(r_i) \text{ n'entraîne qu'un déplacement global de la}$$

configuration. On en tient compte dans le paramètre hauteur de la configuration. On voit que l'on obtient ainsi des opérateurs comprenant deux parties. L'une agit sur les parties radiales des fonctions d'onde, l'autre sur les parties angulaires.

Si on développe alors les éléments de matrice de H ,

$$a_{ij}^J = (\Psi_i J M_J | H | \Psi_j J M_J), \text{ ils s'écrivent comme une}$$

somme de termes dans lesquels les parties radiales et angulaires se séparent.

L'action de la partie radiale de H sur les parties radiales des fonctions d'onde introduit des intégrales telles que :

- les intégrales de SLATER :

$$R^k(a b c d) = e^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r_{12}^k}{r_{12}^{k+1}} \varphi_a^*(r_1) \varphi_b^*(r_2) \varphi_c(r_1) \varphi_d(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2$$

les intégrales directes, $F^k(a, b) = R^k(a b, ab)$,
 et les intégrales d'échange, $G^k(a, b) = R^k(a b, ba)$,
 (les φ sont les parties radiales des fonctions d'onde monoélectroniques)

apparaissent dans l'expression des éléments de matrice de Q .

- les intégrales de structure fine :

$\zeta_l = \int_0^\infty \varphi_l^* \xi(r) \varphi_l r^2 dr$ apparaissent dans l'expression des éléments de matrice de Λ

- un élément a_{ij}^J s'écrit alors sous la forme

$$a_{ij}^J = \sum_k \alpha_{ij}^{Jk} P_k \quad (1)$$

ou les P_k sont les intégrales radiales. Elles dépendent du choix d'un $U(r)$ particulier et sont donc mal définies. Aussi considère-t-on les P_k comme des paramètres ajustables.

Jk

Les α_{ij}^J sont des coefficients numériques angulaires calculables exactement à l'aide de formules explicites contenant en particulier des symboles nJ .

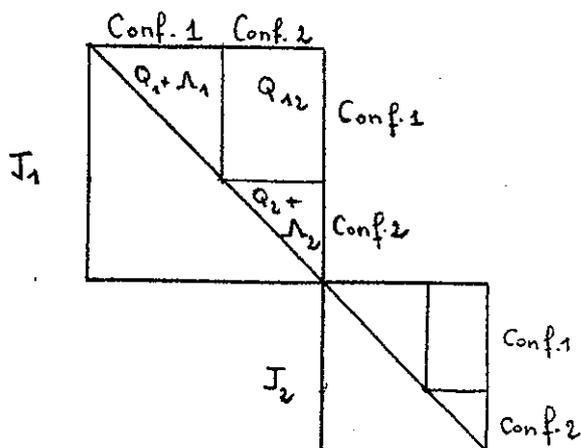
- A un ordre d'approximation supérieur on ne néglige plus les interactions entre configurations. En réalité on ne va tenir compte ici que de l'action d'une ou deux configurations perturbatrices.

Les niveaux d'énergie seront toujours donnés par diagonalisation de la matrice de H construite cette fois sur les états de toutes les configurations considérées.

La matrice se sépare toujours en sous-matrices de J différents et un élément a_{ij}^J peut se mettre encore sous la forme (1).

Dans le cas général seule l'interaction électrostatique donne des éléments non nuls entre des états de deux configurations différentes, et introduit

des intégrales de SLATER supplémentaires. On est alors dans la situation suivante :



Résumons les différentes étapes nécessaires à l'étude d'une ou plusieurs configurations

- 1°) Choisir un couplage de base, c'est-à-dire le jeu de nombres quantiques nécessaires à la caractérisation complète des vecteurs de base.
Ex : en LS total, pour une configuration $1^n 1^p 1^m$ un vecteur de base est complètement caractérisé par la connaissance des nombres quantiques :

$$\langle (1^n \alpha_1 S_1 L_1, 1^p \alpha_2 S_2 L_2) S_3 L_3, 1^m \alpha_4 S_4 L_4, SLJM \rangle$$

- 2°) Calculer à l'aide des opérateurs tensoriels de RACAH les matrices (α_{ij}^{Jk}) des coefficients des paramètres sur la base choisie.

Ce sera le rôle des programmes "AGENAC" et "ASSAC"

- 3°) Construire les sous-matrices de H . Il faut pour cela, choisir un jeu de paramètres initiaux P_k et calculer numériquement les éléments a_{ij}^J des sous-matrices donnés par la formule (1)

Après diagonalisation, les valeurs propres donnent les énergies, les vecteurs

propres donnent la composition des niveaux sur la base choisie et la matrice de passage de la base choisie à la base dans laquelle H serait diagonal. Ce sera le rôle du programme "DIAGON" qui calcule également les dérivées des énergies et des facteurs de Landé g par rapport aux paramètres. On pourra alors ajuster les paramètres P_k par moindres carrés à l'aide du programme "GRMC1", de façon à rendre compte des valeurs expérimentales des énergies des niveaux et des g .

II) La chaîne de programmes :

Nous venons de voir que la méthode utilisée nécessite quatre programmes principaux "DIAGON", "GRMC1", "AGENAC" et "ASSAC", dont nous parlerons plus en détail un peu plus loin.

Les programmes "DIAGON", "GRMC1", "ASSAC" ont été réalisés et mis au point par Y. BORDARIER. J'ai participé avec lui à la réalisation d'"AGENAC" ainsi qu'à la mise au point d'"AGENAC", d'"ASSAC" et de quelques programmes annexes qui nous ont été nécessaires.

Nous tenons à remercier ici le regretté Professeur RACAH et le Docteur Y. STEIN du Département de Physique théorique de l'Université de Jérusalem, pour l'aide et les idées qu'ils nous ont apportées, en particulier, pour la réalisation d'"AGENAC".

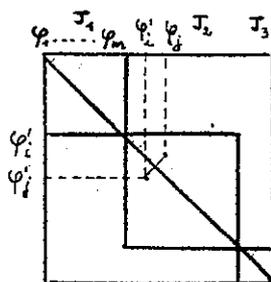
L'ensemble représente une chaîne de programmes spécialement adaptée aux méthodes de RACAH.

Nous allons essayer de la décrire et d'expliquer le rôle des quatre programmes cités.

Description de la chaîne et de son rôle :

- Il s'agit de calculer autant de sous-matrices de H que de valeurs de J .

Elles sont hermitiques et on ne calcule que les triangles supérieurs.



On sait qu'un élément d'une sous-matrice s'écrit :

$$a_{ij}^J = a_{ji}^J = \sum \alpha_{ij}^{Jk} P_k$$

- Les $\alpha_{ij}^{Jk} = (\varphi_i^{JM_r} | \text{opérateur tensoriel angulaire} | \varphi_j^{JM_r})$ forment

autant de matrices qu'il y a de paramètres P_k dans la configuration.

Nous les appellerons "matrices des coefficients des paramètres".

Elles ne dépendent que du nom de la configuration (et du couplage choisi) ; il sera donc utile de les conserver sur bande.

- Les P_k , ou intégrales radiales, dépendent au contraire du corps dans lequel la configuration apparaît et sont considérées comme des paramètres ajustables

On va donc considérer une matrice (a_{ij}^J) de H comme une somme de matrices (α_{ij}^{Jk}) du type :

$$\begin{matrix} \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \\ \triangle & & \\ & a_{ij}^J & \\ \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \end{matrix} = \begin{matrix} \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \\ \triangle & & \\ & \alpha_{ij}^{J_1} & \\ \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \end{matrix} \times P_1 + \begin{matrix} \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \\ \triangle & & \\ & \alpha_{ij}^{J_2} & \\ \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \end{matrix} \times P_2 + \dots + \begin{matrix} \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \\ \triangle & & \\ & \alpha_{ij}^{J_p} & \\ \varphi_1 & \dots & \varphi_{n_r} \end{matrix} \times P_p$$

- L'ensemble des matrices des coefficients des paramètres (α_{ij}^{jk}) forme ce qu'on appelle l'"assemblage" d'une configuration.

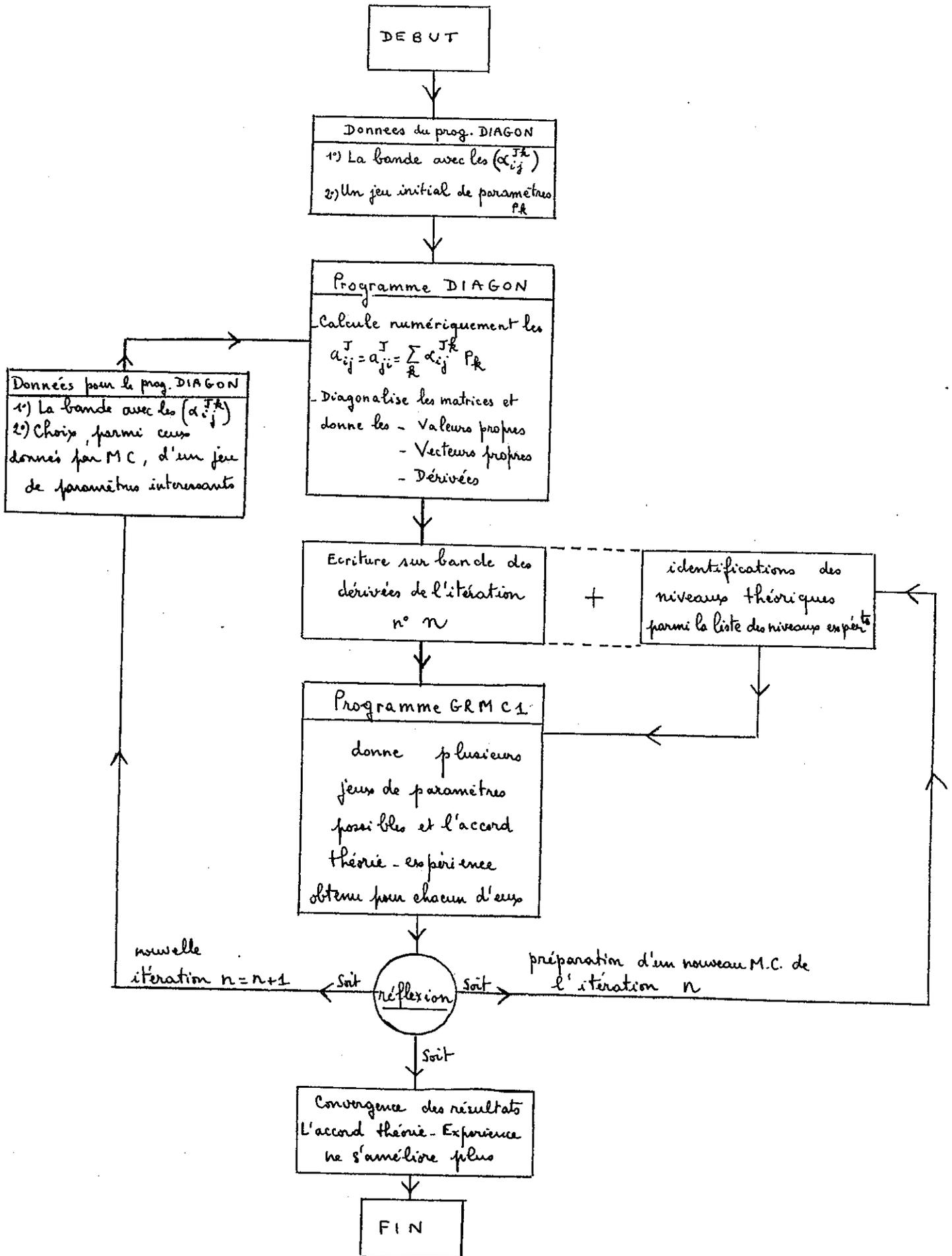
- L'ensemble des assemblages des différentes configurations qu'on a eu l'occasion de calculer, forme ce que nous appelons notre "Bibliothèque des configuration", elle se trouve rangée sur bande magnétique.

La plus grande partie des configurations de cette bibliothèque ont été calculées par les chercheurs du groupe du professeur RACAH. Nous leur sommes très reconnaissants d'avoir bien voulu nous communiquer intégralement son contenu qui représente de très nombreuses heures de calcul.

- Supposons par exemple que la configuration f^6d se trouve dans la bibliothèque et qu'on s'intéresse à $4f^65d$ du Samarium. Il suffit alors de:

- donner des valeurs initiales aux paramètres P_k
- appeler le programme de diagonalisation "DIAGON" qui calculera numériquement les éléments de matrices a_{ij}^J , donnera après diagonalisation les valeurs des énergies, des g , des dérivées des énergies et des g par rapport aux paramètres [4], et permettra de faire avec l'aide du programme "GRMC1" les itérations nécessaires à l'ajustage des paramètres.

- Donc en supposant la bande bibliothèque toute constituée l'ensemble des deux programmes de la chaîne, "DIAGON" et "GRMC1", permet de réaliser les opérations successives portées dans l'organigramme suivant :



Constitution de la bande "bibliothèque"

Voyons maintenant comment on constitue la bande bibliothèque.

Il s'agit de calculer et d'ordonner les matrices $\alpha_{ij}^{J_k}$

Nous allons voir que deux programmes, "AGENAC" et "ASSAC", sont nécessaires.

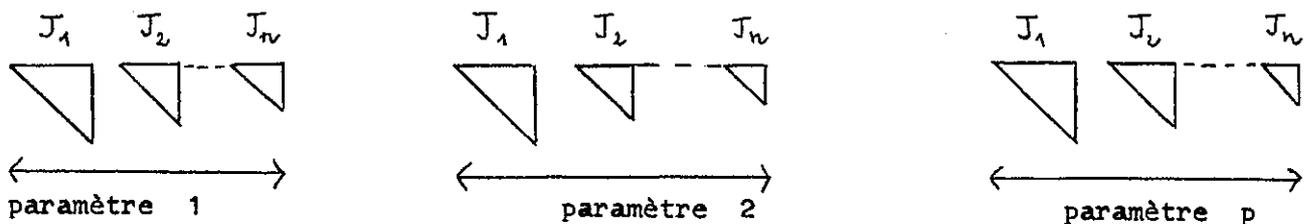
- 1°) Supposons qu'en étudie une seule configuration

comprenant par exemple p paramètres et n valeurs de J

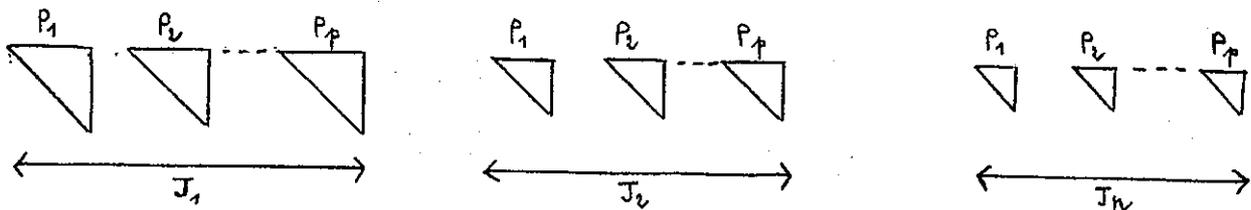
les coefficients de chaque paramètres sont donnés par une formule différente

on va donc donner à calculer par "AGENAC" les p formules successivement

les $\alpha_{ij}^{J_k}$ seront alors rangés sur bande de la façon suivante :



"ASSAC" va être chargé de rétablir l'ordre logique, c'est-à-dire un ordre facilitant pour "DIAGON" la construction des matrices par valeur de J . Il faut donc trouver à la suite sur la bande, les coefficients de tous les paramètres par valeur de J , soit :



- 2°) Supposons que la base choisie soit formée de plusieurs configurations

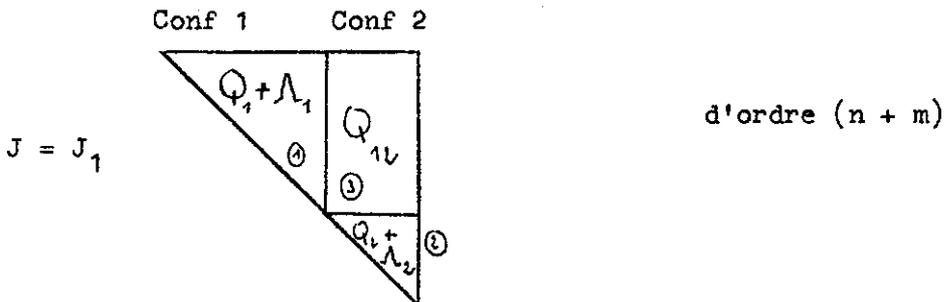
c'est en réalité dans ce cas, que le programme "ASSAC" diminutif d'Assemblage, prend véritablement son sens.

En effet, le tri par valeur de J est toujours nécessaire, mais il est insuf-

fisant et le rôle d'"ASSAC" sera plus compliqué.

- Prenons le cas de deux configurations

On a vu qu'on avait pour chaque valeur J une sous-matrice de la forme



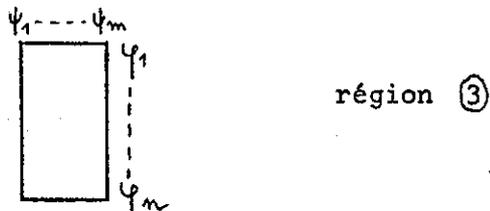
Les interactions Q_1 et Λ_1 donnent p_1 paramètres dont les coefficients non nuls sont compris dans le triangle d'ordre n



Les interactions Q_2 et Λ_2 donnent p_2 paramètres dont les coefficients non nuls sont compris dans le triangle d'ordre m



Q_{12} (ou $Q_{12} + \Lambda_{12}$) donne p_3 paramètres d'interaction dont les coefficients non nuls sont compris dans le rectangle $n \times m$



Aucun paramètre n'a d'éléments à la fois dans une région et dans une autre aussi, la structure d'AGENAC est telle qu'il sait calculer des matrices triangulaires sur les états d'une configuration, ou rectangulaire sur les

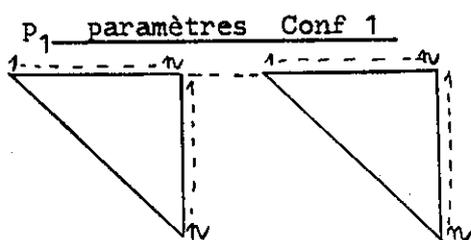
états de deux configurations. Mais, il numérottera, dans tous les cas, les lignes et les colonnes à partir de 1.

Trois cas sont possibles qu'ASSAC sait traiter

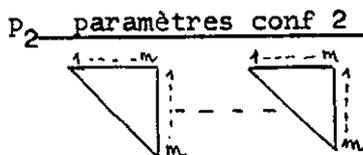
- a) On veut assembler deux configurations déjà assemblées séparément
- b) On veut assembler une configuration assemblée et les résultats d'AGENAC de la deuxième configuration
- c) On veut assembler les résultats d'AGENAC des deux configurations.

Dans les trois cas on peut effectuer facilement le tri des matrices par valeurs de J. (En réalité, bien sur, ASSAC fait ce tri simultanément avec les opérations suivantes).

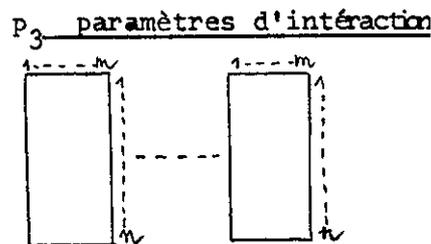
- On obtient alors les matrices suivantes pour une valeur donnée $J = J_1$



≡ assemblage de la conf 1 seule
ordre n

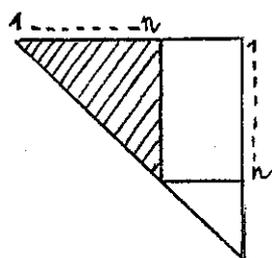


≡ assemblage de conf 2 seule
ordre m



interaction conf 1-conf2

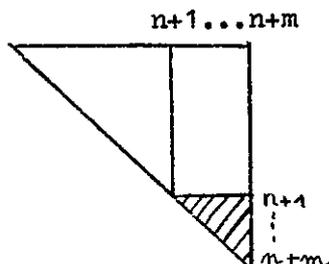
Alors pour obtenir l'assemblage de conf.1 + conf.2 il faut maintenant considérer ces matrices comme des parties d'une grande matrice d'ordre $n + m$. Il faut donc qu'ASSAC place les triangles et les rectangles dans le grand triangle d'ordre $(n + m)$, c'est-à-dire effectue les décalages de lignes et de colonnes nécessaires. On obtient alors pour les n^{os} de lignes et de colonnes.



pour les p_1 paramètres pas de décalages

$$i' = i$$

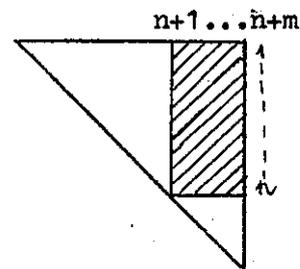
$$j' = j$$



pour les p_2 paramètres 2 décalages

$$i' = i + n$$

$$j' = j + n$$



pour les p_3 paramètres 1 décalage

$$i' = i$$

$$j' = j + n$$

ASSAC permet donc d'obtenir à partir des matrices données par AGENAC, des matrices formant soit :

- l'assemblage de Conf 1 seule
- l'assemblage de Conf 2 seule
- l'assemblage de (Conf 1 + Conf 2)

On peut suivant le même principe ajouter avec ASSAC autant de configurations que l'on veut, ou réciproquement extraire des assemblages de configurations dans un ensemble plus grand.

En résumé, nous voyons que la constitution de la bande bibliothèque nécessite deux programmes

- 1°) "AGENAC" qui calcule les coefficients angulaires des paramètres et les écrit sur bande magnétique sous forme de matrices
- 2°) "ASSAC" qui fait :
 - a) Trier les matrices des différents paramètres par valeur de J
 - b) Associer, soit directement à partir des résultats d'AGENAC, soit à partir des assemblages des configurations seules, un nombre quelconque de configurations
 - c) Dissocier les configurations assemblées.

Conclusion sur la chaîne de programmes

Toutes les transmissions entre les différents programmes de l'ensemble se font par bandes magnétiques et évitent à l'utilisateur de nombreuses manipulations de données et de résultats. Elles font gagner non seulement un temps précieux mais éliminent aussi un très grand nombre de risques d'erreurs.

III) Principes de fonctionnement d'"AGENAC"

Le programme "AGENAC" correspond à l'ancien programme "A" réalisé par Y. BORDARIER et décrit dans sa thèse.

Lors de la traduction en langage symbolique FORTRAN de "A", un grand nombre de modifications et d'améliorations ont complètement changé son principe de fonctionnement et nous allons essayer d'expliquer les différences essentielles. On trouvera en Appendice une description plus détaillée du nouveau programme.

- Rappelons que "A" calculait pour tous les jeux de variables possibles une formule très générale capable de représenter tous les types de coefficients α_{ij}^{jk} possibles :

$$X (J_1, \dots, J_m) = \pi_1^{\alpha} \left[\sum_{J'_1 \dots J'_p} \pi_2 + \dots + \sum_{J'_1 \dots J'_q} \pi_n \right]$$

avec $\pi_i = \delta(A_1, A_2) \dots \delta(A_i, A_j) (-1)^{J_1 + \dots + J_p} \left([J_{k_1}] [J_{k_2}] \dots [] \right)^{\delta} \left([[J_{k_1}]] \dots [[]]] \right)^{\delta}$

$$\frac{a\sqrt{b}}{c} \times \left(3J \right) \dots \left(3J \right) \times \left\{ 6J \right\} \dots \left\{ 6J \right\} \times \left\{ 9J \right\} \dots \left\{ 9J \right\} \text{table } i \dots \text{table } k$$

On voit qu'un π est un produit d'un certain nombre de fonctions bien connues : crochets, double crochets, 3J, 6J, 9J, etc...

On trouvera l'explication détaillée des notations page 8 de la Thèse d'Y. BORDARIER. Notons simplement qu'une "table" est une série de valeurs numériques $a\sqrt{b}/c$, fonctions d'une ou plusieurs variables, par lesquelles, il faut multiplier à tour de rôle la formule.

On considérait cette formule comme une fonction de m variables explicites J_1, \dots, J_m .

Les $J'_1 \dots J'_j$ étaient des variables muettes sur lesquelles on sommait.

Toutes les variables étaient indépendantes et on ne vérifiait que les relations triangulaires.

Dans ce type de calculs tous les résultats, intermédiaires ou définitifs, sont de la forme $a \times \sqrt{b/c}$ et les variables (ou nombres quantiques) sont entières ou $\frac{1}{2}$ entières. Donc, en doublant systématiquement les variables susceptibles d'être $\frac{1}{2}$ entières et en représentant un nombre n par la suite d'entiers $(\alpha_1, \dots, \alpha_{12})$ caractérisant sa décomposition sur les 11 premiers nombres premiers :

$$\begin{array}{l} \text{(représentation ROTENBERG)} \\ \alpha_{10/2} \quad \alpha_{11/2} \\ \dots 29 \quad \cdot \quad 31 \quad \cdot \quad (\alpha_{12}) \end{array} \quad n = 2^{\alpha_{1/2}} \cdot 3^{\alpha_{2/2}} \cdot \dots$$

on pouvait mener tous les calculs sous forme entière, sans jamais manipuler de grands nombres et sans perdre de précision.

Le résultat était une série de valeurs de χ pour tous les jeux possibles de variables, représentant des coefficients $\alpha_{ij}^{J_k}$ édités sur papier seulement, et non rangés sous forme de matrices. Un long travail de classification des résultats restait à faire pour réaliser l'assemblage :

- a) Replacer les coefficients obtenus dans les matrices $(\alpha_{ij}^{J_k})$ correspondantes
- b) Perforer les résultats de chaque matrice obtenue sous une forme équivalente à

n° de ligne, n° de colonne, coefficient:

- Le nouveau programme calcule, toujours sous forme entière, une formule du type (1) ou du type (2)

$$\chi(J_1, \dots, J_n) = \pi_1^{\alpha} \left[\sum_2 \pi_2 + \sum_3 \pi_3 + \dots + \sum_n \pi_n \right] \quad (1)$$

$$\chi(J_1, \dots, J_n) = \pi_1^{\alpha} \left[\sum_2 \pi_2 \left[\sum_3 \pi_3 \left[\dots \left[\sum_n \pi_n \right] \dots \right] \right] \right] \quad (2)$$

Mais il se rappelle que le but est de construire des matrices de coefficients dont les vecteurs de base sont des listes de termes.

On va conserver le sens physique des variables qui ne seront donc plus indépendantes et l'avancement des variables, c'est-à-dire les recherches successives de tous les jeux de variables pour lesquels il faut calculer la formule donnée, va se faire principalement par l'intermédiaire des listes de termes.

C'est la différence fondamentale existant entre les deux programmes comme nous le verrons dans le paragraphe suivant.

Nous examinerons successivement :

- 1°) les différents types de variables qu'il est nécessaire de définir et le principe de leur avancement.
- 2°) les avantages apportés par l'utilisation des listes de termes
- 3°) l'écriture des formules. Les nouvelles possibilités de calcul.

1°) Les différents types de variables - le principe de l'avancement des diverses variables

Avant tout nous allons préciser quelques notations.

Nous avons dit jusqu'ici, pour simplifier, qu'une formule représentait les coefficients d'un paramètre $n^{\circ} k$ donné. En réalité, plusieurs paramètres peuvent avoir leurs coefficients donnés par une même formule explicite.

Nous rencontrerons, par exemple, dans le calcul des configurations 1^{n1} du Samarium, des paramètres d'interaction électrostatique, dont les coefficients sont donnés par une formule du genre :

$$\langle (l^n \psi_1, l') \psi_{12} | \text{Opérateur} \text{ de rang } k | (l^n \psi_3, l') \psi_{12} \rangle = \dots \begin{pmatrix} l' & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_{\bar{\psi}} (\psi_1 | \bar{\psi}) (\psi_3 | \bar{\psi}) \begin{Bmatrix} \bar{S} & S_3 \\ S_2 & S_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l & L_3 \\ l & k & l' \\ L_1 & l' & L_2 \end{Bmatrix} \quad (3)$$

Dans f^6 cette formule sert à calculer les matrices des coefficients des trois paramètres G_1, G_3, G_5 , correspondant respectivement aux valeurs $K = 1, 3, 5$. La formule est ici fonction du rang K d'un tenseur, mais on peut en rencontrer d'autres, fonctions des rangs $K, K', K''...$ de plusieurs tenseurs.

Chaque jeu de valeurs ($K, K', K''...$) correspond alors au calcul des coefficients d'un paramètre n° k

Donc le programme doit pouvoir calculer à partir d'une même formule, non seulement les différentes matrices par valeur de J d'un paramètre k , mais aussi de plusieurs paramètres $k, k + 1, ...$ etc.

Il est nécessaire pour cela que le programme sache distinguer différents types de variables apparaissant dans les notations (3) et (4). Ces dernières supposent les calculs faits en couplage LS ce qui n'est pas du tout indispensable mais simplifié l'exposé

$$\langle (\ell^n s_1 L_1, \ell^m s_2 L_2) s_3 L_3, \ell^p s_4 L_4 \dots SLJM \Big|_{K, K', K''}^{Op. rangs} \Big| (\ell^n s'_1 L'_1, \ell^m s'_2 L'_2) s'_3 L'_3, \ell^p s'_4 L'_4 \dots S'L'JM' \rangle \quad (4)$$

- Nous pouvons maintenant définir 4 sortes de variables :

Toutes les variables appartiendront à l'un de ces 4 groupes même si les calculs sont faits dans un autre couplage :

-a) Les variables des "boucles extérieures" du type J ou $K, K'...$ K''

A chaque ensemble de valeurs de ces variables correspond une nouvelle matrice (\mathcal{C}_{ij}^{Jk}) à calculer.

-b) Les variables des boucles principales du type SL et S'L'

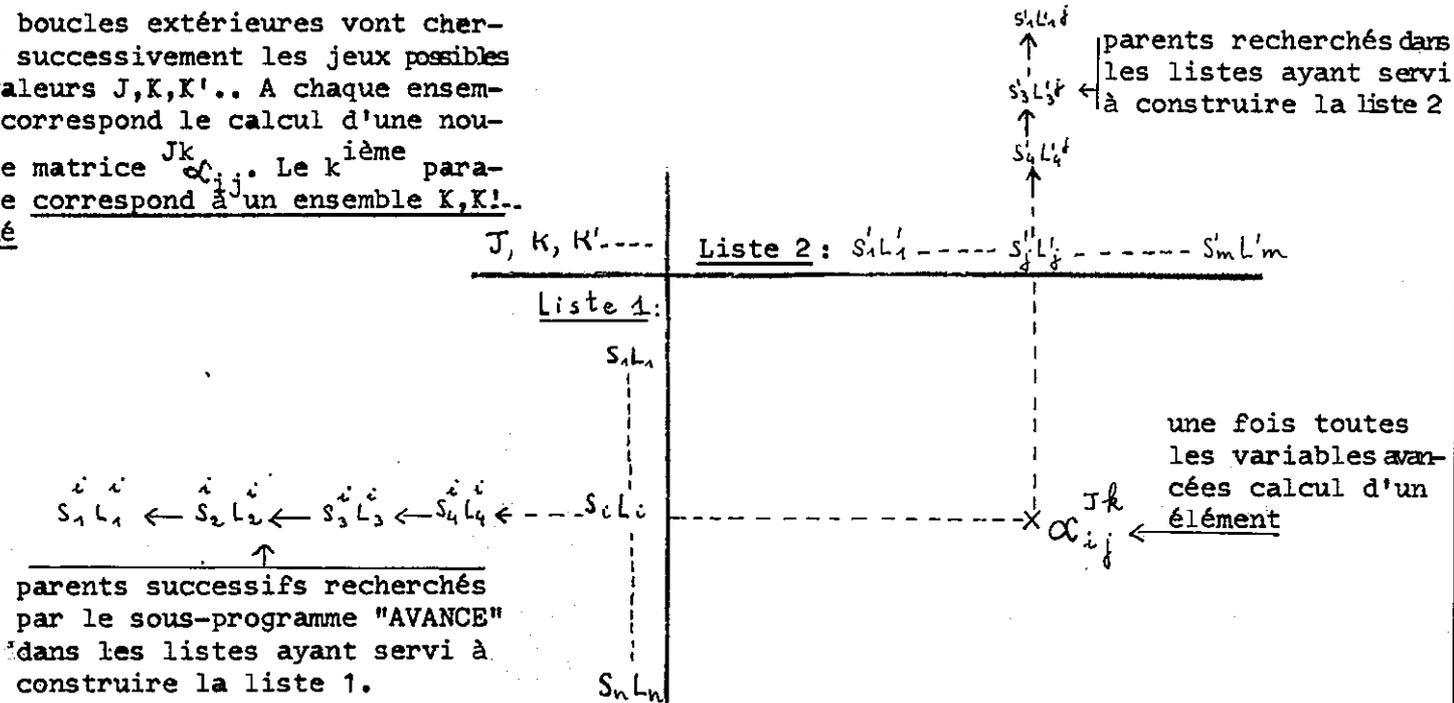
Elles correspondent aux dernières listes de termes construites. La liste 1 (SL...) définit les vecteurs lignes $\langle \quad |$, la liste 2 (S'L') définit les vecteurs colonnes $| \quad \rangle$

de base $\alpha_{ij}^{J_k}$

-c) Les variables liées du type $S_1 L_1, S_2 L_2 \dots$ c'est-à-dire appartenant à des listes de termes parentes jusqu'au $n^{\text{ième}}$ degré de la précédente. Ce sont les nombres quantiques nécessaires à la caractérisation complète des vecteurs de base $\langle SL |, | S'L' \rangle$ précédents. Ils seront recherchés à l'aide du sous-programme "AVANCE"

- On est donc dans la situation suivante pour préparer le calcul des matrices α_{ij}^J du $k^{\text{ième}}$ paramètre et rechercher les valeurs des différentes variables :

Les boucles extérieures vont chercher successivement les jeux possibles de valeurs $J, K, K' \dots$. A chaque ensemble correspond le calcul d'une nouvelle matrice $\alpha_{ij}^{J_k}$. Le $k^{\text{ième}}$ paramètre correspond à un ensemble $K, K' \dots$ donné



- Si les listes 1 et 2 sont différentes on calcule des matrices rectangulaires (cas des paramètres d'interaction entre 2 configurations)
- Si les listes 1 et 2 sont les mêmes on calcule des matrices triangulaires (cas des paramètres internes à une configuration)

-d) Les variables muettes du type $\bar{\psi}$ (formule 3), définies elles aussi par des listes de termes sur lesquelles on effectue les sommes, que nous appellerons "listes principales muettes" par analogie avec les "listes principales 1 et 2", parcequ'on peut aussi avoir besoin d'aller chercher les ancêtres successifs de ses termes.

$$\sum_{\text{Liste: } \bar{S}L \rightarrow \overset{=}{S}L \rightarrow \overset{=}{S}L \dots}$$

- Pour chaque jeu de variables explicites des paragraphes a) b) c), on calcule un coefficient numérique $\overset{Jk}{\alpha}_{ij}$. La machine range alors en mémoire, pour les éditer ensuite sur bande magnétique, les renseignements suivants :

- Le nom de la matrice à laquelle appartient le $\overset{Jk}{\alpha}_{ij}$ calculé
ce nom change chaque fois qu'on passe dans les boucles extérieures
- Le numéro de ligne i dans la matrice ($\overset{Jk}{\alpha}_{ij}$) de l'élément calculé
- Le numéro de colonne j
- La valeur de l'élément $\overset{Jk}{\alpha}_{ij}$

Maintenant que nous avons vu les différentes variables et leur avancement, notons quelques-uns des multiples avantages entraînés par l'utilisation des listes de termes :

2°) Les avantages apportés par l'utilisation des listes de termes

a) Grâce au principe de l'avancement des variables liées par les listes parentes, on ne s'occupe que des valeurs physiquement possibles, et on n'aura plus besoin de s'occuper des relations triangulaires qui seront automatiquement vérifiées.

- Prenons par exemple la sous-configuration $(f^6 S_1 L_1, d)$ SLJ construite sur les seuls termes ${}^7_F, {}^5_S, {}^5_P$ de f^6

Les termes (SL) de $f^6 d$ sont donc :

$$\begin{aligned} {}^7_F + {}^2_D &= {}^{8,6}_{P, D, F, G, H} && 18 \text{ termes SL correspondant cha-} \\ {}^5_S + {}^2_D &= {}^{6,4}_D && \text{cun à un seul } S_1 L_1 \text{ parent possible} \\ {}^5_P + {}^2_D &= {}^{6,4}_{P, D, F} \end{aligned}$$

On obtient au total 18 ensembles $(S_1 L_1 SL)$ possibles

Regardons la différence de traitement des deux programmes

- Dans l'ancien programme on disait à la machine de faire varier

- S_1 de 2 à 3 \rightarrow 2 valeurs possibles
- L_1 de 0 à 3 \rightarrow 4 valeurs possibles
- S de $3/2$ à $7/2$ \rightarrow 3 valeurs possibles
- L de 1 à 5 \rightarrow 5 valeurs possibles

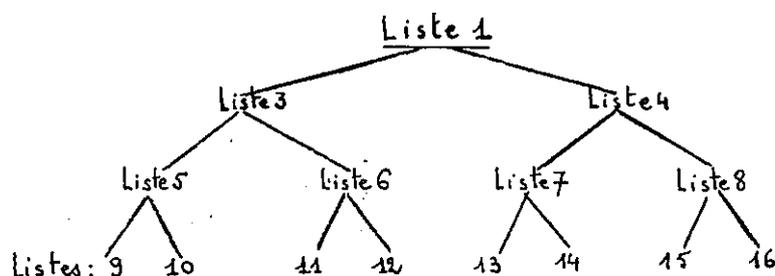
Elle allait donc chercher : $2 \times 4 \times 3 \times 5 =$ 120 ensembles $(S_1 L_1 SL)$ différents, dont 18 seulement correspondaient à un cas physique.

Pour chacun de ces 120 ensembles, la machine, avant d'exécuter le calcul numérique, vérifiait les 2 relations triangulaires $(S_1, S, \frac{1}{2})$, $(L_1, L, 2)$.

- Dans le nouveau programme, la machine prend successivement les 18 valeurs possibles de SL de la liste $f^6 d$, et pour chacun, va chercher son parent $S_1 L_1$ dans la liste parente.

Donc on ne s'occupe ici que des 18 ensembles $(S_1 L_1 SL)$ possibles

physiquement. Le gain de temps est très appréciable surtout si les listes résultantes 1 et 2 sont construites à partir de plusieurs listes 1^n et que l'on a besoin des ancêtres successifs :



$\langle ((9,10) 5, (11,12) 6) \underline{3}, ((13,14) 7, (15,16) 8) \underline{4}, \text{liste } \underline{1} \mid$

b) Supposons maintenant que l'on étudie une configuration

$1^n 1^m 1^p \dots$ la machine construit elle-même les listes de termes dont on a besoin, à partir de la donnée des listes d'électrons équivalents $1^n, 1^m, 1^p \dots$

Si dans l'ensemble précédent, les listes n° 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16 sont des listes d'électrons équivalents, la machine construit elle-même les listes 5, 6, 7, 8, 3, 4, 1.

La construction des listes peut être demandée dans les couplages LS, JJ, JS, SJ, JL, LJ, ce qui permet de calculer les formules dans ces différents couplages de base.

c) Un autre avantage évident est la possibilité de faire les calculs des matrices sur des listes de termes réduites sans rien perdre de l'automatisme du programme et sans calculs inutiles. On devra seulement construire, en général, les listes de termes soi-même.

Supposons que dans l'exemple donné on ne veuille pas tenir compte

des $({}^5D) {}^4D$, $({}^5P) {}^4P$, $({}^5P) {}^4D$ de $f^6 d$. On devra donner soi-même à la machine :

- la liste $f^6 {}^7F - {}^5S - {}^5P$

- la liste $f^6 d {}^8, {}^6P, D, F, G, H, {}^6D, {}^6PDF, {}^4F$

au lieu de donner les listes f^6 et d et de demander la construction de $f^6 {}^7F - {}^5S - {}^5P + {}^2D$, qui donnerait 8 termes de trop.

3°) Ecriture des formules - Nouvelles possibilités de calcul

a) Ecriture d'une formule à calculer

Une partie du programme "AGENAC" se charge de ranger en mémoire les renseignements utiles aux calculs ultérieurs, déduits des données perforées sur cartes par l'utilisateur.

Ces données sont réduites au minimum et permettent à l'utilisateur de ne pas connaître la structure du programme.

- Supposons par exemple qu'on ait à calculer la formule donnant les coefficients du paramètre $\sum_{\mathcal{L}}$ dans $f^6 ({}^7F)$ ds :

$$(-1)^{J+L+L'+S_2+S'_2} \frac{1}{\sqrt{[L][L'][S][S'][S_2][S'_2]}} \begin{Bmatrix} S' & L' & J \\ L & S & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ S'_2 & 1/2 & S_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_2 & 1 & S'_2 \\ 3 & 1/2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ 3 & 2 & 3 \end{Bmatrix} \sum (L_5 | L_1)^2 (-1)^{L_5} \begin{Bmatrix} 3 & 1 & 3 \\ 3 & L_5 & 3 \end{Bmatrix}$$

On perfore sur cartes

$$(-1)^{(J+L+LP+S_2+SP_2)} * ((L)(LP)(S)(SP)(S_2)(SP_2))^{1/2} * 6J(SP, LP, J, L, S, 1) * 6J(S, 1, SP, SP_2, 1/2, S_2) + 6J(S_2, 1, SP_2, 3, 1/2, 3) * 6J(L_1, LP, 3, 2, 3) * \text{SOMME LISTES}(SS, LS, NF) * \text{TABLE CFFF}(NS, NI) (-1)^{L_5} * 6J(3, 1, 3, 3, L_5, 3) \text{ \&}$$

et quelques renseignements annexes sur les listes, les constructions nécessaires, la sortie demandée (bande, cartes...). On trouvera dans l'ap-

pendice la liste exacte des données à perforer. On voit ici la grande similitude entre la formule telle qu'on l'écrit et la formule telle qu'on la perfore.

b) Découpage possible d'une formule en plusieurs parties à calculer

Nous savons déjà que le programme sait calculer automatiquement les matrices des coefficients d'un ou plusieurs paramètres donnés par une même formule, mais on peut aussi donner plusieurs formules à la suite, soit indépendantes, soit utilisant les résultats des formules précédentes mises en mémoire sous la même forme que les tables et traitées comme telles. Cette possibilité est d'un intérêt majeur puisqu'elle permet de ne pas calculer inutilement des parties de formule ne dépendant pas de certaines variables.

- Prenons un exemple très significatif

Supposons qu'on ait à calculer la formule donnant les coefficients du paramètre \sum_f dans (f^6_7F) ds. Définissons les vecteurs de base en couplage LS :

$$\langle (f^6_7F, d) S_2 L_2, s, SLJ \rangle \quad \text{et} \quad | (f^6_7F, d) S'_2 L'_2, s, S'L'J \rangle$$

On trouve :

$$-14 (-1)^{s_2 + s'_2 + L + L' + J + 1} \sqrt{[s][s'][s_2][s'_2][L][L']} \begin{Bmatrix} s' & L' & J \\ L & S & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & 1 & s' \\ s'_2 & 1/2 & s_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_2 & 1 & s'_2 \\ 3 & 1/2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ 3 & 1 & 3 \end{Bmatrix}$$

On peut donner à calculer successivement dans un même passage machine

$$-14 (-1)^{s_2 + s'_2 + 1} \sqrt{[s_2][s'_2]} \times \begin{Bmatrix} s_2 & 1 & s'_2 \\ 3 & 1/2 & 3 \end{Bmatrix} = \underline{\text{table}(N_2, N'_2)} \text{ mise en mémoire}$$

$$-(-1)^{L + L'} \sqrt{[s][s'][L][L']} \begin{Bmatrix} s & 1 & s' \\ s'_2 & 1/2 & s_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ 3 & 1 & 3 \end{Bmatrix} \times \text{table}(N_2, N'_2) = \underline{\text{table}(N, N')}$$

Boucle J $- (-1)^J \cdot \begin{Bmatrix} s' & L' & J \\ L & S & 1 \end{Bmatrix} \text{table}(N, N') = \underline{\text{matrices calculées éditées sur bande}}$

- Un autre exemple est celui des paramètres de SCATER qui ne dépendent pas du nombre quantique J. Il faut malgré tout que les matrices par J soient sur bande.

- On calcule d'abord la formule et on la met au mémoire dans une table (N, N')

- On donne comme 2ème formule

Boucle J - table (N, N') la machine rangera les coefficients dans des matrices par J sans les recalculer.

c) Le bloc calcul

Cette partie du programme est restée presque identique à celle de l'ancien programme "A".

La seule amélioration importante est la rapidité de calcul du 6J dont l'optimisation nous a particulièrement intéressée parce qu'il représente l'unité de temps de notre programme et conditionne très directement le temps total que dureront les calculs réalisés par "AGENAC".

La formule programmée pour le 6J est toujours la même, mais nous avons tabulé les factorielles et supprimé tous les appels de sous-programmes se trouvant dans des boucles de calculs, ainsi que les appels du sous-programme

$\Delta(j_1, j_2, j_3)$ [5]. On gagne ainsi le temps de transmission des valeurs des variables du programme "appelant" vers le programme "appelé" et vice versa.

Actuellement les temps réalisés sont de

<u>6 ms</u> pour le 6 J	$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}$	comprenant 1 seul terme
10 ms pour le 6 J	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	comprenant 2 termes dans la somme
14 ms pour le 6 J	$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$	comprenant 3 termes
<u>36 ms</u> pour le 6 J	$\begin{pmatrix} 8 & 8 & 8 \\ 8 & 8 & 8 \end{pmatrix}$	comprenant 9 termes

Conclusion - Le programme "AGENAC" et ses sous-programmes représentent dans leur version actuelle 3000 ordres FORTRAN, ce qui est déjà considérable, et ont demandé un temps assez long d'écritures et de mise au point.

- L'utilisation de la "représentation ROTENBERG" qui permet de faire les calculs sous forme entière, a l'avantage de ne faire perdre aucune précision aux calculs et de permettre de nombreuses vérifications, mais a l'inconvénient d'augmenter considérablement les temps de calcul qui sont beaucoup plus longs qu'en flottant.

Une option "bloc calcul flottant" sera peut-être nécessaire pour les grosses configurations.

- AGENAC est maintenant d'une utilisation simple et rapide et possède de nombreuses possibilités de calcul et une souplesse très grande.

Le fait qu'il soit écrit en FORTRAN IV UNIVAC a l'avantage de permettre son utilisation éventuelle sur toute autre calculatrice moderne au prix d'un petit nombre de modifications.

Introduction1°) Etat de la classification du Samarium

- La première classification du spectre d'arc du Samarium est due à ALBERTSON [6] qui trouva les deux multiplets $4f^6 6s^2 [7F]$ et $4f^6 6s 7s [9F]$ et 180 niveaux impairs qu'il attribua aux configurations $4f^6 6s 6p$ ou $4f^5 5d 6s^2$.

En 1935 parut l'article de A.S. KING [19] qui mesura un grand nombre de raies. Il les classa en fonction de la température et put distinguer celles venant du spectre d'arc et celles venant du spectre d'étincelle. Son travail apporte encore aujourd'hui une aide considérable pour la classification de Sm I et Sm II.

En 1949 BRIX [7] mesura le déplacement isotopique $Sm^{152} - Sm^{154}$ de 87 transitions aboutissant au fondamental. Il observa des déplacements compris entre -44 et $53 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ et suivant que le déplacement isotopique des raies était négatif (déplacement du niveau supérieur plus petit que celui du fondamental) ou positif il les attribua aux transitions $4f^6 6s 6p \rightarrow 4f^6 6s^2$ ou $4f^5 5d 6s^2 \rightarrow 4f^6 6s^2$. Il confirma la plupart des résultats d'ALBERTSON et trouva 4 nouveaux niveaux impairs. Ce travail a été la première application systématique du déplacement isotopique à la classification des spectres. Il a été confirmé et étendu par STRIGANOV, KATULIN et ELISEEV [8] et nous verrons dans l'étude théorique des configurations impaires de Sm I le très grand intérêt de cette première classification par configurations.

- La première classification du spectre d'étincelle du Samarium est due également à ALBERTSON [6] qui, outre les deux multiplets les plus profonds $4f^6 6s(8,6F)$ a identifié la plupart des niveaux des octuplets de $4f^6 5d$ et 163 niveaux impairs.

- La classification du Samarium a été entreprise à Bellevue en 1965 par J. BLAISE puis par M.G. SCHWEIGHOFER à l'aide d'une part des nombres d'onde de 15000 raies de Sm^{152} mesurés par C. MORILLON sur un SISAM [9] couvrant le domaine $0,8 - 2,5 \mu$ et d'autre part à l'aide de la mesure des structures Zeeman photographiées dans la région 3000 \AA à 9000 \AA avec le spectrographe Paschen-Runge d'Argonne National Laboratory. Cette étude a permis d'améliorer considérablement la classification de Sm I et Sm II.

- 50 nouveaux niveaux pairs de Sm I ont été trouvés parmi lesquels 40 appartiennent à la configuration $4f^6 5d 6s$ qui commence à 10801.10 cm^{-1} , trois sont des niveaux élevés de $4f^6 6s^2$ et un est le multiplet $4f^6 6s 7s [7F]$.

Actuellement 371 niveaux impairs de Sm I sont connus et leur g mesurés. Le plus profond est $4f^6 6s 6p [9G_0]$ situé à 13796 cm^{-1} et le premier niveau attribué à $4f^5 5d 6s^2$ apparaît dès 18075 cm^{-1} ; nous verrons qu'il doit être identifié avec $7H_2$. Ensuite apparaît à 22844 cm^{-1} le multiplet $[9I]$ de $4f^5 5d^2 6s$.

On peut prévoir dans la même région des niveaux de $4f^6 (5D) 6s 6p$ et $4f^6 5d 6p$. La fig. 1 résume les principaux résultats pour Sm I. Le premier niveau connu de chaque configuration est indiqué en traits

pleins ainsi que le type des transitions ayant permis de classer les niveaux. Les configurations attendues sont marquées en pointillés ainsi que les transitions qui permettront peut-être de les trouver.

- D'autre part 23 nouveaux niveaux pairs appartenant à $4f^6 5d$ de Sm II et environ 90 nouveaux niveaux impairs ont été trouvés.

Ainsi plus de 250 niveaux impairs sont connus et attribués à $4f^6 6p$ et $4f^5 5d 6s$; mais la mesure des déplacements isotopiques faite par BRIX puis par STRIGANOV ne porte que sur très peu de niveaux et la classification par configurations est très peu avancée.

La fig. 2 résume les principaux résultats pour Sm II suivant les mêmes conventions que pour la fig. 1

Sm I

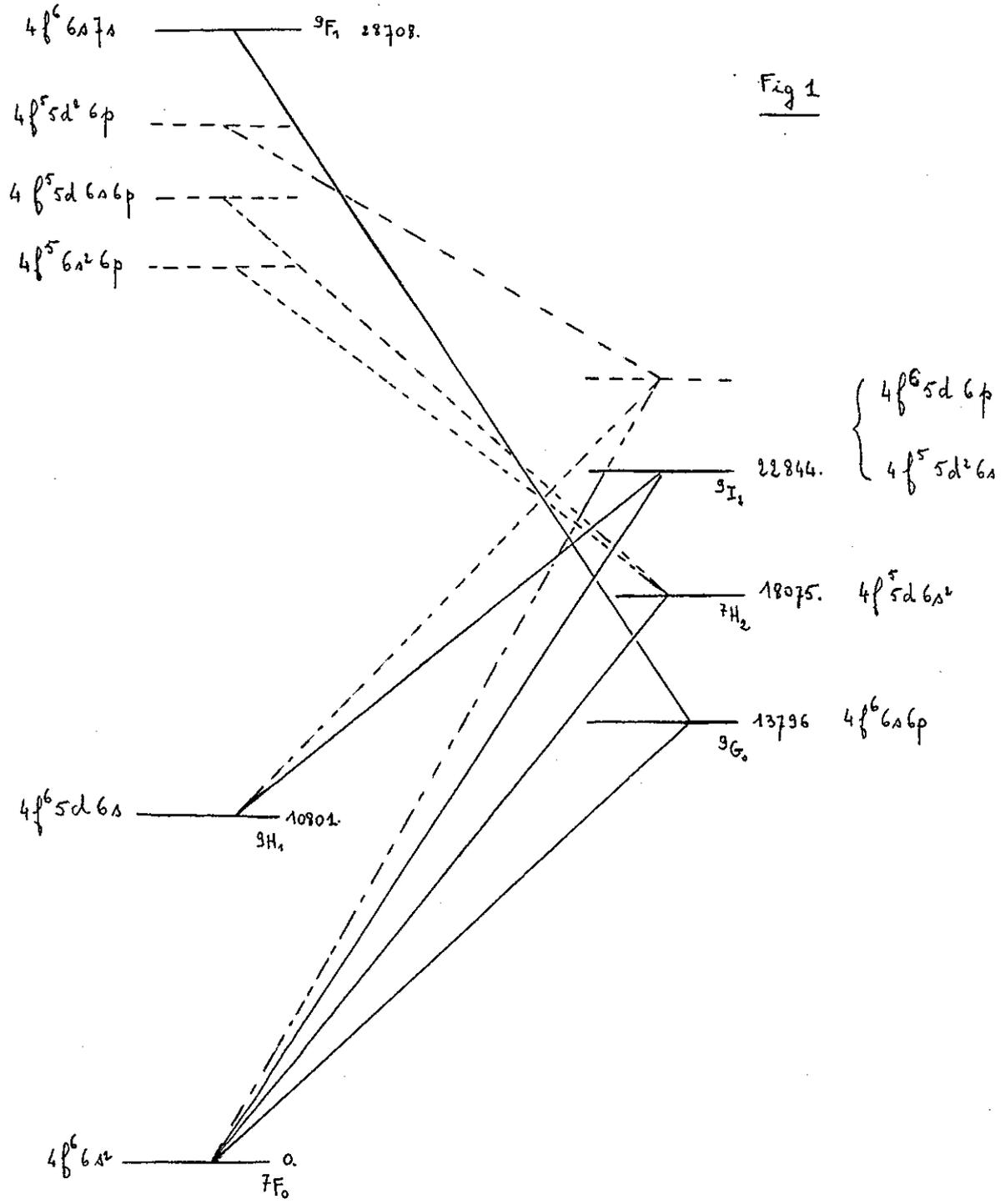


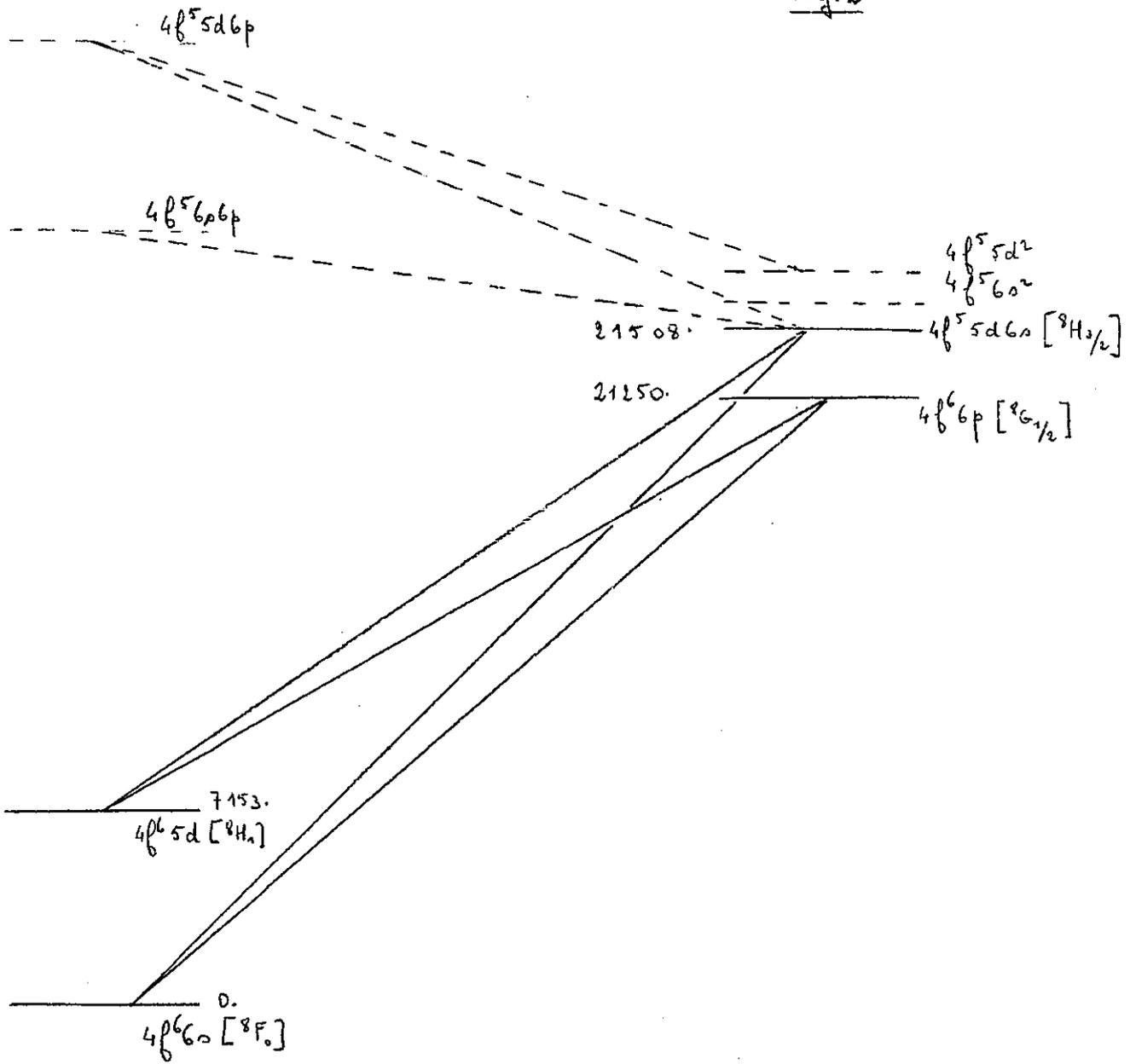
Fig 1

Configurations paires

Configurations impaires

Sm II

Fig. 2



Configurations paires

Configurations impaires

2°) Problèmes de la limitation des bases de calculs

En principe, les calculs du second ordre de la théorie des perturbations (cf. 1ère partie) permettent de pousser aussi loin qu'on veut l'accord théorie-expérience si l'on étend davantage la base, c'est-à-dire, si l'on introduit dans les calculs de plus en plus de configurations.

Nous allons voir qu'en réalité nous sommes très rapidement limités par les programmes et les machines.

- Les limites du programme de diagonalisation sont :

- la place utilisable en machine d'une part,
- les temps de calcul d'autre part.

Le nombre de mémoires nécessaires croît en $2n^2$, si n est l'ordre de la matrice et le temps utilisé croît en n^3 .

Dans le programme actuel toutes les données nécessaires à un calcul sont entrées en mémoire centrale, d'accès très rapide.

Aussi, sommes-nous limités par la place disponible en machine et non par le temps.

L'ordre maximum des matrices diagonalisables est actuellement égal à 100, un autre programme est prévu pour les matrices dont l'ordre est compris entre 100 et 500. Il utilisera les grosses mémoires périphériques, d'accès beaucoup plus lent, et n'entrera en mémoire centrale que les données nécessaires à des parties de calcul; nous serons limités alors par les temps de calculs, avant d'être limités par la place, les tambours et les bandes magnétiques représentant un nombre de mémoires très extensible.

- Nous avons vu dans la première partie que les temps de base du programme "AGENAC" ont été optimisés. Mais la complexité des formules donnant les

coefficients des paramètres est telle que les temps de calcul sont relativement longs. Il est nécessaire de simplifier au maximum les formules et d'évaluer le temps total que l'on utilisera avant d'entreprendre des calculs de configurations.

- Nous allons voir que dans l'étude du Samarium ce sont les limites du programme de diagonalisation qui sont vite atteintes.

Les figures (1) et (2) montrent que toutes les configurations connues ou attendues sont construites sur $4f^6$ et $4f^5$.

La configuration f^6 seule comporte déjà 119 termes, f^6d par exemple, en comporterait 906 et f^6ds 1812 ! La taille des matrices obtenues dépasserait largement les limites actuelles de nos programmes, les temps de calcul seraient énormes et l'extension théorique ainsi obtenue, c'est-à-dire la distance séparant le plus bas et le plus haut niveau théorique, serait très supérieure à l'intervalle à interpréter. OFELT [12] par exemple a évalué l'extension de $4f^6$ de Sm III à 200000 cm^{-1} environ, alors que la hauteur connue expérimentalement n'est que de 4000 cm^{-1} .

D'autre part, le long d'une région à interpréter de Sm I ou Sm II apparaissent toujours d'autres configurations dont il faut tenir compte dans les calculs, et nous venons de voir que l'étude d'une seule n'est déjà pas possible.

Il est donc indispensable de limiter les bases de calcul

Pour cela nous avons essayé de voir l'accord théorie-expérience obtenu si l'on admet :

- qu'on peut négliger l'action des configurations suffisamment éloignées de la région à interpréter. Les configurations à introduire dans

nos différents calculs dépendent des résultats expérimentaux et seront examinés dans chaque cas particulier.

- que seules les parties de ces configurations situées dans la région intéressante interviennent notablement.

Un problème commun à l'ensemble des configurations du Samarium est alors de choisir les multiplets de f^6 et f^5 sur lesquels nous construisons nos sous-configurations de base.

Aussi, allons-nous examiner successivement les troncatures de f^6 et f^5

A) Troncature de f^6

WYBOURNE [10] a trouvé que pour prévoir correctement un ensemble de niveaux de multiplicité donnée il faut introduire en plus dans les calculs ceux de multiplicité immédiatement inférieure et supérieure. Ainsi pour calculer correctement $f^6 \ ^7F$, qui est le seul septuplet, il faut prendre comme base $\ ^7F_J$ et tous les quintuplets. Ce calcul est possible pour f^6 , mais pas pour f^6_d par exemple, ni pour f^6_{ds} comme le montre le cas 3 du tableau ci-dessous et compte-tenu des limites du programme "DIAGON"

nombre de termes obtenus par	$[f^6]$	$[f^6_d]$	$[f^6_{ds}]$	
si on part de $f^6(^7F)$	1	10	20	(1)
+ les 3 $\ ^5D$	4	40	80	(2)
+ les autres $\ ^5$	17	158	316	(3)
tous les termes	119	906	1812	(4)

Les troncatures $f^6(7F)$ ou $f^6(7F, 5D^{1,2,3})$ sont seules envisageables pour l'instant.

Il nous reste à voir d'après les résultats de $4f^6$ [44] si elles ont un sens

- seul le multiplet fondamental $[7F]$ a été trouvé expérimentalement. La théorie faite par OFELT [12] en introduisant dans les calculs le septuplet, les quintuplets et les triplets rend bien compte des résultats expérimentaux.

Le multiplet $[7F]$ est très proche du couplage L S, c'est-à-dire que l'on trouve par exemple pour $J = 2$

$$[7F_2] = 0,98 |7F_2) - 0,13 |5D_2^3) + 0,11 |5D_2^2) + \dots$$

Nous dirons que la "pureté L S" de $[7F]$ est comprise entre 90 et 98 %. Elle nous montre l'indépendance de $[7F]$ par rapport aux autres multiplets.

Celui immédiatement supérieur serait un $[5D]$ situé 15000 cm^{-1} plus haut, donc bien séparé de $[7F]$. Les multiplets suivants $[5L]$, $[5G]$ etc commenceraient 6000 cm^{-1} au-dessus du premier $[5D]$.

On voit apparaître les 2 possibilités d'étude suivantes :

a) calculer seulement les parties de configurations construites sur $f^6(7F)$

et si l'accord n'est pas satisfaisant :

b) Calculer les parties de configurations construites sur $f^6(7F - 5D)$

Mais le $[5D]$ n'est pas pur, on a par exemple :

$$[5D_2] = 0,75 |5D_2^2) - 0,57 |5D_2^3) - 0,21 |5D_2^1) - 0,16 |7F_2) + \dots$$

En effet, l'interaction électrostatique a des éléments de matrices non

nuls entre les termes de même nom d'une configuration l^n et elle est responsable du grand mélange entre les trois 5D de f^6 .

Nous verrons dans le § C les diverses façons de tenir compte de la composition réelle du multiplet $[{}^5D]$ dans nos calculs. Regardons d'abord les diverses possibilités de couper la configuration f^5

B) Troncature de f^5

Les mêmes problèmes se posent pour les configurations f^5 qui comporte 73 termes dont 3 sextuplets et 24 quadruplets.

De même que le $[{}^7F]$ de f^6 était bien séparé du reste de la configuration, de même $[{}^6H]$ et $[{}^6F]$ sont séparés de 11000 cm^{-1} des multiplets supérieurs.

L'étude faite par WYBOURNE [10] rend bien compte des résultats expérimentaux qui pour $4f^5$ sont plus nombreux que pour $4f^6$ [13.]

La pureté de $[{}^6F]$ et $[{}^6H]$ est comprise entre 90 et 98 % et l'on pourra donc dans une première étape considérer seulement les parties de configurations construites sur $4f^5 ({}^6H - {}^6F)$

La seconde étape est ici beaucoup plus difficile à déterminer; il n'existe pas un petit groupe de multiplets suffisamment isolés. Une des seules possibilités serait d'ajouter 11 termes supplémentaires dans f^5 .

Mais nous verrons que dans Sm I et Sm II les configurations construites sur $4f^5$ apparaissent après la configuration fondamentale toujours construite sur $4f^6$ et la troncature $4f^5 ({}^6H - {}^6F)$ sera suffisante.

Nous venons de voir les différentes façons de couper les configurations $4f^6$ et $4f^5$ regardons les problèmes théoriques qui s'ensuivent.

C) Les différentes possibilités de limitation. Problème du coeur réel

Les problèmes sont différents selon les puretés des multiplets introduits dans les calculs et il existe plusieurs façons de tenir compte de l'influence des multiplets supérieurs; supposons d'abord que le multiplet soit très pur et très proche du multiplet théorique LS; c'est le cas par exemple pour $4f^6 ({}^7F)_1$; une première étape consistera à calculer simplement la sous-configuration construite sur le multiplet LS 7F .

Soit $4f^6 ({}^7F)_1$ ou $4f^6 ({}^7F)_{11}$

Les séparations des différents niveaux 7F_J de f^6 sont dues au paramètre ζ_f

- les écarts ainsi obtenus suivent rigoureusement la loi de Landé quelle que soit la valeur de ζ_f . C'est-à-dire que les écarts sont toujours proportionnels entre eux suivant la loi :

$$\frac{E_J - E_{J-1}}{J} = \text{cte}$$

- le multiplet théorique sur lequel nous avons construit nos sous- configurations vérifie donc :

$$\frac{E_1 - E_0}{1} = \frac{E_2 - E_1}{2} = \dots = \frac{E_6 - E_5}{6} = A = \frac{\zeta 4f}{6}$$

E_6 _____ 7F_6
 E_1 _____ 7F_1
 E_0 _____ 7F_0

Multiplet théorique $f^6 ({}^7F)$

- Or les écarts expérimentaux ne suivent pas très bien cette loi les résultats expérimentaux pour le multiplet réel $[{}^7F]$ dans $4f^6$ de Sm III et $4f^6 6s^2$ de Sm I sont égaux respectivement à :

— 3981	— 4021
— 3099	— 3125
— 2257	— 2273
— 1481	— 1489
— 808	— 812
— 291	— 293
— 0	— 0

Fig. 3

 $4f^6 [^7F]$ $4f^6 6s^2 [^7F]$

On trouve pour $\Delta E_J / J$ dans $4f^6$ par exemple, les valeurs successives suivantes :

	$\Delta E_J / J$
$(E_1 - E_0) / 1$	291
$(E_2 - E_1) / 2$	258
$(E_3 - E_2) / 3$	226
$(E_4 - E_3) / 4$	194
$(E_5 - E_4) / 5$	168
$(E_6 - E_5) / 6$	147

On voit que $\Delta E_J / J$ n'est pas constant et décroît régulièrement quand J croît.

$E_6 - E_5 / 6$ est même égal à peu près à la moitié de $(E_1 - E_0) / 1$

$\Delta E_j / J$ varie donc du simple au double et aucun ajustement de ζ_{4f} ne parviendra à rendre compte de ces déformations.

Aussi peut-il être intéressant de tenir compte dans les calculs des séparations réelles des niveaux ${}^7F_{J_1}$. Nous aurons donc à calculer des sous-configurations que nous noterons

$$\underline{4f^6 [{}^7F \text{ réel}]_1} \text{ ou } \underline{4f^6 [{}^7F \text{ réel}]_{11'}}$$

$[{}^7F \text{ réel}]$ est un multiplet déformé énergétiquement mais dont la composition est toujours purement L S.

La figure 3 nous montre que le coeur $4f^6$ varie très peu entre $4f^6$ de Sm III et $4f^6 6s^2$ de Sm I, et l'on peut admettre qu'il est stable et peu différent dans les configurations $4f^6 [{}^7F]_1$

Pour tenir compte des déformations de $4f^6 [{}^7F]$ on supprime le paramètre ζ_{4f} et l'on considère les énergies expérimentales ${}^7F_{0,1\dots 6}$ comme 7 paramètres que l'on ne fera en principe pas varier

$$E_{(J_1 = 0)} \dots E_{(J_1 = 6)}$$

En couplage J_j pour une configuration $f^6 l$ par exemple, les coefficients de ces paramètres sont diagonaux et on a pour chaque J_1 les éléments de matrice

$$\langle f^6 {}^7F_{J_1}, l_j, J_{M_j} | Q_{\lambda} | f^6 {}^7F_{J_1'}, l_{j'}, J_{M_j'} \rangle = \delta(j, j') \delta(J_1, J_1') \cdot E_{J_1}$$

On doit repasser en couplage L S et on obtient après recouplage des moments angulaires

$$[J_1] \sum_j [j] \begin{Bmatrix} 3 & 3 & J_1 \\ 1/2 & l & j \\ s & L & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 3 & 3 & J_1 \\ 1/2 & l & j \\ s' & L' & J \end{Bmatrix} \sqrt{[s][L][s'][L']} \cdot E_{J_1}$$

On a donc introduit ainsi 7 pseudo paramètres qui imposent des déformations "énergétiques" au multiplet théorique 7F . Les hauteurs et

les compositions des niveaux de $f^6 [{}^7F \text{ réel}]$ 1 seront différentes du cas $f^6 ({}^7F)$ 1 précédent, mais il faut remarquer que l'on ne tient pas compte de la composition réelle du multiplet $[{}^7F]$ de f^6

$$[{}^7F_J] = \alpha_1 |{}^7F_J\rangle + \alpha_2 |{}^5D_J^1\rangle + \alpha_3 |{}^5D_J^2\rangle + \alpha_4 |{}^5D_J^3\rangle + \dots$$

et l'on peut alors envisager de calculer dans une étape suivante des sous-configurations que nous noterons

$$\underline{4f^6 \{ {}^7F \} 1} \quad \text{ou} \quad \underline{4f^6 \{ {}^7F \} 11'}$$

où l'on tient compte de

la composition de $[{}^7F]$ et des énergies réelles.

On devra donc calculer :

$$\begin{aligned} & \langle f^6 \{ {}^7F \} d \mid H \mid f^6 \{ {}^7F \} d \rangle \quad \text{soit} \\ & \langle \alpha_1 ({}^7F \mid + \alpha_2 ({}^5D^1 \mid + \dots, d \mid H \mid \alpha_1 |{}^7F\rangle + \alpha_2 |{}^5D^1\rangle + \dots, d \rangle \\ = & \alpha_1^2 \langle {}^7F, d \mid H \mid {}^7F, d \rangle + \dots + \alpha_4^2 \langle {}^5D^3, d \mid H \mid {}^5D^3, d \rangle + \dots \\ & + 2\alpha_1\alpha_2 \langle {}^7F, d \mid H \mid {}^5D^1, d \rangle + \dots + \dots \end{aligned}$$

Cette méthode tient compte de l'effet de la composition du multiplet réel $[{}^7F]$ sur les niveaux appartenant à la sous-configuration $f^6 [{}^7F] d$. Nous avons pris $f^6 [{}^7F] d$ comme exemple mais on a vu que le multiplet $[{}^7F]$ de f^6 était très pur et il n'est pas nécessaire de tenir compte de sa composition réelle.

Il n'en serait pas de même si l'on introduisait dans les calculs le multiplet $4f^6 [{}^5D]$

$$[{}^5D] = \beta_1 |{}^5D^1\rangle + \beta_2 |{}^5D^2\rangle + \beta_3 |{}^5D^3\rangle + \beta_4 |{}^7F\rangle + \dots$$

dont les composantes sur les trois $|{}^5D\rangle$ de f^6 sont de même importance.

Nous venons de voir 3 études de plus en plus poussées d'une seule con-

figuration :

- multiplet $S_1 L_1$ très pur on calcule $1^n (S_1 L_1) 1'$
(multiplet L S)
- multiplet $S_1 L_1$ très pur mais déformé.... on calcule $1^n [S_1 L_1 \text{ réel}] 1'$
(énergies réelles)
- multiplet $S_1 L_1$ mélangé..... on calcule $1^n \{S_1 L_1\} 1'$
(compositions réelles
et énergies réelles)

Regardons maintenant les différentes méthodes pour étudier 2 sous-figures appartenant à une même configuration ou à 2 différentes. Elles dépendront aussi de la pureté L S des multiplets sur lesquels sont construites les sous-configurations.

Supposons d'abord que les multiplets soient très purs. C'est le cas des multiplets 6H et 6F de $4f^5$, on calculera simplement :

$$\underline{4f^5 ({}^6H - {}^6F) 11'}$$

Supposons que les multiplets soient très purs mais déformés en énergie, on introduira le coeur réel et les pseudo paramètres. On aura par exemple à calculer :

$$\underline{4f^6 [{}^7F \text{ réel}] d + 4f^6 [{}^7F \text{ réel}] s}$$

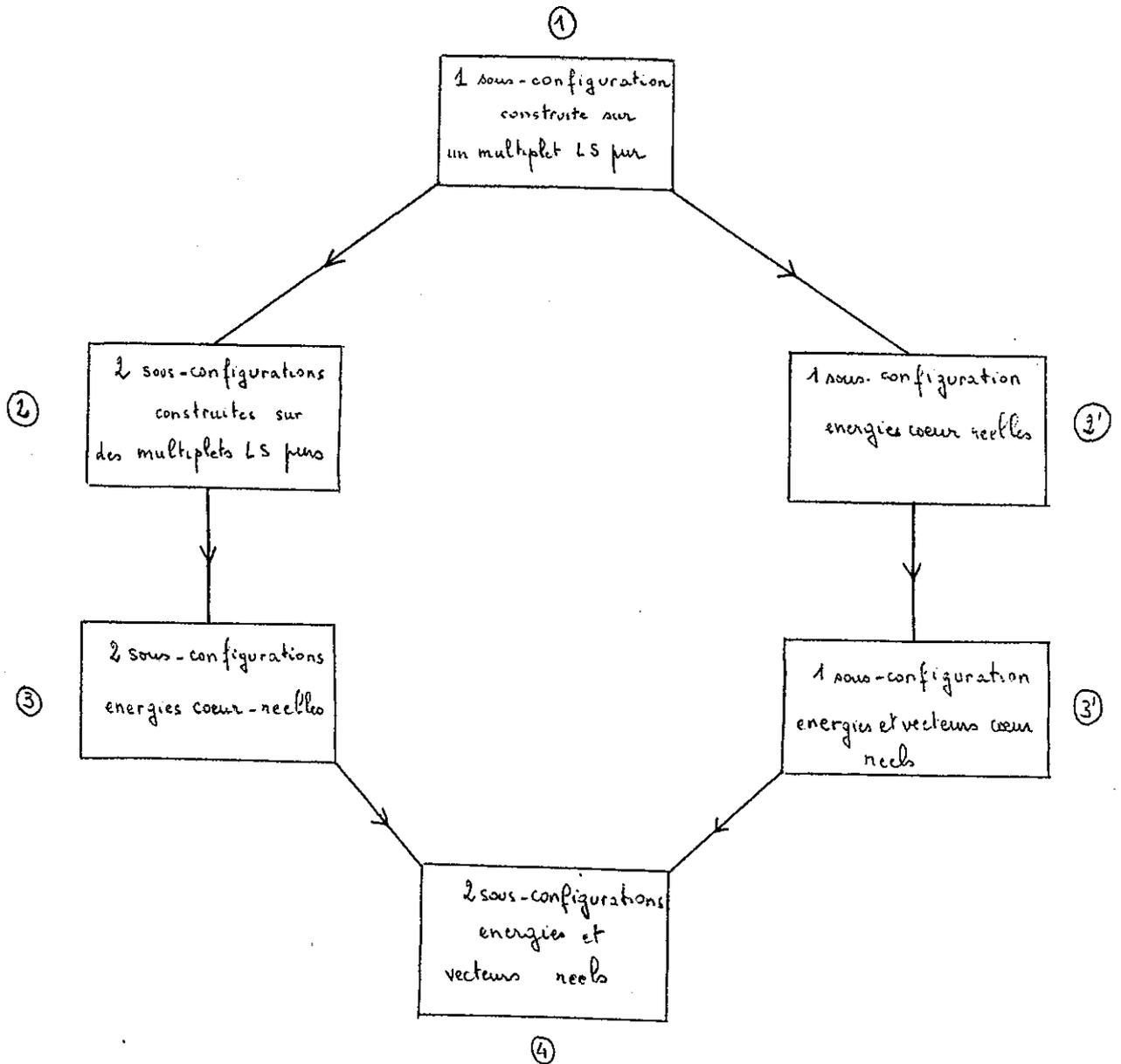
Supposons que les multiplets soient très mélangés ; on devrait alors calculer les deux sous-configurations en tenant compte des vecteurs réels

par ex. $\underline{4f^6 (\{{}^7F\}, \{{}^5D\}) d}$

ou $\underline{4f^6 (\{{}^7F\}, \{{}^5D\}) d + 4f^6 (\{{}^7F\}, \{{}^5D\}) s}$

Le tableau ci-dessous résume les différents cas dont nous avons parlés, classés dans un ordre croissant d'approximation.

Fig 4



Nous rencontrerons dans ce qui suit les cas ①, ②, ③, ④

3°) Quelques généralités sur les calculs et les paramètres utilisés

- Dans toutes les études qui vont suivre les calculs sont faits en couplage L S généralisé, c'est-à-dire que les vecteurs de base sont du type :

$$- \langle (1^n S_1 L_1, 1') SLJM_J |$$

$$- \langle (1^n S_1 L_1, 1') S_2 L_2, 1'', SLJM_J |$$

- On aura à calculer les éléments de matrice de $H = Q + \Lambda$

sur les bases choisies.

On a vu dans la première partie que $Q = \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}}$ introduit les paramètres F^n et G^n . Les coefficients de ces paramètres sont très petits et on préfère en général utiliser les paramètres F_n et G_n . Le tableau I donne les facteurs de passage pour les types d'interaction que nous rencontrerons.

Intéactions

fd	F_2	F_4	G_1	G_3	G_5
	105	693	35	315	15246/10

fp	F_2	G_2	G_4
	75	175	189

fs	G_2
	7

ds	G_2
	5

ps	G_1
	3

TABEAU I des facteurs α_n et β_n

$$F_n = \frac{F^n}{\alpha_n}$$

$$G_n = \frac{G^n}{\beta_n}$$

- Fixation d'une origine dans le cas d'une seule configuration ou sous-configuration

L'exposé de la 1ère partie sur les méthodes utilisées montre que l'on ne calcule pas les énergies absolues des niveaux d'une configuration mais seulement les séparations des niveaux entre eux.

Les énergies expérimentales sont repérées par rapport au niveau fondamental et l'on doit introduire un paramètre T que nous appellerons "hauteur moyenne" dont le rôle est seulement de déplacer en bloc tous les niveaux de la configuration de façon à cadrer les résultats théoriques et expérimentaux.

La valeur de T est déterminée par la condition

$$\sum_{i=1}^N d E_i = 0$$

C'est donc un paramètre purement diagonal et ses coefficients ont été pris égaux à 1. Certains paramètres tels que les F^0 n'entraînent qu'un déplacement global de la configuration ; T tient déjà compte de cet effet et on ne doit donc pas introduire ces paramètres dans nos calculs.

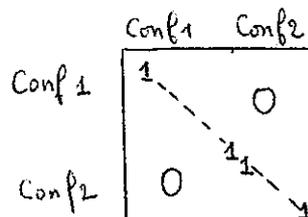
Cas de deux configurations ou de deux sous-configurations appartenant à deux configurations différentes

Nous aurons par exemple à calculer $f^6 ({}^7F) s + f^6 ({}^7F) d$ les écarts théoriques calculés dépendent, en plus des interactions internes à chaque configuration, de l'interaction entre les 2 configurations, qui elle-même dépend de la distance des deux configurations.

Nous devons donc introduire ici :

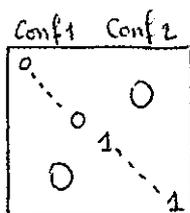
- d'une part un paramètre de cadrage T pour les mêmes raisons que ci-dessus, qui déplacera d'une même quantité tous les niveaux des deux

configurations. c'est donc un paramètre diagonal et ses coefficients ont été pris égaux à 1



- d'autre part un paramètre que nous noterons S , permettant de faire varier la distance des 2 configurations, c'est-à-dire permettant de déplacer en bloc tous les niveaux d'une configuration par rapport aux niveaux de l'autre.

C'est encore un paramètre diagonal dont les coefficients sont égaux à 1 entre les états d'une configuration, 0 pour les autres



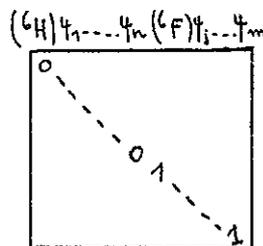
Ce paramètre joue un rôle dans l'ajustement des écarts des niveaux théoriques.

Cas de deux sous-configurations construites sur deux multiplets L S d'une même configuration

Nous rencontrerons le cas $f^5 ({}^6H - {}^6F) ds$. On peut considérer que l'on calcule les deux sous-configurations $f^5 ({}^6H) ds + f^5 ({}^6F) ds$. Nous aurons comme toujours le paramètre diagonal T dont les coefficients sont égaux à 1 sur toute la base $f^5 ({}^6H - {}^6F) ds$.

Nous devons d'autre part tenir compte de la séparation des multiplets 6H et 6F dans $4f^5$. Ils sont indépendants (L S purs) et l'on introduit seulement un paramètre $D_1 ({}^6H - {}^6F)$ qui permet de déplacer tous les

niveaux construits sur 6F par exemple par rapport à tous ceux construits sur 6H



Notations utilisées pour les interactions électrostatique et de spin-orbite

- Nous noterons $Q(1^n 1')$ la partie de l'interaction électrostatique dépendant des paramètres $F^k(1, 1')$ et $G^k(11')$. Elle représente l'interaction de l'électron $1'$ avec le coeur 1^n
- Nous noterons $Q(1^n)$ la partie de l'interaction électrostatique dépendant des paramètres $F^k(11)$. Elle représente l'interaction entre les électrons du coeur
- Nous noterons $\Lambda(1^n)$ la partie de l'interaction de spin-orbite dépendant du paramètre ζ_1
- Enfin, nous noterons $\Lambda(1')$ la partie de l'interaction de spin-orbite dépendant du paramètre $\zeta_{1'}$

ETUDE THEORIQUE DU SAMARIUM II

I - Configurations paires $4f^6 6s + 4f^6 5d$

Notre but est d'interpréter théoriquement les 58 niveaux expérimentaux attribués à $4f^6 6s$ et $4f^6 5d$, d'obtenir les valeurs des paramètres et de mettre en évidence d'éventuelles interactions. Les deux multiplets 8F et 6F attribués à $4f^6 6s$ sont situés de 0 à 5000 cm^{-1} et proviennent donc sans ambiguïté du terme parent 7F , le fondamental de $4f^6$.

Les multiplets attribués à $4f^6 5d$ se situent de 7000 à 17000 cm^{-1} , soit une extension de 10000 cm^{-1} et peuvent tous provenir également du terme parent 7F , mais les plus élevés peuvent être perturbés par $f^6 (^5D) (d + s)$.

Nous avons fait deux études successives dont nous allons parler :

$$- \underline{4f^6(^7F) 6s + 4f^6(^7F) 5d}$$

c'est à dire que nous calculons deux sous-configurations construites sur le multiplet L S pur 7F (cas n° 2 de la discussion précédente C).

$$- \underline{4f^6(^7F \text{ réel}) 6s + 4f^6(^7F \text{ réel}) 5d}$$

nous calculons encore deux sous-configurations construites sur le multiplet 7F ; nous ne tenons pas compte de sa composition réelle mais nous tenons compte des écarts réels de ses niveaux (cas n° 3 de la discussion C).

Il ne semblait pas utile d'introduire les compositions réelles des niveaux 7F_J . En effet, nous avons vu dans l'introduction la grande pureté du multiplet $f^6 [{}^7F]$.

$$A) \underline{4f^6({}^7F) 6s + 4f^6({}^7F) 5d}$$

représente une base de 70 niveaux théoriques

$$|(f^6 {}^7F, d) SLJM_J), |(f^6 {}^7F, s) SLJM_J)$$

1°) Calcul des coefficients des paramètres de $4f^6({}^7F)$

Nous devons calculer $(f^6 {}^7F, d, SLJM_J | H | f^6 {}^7F, d, S'L'JM_J)$

ou $H = Q + \Lambda$

$$\text{avec } Q = \sum_{i \rightarrow j} \frac{e^2}{r_{ij}} = \underline{Q(f^6) + Q(f^6 d)}$$

$$\Lambda = \sum \xi(r_i) l_i \cdot A_i = \underline{\Lambda(f^6) + \Lambda(d)}$$

a) $Q(f^6)$

L'interaction $Q(f^6)$ sépare les différents termes de f^6 .

Nous avons pris comme base les multiplets de $f^6 d$ construits sur 7F seulement; nous ne nous intéressons donc pas à $Q(f^6)$ qui n'introduit qu'un déplacement global de la sous-configuration dont il est tenu compte par le paramètre T, que nous avons défini dans le § 3° de l'introduction.

b) $\Lambda(f^6)$

Cette interaction de spin-orbite sépare les niveaux 7F_J de $4f^6$ et introduit le paramètre $\sum 4f$ dont les coefficients sont donnés, toutes simplifications faites par la formule :

$$6 \times 3 \times 7 \times 7 \sqrt{14} (-1)^{L+L'+I+1/2} \sqrt{[S][S'][L][L']} \begin{Bmatrix} S' L' J \\ L S 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L 1 L' \\ 3 2 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S 1 S' \\ 3 1/2 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 3 1 3 \\ 1/2 5/2 1/2 \end{Bmatrix} \times \\ \sum_{\bar{\Psi}} (\langle \bar{\Psi}^5 | \bar{\Psi} \rangle \langle \bar{\Psi}^6 | 7F \rangle)^2 (-1)^{\bar{L}} \begin{Bmatrix} 3 & 1 & 3 \\ 3 & \bar{L} & 3 \end{Bmatrix}$$

c) $\Lambda(d)$

L'interaction spin-orbite de l'électron d introduit le paramètre ζ_{5d} . les coefficients sont donnés toutes simplifications faites par :

$$3\sqrt{5} (-1)^{I+S+S'+1/2} \sqrt{[S][L][S'][L']} \begin{Bmatrix} 1 S' S \\ J L L' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 S' S \\ 3 1/2 1/2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L L' 1 \\ 2 2 3 \end{Bmatrix}$$

d) $Q(f^6 d)$

B.R. JUDD [14] a étudié les configurations $1^n l'$ et montré comment les éléments de matrice de $Q(1^n l')$ s'expriment en fonction des intégrales de SLATER définies pour la configuration $1 l'$

Les paramètres qui interviennent sont $F^0(4f, 5d)$, $F^2(4f, 5d)$, $F^4(4f, 5d)$ et $G^1(4f, 5d)$, $G^3(4f, 5d)$, $G^5(4f, 5d)$

Le paramètre F^0 déplace, en bloc la configuration et le paramètre T en tient compte. En appliquant les formules données par JUDD à notre cas particulier, on obtient pour les coefficients de

- $\underline{F^k \quad k = 2, 4}$

$$5 \times 7 \times \delta(S, S') \delta(L, L') (-1)^L \begin{pmatrix} 3 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & k & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & k & 2 \\ 3 & L & 3 \end{Bmatrix} (7F \parallel U^{(k)} \parallel 7F)$$

- $\underline{G^k \quad k = 1, 3, 5}$

$$6 \times 5 \times 7 \delta(S, S') \delta(L, L') 7 \times 7 \begin{pmatrix} 2 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sum_{\bar{\Psi}} (\langle \bar{\Psi}^5 | \bar{\Psi} \rangle \langle \bar{\Psi}^6 | 7F \rangle)^2 \begin{Bmatrix} 1/2 & 5/2 & 3 \\ 1/2 & S & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{L} & 3 & 3 \\ 3 & k & 2 \\ 3 & 2 & L \end{Bmatrix}$$

2°) Calcul des coefficients des paramètres $4f^6(7F) 6s$

Il faut calculer $(f^6 7F, s, SLJM_J | H | f^6 7F, s, S'L'JM_J)$ où $H = Q + \Lambda$

avec $Q = Q(f^6) + Q(f^6 s)$

$$\underline{\Lambda = \Lambda(f^6)}$$

a) $\Lambda(f^6)$ introduit le paramètre $\zeta 4f$ dont les coefficients sont donnés par :

$$6 \times 3 \times 7 \times 7 \sqrt{14} (-1)^{J+3/2} \sqrt{[S][S']} \begin{Bmatrix} S' & 3 & J \\ 3 & S & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ 3 & 1/2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 3 & 1 & 3 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{Bmatrix} \sum_{\Psi} (\Psi | \Psi) \begin{Bmatrix} 7F \\ 3 & 1 & 3 \end{Bmatrix} (-1)^L \begin{Bmatrix} 3 & 1 & 3 \\ 3 & 1 & 3 \end{Bmatrix}$$

b) $Q(f^6 s)$

Les paramètres qui interviennent sont F^0 qu'on peut ignorer et $G^3(4f, 6s)$ dont les coefficients sont donnés par

$$\delta(S, S') \times 6 * \begin{Bmatrix} 7/2 & 5/2 & 3 \\ 7/2 & S & 3 \end{Bmatrix}$$

3°) Calcul des coefficients des paramètres d'interaction entre $4f^6(7F) 5d$ et $4f^6(7F) 6s$

L'interaction électrostatique donne des éléments de matrice non nuls.

on doit calculer $(f^6 7F, d, SLJM_J | Q | f^6 7F, s, S'L'JM_J)$

L'interaction directe introduit le paramètre :

- $R^2(fd, fs)$ dont les coefficients sont donnés par

$$-7\sqrt{5} \delta(L, L') \delta(S, S') \begin{Bmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 3 & 3 & 3 \end{Bmatrix} (7F || u^2 || 7F)$$

L'interaction d'échange introduit le paramètre :

- $R^3(fd, sf)$ dont les coefficients sont donnés par

$$6 \times 7 \sqrt{5} \delta(S, S') \delta(L, L') 7 \times 7 * \begin{Bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \sum_{\Psi} (13)^2 \begin{Bmatrix} 7/2 & 5/2 & 3 \\ 7/2 & S & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 3 & 3 & 0 \\ 3 & 1 & 3 \end{Bmatrix}$$

Résultats

Nous avons vu dans la 1ère partie le processus des itérations. Au bout de quelques-unes, nous avons obtenu un assez bon accord avec l'expérience. L'écart quadratique moyen, pour les énergies de 54 niveaux connus sur 58, était 172 cm^{-1} , soit 1/100 environ de la hauteur totale interprétée, et l'accord pour les g était 0.04. Rappelons que l'écart quadratique moyen est $\left[\sum_1^N (\Delta E_i)^2 / (N-M) \right]^{1/2}$ où $N = \text{Nbre d'équations}$ et $M = \text{Nbre de paramètres libres}$. Tous les niveaux sont interprétés sans difficulté. Seule l'identification du dernier multiplet expérimental est ambiguë, nous ne l'avons pas introduit dans les moindres carrés. Les valeurs des paramètres sont données dans le tableau V. Nous n'avons pas donné le tableau des résultats complets, un meilleur accord ayant été obtenu en étudiant :

$$B) \quad \underline{4f^6(^7F \text{ réel}) 6s + 4f^6(^7F \text{ réel}) 5d}$$

L'accord théorie-expérience obtenu ci-dessus était déjà correct mais nous voulions améliorer les résultats pour les multiplets supérieurs.

Nous avons donc essayé de voir l'influence de la déformation du coeur $4f^6$ (cas 3 de la figure 4).

Nous savons qu'il faut remplacer ζ_{4f} par 7 pseudo-paramètres égaux aux énergies expérimentales de $^7F_{6-6}$. La formule donnant les coefficients a déjà été donnée dans le § C de l'introduction. De même, nous devons remplacer ζ_{4f}^* par 7 autres pseudo-paramètres égaux aux précédents. Les 14 pseudo-paramètres sont fixés dans les moindres carrés et au total nous avons donc deux paramètres de moins, ζ_{4f} et ζ_{4f}^*

Résultats obtenus

L'écart quadratique moyen est passé de 172 cm^{-1} à 135 cm^{-1} soit une amélioration d'ensemble de 20 % environ.

Les moindres carrés ont été faits dans les conditions les plus identiques possibles (mêmes niveaux identifiés, mêmes paramètres libres ou fixés...) et les 14 pseudo-paramètres sont restés fixés rigoureusement aux valeurs expérimentales.

L'écart quadratique moyen pour les g est de 0.040 c'est-à-dire qu'il est resté le même.

Les résultats complets classés par valeur de J sont donnés par le tableau I, on trouve successivement dans les six premières colonnes, la valeur de J , l'énergie calculée par les moindres carrés, l'énergie observée, l'écart énergie observée - énergie calculée, les g observés, les g calculés dans la dernière diagonalisation. Nous avons donné à partir de la 7ème colonne les carrés des trois plus grandes composantes $L S$ des niveaux calculés, lorsqu'ils étaient supérieurs à 10 %.

Les niveaux appartenant à la sous-configuration $f^6[{}^7F] s$ sont marqués d'un astérisque (${}^8F^*$ ${}^6F^*$). On peut remarquer immédiatement que l'interaction entre $f^6[{}^7F] d$ et $f^6[{}^7F] s$ est très faible, aucun niveau réel n'ayant à la fois des composantes sur $f^6[{}^7F] d$ et $f^6[{}^7F] s$, supérieures à 10 %.

Nous avons donné entre parenthèses le multiplet expérimental perturbé qui n'a pas été introduit dans les moindres carrés et n'a donc pas participé à l'ajustement des paramètres.

TABLEAU I RESULTATS de $4f^6$ (7F réel) $5d + 4f^6$ (7F réel) $6s$

J	Calc.	Obs.	O-C	0.g	C.g	SL Composition	
1/2	5	0.	-5	3.950	3.96	.99	$8F^*$
	1539	1518.29	-21	-.596	-.62	.99	$6F^*$
	10401	10371.51	-30	.35	.23	.70	$8G$.28 $8F$
	10739	10743.40	4	2.32	2.42	.69	$8F$.29 $8G$
	15755				2.92	.87	$6D$.10 $6F$
	17074	(16162.32)		0.300	-.24	.88	$6F$.10 $6D$
3/2	333	326.64	-6	1.975	1.98	.98	$8F^*$
	2019	2003.23	-16	1.085	1.09	.97	$6F^*$
	7153	7135.06	-18	-.39	-.39	.99	$8H$
	8927	8578.70	-348	2.62	2.72	.84	$8D$.13 $6P$
	10548	10518.50	-30	1.335	1.31	.65	$8G$.31 $8F$
	11129	11155.30	27	1.63	1.65	.61	$8F$.34 $8G$
	11312	11047.30	-265	2.510	2.42	.84	$6P$.12 $8D$
	15856	(16077.75)		1.35	1.62	.66	$6D$.27 $6F$
	17314				1.	.46	$6F$.26 $6D$
	18288				.33	.71	$6G$.25 $6F$
5/2	845	838.22	-6	1.708	1.70	.97	$8F^*$
	2699	2688.69	-10	1.328	1.32	.97	$6F^*$

J	Calc.	Obs	O-C	0.9	C.9	SL Composition
5/2	7545	7524.86	-20	.70	.69	.99 ⁸ H
	9445	9410.	-35	2.01	2.03	.90 ⁸ D
	10890	10873.30	-16	1.435	1.43	.63 ⁸ G .31 ⁸ F
	11598	11659.80	62	1.57	1.71	.38 ⁸ F .27 ⁸ G .15 ⁸ P
	11709	11798.60	89	1.99	1.92	.35 ⁶ P .32 ⁸ P .24 ⁸ F
	13067	12566.80	-500	2.16	2.09	.51 ⁸ P .42 ⁶ P
	14337	14193.43	-144	.295	.30	.98 ⁶ H
	16165	(16428.73)		1.39	1.49	.50 ⁶ D .38 ⁶ F
	17760			1.29	1.29	.37 ⁶ D .34 ⁶ G .27 ⁶ F
	18922			1.06	1.06	.59 ⁶ G .33 ⁶ F
7/2	1492	1489.16	- 3	1.610	1.61	.97 ⁸ F*
	3499	3499.12	0	1.40	1.40	.97 ⁶ F*
	8067	8046.	-21	1.04	1.05	.99 ⁸ H
	10069	10180.70	111	1.790	1.79	.91 ⁸ D
	11399	11395.40	- 3	1.465	1.46	.64 ⁸ G .29 ⁸ F
	12174	12232.30	58	1.532	1.54	.62 ⁸ F .33 ⁸ G
	12834	12987.86	154	1.86	1.85	.63 ⁸ P .31 ⁶ P
	14359	³ 14777.05	118	1.78	1.78	.61 ⁶ P .34 ⁸ P
	14774	14667.96	-106	.845	.84	.96 ⁶ H

J	Calc.	Obs	O-C	0.g	C.g	SL Composition			
7/2	16716	(17005.30)		1.405	1.47	.43	⁶ F	.41	⁶ D
	18317				1.39	.43	⁶ D	.35	⁶ G
	19540				1.27	.54	⁶ G	.36	⁶ F
9/2	2232	2237.97	6	1.580	1.57	.98	⁸ F*		
	4374	4386.03	12	1.47	1.44	.97	⁶ F*		
	8697	8679.23	-18	1.220	1.21	.99	⁸ H		
	10822	10960.16	138	1.685	1.69	.92	⁸ D		
	12038	12045.17	7	1.470	1.47	.66	⁸ G	.28	⁸ F
	12782	12841.60	60	1.52	1.53	.65	⁸ F	.32	⁸ G
	14245	14115.00	-130	1.780	1.77	.96	⁸ P		
	15296	15242.90	-53	1.100	1.08	.96	⁶ H		
	17461	(17717.9)			1.47	.46	⁶ F	.42	⁶ D
	18861				1.44	.48	⁶ D	.33	⁶ G
	20073				1.35	.55	⁶ G	.36	⁶ F
11/2	3057	3052.65	-4	1.55	1.55	.99	⁸ F*		
	5280	5317.56	38	1.455	1.455	.98	⁶ F*		
	9415	9406.63	-8	1.30	1.30	.99	⁸ H		
	11669	11791.05	122	1.630	1.63	.95	⁸ D		
	12777	12789.81	13	1.47	1.47	.69	⁸ G	.27	⁸ F

J	Calc.	Obs	O-C	0.g	C.g	.SL	Composition
11/2	13428	13466.50	38	1.51	1.52	.68	⁸ F .29 ⁸ G
	15882	15897.54	15	1.21	1.21	.96	⁶ H
	18889				1.42	.70	⁶ F .27 ⁶ G
	20424				1.37	.70	⁶ G .28 ⁶ F
13/2	3892	3909.62	17	1.540	1.54	.99	⁸ F*
	10204	10214.38	11	1.35	1.35	.99	⁸ H
	13600	13604.50	5	1.47	1.47	.72	⁸ G .26 ⁸ F
	14076	14084.55	9	1.514	1.515	.73	⁸ F .26 ⁸ G
	16510	16615.50	105	1.295	1.29	.97	⁶ H
	20553				1.38	.97	⁶ G
15/2	11056	11094.06	38	1.39	1.39	.99	⁸ H
	14528	14503.67	-25	1.460	1.46	.97	⁸ G
	17181	17391.89	211	1.34	1.34	.97	⁶ H
17/2	11971	12044.98	74	1.412	1.412	1.	⁸ H

- Remarquons également que le couplage L S permet de nommer très correctement les niveaux.

Paramètres obtenus

Le tableau V donne les valeurs des paramètres obtenus et leurs écarts types. L'interaction entre les multiplets 8F et 6F de $f^6(^7F)$ d'une part et les multiplets $^8F^*$ et $^6F^*$ de $f^6(^7F)$ s d'autre part, n'est pas assez forte pour tenir les paramètres R^2 et R^3 . Des valeurs optimales ont été cherchées par diagonalisations successives pour R^2 et R^3 qui sont restés fixés à ces valeurs. Les autres paramètres au contraire ont varié librement et les écarts types obtenus sont bons puisqu'ils représentent souvent quelques centièmes de la valeur du paramètre

$$F_2 = 127.4 \pm 1.6 \text{ cm}^{-1}$$

$$G_1 = 175 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$$

La notation $F_2 = 127.4 \pm 1.6$ ne veut pas vraiment dire qu'on connaît la valeur du paramètre F_2 à $\pm 1.6 \text{ cm}^{-1}$ près.

En fait l'écart type d'un paramètre est déterminé de façon à vérifier la propriété suivante : supposons que l'on fasse un premier calcul de moindres carrés. Il nous donne un ensemble de valeurs pour les paramètres, leurs écarts types, et l'écart quadratique moyen obtenu.

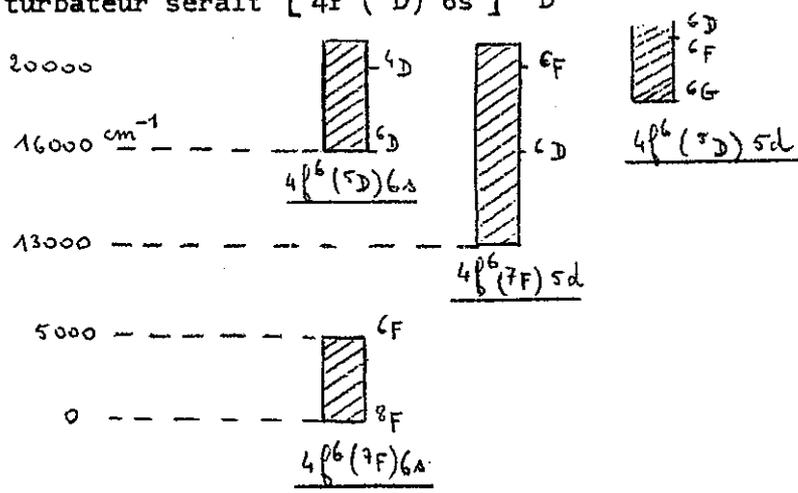
Dans un second calcul de moindres carrés fixons tous les paramètres sauf un aux valeurs précédentes et donnons au dernier paramètre une valeur comprise dans l'intervalle déterminé par son écart type, alors l'écart quadratique moyen trouvé sera rigoureusement le même que dans le premier calcul.

Disons qu'un bon écart type est un test sur la signification des paramètres pour un calcul donné et sur la validité des identifications des niveaux expérimentaux.

Des moindres carrés successifs ont montré d'autre part qu'il n'était pas possible d'améliorer l'accord pour le multiplet expérimental le plus élevé qui s'identifie soit à 6D soit à 6F . On obtient soit un bon accord sur les énergies, soit un bon accord sur les g, mais jamais les deux à la fois et nous avons préféré ne pas l'introduire dans les moindres carrés.

Le fait qu'il s'identifie soit au multiplet théorique $[f^6 7F, d] {}^6F$ soit au $[f^6 7F, d] {}^6D$ laisse supposer que la perturbation vient d'un multiplet 6D ou 6F des sous-configurations attendues $f^6({}^5D)(d+s)$

Si les prévisions théoriques concernant le 5D de $4f^6$ sont correctes le schéma ci-dessous nous montre que le principal multiplet perturbateur serait $[4f^6({}^5D) 6s] {}^6D$



En conclusion on peut dire que la base $f^6 [7F \text{ réel}] (d+s)$ donne un accord théorie-expérience très satisfaisant jusqu'à 17000 cm^{-1} environ, puisque 135 cm^{-1} d'écart quadratique moyen représenté à peu

près 8/1000 de la hauteur totale interprétée.

L'introduction du coeur réel qui supprime les paramètres S_{4f} et S_{4f^*} apporte une amélioration d'ensemble très sensible pour les énergies. Pour aller plus loin et interpréter les niveaux plus élevés il serait nécessaire d'introduire dans les calculs l'action de $4f^6(5D^{1,2,3})_s$ et peut-être celle de $4f^6(5D^{1,2,3})_d$.

Cette étude introduit de nouveaux paramètres. Elle n'aura d'intérêt que si l'on trouve expérimentalement un niveau du multiplet $5D$ de f^6s^2 ou $6D$ de f^6s , et si les niveaux qui seront ainsi prévus théoriquement peuvent effectivement être trouvés.

Il existe deux possibilités pour identifier le multiplet $5D$ de f^6s^2 attendu vers 15000cm^{-1} :

a) la hauteur des niveaux connus de f^6sp montre que les transitions les plus probables $f^6(7F)sp \rightarrow f^6(5D)s^2$ tombent dans l'I.R. vers 2μ .

Il faudrait donc mesurer les effets Zeeman dans cette région ce qui est possible avec le SISAM.

b) une autre façon d'identifier le $5D$ est de trouver des niveaux très élevés de f^6sp et f^6dp , ce qui nécessite d'étendre les mesures des effets Zeeman vers l'U.V.

Il est donc raisonnable d'espérer disposer prochainement des données expérimentales nécessaires pour entreprendre une étude théorique plus avancée.

II - Configurations impaires $4f^6 6p - 4f^5 5d6s$

Nous avons vu dans l'introduction que les énergies et les g de plus de 250 niveaux étaient connues mais ceux-ci sont mal identifiés ou même pas du tout. Le classement par configurations, n'a été tenté que pour les premiers multiplets et il est peu certain.

D'une façon générale le spectre est d'une très grande complexité et laisse prévoir un grand mélange de configurations.

Notre but était donc principalement d'essayer de trouver les interprétations correctes, tout au moins pour les niveaux les plus profonds.

Ceux-ci sont attribués aux configurations $4f^6 6p$ et $4f^5 5d6s$ et nous avons essayé la base $4f^6(^7F) 6p + 4f^5(^6H - ^6F) 5d6s$ qui représente 258 niveaux théoriques. L'ordre maximum des matrices par J est alors 41.

1°) Calculs des coefficients des paramètres de $4f^6(^7F) 6p$

Tous les calculs sont faits en couplage L S. Il faut calculer les éléments de matrices de $H = Q(f^6 p) + \Lambda(f^6) + \Lambda(p)$ sur la base $(4f^6(^7F) 6p, SLJM_J |$

a) $Q(f^6 p)$

représente l'interaction électrostatique de l'électron p avec le coeur f^6 ; on est encore dans le cas d'une configuration $l^N l'$

$$(f^6 \ ^7F, p, SLJM | Q | f^6 \ ^7F, p, S'L'JM) = \sum_k C_k P_k$$

les paramètres P_k qui interviennent sont :

$$F^2(4f, 6p)$$

$$G^2(4f, 6p) \text{ et } G^4(4f, 6p)$$

- Pour F^2 les coefficients sont donnés par :

$$7 \times 3 \times \delta(s, s') \delta(L, L') (-1)^{L+1} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 3 & L & 3 \end{Bmatrix}$$

- Pour G^k , $k = 2, 4$:

$$6 \times 7 \times 3 \times 7 \times 7 \delta(s, s') \delta(L, L') \begin{pmatrix} 1 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sum_{\bar{\Psi}} (7F | \bar{\Psi})^2 \begin{Bmatrix} \gamma_L & 5/2 & 3 \\ \gamma_2 & 5 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 3 & 3 \\ 3 & k & 1 \\ 3 & 1 & L \end{Bmatrix}$$

b) $\Lambda(f^6)$

représente l'énergie de spin orbite des électrons f et introduit le paramètre $\zeta(4f)$. Les coefficients de $\zeta 4f$ sont donnés tous calculs faits par :

$$\frac{7}{3} (-1)^{L+L'+J+1/2} \sqrt{[s][s'][L][L']} \begin{Bmatrix} s' & L' & J \\ L & s & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & 1 & s' \\ 3 & \gamma_2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ 3 & 1 & 3 \end{Bmatrix}$$

c) $\Lambda(p)$

représente l'énergie de spin-orbite de l'électron p et introduit le paramètre $\zeta(6p)$ dont les coefficients tous calculs faits sont donnés par

$$3 (-1)^{s'+J+3/2} \sqrt{[s][s'][L][L']} \begin{Bmatrix} s' & L' & J \\ L & s & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & 1 & s' \\ \gamma_2 & 3 & \gamma_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ 1 & 3 & 1 \end{Bmatrix}$$

2°) Calcul des coefficients des paramètres de $4f^5(6H - 6F) 5d6s$

$$H = Q(f^5) + Q(f^5d) + Q(f^5\lambda) + Q(d_0) + \Lambda(f^5) + \Lambda(d)$$

Ici, $Q(f^5)$ n'entraîne pas seulement un déplacement global de la configuration mais donne aussi la séparation des deux termes $6H$ et $6F$ de f^5 .

a) $Q(f^5)$

On tient compte de l'action de $Q(f^5)$ en introduisant un paramètre D_1 "distance" des multiplets $6H$ et $6F$. Il est purement diagonal, les coefficients pour tous les niveaux construits sur $6H$ sont nuls et les coefficients pour tous les niveaux construits sur $6F$ sont égaux à 1.

On a donc simplement si N et N' sont les numéros des niveaux

$|SLN JM_J\rangle$

$$\delta(N, N') \delta(L, 3)$$

b) Q (f⁵d)

introduit les paramètres utiles :

$$F^2 (4f, 5d), F^4 (4f, 5d), G^1 (4f, 5d), G^3 (4f, 5d), G^5 (4f, 5d)$$

Les calculs sont faits en couplage L S généralisé soit

$$\langle (f^5 s_1 L_1, d) s_2 L_2, s, SLJ |$$

- Pour F^k k = 2,4 les coefficients sont donnés par :

$$\delta(s, s') \delta(L_2, L'_2) \delta(s_2, s'_2) \delta(s_1, s'_1) \times 7 \times 5 \times (-1)^{L_2 + L'_1 + 1} \begin{pmatrix} 3 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & k & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & k & 2 \\ L_1 & L_2 & L'_1 \end{pmatrix} \langle \psi, \| u^k \| \psi' \rangle$$

Les U^k sont tabulés

- Pour G^k k = 1,3,5 les coefficients sont donnés par :

$$\delta(s, s') \delta(L_2, L'_2) \delta(s_2, s'_2) \times 5 \times 7 \times 5 \times 6 \times \sqrt{[L_1][L_2]} (-1)^1 \begin{pmatrix} 2 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{Bmatrix} 1/2 & 2 & 5/2 \\ 1/2 & s_2 & 5/2 \end{Bmatrix} \frac{1}{4} \sum_{\bar{q}} (\psi, \| \bar{q} \| \psi') \begin{pmatrix} \bar{L} & 3 & L'_1 \\ 3 & k & 2 \\ L_1 & 2 & L_2 \end{pmatrix}$$

c) Q (f⁵s)

introduit le paramètre G³(4f, 6s). Ses coefficients sont donnés par :

$$\delta(s, s') \delta(L, L') \delta(L_1, L'_1) \times 30 \times (-1)^{s + 1/2} \sqrt{[s_1][s'_1]} \begin{Bmatrix} 1/2 & 5/2 & 2 \\ s_2 & 1/2 & 5/2 \\ s & s'_2 & 1/2 \end{Bmatrix}$$

d) Q (ds)

introduit le paramètre G²(5d, 6s). Ses coefficients sont donnés par :

$$1/5 \times \delta(s, s') \delta(L, L') \delta(N_1, N'_1) (-1)^{s_2 + s'_2} \sqrt{[s_1][s'_1]} \begin{Bmatrix} 1/2 & 5/2 & s'_2 \\ 1/2 & s & s_2 \end{Bmatrix}$$

e) $\Lambda(f^5)$

introduit le paramètre ζ 4f dont les coefficients tous calculs faits sont donnés par la formule :

$$15 \sqrt{14} (-1)^{L+L'+J+S_2+S'_2+3/2} \left(\begin{matrix} [s'_2] [s_1] \\ [L] [L'] [L_1] [L_2] [s] [s'] [s_1] [s_2] \end{matrix} \right) \left\{ \begin{matrix} S' L' J \\ L S 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L 1 L' \\ L_1 2 L_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S 1 S' \\ S'_2 \frac{1}{2} S_2 \end{matrix} \right\} \\ \left\{ \begin{matrix} S_2 1 S'_2 \\ S'_1 \frac{1}{2} S_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1 1 S'_1 \\ \frac{1}{2} 2 \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \sum (\bar{\psi}_1 | \psi_1) (\bar{\psi}_1 | \psi'_1) (-1)^{L_1} \left\{ \begin{matrix} L_1 1 L'_1 \\ 3 L_1 3 \end{matrix} \right\}$$

f) $\Lambda(d)$

introduit le paramètre ζ 5d. On trouve pour les coefficients :

$$(-1)^{J+\frac{1}{2}} \times 3 \sqrt{5} \times \delta(L_1, L'_1) \delta(S_1, S'_1) \sqrt{[L][L'] [s][s'] [s_1][s'_1]} \left\{ \begin{matrix} S' L' J \\ L S 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L 1 L' \\ 2 L_1 2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S 1 S' \\ S'_2 \frac{1}{2} S_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_2 1 S'_2 \\ \frac{1}{2} \frac{5}{2} \frac{1}{2} \end{matrix} \right\}$$

3°) Calcul des coefficients des paramètres d'interaction entre

$$\underline{4f^5(6H - 6F) 5d6s \text{ et } 4f^6(7F) 6p}$$

Seule l'interaction électrostatique donne des éléments de matrice non nuls.

On doit calculer $(f^6 7F, 6p, SLJM_J | Q | f^5(S_5 L_5), 5d, S_2 L_2, 6s, S' L' JM_J)$

L'interaction introduit deux paramètres :

a) $R^1(f p, d s)$ dont les coefficients, toutes simplifications faites, sont donnés en couplage L S, par :

$$\delta(S, S') \delta(L, L') \delta(S_2, 3) \times 42 \times (f^6 7F | \psi^5 \psi_r) (-1)^{L_2} \left\{ \begin{matrix} 3 1 L_2 \\ 2 L_5 3 \end{matrix} \right\}$$

b) $R^3(f p, s d)$

$$\delta(S, S') \delta(L, L') 3 \sqrt{6} (f^6 7F | \psi^5 \psi_r) (-1)^{L_2 + S_2} \sqrt{[s_2]} \times \left\{ \begin{matrix} 1/2 5/2 S_2 \\ 1/2 S 3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_5 3 3 \\ 1 L_2 2 \end{matrix} \right\}$$

Résultats

Cette étude est la seule qui n'ait pas donné de résultats satisfaisants.

Les moindres carrés n'ont pas montré une convergence nette. Plusieurs interprétations sont possibles pour les niveaux profonds selon la valeur donnée à la distance des deux sous-configurations $f^6(7F)_p$ et $f^5(6H - 6F)_{ds^2}$ et aux paramètres d'interaction.

D'autre part le haut du spectre n'est pas identifiable du tout. La base choisie malgré son nombre élevé de niveaux est déjà trop peu étendue. Pour $J = \frac{1}{2}$ par exemple le nombre de résultats expérimentaux est supérieur au nombre de niveaux théoriques.

Tous ces calculs ne peuvent donc pas être considérés comme définitifs et nous n'avons pas donné les tableaux des résultats ni des paramètres.

Néanmoins, si parmi les interprétations possibles, on choisit celle qui est la plus compatible avec le premier classement des multiplets profonds en configurations effectué par BRIX [7], on arrive à une légère convergence des résultats :

Dans une première étude nous avons fixé tous les paramètres sauf :

R^1, R^3, S, T qui prennent alors les valeurs :

$$R^1 = 3923 \pm 177 \text{ cm}^{-1}$$

$$R^3 = 1001 \pm 91$$

$$S = -7818 \pm 19$$

S est la distance de la sous-configuration $f^5(6H - 6F)_{ds}$ par rapport à la sous-configuration $f^6(7F)_p$

$$T = 34678 \pm 30$$

T est la hauteur moyenne

L'écart quadratique moyen obtenu est alors 332 cm^{-1} pour 72 niveaux identifiés et un intervalle interprété de 13000 cm^{-1} . Mais l'identification d'autres niveaux devient très ambiguë.

Dans une autre étude nous avons laissé varier aussi $\zeta_f(f^6_p)$, ζ_p , $F_2(f_p)$, $G_2(f_p)$, $F_2(f_d)$, $G_1(f_d)$, $\zeta_f(f^5_{ds})$ et ζ_d .

Les valeurs obtenues sont presque identiques aux valeurs primitivement fixées, déduites des résultats de Sm I ($f^6_{sp} - f^5_{ds^2}$), et les écarts types sont assez bons.

Par exemple $F_2(f'd)$ avait été fixé à 120 cm^{-1}

il est devenu égal à 117 ± 6

$G_1(f'd)$ avait été fixé à 140 cm^{-1}

il est devenu égal à 143 ± 5

Quant aux valeurs de R^1 , R^3 et T elles sont restées les mêmes que précédemment et l'écart quadratique est 340 cm^{-1} pour 72 niveaux identifiés.

Il semble donc que les identifications ne soient pas fausses puisque les écarts types sont assez bons et que les paramètres libérés prennent des valeurs compatibles avec les résultats de Sm I que nous verrons un peu plus loin.

Mais l'écart quadratique moyen obtenu ne s'améliore plus et l'identification des autres niveaux est peu sûre ou même impossible.

On peut donc penser que l'on ne pourra guère obtenir un meilleur accord si l'on n'étend pas la base et nous envisageons dans un proche avenir de prendre comme base :

$$f^6(7_F, 5_D)_p + f^5(6_H - 6_F)_{ds} + f^5(6_H - 6_F)_{s^2} + f^5(6_H - 6_F)_{d^2} \text{ au}$$

moins en partie. Une étude préalable sera nécessaire pour savoir si ces calculs sont possibles avec nos programmes actuels. De toutes façons la complexité du spectre rend l'interprétation très difficile.

ETUDE THEORIQUE DU SAMARIUM I

I) Les configurations paires

A) - Configuration $4f^6(7F \text{ réel})5d6s$

Lorsque cette étude a été entreprise 28 niveaux attribués à f^6ds étaient connus de 10800 à 17000 cm^{-1} , ainsi que le multiplet 7F de f^6s^2 .

Aussi notre but ici était non seulement d'interpréter les 28 niveaux connus mais si possible de prévoir les niveaux situés dans cette région et pas encore trouvés.

La base choisie est $4f^6(7F)5d6s$ et représente 114 niveaux théoriques. On a vu dans l'étude des configurations $f^6(7F)s$ et $f^6(7F)d$ de SmII que l'interaction des multiplets 8F et 6F de f^6s avec 8F et 6F de f^6d était négligeable; aussi n'avons nous pas introduit ici l'interaction de $f^6(7F)s^2$ et $f^6(7F)5d6s$

1°) Calcul des coefficients des paramètres -la base est

$$\langle (f^6 7F, d) S_2 L_2, s, SLJM_J |$$

Tous les calculs ici aussi sont faits en couplage LS. On doit calculer les éléments de matrices de

$$H = Q(f^6) + Q(f^6d) + Q(f^6s) + Q(ds) + \Lambda(f^6) + \Lambda(d)$$

a) Q (f⁶d)

Nous avons déjà vu les paramètres introduits par les interactions fd

- Pour F^k k=2,4 les coefficients sont donnés par

$$7 \times 5 \times \delta(s_2, s'_2) \delta(L_2, L'_2) (-1)^{L_2+1} \begin{pmatrix} 3 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & k & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & k & 2 \\ 3 & L_2 & 3 \end{Bmatrix}$$

- Pour G^k k=1,3,5

$$\delta(s_2, s'_2) \delta(L_2, L'_2) \left[7 \sqrt{2 \cdot 10} \begin{pmatrix} 2 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]^2 \sum_{\bar{\Psi}} (7F|\bar{\Psi})^2 \begin{Bmatrix} \gamma_2 & \bar{s} & 3 \\ \gamma_2 & s_2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{L} & 3 & 3 \\ 3 & k & 2 \\ 3 & 2 & L_2 \end{Bmatrix}$$

b) Q (f⁶s) introduit le paramètre G³ (4f,6s)

les coefficients sont donnés par :

$$(-1)^s \begin{Bmatrix} \gamma_2 & 3 & s/2 \\ s_2 & \gamma_2 & 3 \\ s & s'_2 & \gamma_2 \end{Bmatrix} \times 6 \times \delta(s, s') \delta(L, L') \sqrt{[s_2][s'_2]}$$

c) Q (ds)

introduit le paramètre G²(5d6s) - Ses coefficients sont donnés par :

$$\frac{1}{5} \times (-1)^{s_2+s'_2} \sqrt{[s_2][s'_2]} \times \delta(s, s') \delta(L, L') \begin{Bmatrix} \gamma_2 & 3 & s'_2 \\ \gamma_2 & s & s_2 \end{Bmatrix}$$

d) $\Lambda (f^6)$

Le paramètre ζ_{4f} a été remplacé par les 7 pseudo-paramètres égaux aux énergies expérimentales du multiplet 7F de f^6

Les coefficients sont donnés en couplage LS par

$$2\sqrt{[s][s'] [s_2][s'_2] [L_2][L'_2]} (-1)^{s+s'+L+L'+1} \sum_{J_1} [J_1] \sum_{J_2} [J_2] (-1)^{2J_2} \begin{Bmatrix} s_2 & J_2 & L \\ J & s & \gamma_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s'_2 & J_2 & L' \\ J & s' & \gamma'_2 \end{Bmatrix} \times \left[\sum_j [j] \begin{Bmatrix} 3 & 3 & J_1 \\ \gamma_2 & 2 & j \\ s_2 & L_2 & J_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 3 & 3 & J_1 \\ \gamma'_2 & 2 & j \\ s'_2 & L'_2 & J_2 \end{Bmatrix} \right]$$

e) $\Lambda (d)$

Les coefficients du paramètre ζ_{5d} sont donnés toutes simplifications faites par

$$3\sqrt{5} (-1)^{J+1} [s_2][s'_2][s][L][s'][L'] \begin{Bmatrix} L_2 & 1 & L'_2 \\ 2 & 3 & 2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s_2 & 1 & s'_2 \\ \gamma_2 & 3 & \gamma'_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & s' & 1 \\ L_2 & L'_2 & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & s' & 1 \\ s'_2 & s_2 & \gamma_2 \end{Bmatrix}$$

RESULTATS.

Le nombre de paramètres total à déterminer par itérations successives est donc 8 dont 7 paramètres de Slater : T, assimilable en partie à $F_0 (4f5d)$, $F_2, F_4, G_1, G_3, G_5, G_2$ et un paramètre de structure fine ζ_d

Les coefficients des paramètres de Slater sont indépendant de J. Il est donc à peu près équivalent pour déterminer ces paramètres, de connaître un seul ou tous les niveaux d'un même multiplet. Supposons que l'on soit près du couplage LS. Alors pour que les moindres carrés aient

un sens il faut que le nombre de multiplets différents connus soit supérieur au nombre de paramètres de Slater.

Quant aux paramètres ζ , leurs coefficients dépendent de J et ils sont toujours bien tenus si les identifications sont correctes.

Lorsque l'étude a été entreprise les 28 niveaux connus provenaient d'un nombre de multiplets inférieur au nombre de paramètre de Slater.

Aussi avons nous fixé au début les paramètres G_5 et G_2 , jusqu'à ce que les données expérimentales soient suffisantes.

- Actuellement 40 niveaux sont connus expérimentalement. Sur les 12 nouveaux niveaux 10 ont été prévus à 100 cm^{-1} près environ par les calculs avec un bon accord pour le g.

L'écart quadratique moyen obtenu est de 46 cm^{-1} pour les énergies, soit moins de 6/1000 de la hauteur interprétée, et 0,04 pour les g.

Les résultats complets classés par valeur de J sont donnés par le tableau II. Ce dernier est disposé suivant le même modèle que le tableau des résultats de f^6d .

Les septuplets marqués d'un a ont comme terme parent dans f^6d un octuplet

Les septuplets marqués d'un b ont comme terme parent dans f^6d un sextuplet

par exemple $((^7F,d)^8G,s)^7G^a$ $((^7F,d)^6G,s)^7G^b$

Paramètres obtenus

Le tableau V donne les valeurs des paramètres obtenues et leurs écarts types.

Tous les paramètres ont un sens et ont varié librement dans les derniers moindres carrés.

En conclusion.

La base $4f^6 [7F \text{ réel}] 5d6s$ donne un accord théorie-expérience très satisfaisant et a été suffisante pour prévoir correctement 12 niveaux inconnus de la région $10000 - 18000 \text{ cm}^{-1}$. Aucune interaction n'a encore été mise en évidence. Cependant J. BLAISE et M.G. SCHWEIGHOFER ont cherché sans succès les niveaux $7D_1$, $7F_{1,2,3}$ et $5P_{1,2,3}$ prévus entre 15500 et 18000 cm^{-1}

Or, nous savons que le multiplet $5D$ de $f^6 s^2$ est prévu vers 15000 cm^{-1} et on peut penser qu'il est le principal perturbateur.

Nous envisageons donc d'étendre la base et tenir compte des perturbations attendus $4f^6 (5D) 6s^2$ et $4f^6 (5D) 5d6s$.

Cette étude montre l'intérêt de mener simultanément la classification d'un spectre et son étude théorique.

J	Calc.	Obs	O-C	O.g	C.g	SL Composition					
2	13071	13050.05	- 21	.02	.01	.88	7 ^a _H	.10	7 ^b _H		
	13691	13687.75	- 4	1.78	1.78	.54	9 ^G	.35	9 ^F		
	14311	14365.50	54	1.845	1.87	.43	9 ^F	.42	9 ^G		
	14525	14550.50	25	2.34	2.27	.56	7 ^b _P	.14	7 ^a _P	.13	5 ^P
	14826	14783.51	- 43	1.93	1.92	.43	7 ^a _D	.27	5 ^P	.12	9 ^F
	15964	15955.20	- 9	1.085	1.17	.52	7 ^a _G	.16	7 ^a _F	.10	7 ^a _D
	16110				1.86	.45	5 ^P	.19	7 ^a _D	.17	7 ^b _P
	16688				1.32	.52	7 ^a _F	.26	7 ^a _G		
	18141	18176.17	25	.02	.03	.87	7 ^b _H	.10	7 ^a _H		
	18160				2.17	.69	7 ^a _P	.14	7 ^b _D		
	18619				1.30	.36	5 ^F	.33	5 ^D		
	19570				1.81	.42	7 ^b _D	.23	7 ^b _F		
	19836				.85	.52	5 ^G	.31	5 ^D		
	20761				1.17	.25	7 ^b _G	.21	5 ^F	.13	7 ^b _D
	20750				1.05	.29	5 ^G	.23	5 ^F	.15	7 ^b _F
	21861				1.13	.49	7 ^b _G	.32	7 ^b _F		
3	11386	11406.50	20	1.08	1.08	.98	9 ^H				
	12867	12846.64	-20	2.05	2.06	.86	9 ^D				

J	Calc.	Obs	O-C	0.9	C.g	SL Composition	
3	13560	13542.80	-17	.77	.77	.86	⁷ H ^a .11 ⁷ H ^b
	14060	14056.70	-3	1.64	1.65	.54	⁹ G .31 ⁹ F
	14507	14612.44	105	2.14	2.02	.48	⁹ P .25 ⁷ P ^b .10 ⁹ G
	14861	14920.40	59	1.74	1.75	.55	⁹ F .31 ⁹ G
	15519	15524.56	6	1.84	1.82	.53	⁷ D ^a .20 ⁹ P
	15939	15834.60	-105	1.815	1.87	.27	⁷ P ^b .21 ⁹ P .18 ⁵ P
	16469			1.31		.54	⁷ G ^a .15 ⁷ F ^a .10 ⁷ D ^a
	17087			.58		.88	⁵ H
	17275			1.54		.28	⁵ P .17 ⁷ G ^a .13 ⁷ F ^a
	17309			1.54		.38	⁷ F ^a .30 ⁵ P .10 ⁷ G ^a
	18506			.77		.82	⁷ H ^b .10 ⁷ H ^a
	18933			1.58		.29	⁷ P ^a .19 ⁵ F .18 ⁷ D ^b
	19182			1.55		.25	⁷ P ^a .23 ⁵ F .15 ⁵ P
	20126			1.65		.26	⁷ F ^b .25 ⁷ P ^a .16 ⁷ D ^b
	20408			1.21		.45	⁵ G .37 ⁵ D
	21376			1.46		.34	⁷ G ^b .30 ⁷ D ^b .12 ⁷ F ^b
	21405			1.19		.42	⁵ F .34 ⁵ G .15 ⁵ D
	22466			1.35		.41	⁷ G ^b .34 ⁷ F ^b

J	Calc.	Obs	O-C	0-g	C-g	SL Composition.
4	11870	11877.50	8	1.25	1.25	.97 9H
	13442	13458.46	16	1.83	1.83	.85 9D
	14164	14154.30	- 9	1.075	1.075	.82 7H ^a .11 7H ^b
	14581	14563.98	-17	1.57	1.56	.57 9G .29 9F ₁
	15354			1.66		.43 9F .33 9G .11 9P
	15600			1.81		.43 9P .16 7P ^b .15 9F
	16318	16354.60	37	1.64	1.69	.53 7D ^a .24 9P .10 7F ^a
	17020			1.38		.48 7G ^a .16 7F ^a
	17321			1.73		.48 7P ^b .16 7P ^a .15 9P
	17674			.98		.79 5H
	17900			1.44		.47 7F ^a .28 7G ^a .10 7F ^b
	18964			1.06		.77 7H ^b .11 7H ^a
	19676			1.39		.41 5F .33 5D .12 5G
	19940			1.63		.36 7D ^b .30 7P ^a .14 7F ^b
	20853			1.54		.25 7P ^a .19 7F ^b .15 7P ^b
	21069			1.40		.36 5D .29 5G .11 7P ^a
	21978			1.50		.31 7D ^b .30 7G ^b
	22024			1.31		.41 5F .36 5G .14 5D
	23042			1.42		.37 7G ^b .34 7F ^b

J	Calc.	Obs.	O-C	O.g.	C.g.	SL Composition
5	12449	12445.35	- 3	1.33	1.33	.97 ⁹ H
	14180	14202.85	22	1.715	1.72	.85 ⁹ D .10 ⁹ F
	14854	14856.20	2	1.24	1.24	.76 ⁷ H ^a .12 ⁷ H ^b
	15213			1.52		.57 ⁹ G .26 ⁹ F
	15981			1.59		.60 ⁹ F .33 ⁹ G
	16769			1.72		.57 ⁹ P .25 ⁷ D ^a
	17241			1.65		.43 ⁷ D ^a .37 ⁹ P
	17721			1.37		.44 ⁷ G ^a .17 ⁵ H .11 ⁷ F ^a
	18365			1.21		.64 ⁵ H .17 ⁷ F ^a
	18545			1.43		.41 ⁷ F ^a .34 ⁷ G ^a
	19497			1.20		.73 ⁷ H ^b .12 ⁷ H ^a
	20992			1.47		.22 ⁷ F ^b .20 ⁷ D ^b .17 ⁵ F
	21216			1.41		.38 ⁵ F .26 ⁵ G .19 ⁷ D ^b
	22327			1.46		.33 ⁷ G ^b .30 ⁷ D ^b .10 ⁵ F
	22461			1.35		.52 ⁵ G .30 ⁵ F .10 ⁷ D ^b
	23509			1.44		.40 ⁷ G ^b .34 ⁷ F ^b
6	13108	13095.75	-12	1.385	1.38	.98 ⁹ H
	15052	15082.84	31	1.66	1.66	.89 ⁹ D

J	Çalc.	Obs	O-C	C.g	C.g	SL Composition
8	14609	14591.70	-18	1.43	1.43	.99 ⁹ H
	17245	17270.96	26	1.43	1.42	.50 ⁷ H ^a .34 ⁹ G .16 ⁷ H ^b
	17698				1.46	.65 ⁹ G .32 ⁷ H ^a
	21252				1.38	.81 ⁷ H ^b .18 ⁷ H ^a
9	15430	15418.65	-11	1.444	1.444	1. ⁹ H

B) - Configuration $4f^6 ({}^7F \text{ réel}) 6s7s$

Ce n'est pas une configuration fondamentale. Les multiplets connus sont situés entre 28700 et 33200cm^{-1} , c'est-à-dire en plein milieu de f^6s^2 . Les méthodes paramétriques sont mal adaptées à l'étude des petites configurations dont le nombre de paramètres est du même ordre de grandeur que le nombre de termes (voir discussion $f^6[{}^7F\text{réel}]ds$)

Néanmoins les résultats expérimentaux montraient que les multiplets de cette petite sous-configuration semblaient peu perturbés, on avait une idée à priori de la valeur de certains paramètres par extrapolation des courbes des valeurs des paramètres le long d'une série (J.SUGAR (17)) et l'étude a été entreprise :

1°) - Calcul des coefficients des paramètres.

Les calculs sont faits en couplage $LS \langle (f^6 {}^7F, s) S_2 L_2, s', SLJM_J \rangle$

$$H = Q(f^6) + \Lambda(f^6) + Q(f^6s) + Q(f^6s') + Q(s, s')$$

a) $\Lambda(f^6)$

Le paramètre \sum_{4f} a été remplacé par les 7 pseudo-paramètres égaux aux énergies expérimentales du multiplet 7F de f^6

les coefficients sont donnés par :

$$[J_1]^{(-1)} s_2 + s'_2 + s + s' + 1 \sqrt{[s_2][s'_2][s][s']} \sum [J_2] \left\{ \begin{matrix} 3 & J_1 & 3 \\ & s_2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 3 & J_1 & 3 \\ & J_2 & s'_2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & J_2 & 1/2 \\ & s_2 & s & 3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & J_2 & 1/2 \\ & s'_2 & s' & 3 \end{matrix} \right\}$$

b) Q (f⁶_s)

Introduit le paramètre G³(4f,6s). Les coefficients de G³ sont donnés par :

$$G \times \delta(s, s') \times \delta(s, s') \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{5}{2} & 3 \\ \frac{1}{2} & s & 3 \end{Bmatrix}$$

c) Q (f⁶_{s'})

Introduit le paramètre G³_{*}(4f,6s'). Ses coefficients sont donnés par

$$(-1)^s \times G \times \delta(s, s') \sqrt{[s_2][s'_2]} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & 3 & \frac{5}{2} \\ s_2 & \frac{1}{2} & 3 \\ s & s'_2 & \frac{1}{2} \end{Bmatrix}$$

d) Q (s, s')

Introduit le paramètre G₀(6s7s) dont les coefficients sont donnés par :

$$\delta(s, s') (-1)^{s_2 + s'_2} \sqrt{[s_2][s'_2]} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & 3 & s'_2 \\ \frac{1}{2} & s & s_2 \end{Bmatrix}$$

2°) - RESULTATS.

Ils sont donnés par le tableau III suivant les notations déjà utilisées. L'écart quadratique moyen est de 12cm⁻¹ pour les énergies et 0,035 pour les g si on n'introduit pas dans les calculs les niveaux

perturbés par l'action du champ magnétique, 0.09 dans le cas contraire.

Les valeurs des paramètres sont donnés par le tableau V

Remarquons que nous avons 3 multiplets connus et 4 paramètres de Slater T, G_3, G_3, G_0 . Nous avons donc fixé 2 paramètres par sécurité. Les valeurs initiales fournies par J. SUGAR, par extrapolation des courbes le long de la série des lanthanides étaient

$$G_3 (4f, 6s) = 200 \text{ cm}^{-1}$$

$$G_3 (4f 7s) = 35 \quad "$$

$$G_0 (6s 7s) = 830 \quad "$$

A priori il était difficile d'avoir une idée précise de la valeur des prévisions obtenues. Nous étions en effet à la limite des conditions d'utilisation d'une méthode de moindres carrés, ce qui nous obligeait à fixer des paramètres, et d'autre part il n'était pas possible de tenir compte des interactions avec les niveaux élevés de $4f^6 6s^2$. Le bon accord théorie-expérience pouvait donc n'être qu'apparent et être obtenu quelles que soient les conditions.

Remarquons cependant sur le tableau III, que la présence de niveaux perturbateur de $f^6 s^2$ dont on ne tient pas compte dans les calculs devait entraîner un écart théorie-expérience appréciable pour les g. On remarque qu'il en est bien ainsi, les g expérimentaux sont bien des valeurs intermédiaires entre les g théoriques obtenus et les g des niveaux perturbateurs. On voit qu'on n'a pas obtenu un accord qui aurait été abusif pour les 3 niveaux marqués d'astérisques.

TABLEAU .III - Résultats de 4f⁶ (7F réel) 6s7s

J	Calc.	Obs	Q-C	0.g	C.g	SL	Composition
0	29445	29469.59	24	0/0	0/0	.88 7 _F ^a	.12 7 _F ^b
	30773			0/0		.88 7 _F ^b	.12 7 _F ^a
1	28711	28708.20	- 3	3.36	3.39	.95 9 _F	
	29665	29656.30	- 9	1.50	1.46	.74 7 _F ^a	.12 7 _F ^b
	30621			.27		.82 5 _F	.15 7 _F ^a
	31106			1.37		.83 7 _F ^b	
2	29052	29037.30	-15	1.84*	2.09	.90 9 _F	
	30122	30148.40	26	1.67**	1.51	.67 7 _F ^a	.13 7 _F ^b
	31246	31246.40	0	1.21	1.19	.63 5 _F	.24 7 _F ^a
	31693			1.37		.70 7 _F ^b	.26 5 _F
3	29559	29551.90	- 7	1.79	1.79	.89 9 _F	
	30756	30755.28	- 1	1.47	1.51	.66 7 _F ^a	.14 7 _F ^b
	32008			1.39		.44 5 _F	.30 7 _F ^b
	32448			1.39		.52 7 _F ^b	.46 5 _F
4	30199	30191.20	- 8	1.675	1.68	.90 9 _F	
	31506	31508.12	2	1.515	1.51	.69 7 _F ^a	.15 7 _F ^b
							.10 9 _F

J	Calc.	Obs	O-C	Q.g	Ç.g	ΣL Composition					
4	32858			1.46		.48	7 _F ^b	.27	5 _F	.25	7 _F ^a
	33305			1.40		.66	5 _F	.34	7 _F ^b		
5	30932	30922.	-10	1.53***	1.62	.93	9 _F				
	32330	32333.	3	1.515	1.51	.73	7 _F ^a	.16	7 _F ^b		
	33765			1.49		.65	7 _F ^b	.23	7 _F ^a	.13	5 _F
	34223			1.42		.84	5 _F	.16	7 _F ^b		
6	31729	31725.70	- 3	1.585	1.59	.96	9 _F				
	33201	33202.66	2	1.495	1.50	.78	7 _F ^a	.18	7 _F ^b		
	34710			1.50		.80	7 _F ^b	.20	7 _F ^a		
7	32569	32567.80	- 1	1.57	1.57	1.	9 _F				
	* g perturbé par le niveau 29066.02 g = 1.57 de f ⁶ s ² J=2										
	** "	"	"	30040.95	g = 1.79	"	"	"	J=2		
	*** "	"	"	30931.62	g = 1.48	"	"	"	J=5		

En conclusion on peut dire que l'étude des petites configurations par la méthode paramétrique est possible si l'on a de bonnes valeurs initiales pour certains paramètres qui restent alors fixés. Elle représente en quelque sorte un test sur la valeur des prévisions de ces paramètres, et celui-ci semble concluant en ce qui concerne $4f^6 6s7s$. On ne peut pas dire vraiment qu'il s'agisse d'ajustement par moindres carrés mais plutôt d'un calcul direct des énergies.

II) Configurations impaires $4f^6(^7F)6s6p + 4f^5(^6H-^6F)5d6s^2$

Cette étude peut se comparer à celle des configurations impaires de SmII; les résultats expérimentaux ici aussi sont très nombreux mais un premier classement par configurations a été possible grâce en partie à la mesure des déplacements isotopiques [7,8] des niveaux profonds, et grâce aussi à un mélange moins grand des sous-configurations présentes.

La classification des niveaux impairs les plus profonds de SmI montre que la configuration fondamentale est $4f^6 6s6p$. Elle est rapidement perturbée par $4f^5 5d6s^2$ puis par les deux configurations $4f^5 5d^2 6s$ et $4f^6 5d6p$.

Dans une première étape nous avons essayé d'interpréter le bas du spectre par l'étude de la sous configuration $4f^6(^7F)6s6p$, étude qui avait déjà été entreprise par Racah et Ganiel [15] qui ne disposaient pas de résultats expérimentaux aussi complets. Cette base s'est révélée immédiatement insuffisante et dans une seconde étape nous avons essayé d'interpréter l'intervalle $13000-30000\text{cm}^{-1}$ par l'étude des sous configurations $4f^6(^7F)6s6p + 4f^5(^6H-^6F)5d6s^2$, base qui représente 186 niveaux théoriques.

1°) - Calculs des coefficients des paramètres de $4f^6(^7F)6s6p$

Le couplage choisi est toujours le couplage LS généralisé
 $\left\langle (f^6 \ ^7F, p) s_2 L_2, s, SLJM_j \right\rangle$

Il faut calculer les éléments de matrices de

$$H = Q(f^6) + \Lambda(f^6) + Q(f^6_p) + Q(f^6_s) + Q(ps) + \Lambda(p)$$

a) $\Lambda(f^6)$

introduit le paramètre \sum_{4f} . Nous n'avons pas tenu compte du coeur réel qui entraînait des calculs trop longs.

Les coefficients de \sum_{4f} sont donnés toutes simplifications faites par la formule :

$$14 (-1)^{s_2+s'_2+L+L'+J+1} [s][s'] [s_2][s'_2][L][L'] \begin{Bmatrix} s'L'J \\ L s 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s 1 s' \\ s'_2 \frac{1}{2} s_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s_2 1 s'_2 \\ 3 \frac{1}{2} 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L 1 L' \\ 3 1 3 \end{Bmatrix}$$

b) $Q(f^6)$

On part de $f^6(7F)$ seulement. $Q(f^6)$ n'intervient donc pas dans la séparation relative des niveaux.

c) $Q(f^6_p)$

introduit les paramètres

$$\underline{F^2(4f, 6p)} \quad \underline{G^2(4f, 6p)} \quad \underline{G^4(4f, 6p)}$$

les coefficients de F^2 sont donnés par :

$$7 \times 3 \times \delta(s, s') \delta(s_2, s'_2) \delta(L, L') \delta(L_2, L'_2) (-1)^{L_2+1} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 3 & L_2 & 3 \end{Bmatrix}$$

les coefficients de G^k $k=2, 4$ sont donnés par :

$$6 \times 7 \times 3 \times 7 \times 7 \delta(s_2, s'_2) \delta(L_2, L'_2) \begin{pmatrix} 1 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sum_{\bar{\Psi}} (\{f^{67F}\} \bar{\Psi})^2 \begin{Bmatrix} \gamma_2 & \gamma_2 & 3 \\ \gamma_2 & s_2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{1} & 3 & 3 \\ 3 & k & 1 \\ 3 & 1 & L_2 \end{Bmatrix}$$

d) $Q(f^6_s)$

introduit le paramètre $G^3(4f6s)$. On a pour les coefficients :

$$6 \times (-1)^s \delta(s, s') \delta(L, L') \sqrt{[s_2][s'_2]} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & 3 & \frac{5}{2} \\ s_2 & \frac{1}{2} & 3 \\ s & s'_2 & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\}$$

e) Q (ps)

introduit le paramètre $G^1(6p6s)$. Les coefficients de G^1 sont donnés par :

$$\frac{1}{3} \times \delta(s, s') \delta(L, L') (-1)^{s_2 + s'_2} \sqrt{[s_2][s'_2]} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & 3 & s'_2 \\ \frac{1}{2} & s & s_2 \end{matrix} \right\}$$

f) Λ (p)

introduit le paramètre \sum_{6p} dont les coefficients sont donnés tous calculs faits par :

$$3 \times (-1)^J \sqrt{[s][s'] [L][L'] [s_2][s'_2]} \left\{ \begin{matrix} s' & L' & J \\ L & s & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & 1 & L' \\ 1 & 3 & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} s & 1 & s' \\ s'_2 & \frac{1}{2} & s_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} s_2 & 1 & s'_2 \\ \frac{1}{2} & 3 & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\}$$

2°)- Calcul des coefficients des paramètres de $4f^5(6H-6F)5d6s^2$

dans le couplage $(f^5 s^2) s_1 L_1, d, SL JM_J$

$$H=Q(f^5) + \Lambda(f^5) + Q(f^5 d) + \Lambda d$$

a) Q (f⁵)

introduit le paramètre "distance" $D_1(6F-6H)$ dont nous avons déjà parlé.

$$\delta(N, N') \times \delta(L_1, 3)$$

b) $\Lambda(f^5)$

introduit le paramètre \sum_{4f} . On trouve toutes simplifications faites pour les coefficients la formule :

$$21 \sqrt{10} \times (-1)^{L+L'+J+1} \left\{ \begin{matrix} s' & L' & J \\ L & s & 1 \end{matrix} \right\} \sqrt{[s][s'] [L][L']} \left\{ \begin{matrix} s & 1 & s' \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{5}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & 1 & L' \\ L'_1 & 1 & L_1 \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{\Psi}} (-1)^{\bar{L}} \times \\ \times (\Psi_1 | \bar{\Psi})(\Psi_2 | \bar{\Psi}) \sqrt{[L_1][L'_1]} \left\{ \begin{matrix} L_1 & 1 & L'_1 \\ 3 & \bar{L} & 3 \end{matrix} \right\}$$

c) $Q(f^5 d)$

Introduit les paramètres F^2, F^4, G^1, G^3, G^5

Les coefficients $F^k, k = 2, 4$ sont donnés par :

$$\delta(s, s') \delta(L, L') \delta(s_1, s'_1) \times 7 \times 5^{-1} \begin{matrix} L+L_1+3 \\ 3 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \begin{matrix} 2 & k & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} 2 & k & 2 \\ L_1 & L & L_1 \end{matrix} \right\} (\psi_1 \| u^k \| \psi_1)$$

Les coefficients $G^k, k = 1, 3, 5$ sont donnés par :

$$\delta(s, s') \delta(L, L') \times 5 \times 7 \times 5 \times 6 \times \sqrt{[L_1][L_1]^{-1}} \begin{matrix} 2 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \begin{matrix} 1/2 & 2 & 1/2 \\ 1/2 & 5 & 1/2 \end{matrix} \sum_{\bar{\psi}} (\psi_1 | \bar{\psi}) (\psi_1 | \bar{\psi}) \left\{ \begin{matrix} \bar{L} & 3 & L_1 \\ 3 & k & 2 \\ L_1 & L & L \end{matrix} \right\}$$

d) Λ_d

Les coefficients du paramètre ζ_{sd} sont donnés tous calculs faits par :

$$3 \sqrt{5}^{-1} \begin{matrix} s+s'+J \\ [s][s'] [L][L'] \end{matrix} \begin{matrix} s' & L' & J \\ L & s & 1 \end{matrix} \begin{matrix} s & 1 & s' \\ 1/2 & 5/2 & 1/2 \end{matrix} \begin{matrix} L & 1 & L' \\ 2 & L_1 & 2 \end{matrix}$$

3°) - Calcul des coefficients des paramètres d'interaction.

$$4f^6 ({}^7F) 6s6p - 4f^5 ({}^6H-{}^6F) 5d6s^2$$

L'interaction électrostatique donne des éléments de matrice non nuls.

On doit calculer $\langle (f^6 {}^7F, p) s_2 L_2, s_5 L_5 J M_J | Q | f^5 {}^2S_5 L_5, d, s' L' J M_J \rangle$

a) Coefficients de $R^1(fp; ds)$

Ils sont donnés toutes simplifications faites par la formule

$$\delta(s, s') \delta(L, L') \delta(s, s) \left(\begin{matrix} 6 & 7F \\ 1 & 1 & 2 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} 5 & S_5 L_5 \\ 1 & 1 & 2 \end{matrix} \right) \times 6 \times (-1)^{s_2+L+1/2} \sqrt{[s_2]} \left\{ \begin{matrix} L_5 & 3 & 3 \\ 1 & L & 2 \end{matrix} \right\}$$

b) Coefficients de $R^3(fp;sd)$

Ils sont donnés par :

$$\delta(S,S') \delta(L,L') \approx \sqrt{6} \left(\begin{matrix} L & F \\ S & S' \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} S & L \\ S' & L' \end{matrix} \right) (-1)^{S_2+L+1/2} \sqrt{[S_2]} \begin{Bmatrix} 1/2 & S & S \\ 1/2 & S_2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 3 & 3 \\ 1 & L & 2 \end{Bmatrix}$$

RESULTATS.

Nous avons pris comme paramètres initiaux de f^6_{sp} les valeurs publiées par Racah et Ganiel [15] . Pour ceux de $f^5_{ds^2}$ et de l'interaction nous nous sommes servis des résultats obtenus dans f^6_d et f^6_{ds} et des paramètres d'interaction obtenus par P.CAMUS dans le Thulium.[16].

Au total 127 niveaux ont été interprétés avec un très bon accord entre la théorie et l'expérience. Les écarts quadratiques moyens sont de 105cm^{-1} pour les énergies soit 6/1000 environ de la hauteur interprétés, et de 0,052 pour les g. Nous n'avons pas introduit dans ce dernier calcul les g des niveaux perturbés par l'action du champ magnétique. Ils sont marqués d'un astérisque dans le tableau IV.

Ce tableau résume les principaux résultats, classés par valeur de J; on trouve successivement dans les sept premières colonnes, la valeur de J, l'énergie calculée, l'énergie observée, l'écart énergie observée - énergie calculée, les g observés, les g calculés par la diagonalisation, et enfin le déplacement

isotopique associé au niveau de la façon suivante :

Si X est le déplacement isotopique supposé/des niveaux de $f^6_s^2 [7_F]$ constant

la théorie des effets d'écran permet de prévoir pour les niveaux de la configuration $f^5_{ds^2}$ un déplacement isotopique supérieur à X , soit $X + \alpha$ et pour les niveaux de f^6_{sp} un déplacement inférieur à X , soit $X - \beta$. Les déplacements pour les niveaux mélangés ($f^6_{sp} + f^5_{ds^2}$) seraient alors des valeurs intermédiaires $X \pm a$ se rapprochant plus ou moins des valeurs extrêmes $X + \alpha$ et $X - \beta$ selon l'importance des composantes.

Les transitions $f^5_{ds^2} \rightarrow f^6_s^2$ doivent donc montrer un déplacement isotopique $X + \alpha - X = +\alpha$

Les transitions $f^6_{sp} \rightarrow f^6_s^2$ doivent montrer un déplacement isotopique $X - \beta - X = -\beta$

Les transitions ($f^5_{ds^2} + f^6_{sp}$) $\rightarrow f^6_s^2$ doivent montrer un déplacement isotopique $X - X \pm a = \pm a$ (en négligeant l'effet spécifique).

Toutes les transitions dont le déplacement isotopique a été mesuré par BRIX [7] et par STRIGANOV [8] aboutissent au multiplet fondamental $f^6_s^2 [7_F]$ et la valeur mesurée est donc directement α , β ou $\pm a$.

On a donc associé à chaque niveau le déplacement isotopique de la transition correspondante et ce sont les valeurs α , β ou a qui sont portées dans la colonne 7.

La 8ème colonne où sont donnés les carrés des trois plus grandes

composantes LS montre l'importance de $4f^5(6H-6F)5d6s^2$ des 18000cm^{-1}

Le couplage réel intermédiaire est ici assez loin du couplage LS. Un essai de couplage nous a montré qu'il était également loin du couplage Jj.

Remarquons également l'accord entre la composition théorique des niveaux et les valeurs de leur déplacement isotopique.

Malheureusement nous ne connaissons pas les déplacements isotopiques des niveaux supérieurs à 23000cm^{-1} et on voit sur le tableau IV qu'apparaissent alors les premières difficultés d'interprétation. Nous allons donc discuter un peu la précision des résultats obtenus.

On peut diviser la hauteur interprétée en deux régions :

- a) - De 13000 à 24000cm^{-1} environ

L'introduction de $4f^55d6s^2$ a permis d'obtenir un très bon accord entre la théorie et l'expérience.

Tous les niveaux ont été interprétés sans ambiguïté. Seuls les multiplets $5,7K$ ne sont pas trouvés expérimentalement et ne peuvent l'être pour l'instant, la règle de sélection $\Delta L = 0 \pm 1$ interdisant pratiquement les transitions avec les niveaux profonds $4f^66s^2 [7F_J]$.

On observe dans le tableau IV, pour certains couples de niveaux proches de même J et de composition voisine, quelques interversions des valeurs des g calculés.

par exemple pour $J = 2$ on trouve

	g observés	g calculés
15039 - 40 (9D) , 26 (9F)	2, 36	2,29
15567 - 53 (9D) , 36 (9F)	2,235	2,36

Cela provient du fait que les compositions de ces couples de niveaux sont très sensibles à de faibles variations des paramètres, comprises à l'intérieur de leur écart type.

b) De 24000 environ à 30000 cm^{-1} environ

Le spectre devient d'une grande complexité et des multiplets n'appartenant pas aux deux configurations étudiées apparaissent.

Nous avons essayé de les identifier afin d'évaluer l'importance des perturbations qu'ils apportent et de n'introduire dans les moindres carrés que les niveaux susceptibles d'être bien prévus par nos calculs, de façon à ne pas trop entâcher d'interaction les paramètres de f^5ds^2 .

On reconnaît facilement, grâce à leur g caractéristique, deux multiplets 9I , 3^9H , 3^7H qu'on peut attribuer aux configurations f^5d^2s et f^6dp et qui perturbent sans doute très peu f^6sp et f^5ds^2 .

En effet les interactions entre ces diverses sous-configurations sont des interactions électrostatiques qui ne connectent que des états LS de même nom. Donc les multiplets de même nom interagissent davantage. Les autres interagissent par effet de mélange. Or ici

d'une part les multiplets perturbateurs 9I , 9H , 7H sont très purs
d'autre part nos sous configurations étudiées ne comportent
ni 9H ni 9I et leur 7H sont déjà tous identifiés.

Les perturbations sont donc dues aux autres multiplets qui
malheureusement sont plus difficiles à interpréter.

Aussi avons nous identifié avec prudence les niveaux de
 f^6_{sp} et $f^5_{ds^2}$ situés dans leur région.

Ceux pour lesquels nous avons accord suffisant avec la théorie
sur l'énergie et le g ont été introduits dans les moindres carrés,
d'autre dont nous connaissions les niveaux perturbateurs ont été
seulement identifiés et portés au tableau IV en laissant en blanc
la colonne réservée à (0-C).

PARAMETRES OBTENUS.

Le tableau V donne les valeurs des paramètres obtenus et leur
écart type.

Pour obtenir une valeur convenable de G_4 nous avons alternati-
vement dans les moindres carrés, laissé G_2 ou G_4 libre, l'autre
étant fixé. D'autre part $G_3(fs)$ et $G_1(ps)$ ont beaucoup varié. $G_1(ps)$
a diminué après introduction de $f^5_{ds^2}$ et il est curieux de noter
que dans l'étude de Yb II faite par Racah puis par Z.Goldschmidt et
Y.Bordarier [18], $G_1(ps)$ augmente lorsqu'on ajoute f^n_{dp} à f^n_{sp} .
On peut dire en tout cas que les paramètres faisant intervenir
des électrons extérieurs au coeur 1^n semblent très variables
selon le choix des configurations introduites dans les calculs.

TABLEAU IV Résultats de $4f^6 ({}^6H - {}^6F) 5d6s^2 + 4f^5 ({}^6H - {}^6F) 5d6s^2$

J	Calc.	Obs.	O-C	O.g	C.g	Δ	SL Composition.
0	13953	13796.36	-157	0/0	0/0		.94 9G
	15800	15586.30	-214	0/0	"		.74 5D .15 ${}^7F^b$
	17795	17810.83	16	0/0	"	-31	.49 ${}^7F^a$.20 5D .17 ${}^7F^b$
	18451	18309.02	-142	0/0	"	+33	.74 (6H) 7F .21 ${}^7F^b$
	22335	22041.02	294	0/0	"		.33 ${}^7F^b$.32 (6F) 7F .25 ${}^7F^a$
	26083						.59 (6F) 7F .13 ${}^7F^b$.12 ${}^7F^a$
	29457			0/0			.91 (6F) 5D
1	14103	13999.43	-104	1.50	1.50		.95 9G
	14994	14863.85	-130	3.10	3.22	-39	.57 9F .31 ${}^7D^a$
	15772	15650.55	-121	-1.12	-2.22	-44	.44 ${}^7G^b$.36 ${}^7G^a$
	16144	16112.33	-32	1.50	1.50	-41	.59 5D .12 ${}^7F^b$
	16787	16690.76	-96	2.83*	2.88	-42	.35 ${}^7D^a$.30 9F .18 ${}^7D^b$
	17761	17769.68	9	.80*	.77	-15	.22 ${}^7F^a$.17 5F .14 (6H) 5F
	18220	18225.13	5	.695	.65	+11	.21 (6H) 7G .20 (6H) 5F .17 ${}^7F^a$
	18572	18475.28	-97	.96*	1.12	+32	.65 (6H) 7F .13 5F
	18998	18985.74	-12	.19	.12	-27	.58 5F .15 (6H) 7G
	20104	20091.03	-13	.08	-0.05	+40	.56 (6H) 5F .12 (6H) 7G .10 ${}^7G^a$
	21238	21193.68	-44	2.94	2.98		.64 ${}^7D^b$.26 ${}^7D^a$
	22525	22313.63	-211	1.48	1.42		.31 (6F) 7F .30 ${}^7F^b$.23 ${}^7F^a$

J	Calc.	Obs.	0-C	0.9	C-9	Δ	SL Composition:					
1	23035	22914.07	-121	-0.47	-0.42		.30	⁷ G ^a	.27	⁷ G ^b	.21	(⁶ F) ⁷ G
	23249	23243.80	-5	-0.465	-0.47		.67	(⁶ F) ⁷ G	.22	(⁶ H) ⁷ G		
	26281	26281.09	0	1.495	1.52		.58	(⁶ F) ⁷ F	.13	⁷ F ^b	.12	⁷ F ^a
	26996	26962.19	-34	2.56	2.93		.82	(⁶ F) ⁷ D				
	28982				1.17		.54	(⁶ F) ⁵ D	.26	(⁶ F) ⁵ F		
	30068				.66		.63	(⁶ F) ⁵ F	.15	(⁶ F) ⁵ P	.15	(⁶ F) ⁵ D
	31179				2.20		.67	(⁶ F) ⁵ P	.23	(⁶ F) ⁵ D		
2	14402	14380.44	-22	1.50	1.50		.95	⁹ G				
	15119	15039.59	-79	2.36	2.29	-41	.40	⁹ D	.26	⁹ F	.23	⁷ D ^a
	15715	15567.32	-148	2.235	2.36	-42	.53	⁹ D	.36	⁹ F		
	16113	16116.42	3	.96	.95	-42	.43	⁷ G ^b	.37	⁷ G ^a		
	16648	16681.74	33	1.77 *	1.69	-42	.42	⁵ D	.22	⁹ F		
	17182	17190.19	8	1.425	1.65	-42	.26	⁷ F ^a	.20	⁷ F ^b	.19	⁷ D ^a
	17601	17462.31	-139	.755	.61	-41	.73	⁵ G				
	18193	18075.67	-117	.41	.97	{+50 +40}	.16	(⁶ H) ⁷ H	.13	(⁶ H) ⁷ F	.11	(⁶ H) ⁵ F
	18459	18416.62	-42	1.08	.45	-14	.55	(⁶ H) ⁷ H				
	18770	18788.08	18	1.28	1.21	{+28 +22}	.32	(⁶ H) ⁷ F	.17	⁷ F ^b	.15	(⁶ H) ⁵ F
	19032	19009.52	-23	.95	1.05	{+29 +23}	.37	(⁶ H) ⁷ G	.27	(⁶ H) ⁷ F		
	19599	19677.38	78	1.08	1.06	-35	.59	⁵ F	.14	⁵ D	.10	(⁶ H) ⁷ G

J	Calc.	Obs	0-C	0.G	C-G	Δ	SL Composition.
2	20710	20762.84	53	.99	.99		.53 (${}^6\text{H}$) ${}^5\text{F}$
	21708	21813.22	105	1.94	1.97	-29	.60 ${}^7\text{D}^{\text{b}}$.26 ${}^7\text{D}^{\text{a}}$
	22464	22491.94	27	.52	.47		.65 (${}^6\text{H}$) ${}^5\text{G}$
	22939	22893.40	46	.59*	1.40		.29 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{F}$.24 ${}^7\text{F}^{\text{b}}$.19 ${}^7\text{F}^{\text{a}}$
	23451	23380.72	-70	.72	.86		.54 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{G}$.14 ${}^7\text{G}^{\text{a}}$.12 ${}^7\text{G}^{\text{b}}$
	23547	23546.54	0	.79	.56		.30 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{H}$.25 (${}^6\text{H}$) ${}^7\text{G}$.13 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{G}$
	23894	23986.48	92	.32	.28		.51 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{H}$.16 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{G}$.11 (${}^6\text{H}$) ${}^7\text{H}$
	25957	25579.35			2.30		.95 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{P}$
	26718	26786.75	68	1.35 *	1.52		.58 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{F}$.13 ${}^7\text{F}^{\text{b}}$.12 ${}^7\text{F}^{\text{a}}$
	27558	27671.39	112	1.955	1.97		.84 (${}^6\text{F}$) ${}^7\text{D}$
	28757				.89		.37 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{G}$.29 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{F}$.21 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{D}$
	29534				.92		.48 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{G}$.34 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{D}$
	30916				1.14		.56 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{F}$.16 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{D}$.12 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{P}$
	32631				1.75		.73 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{P}$.20 (${}^6\text{F}$) ${}^5\text{D}$
3	14847	14915.83	69	1.49	1.50	-40	.94 ${}^9\text{G}$
	15473	15507.35	35	1.96	1.94	-40	.57 ${}^9\text{D}$.19 ${}^7\text{D}^{\text{a}}$.14 ${}^9\text{F}$
	16214	16211.12	-3	1.765	1.82		.55 ${}^9\text{F}$.28 ${}^9\text{D}$
	16647	16748.30	101	1.27	1.26	-42	.40 ${}^7\text{G}^{\text{b}}$.38 ${}^7\text{G}^{\text{a}}$.11 ${}^9\text{F}$
	17210	17243.55	34	1.62	1.63	-43	.21 ${}^5\text{D}$.18 ${}^7\text{D}^{\text{a}}$.17 ${}^7\text{D}^{\text{b}}$

J	Calc.	Obs	0-C	0.g	C-g	A	SL Composition.					
3	17740	17830.80	91	1.22	1.28	-41	.37	⁵ G	.22	⁷ F ^a	.19	⁷ F ^b
	18107	18209.04	102	1.39	1.31	-42	.36	⁵ G	.16	⁷ F ^a	.11	⁷ D ^a
	18496	18328.64	-168	.33	.31		.88	(⁶ H) ⁷ I				
	19918	18948.80	31	.95	1.15	+43	.22	(⁶ H) ⁷ H	.16	(⁶ H) ⁷ F		
	19168	19210.10	42	1.27	1.04	-14	.44	(⁶ H) ⁷ H	.11	⁵ D		
	19443	19501.27	58	1.37	1.39	+32	.49	(⁶ H) ⁷ F	.15	⁷ F ^b		
	19714	19776.97	63	1.16	1.16	+26	.52	(⁶ H) ⁷ G	.12	⁷ G ^b		
	20407	20459.32	52	1.295	1.32	-39	.55	⁵ F	.26	⁵ D		
	21653	21700.89	47	1.235	1.24	+30	.46	(⁶ H) ⁵ F	.15	(⁶ H) ⁵ G		
	22426	22632.34	206	1.69	1.71	-24	.55	⁷ D ^b	.27	⁷ D ^a		
	23055	23316.62		1.01	1.07		.37	(⁶ H) ⁵ G	.16	⁷ G ^b	.14	⁷ G ^a
	23587	23709.98	121	1.26	1.39		.26	(⁶ F) ⁷ F	.17	⁷ F ^b	.15	⁷ F ^a
	23962	23852.43	-110	.95	1.10		.51	(⁶ F) ⁷ G	.21	(⁶ F) ⁷ H		
	24168	24150.80	-18	1.105	.98		.37	(⁶ F) ⁷ H	.14	(⁶ H) ⁷ G	.11	⁷ G ^b
	24464	24467.27	3	.96	.94		.25	(⁶ F) ⁷ H	.21	(⁶ F) ⁷ G	.17	(⁶ H) ⁷ G
	25420				.60		.63	(⁶ H) ⁵ H	.15	(⁶ H) ⁵ G	.11	(⁶ F) ⁵ H
	26652			1.88			.88	(⁶ F) ⁷ P				
	27369	27425.54	56	1.49	1.51		.59	(⁶ F) ⁷ F	.12	⁷ F ^b	.12	⁷ F ^a
	28263	28356.24		1.59	1.70		.75	(⁶ F) ⁷ D				

J	Calc.	Obs.	O-C	O.G	C-g	Δ	SL	Composition
3	29002				1.12		.50 (⁶ F) ⁵ G	.23 (⁶ F) ⁵ F
	30176				1.24		.40 (⁶ F) ⁵ D	.27 (⁶ F) ⁵ G .11 (⁶ F) ⁵ F
	31214				.62		.73 (⁶ F) ⁵ H	.12 (⁶ H) ⁵ H
	31985				1.28		.49 (⁶ F) ⁵ F	.24 (⁶ F) ⁵ D .11 (⁶ F) ⁵ G
	34405				1.64		.85 (⁶ F) ⁵ P	.12 (⁶ F) ⁵ D
4	15440	15579.11	139	1.495	1.50		.94 ⁹ G	
	15499				.40		.99 (⁶ H) ⁷ K	
	16042	16131.53	90	1.79	1.78		.70 ⁹ D	.14 ⁷ D ^a
	16788	16890.59	102	1.60	1.63		.67 ⁹ F	.11 ⁷ G ^a
	17356	17504.63	149	1.395	1.38	-43	.39 ⁷ G ^a	.36 ⁷ G ^b .18 ⁹ F
	17879	17959.28	80	1.52	1.50	-42	.21 ⁵ G	.16 ⁷ D ^a .14 ⁷ D ^b
	18420	18503.49	84	1.37	1.41	-42	.41 ⁵ G	.14 ⁷ D ^b .13 ⁷ D ^a
	19014	19191.62	177	1.27*	1.43	-15	.38 ⁷ F ^a	.23 ⁷ F ^b .20 ⁵ G
	19239	19174.84	-64	.96*	.79	+36	.86 (⁶ H) ⁷ I	
	19881	19990.25	109	1.11	1.11	{ +46 +39	.54 (⁶ H) ⁷ H	
	20110	20162.99	52	1.39	1.40	-15	.32 (⁶ H) ⁷ F	.13 ⁵ F .12 (⁶ H) ⁷ H
	20329	20396.67	68	1.405	1.40	+30	.23 (⁶ H) ⁷ F	.15 ⁵ F .14 ⁵ D
	20602	20712.80	111	1.29	1.32	+21	.36 (⁶ H) ⁷ G	.15 ⁷ G ^b
	21390	21243.27	-147	1.39	1.42	-41	.45 ⁵ D	.44 ⁵ F

J	Calc.	Obs.	O-C	O.g	C.g	Δ	SL Composition
4	22897	22893.07	-4	1.345	1.35		.32 (⁶ H) ⁵ F :.20 (⁶ H) ⁵ G :.13 ⁷ F ^b
	23412	23594.84	183	1.595	1.55		.42 ⁷ D ^b .25 ⁷ D ^a
	23808			1.29	1.29		.20 ⁷ G ^b .15 ⁷ G ^a .14 (⁶ H) ⁵ G
	24423	24633.74		1.325	1.37		.20 (⁶ F) ⁷ F .19 (⁶ F) ⁷ G .10 (⁶ H) ⁵ F
	24600	24772.74		1.25	1.22		.27 (⁶ F) ⁷ G .23 (⁶ F) ⁷ H
	24851	23996.85		1.05	.90	+25	.51 (⁶ H) ⁵ I .14 (⁶ F) ⁷ G .11 (⁶ H) ⁷ G
	25022	25065.37	43	1.21	1.15		.52 (⁶ F) ⁷ H .24 (⁶ F) ⁷ G
	25558	25387.19		1.055	1.06		.26 (⁶ H) ⁵ I .18 (⁶ H) ⁵ G .15 (⁶ H) ⁷ G
	26815	2652.26 26657.09	-63 -140	0.945 0.910	.94		.50 (⁶ H) ⁵ H .19 (⁶ H) ⁵ D .12 (⁶ F) ⁵ H
	27733			1.71	1.71		.81 (⁶ F) ⁷ P
	28161	28180.95	18	1.50	1.50		.58 (⁶ F) ⁷ F .12 ⁷ F ^b .12 ⁷ F ^a
	29101	29365.03		1.61	1.59		.56 (⁶ F) ⁷ D .14 (⁶ F) ⁷ P
	29648	29673.01	25	1.26	1.26		.55 (⁶ F) ⁵ G .18 (⁶ F) ⁷ D .12 (⁶ F) ⁵ F
	31252			1.29	1.29		.30 (⁶ F) ⁵ D .26 (⁶ F) ⁵ F .19 (⁶ F) ⁵ H
	32037			1.04	1.04		.56 (⁶ F) ⁵ H .15 (⁶ F) ⁵ G .14 (⁶ F) ⁵ D
	33160			1.40	1.40		.45 (⁶ F) ⁵ D .40 (⁶ F) ⁵ F
5	16187	16344.77	158	1.495	1.50		.94 ⁹ G
	16389			0.77	0.77		.99 (⁶ H) ⁷ K
	16819	16859.31	40	1.70	1.70		.81 ⁹ D

#

805
657
152

J	Calc.	Obs.	O-C	O.g	C.g	Δ	SL Composition	
5	17437	17587.44	150.	1.545	1.55	-42	.68	⁹ F .17 ⁷ G ^a
	18221	18350.40	129	1.44	1.44	-40	.39	⁷ G ^a .31 ⁷ G ^b .25 ⁹ F
	18724	18811.11	87	1.45	1.41	-44	.47	⁵ G .11 ⁵ F .10 ⁷ F ^a
	19396	19264.60	-132	1.48	1.52	-39	.33	⁷ D ^a .31 ⁷ D ^b .22 ⁵ G
	20082	20153.47	71	1.44	1.44	-40	.44	⁷ F ^a .23 ⁷ F ^b .18 ⁵ G
	20167	20183.36	16	1.03	1.03	+12	.84	(⁶ H) ⁷ I .11 (⁶ H) ⁷ H
	20899	21062.82	163	1.21	1.21	{ ⁺⁵³ ⁺⁴⁸	.59	(⁶ H) ⁷ H .12 (⁶ H) ⁷ G .10 (⁶ H) ⁷ I
	21313	21458.89	146	1.42	1.42	{ ⁺²⁹ ⁺²⁴	.42	(⁶ H) ⁷ F .18 (⁶ H) ⁷ G
	21611	21599.84	-11	1.37	1.39	-15	.22	⁵ F .18 (⁶ H) ⁷ G .13 (⁶ H) ⁷ F
	21836	21809.74	-26	1.41	1.42	~ 0	.57	⁵ F .13 (⁶ H) ⁷ F
	22463			0.68			.96	(⁶ H) ⁵ K
	24362	24323.51	-40	1.46	1.47		.23	⁷ D ^b .15 ⁷ F ^b .13 ⁷ D ^a
	24628			1.32	1.32		.24	(⁶ H) ⁵ G .14 (⁶ H) ⁵ H .11 ⁷ G ^b
	24855	24668.79	-186	1.53	1.49		.17	⁷ D ^b .15 ⁷ D ^a .10 ⁷ G ^b
	25449	25390.91	-58	1.29	1.30		.27	(⁶ F) ⁷ H .26 (⁶ F) ⁷ G
	25527	25615.57	89	1.39	1.38		.15	(⁶ H) ⁷ G .14 (⁶ H) ⁵ F .14 (⁶ F) ⁷ F
	25846	25675.50	-171	1.12	1.16		.37	(⁶ H) ⁵ I .26 (⁶ F) ⁷ G
	26031	26065.88	35	1.25	1.21		.42	(⁶ F) ⁷ H .17 (⁶ F) ⁷ G .14 (⁶ H) ⁵ I
	26911			1.23	1.23		.28	(⁶ H) ⁵ F .20 (⁶ H) ⁵ I .20 (⁶ H) ⁵ G
	28169			1.14	1.14		.42	(⁶ H) ⁵ H .22 (⁶ H) ⁵ G .15 (⁶ F) ⁵ H

J	Calc.	Obs.	O-C	O.g	C.g	Δ	SL Composition					
5	29073	29023.93	-49	1.40	1.48		.54	(⁶ F) ⁷ F	.12	⁷ F ^b	.11	⁷ F ^a
	29944	30233.77		1.55	1.55		.68	(⁶ F) ⁷ D				
	30595			1.30	1.30		.62	(⁶ F) ⁵ G	.11	(⁶ F) ⁷ D		
	32562			1.19	1.19		.56	(⁶ F) ⁵ H	.21	(⁶ F) ⁵ F	.14	(⁶ H) ⁵ H
	33403			1.33	1.33		.50	(⁶ F) ⁵ F	.20	(⁶ F) ⁵ G	.12	(⁶ F) ⁵ H
6	17092	17193.75	102	1.50	1.50		.96	⁹ G				
	17458			0.98	0.98		.99	(⁶ H) ⁷ K				
	17803	17654.54	-148	1.65	1.65		.88	⁹ D				
	18196	18298.29	102	1.52	1.53	-42	.62	⁹ F	.23	⁷ G ^a		
	19230	19254.29	24	1.47	1.47	-41	.39	⁷ G ^a	.34	⁹ F	.26	⁷ G ^b
	19776	19712.44	-64	1.38	1.38	-41	.70	⁵ G	.13	⁷ F ^b	.10	⁷ F ^a
	21208	21055.79	-153	1.455	1.45	-39	.45	⁷ F ^a	.25	⁵ G	.20	⁷ F ^b
	21255	21296.45	41	1.12	1.16		.82	(⁶ H) ⁷ I	.12	(⁶ H) ⁷ H		
	22021	22160.00	139	1.30	1.30	{ +49 +44	.52	(⁶ H) ⁷ H	.15	(⁶ H) ⁷ G	.12	(⁶ H) ⁷ I
	22616	22643.12	27	1.355	1.37	+33	.32	(⁶ H) ⁷ G	.19	(⁶ H) ⁷ H	.18	⁷ G ^b
	23108	22944.38	-164	1.47	1.48	{ +23 +18	.61	(⁶ H) ⁷ F	.21	⁷ F ^b		
	23427			0.92	0.92		.94	(⁶ H) ⁵ K				
	25867	25840.31	-27	1.48	1.38		.24	⁷ G ^b	.16	(⁶ H) ⁷ G	.16	⁷ G ^a

J	Calc.	Obs	O-C	O.g	C-g	Δ	SL Composition
6	26081	26180.92	100	1.29	1.42		.20 ${}^7\text{F}^b$.19 $({}^6\text{F})^7\text{F}$.14 $({}^6\text{F})^7\text{G}$
	26474	26471.36	-4	1.355	1.36		.29 $({}^6\text{F})^7\text{H}$.25 $({}^6\text{F})^7\text{G}$
	26968				1.28		.29 $({}^6\text{H})^5\text{I}$.26 $({}^6\text{F})^7\text{G}$.25 $({}^6\text{H})^7\text{G}$
	27043	27129.49	86	1.33	1.31		.50 $({}^6\text{F})^7\text{H}$.16 $({}^6\text{F})^7\text{G}$.10 $({}^6\text{H})^5\text{G}$
	27777				1.25		.39 $({}^6\text{H})^5\text{G}$.33 $({}^6\text{H})^5\text{I}$
	29332	29379.80	48	1.215	1.23		.41 $({}^6\text{H})^5\text{H}$.19 $({}^6\text{F})^5\text{H}$.14 $({}^6\text{H})^5\text{I}$
	30185	30092.53	93	1.455	1.46		.49 $({}^6\text{F})^7\text{F}$.12 $({}^6\text{H})^5\text{G}$.11 ${}^7\text{F}^b$
	31923				1.33		.67 $({}^6\text{F})^5\text{G}$.12 $({}^6\text{F})^5\text{H}$
	33697				1.24		.59 $({}^6\text{F})^5\text{H}$.20 $({}^6\text{H})^5\text{H}$.16 $({}^6\text{F})^5\text{G}$
7	18148	18118.85	-29	1.49	1.50		.98 ${}^9\text{G}$
	18705				1.11		.99 $({}^6\text{H})^7\text{K}$
	19025	19005.65	-19	1.51	1.51	-42	.60 ${}^9\text{F}$.30 ${}^7\text{G}^a$
	20376	20211.95	-164	1.475	1.48	-42	.39 ${}^9\text{F}$.38 ${}^7\text{G}^a$.22 ${}^7\text{G}^b$
	22503	22468.87	-34	1.23	1.24		.82 $({}^6\text{H})^7\text{I}$.12 $({}^6\text{H})^7\text{H}$
	23350	23337.38	-12	1.36	1.34	{ +41 +34	.53 $({}^6\text{H})^7\text{H}$.12 $({}^6\text{H})^7\text{G}$.12 $({}^6\text{H})^7\text{I}$
	23939	23734.36	-205	1.37	1.40	{ +34 +29	.31 $({}^6\text{H})^7\text{G}$.29 ${}^7\text{G}^b$.18 $({}^6\text{H})^7\text{H}$
	24640				1.07		.92 $({}^6\text{H})^5\text{K}$
	27159	27287.58	128	1.400	1.42		.30 ${}^7\text{G}^b$.24 $({}^6\text{H})^7\text{G}$.20 $({}^6\text{F})^7\text{G}$
	27723	27718.35	-5	1.345	1.36		.45 $({}^6\text{F})^7\text{H}$.33 $({}^6\text{F})^7\text{G}$

J	Calc.	Obs	Q-C	Q.G	C.G	Δ	SL Composition
7	28228	28137.92	90	1.39	1.38		.38 (^6F) ^7G .24 (^6F) ^7H .23 (^6H) ^7G
	28631			1.23	1.23		.59 (^6H) ^5I .15 (^6F) ^7H .12 (^6H) ^5H
	30327	30330.78	4	1.275	1.27		.47 (^6H) ^5H .28 (^6F) ^5H .20 (^6H) ^5I
	34406			1.29	1.29		.67 (^6F) ^5H .31 (^6H) ^5H
8	19338	19138.83	-199	1.50	1.50		1.00 ^9G
	20128			1.20	1.20		.99 (^6H) ^7K
	23929			1.29	1.29		.83 (^6H) ^7I
	24948			1.36	1.36		.74 (^6H) ^7H .14 (^6F) ^7H .10 (^6H) ^7I
	26114			1.16	1.16		.90 (^6H) ^5K
	29303			1.37	1.37		.80 (^6F) ^7H .12 (^6H) ^7H
	30560			1.26	1.26		.87 (^6H) ^5I
9	21727			1.26	1.26		1.00 (^6H) ^7K
	25566			1.32	1.32		.89 (^6H) ^7I .10 (^6H) ^5K
	27848			1.23	1.23		.90 (^6H) ^5K .10 (^6H) ^7I
10	23501			1.30	1.30		1.00 (^6H) ^7K

Mais il faut remarquer également que le coeur de Yb II est f^{14} et qu'il n'existe donc pas de troncatures du coeur.

EN CONCLUSION :

Cette étude à permis d'obtenir les premières valeurs des paramètres de $4f^5(6H-6F)5d6s^2$ et de nouvelles valeurs pour ceux de $4f^6(7F)6s6p$.

Elle donne une meilleure interprétation des niveaux profonds et un premier essai d'interprétation des niveaux plus élevés. Ces résultats feront l'objet d'un article à paraître dans le J.O.S.A. Pour améliorer ces résultats et interpréter les niveaux expérimentaux supérieurs nous envisageons de remplacer dans la base choisie $f^6(7F)sp$ par $f^6(7F,5D)sp$ et d'ajouter, en plus de $f^5(6H-6F)ds^2$, l'action de $f^5(6H-6F)d^2s$ au moins en partie, ainsi que $f^6(7F)dp$.

V - TABLEAU DES PARAMETRES

PARAMETRES	S m II		S m I			
	$4f^6(7F)5d +$ $4f^6(7F)6s$	$4f^6(7F \text{ réel})5d +$ $4f^6(7F \text{ réel})6s$			$4f^6(7F \text{ réel})5d6s$	$4f^6(7F \text{ réel})6s7$
$F_2(4f, 5d)$	127. . 2.	127.4 1.6	101.6	1.18		
$F_4(4f, 5d)$	6.5 . 0.5	6.25 0.4	4.7	0.2		
$G_1(4f, 5d)$	172. . 2.5	175. 2.	129.	1.3		
$G_3(4f, 5d)$	13.3 . 0.7	12.6 0.5	9.7	0.3		
$G_5(4f, 5d)$	1.79. 0.17	1.77 0.14	1.	0.1		
$G_3(4f, 6s)$	217. 9.	215. 8.	120.	5.	206.	12.
$G_3(4f, 7s)$					35.	fixé
$G_2(5d, 6s)$			1671.	84.		
$G_0(6s, 7s)$					572.	fixé
$F_2(4f, 6p)$						
$G_2(4f, 6p)$						
$G_4(4f, 6p)$						
$G_1(6p, 6s)$						
$R_2(fd, fs)$	2500. fixé					
$R_3(fd, sf)$	-500. fixé					
$R_1(fp, ds)$						
$R_3(fp, sd)$						
f^6_d	1167. 19.	f^6_d coeur réel				
ζ_{4f}	f^6_s 1135. 27.	f^6_s coeur réel	(1200)			coeur réel
ζ_{5d}	477. 32.	502. 24.	424.	11.		
ζ_{6p}						
$D_1(^6F-^6H)$						
$S(f^6_d-f^6_s)$	-12760. 65.	-12727. 51.				
$S(f^5_{ds^2}-f^6_{sp})$						

Résumons les principaux résultats obtenus dans l'étude théorique des différentes configurations paires et impaires des spectres I et II du Samarium.

1°) Configurations paires $4f^6 5d - 4f^6 6s$ de Sm II

Les meilleurs résultats ont été obtenus par l'étude de $4f^6(^7F \text{ réel})5d + 4f^6(^7F \text{ réel})6s$ qui a permis :

- d'interpréter correctement la région $0 - 17000 \text{ cm}^{-1}$ et d'obtenir les valeurs des paramètres.
- de mettre en évidence la présence de multiplets appartenant aux sous-configurations $4f^6[{}^5D]6s$ et $4f^6[{}^5D]5d$, qui perturbent dès 17000 cm^{-1} les multiplets 6F et 6D de $4f^6(^7F)5d$. Nous en tiendrons compte dans nos prochains calculs et nous espérons ainsi prévoir de nouveaux niveaux dans la région $17000 - 25000 \text{ cm}^{-1}$.

2°) Configurations impaires $4f^6 6p - 4f^5 5d 6s$ de Sm II

La base $4f^6(^7F)6p + 4f^5(^6H)5d6s + 4f^5(^6F)5d6s$ n'est pas encore suffisante pour interpréter les niveaux impairs expérimentaux situés entre 21250 et 40000 cm^{-1} . Nous devons étendre la base des calculs et ajouter $4f^6[{}^5D]6p + 4f^5(^6H - ^6F)5s^2 + 4f^5(^6H - ^6F)5d^2$ au moins en partie.

3°) Configuration paire $4f^6 5d 6s$ de Sm I

Lorsque l'étude a été entreprise 28 niveaux pairs attribués à $4f^6 5d 6s$ étaient connus. Aussi notre but était-il principalement de prévoir de nouveaux niveaux. La base $4f^6(^7F \text{ réel})5d 6s$ a permis d'in

interpréter très correctement la région $10000 - 16000 \text{ cm}^{-1}$. 12 niveaux ont été trouvés expérimentalement dont 10 avec un bon accord avec les énergies et les g théoriques.

Nous pensons en prévoir d'autres très prochainement en tenant compte des sous-configurations $4f^6[{}^5D]6s^2$ et $4f^6[{}^5D]5d6s$

4°) Configuration paire $4f^66s7s$ de Sm I

L'étude de $4f^6({}^7F \text{ réel})6s7s$ a permis principalement d'obtenir une évaluation du paramètre $G_0(6s,7s)$, difficile à déterminer et la valeur de $G_3(4f,6s)$.

5°) Configurations impaires $4f^66s6p - 4f^55d6s^2$ de Sm I

La base $4f^6({}^7F)6s6p + 4f^5({}^6H)5d6s^2 + 4f^5({}^6F)5d6s^2$ nous a permis :

- d'obtenir une très bonne interprétation de la région $14000 - 24000 \text{ cm}^{-1}$.

- de montrer l'importance des interactions des configurations f^6sp et f^5ds^2 des 18000 cm^{-1} .

- d'interpréter en partie la région $24000 - 30000 \text{ cm}^{-1}$

Nous espérons que l'introduction de $4f^6[{}^5D]6s6p + 4f^6({}^6H - {}^6F)5d^26s + 4f^6[{}^7F]5d6p$ permettra de compléter ces résultats déjà très intéressants.

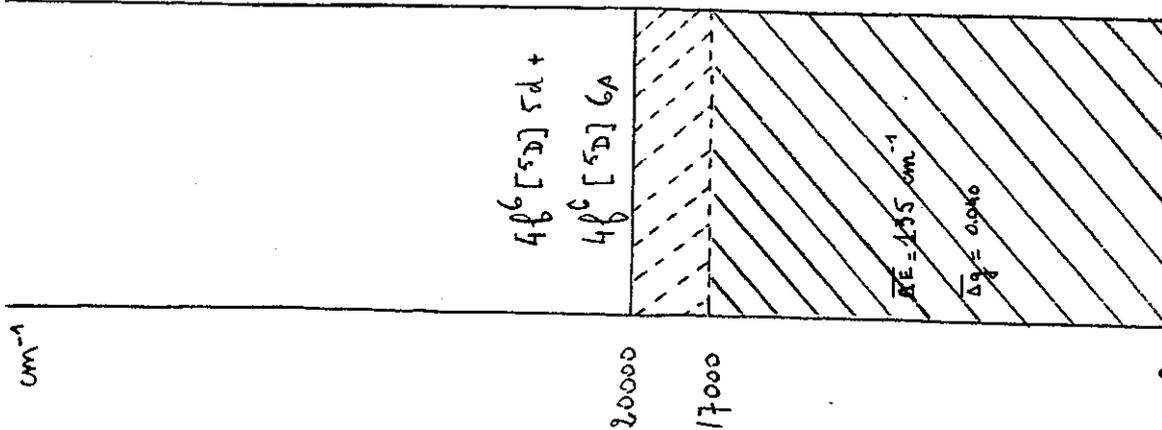
Les schémas de la figure 5 rappellent :

- hachurés en traits pleins, les intervalles correctement interprétés avec les bases choisies et les écarts quadratiques moyens obtenus pour les énergies et les g .

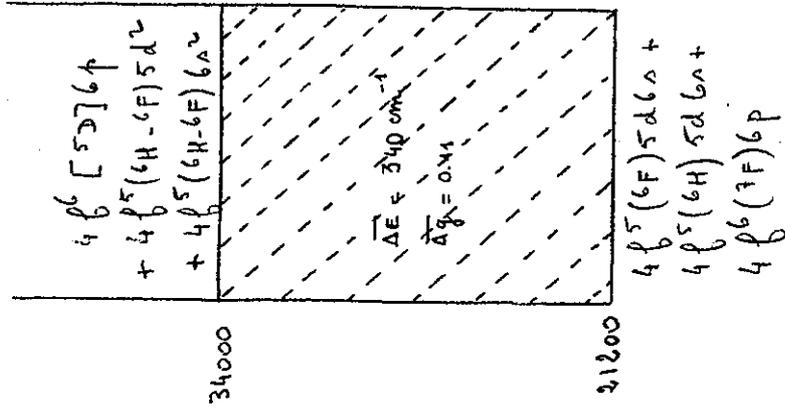
- hachurés en traits pointillés, les intervalles où les identifications sont incomplètes ou incertaines et où apparaissent de nouvelles sous-configurations perturbatrices.

Sm II

Conf. paires

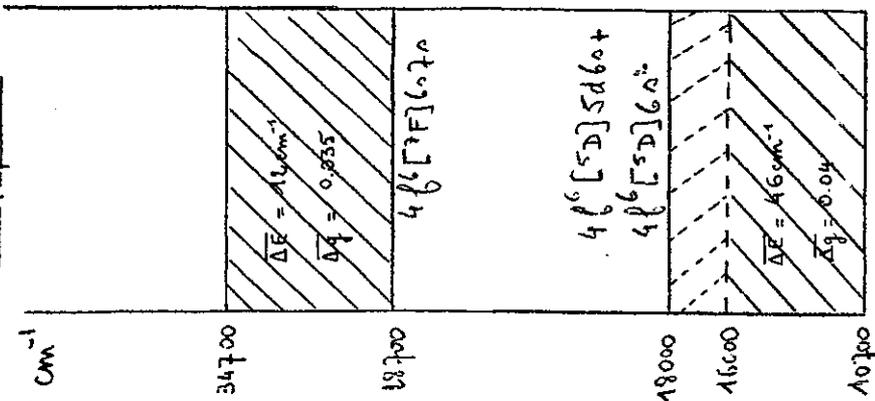


Conf. impaires

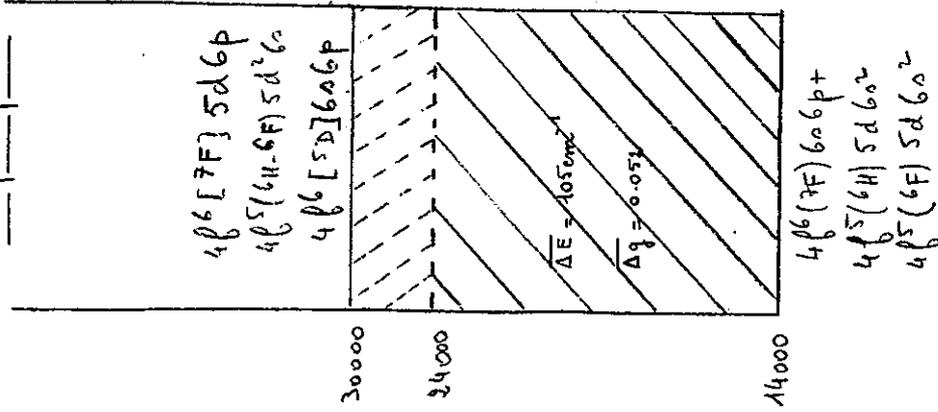


Sm I

Conf. paires



Conf. impaires



$0 \cdot 4\beta^6 [7F_0]$

- au-dessus des régions hachurées en pointillés, les sous-configurations que nous envisageons d'introduire dans nos prochains calculs.

Rappelons enfin que le tableau général des paramètres obtenus est donné page 80 bis.

CONCLUSION GENERALE SUR LES METHODES UTILISEES ET LES RESULTATS

Les configurations du Samarium, toutes construites sur f^5 et f^6 , comportent un nombre énorme de niveaux (5000 - 6000) et seuls, des calculs de sous-configurations sont possibles.

L'étude théorique nous a montré que les méthodes utilisées sont très efficaces pour calculer les niveaux profonds des sous-configurations fondamentales qui, en général, sont assez bien isolées des suivantes.

L'interprétation des niveaux plus élevés, appartenant à des configurations mélangées, pose par contre de nombreux problèmes :

a) Souvent les résultats expérimentaux sont

- soit très nombreux mais mal classés par configurations. Les paramètres "distances" des sous-configurations introduites dans les calculs sont alors difficiles à déterminer.
- soit au contraire, pas assez nombreux pour déterminer les valeurs de tous les paramètres utilisés.

b) Les méthodes actuelles entraînent de trop gros calculs, même pour les puissantes calculatrices modernes et nous sommes limités par la taille des matrices à diagonaliser et par les temps de calculs nécessaires. C'est en fait le problème le plus important et le plus difficile à résoudre.

Nous avons réussi à limiter nos problèmes en n'étendant que peu à peu nos bases de calculs, c'est-à-dire, en ajoutant l'action de nouvelles sous-configurations, tant que l'accord théorie-expérience n'était pas suffisant ou lorsque des interactions étaient mises en évidence.

Nous avons donc procédé par approximations successives en essayant de tenir compte d'abord des interactions les plus importantes.

- Lorsqu'une ou deux sous-configurations semblaient une base suffisante nous avons tenu compte des énergies du coeur réelles de $4f^6$, pour améliorer nos résultats. C'est le cas, par exemple, de l'étude de $4f^6 [{}^7F \text{ réel}] 5d + 4f^6 [{}^7F \text{ réel}] 6s$ de Sm II et de $4f^6 {}^7F \text{ réel } 5d 6s$ de Sm I

Dans ces deux études nous avons pu mettre en évidence des interactions avec les sous-configurations construites sur $4f^6 [{}^5D]$ et nous espérons pouvoir bientôt en tenir compte.

- Les effets des déformations du coeur $4f^6$ ou $4f^5$ sont par contre négligeables à côté des interactions existant entre les nombreuses sous-configurations présentes dans les spectres des niveaux impairs de Sm I et Sm II.

Si les résultats pour Sm II ne sont pas encore suffisants par contre ceux de Sm I sont très significatifs :

a) L'étude de $4f^6 ({}^7F) 6s 6p$ seule, interprétait correctement la région $14000 - 18000 \text{ cm}^{-1}$. L'accord théorie-expérience était ensuite insuffisant.

b) On étend la base : $4f^6 ({}^7F) 6s 6p + 4f^5 ({}^6H - {}^6F) 5d 6s^2$ donne maintenant un bon accord pour la région $14000 - 24000 \text{ cm}^{-1}$, un accord moyen pour la région $24000 - 30000 \text{ cm}^{-1}$, insuffisant ensuite.

Nous espérons que l'extension prévue de la base permettra l'étude correcte jusqu'à 35000 cm^{-1} . Ces calculs seront facilités dès que les programmes prévus pour les grosses matrices seront mis au point. Nous voyons qu'un très bon accord théorie-expérience est possible malgré les troncatures sévères de $4f^6$ et $4f^5$ que nous sommes obligés de faire.

Les méthodes que nous avons employées (SLATER, RACAH, etc..) s'avèrent donc très utiles et très efficaces dans certains cas. Elles sont très puissantes théoriquement puisqu'elles permettent en principe d'obtenir un accord théorie-expérience aussi bon que l'on veut et il est dommage que les applications pratiques nécessitent de faire de nombreuses approximations.

Il faut souhaiter qu'une méthode nouvelle permette d'étendre plus simplement les bases de calculs.

Je voudrais, en terminant, exprimer toute ma gratitude à Monsieur le Professeur JACQUINOT et à Monsieur le Professeur CHABBAL qui ont bien voulu m'accueillir au laboratoire Aimé COTTON.

Mes remerciements s'adressent aussi à Monsieur J. BLAISE, Directeur de Recherche, qui a témoigné un intérêt constant à mon travail.

Monsieur LEACH, Directeur de Recherche, mon parrain au C.N.R.S. voudra bien trouver ici l'expression de ma reconnaissance.

Qu'il me soit permis de remercier plus particulièrement J. BAUCHE qui m'a aidé de ses conseils pour la partie théorique, Y. BORDARIER qui a entrepris et dirigé la réalisation des programmes sans lesquels l'étude du Samarium n'aurait pas été possible, ainsi que tous mes camarades du laboratoire Aimé Cotton.



Le programme "AGENAC" peut se diviser en cinq grandes parties principales comprenant chacune de nombreux sous-programmes et que nous examinerons successivement :

- 1°) Le décodage et le rangement des données en mémoire
- 2°) Les boucles "extérieures"
- 3°) La construction d'une matrice par les deux boucles principales
- 4°) Les recherches des termes parents successifs par le sous-programme "AVANCE"
- 5°) Le calcul de la formule générale :

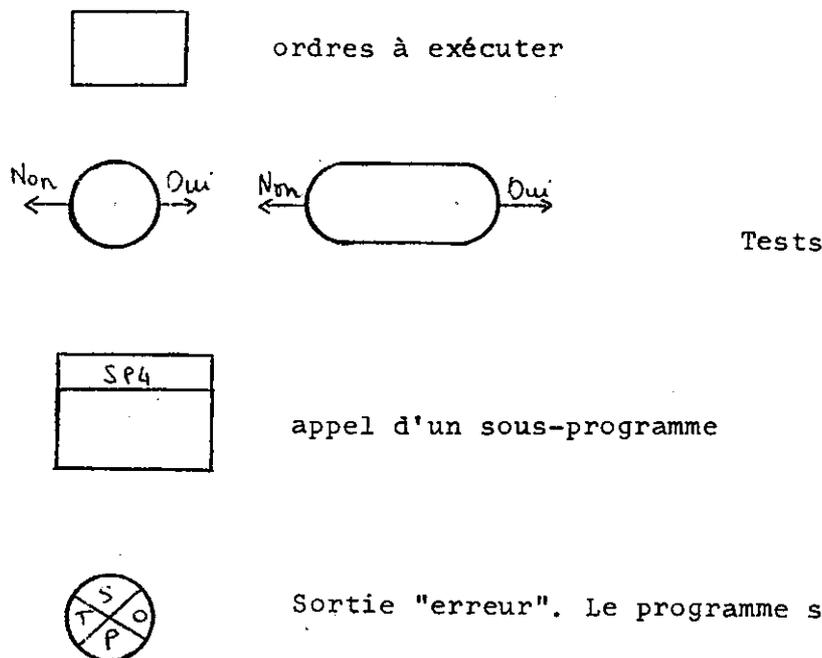
a) L'option (1) $\pi_1 [\sum_k \pi_2 + \dots + \sum_n \pi_n]$

b) L'option (2) $\pi_1 [\sum_k \pi_2 [\sum_l \pi_3 [\dots [\sum_n \pi_n \dots]]]]$

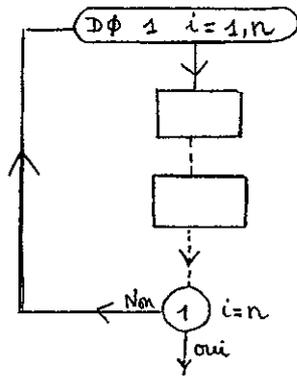
c) Le calcul d'un π_i (Bloc calcul numérique)

Nous nous aiderons d'un certain nombre d'organigrammes

Voici les conventions utilisées



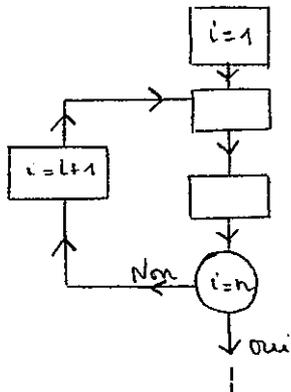
(1)



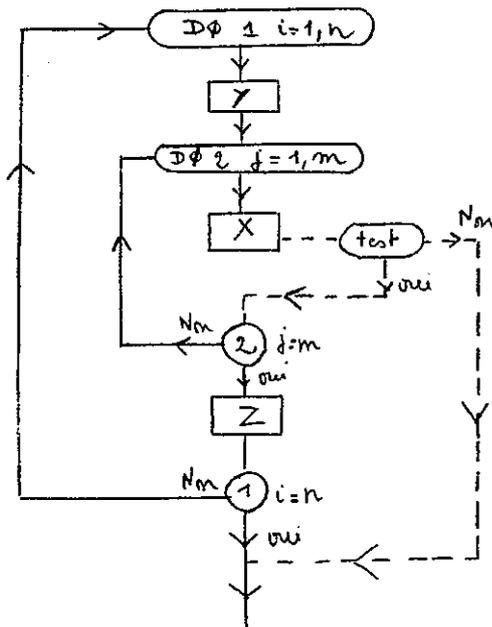
Signifie: exécuter tous les ordres compris entre $D\phi$ et 1 pour toutes les valeurs de i comprises entre 1 et n (par pas de 1) C'est-à-dire: exécuter n fois les ordres de la boucle

C'est équivalent aux ordres suivants :

(2)



On peut en imbriquer plusieurs



Signifie: exécuter n fois la boucle 1 et pour chacun de ces n passages exécuter m fois la boucle 2

Ainsi les ordres Y et Z sont exécutables n fois, les ordres X exécutables $n \times m$ fois.

Sauf bien sûr, si un test non vérifié fait sortir de la boucle (en pointillé)

En réalité les boucles Fortran (1) et (3) obéissent à un certain nombre de règles strictes. Aussi rencontrerons nous dans les organigrammes, des boucles que nous avons été obligés d'explicitier, c'est-à-dire de mettre sous la forme (2). c'est le cas, par exemple, dans le schéma des boucles extérieures.

- Les variables indicées

Ce sont des tableaux de nombres à 1, 2, 3,dimensions

- JV (i) tableau à 1 dimension JV(1)..... JV(n)

.Si JV(i) =50 i^{ème} nbre du tableau appelé JV est égal à 50

-V6J(i,j,k) tableau à 3 dimensions, appelé V6J

Un élément du tableau est repéré par ses 3 coordonnées i,j,k

Ici par exemple l'élément V6J (i,j,k) représente le k^{ième} (1≤k≤6) argument, du j^{ème} 6J, du Π indice i

$$\dots\dots\dots\Pi_3\dots\dots = \dots\dots \left\{ \begin{matrix} \dots \\ \dots \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{matrix} \right\} \dots\dots$$

$$\underline{V6J (3,2,5) =4}$$

SP 25
PP=PP×EE

Signifie multiplier le nombre sous forme Rotenberg PP par le nombre Rotenberg E E et placer le résultat dans les 12 mémoires réservées au nombre PP

- 1°) Le décodage de la formule -Rangement des données en mémoire

Cette partie de programme réalisée récemment par Y.BORDARIER n'a pas d'équivalent dans l'ancien programme.

Nous avons pris comme exemple dans la 1ère partie la formule donnant les coefficients du paramètre ζ_{4f} dans $f^6(7F)ds$:

$$(-i)^{J+L+L'+S_2+S'_2} \sqrt{\frac{\{S'L'J\} \{S_1 S'_1\} \{S_2 L S'_2\} \{L_1 L'_1\}}{\{LS_1\} \{S'_2 L_2 S_2\} \{S_2 L_2 S'_2\} \{3 2 3\}}} \sum_{L_5} (L_5) L_1^2 (-1)^{L_5} \begin{Bmatrix} 3 & 1 & 3 \\ 3 & 4 & 3 \end{Bmatrix}$$

Les données exactes à perforer seront :

c LISTE LIS-F5 3

6P

6F

6H

c LISTE LIS-F6 1

7F

c LISTE LIST-D 1

2D

c LISTE LIST- s 1

2S

CONSTRUCTION LS LI-F6D = LIS-F6 + LIST -D

CONSTRUCTION LS L-F6DS = LI -F6D + LIST -S

c TABLE TABCPF 3

1 1 a b c

2 2 "

3 3 "

SORTIE BANDE, IRRATIONNEL, FLOTTANT, ROTENBERG \notin J, L, S, LP, SP, S2, SP2 \notin

DEFINITION S + L = J

BOUCLE J

MATRICE ZETF..(L-F6DS(S, L, N, NA), L-F6DS(SP, LP, NP, NPA))

NA = LI -F6D (S2, L2, N2) NPA = LI -F6D (SP2, LP2, NP2)

$(-1)(J+L+LP+S2+SP2) ((L) (LP)(s)(SP) (S2) SP2)) 1/2 + 6J(SP,LP,J,L,S,1) 6J(S,1, SP,SP2,1/2,S2) 6J(S2,1,SP2,3,1/2,3) 6J(L,1,LP,3,2,3) \text{ SOMME LIS-F5}(S5,L5,N5)$
 TABLE TABCPF (N5,N5)(-1)(L5) 6J (3,1,3,3,L5,3)

FINPRO

(chaque ligne est perforée sur une carte différente)

Revoyons successivement les différents ordres rencontrés et la façon dont le programme range les renseignements utiles en mémoire. Nous donnerons ainsi la signification des variables que nous rencontrons plus loin dans les organigrammes de fonctionnement.

- Ordre C LISTE Nom de la liste (6 caractères) N (nbre de termes)

1S

7F

Cet ordre sert à donner à la machine les listes l^n d'électrons équivalents

Ordres principaux exécutés.

- | | |
|---|---|
| - COL est le compteur de listes. Il augmente d'une unité | COL = COL + 1 |
| - Le nom de la liste NOMLIS est rangé dans le tableau
NOLIST..... | NOLIST(COL)=NOMLIS |
| - L'adresse du dernier élément de la liste précédente
sert d'adresse initiale à la liste NOMLIS..... | ADLIST(COL)=COEL |
| - Les N termes de NOMLIS sont rangés dans le tableau X... | X (COEL+1,1)=2xS
X (COEL+1,2)=2xL |
| - Les termes de toutes les listes sont rangés à la
file dans le même tableau | X (COEL+1,3)=N° dans la
liste =1
X (COEL+N,3) = N |

- Ordre C TABLE Nom de la table (6 caractères) N (nbre d'éléments)

1 1 5 2 3
2 3 2 5 7

- COT est le compteur de tables Il augmente d'une unité COT = COT 1
- Le nom de la table NOMTAB est rangé en mémoire. NOTAB(COT) = NOMTAB
- L'adresse du dernier élément de la table précédente sert d'adresse initiale à la table NOMTAB..... ADTAB (COT) = COET
- Les N éléments sont rangés dans le tableau NTAB. Un élément est repéré par 2 coordonnées N1 et N2 qui seront en général des N^{OS} de termes dans une liste et par sa valeur $a\sqrt{b/c}$
- On comprend qu'une matrice déjà calculée α_{ij} puisse être considérée comme une table : N1 = n° dans la liste 1 = n° de ligne, N2 = n° de colonne, $a\sqrt{b/c} =$ l'élément α_{ij}

IJ
 LS LISTE 3 = LISTE 1 + LISTE 2
 IL
 IS
 SJ
 LJ

Cet ordre sous-entend bien sur qu'on a déjà donné les listes 1 et 2 et sert à demander la construction de la liste 3 par la machine, à partir des listes 1 et 2 déjà connues (données ou construites)

LISTE 3 = $l^n + l^p$
 LISTE 5 = LISTE 3 + l^m
 etc....

COL = COL + L	
NOLIST (COL) = LISTE 3	
ADLIST (COL) = COEL	

A l'aide des sous-programmes CONSTRUCTION et ORDRE 1 la machine calcule les termes et les range dans l'ordre qu'on désire (L croissant, S croissant, etc....)

Elle range ensuite en mémoire

N1 est le n° du terme parent dans la liste 1

N2 est le n° du terme parent dans la liste 2

K1 n° de la liste parente 1

K2 n° de la liste parente 2

$$X(\text{COEL} + 1, 1) = 2 \times S$$

$$X(\text{COEL} + 1, 2) = 2 \times L$$

$$3) = N$$

$$4) = N1$$

$$X(\text{COEL} + 1, 5) = N2$$

$$X(\text{COEL} + N, 5) = N2$$

K1 (COL) = N° de la liste parente 1

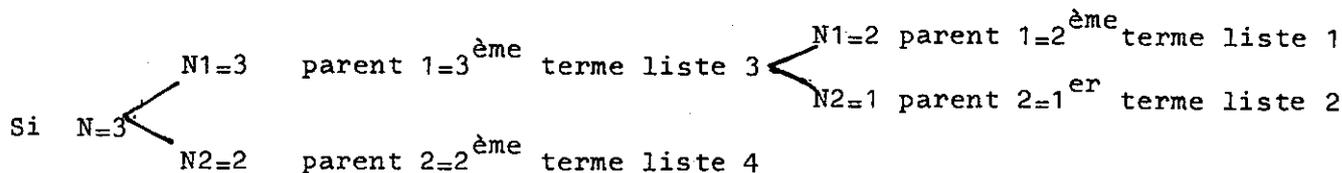
K2 (COL) = N° de la liste parente 2

Le sous-programme AVANCE utilisera entre autres ces données pour rechercher les parents successifs d'un terme.

Exemple

Liste 1			Liste 2			Liste 4			Liste3=liste1+Liste2					Liste5=liste3+Liste4				
N	S	L	N	S	L	N	S	L	N	S	L	N1	N2	N	S	L	N1	N2
1	0	0	1	2	3	1	0	0	1	2	3	1	1	1	2	2	3	1
2	0	1	2	2	4	2	2	4	2	2	4	1	2
...	3	2	2	2	1	3	2	4	3	2
n ₁			n ₂			n ₄			n ₃					n ₅				

$\langle (S_1 L_1, S_2 L_2) S_3 L_3, S_4 L_4 \rangle S_5 L_5$ Supposons qu'on recherche les parents du 3^{ème} terme de la liste 5 (N=3) on trouve successivement



PAPIER

Ordre SORTIE BANDE ROTENBERG, FLOTTANT, IRRATIONNEL § S,L,N,J.....§

CARTES

La machine range l'option d'édition choisie:	résultats écrits sur papier seulement.	
et les formes de l'édition (Rotenberg, Flottant..)		résultats écrits sur papier et sur bande.
		résultats écrit sur papier et perforés sur cartes

Chaque fois que la machine lit un nom S,L....elle regarde à l'aide du sous-programme NUMVAR si c'est la première fois qu'elle rencontre cette variable.

- Si oui, NUMVAR lui assigne un numéro et le range dans K

$$K = \text{NUMVAR}(S)$$

- Si non, NUMVAR transmet le numéro déjà assigné

$$K = \text{NUMVAR}(S)$$

Les variables sont numérotés à partir de 50 dans l'ordre ou la machine les rencontre. Nous verrons que cela permet de traiter de la même façon les variables et les constantes sans faire de test. les constantes sont toujours ≤ 25

La machine range alors les n^{os} des variables à éditer dans EDITN(i)=K

- Ordre DEFINITION S + L = J

Rangement dans les tableaux PARVA 1
et PARVA 2 des numéros des variables définissant J

K = NUMVAR (J)
PARVA 1 (K) = NUMVAR (S)
PARVA 2 (K) = NUMVAR (L)

- Ordre BOUCLE K = 0,4,2

et

- Ordre BOUCLE J

Dans les 2 cas... COVARB = COVARB + 1

Si variable du type K...

COVARB est le compteur des variables de boucles extérieures

NOVARB (COVARB,1) = NUMVAR (K)
NOVARB (COVARB,2) = minimum x 2 = 0
NOVARB (COVARB,3) = maximum x 2 = 8
NOVARB (COVARB,4) = pas x 2 = 4

Dans NOVARB (COVARB,1) on range le n° de la variable de la boucle extérieure n° COVARB

Si variable du type J;..

NOVARB (COVARB,2) = -1
NOVARB (COVARB,3) = -1

Ici K variera de 0, à 4, par pas de 2

Les minimum et maximum de la variable J seront calculés à partir des termes de la liste à laquelle S et L appartiennent.

les (-1) permettront de différencier les variables J ou K

- Ordre MATRICE $\begin{matrix} R \\ T \\ D \end{matrix}$ NOMMAT (LISTE 1(S,L,N,N1,M1), LISTE 2(SP,LP,NP,NP1,NP1))

Dans les expressions $\pi_1 \sum_{\substack{\text{liste } \alpha \\ \text{liste } \beta}} \pi_2 + \dots + \sum_{\substack{\text{liste } \alpha' \\ \beta'}} \pi_n$ ou $\pi_1 \sum_{\substack{\text{liste } \alpha \\ - \beta}} \pi_2 \left[\sum \pi_3 \dots \right]$,

on voit qu'à chaque $\pi_i > 1$ sont attachées une ou plusieurs listes muettes sur lesquelles on somme, et à partir desquelles des recherches de parents peuvent être nécessaires.

Par analogie on considère que les listes principales 1 et 2 sont attachées à π_1 , le rangement des données en mémoire est ainsi facilité.

Lorsqu'elle rencontre l'ordre MATRICE la machine va donc faire :

On s'intéresse aux données pour π_1	I = 1
On s'intéresse aux données pour la première liste de π_1 :	J = 1
le n° de la j ^{ème} liste de π_1 est NG	NOLIS (I,J) = NG
On a rangé dans le tableau NVS, le n° de	NVS(I,J,1) = NUMVAR (S)
la k ^{ième} variable, de la j ^{ème} liste principale de π_1	2) " (L)
	3) " (N)
	4) " (N1)
le nombre de variables attachées à la liste j de π_1 : est 5	5) " (M1)
la présence des variables N1 et M1, qui sont les n ^{os} des parents de SL indique que des recherches à partir de LISTE 1 vont exister	NBVAR (I,J) = 5
On s'intéresse aux données de la 2ème liste de π_1	J = 2
	NOLIS (I,J) = NG'
idem à J = 1	NVS (I,J,1) = NUMVAR (SP)
	NBVAR (I,J) = 5
Nombre de listes attachées à π_1 = J = 2	NBLIST (I) = J
Si i = 1 le maximum est 2 (2 listes principales 1 et 2)	
Si i > 1 le maximum est 4	
(on peut sommer sur 4 listes maximum)	

Plusieurs options sont possibles dans l'ordre matrice

a) Si le signe * n'existe pas on calcule l'option (1) $\pi_1 \sum_2 \pi_2 + \dots + \sum_n \pi_n$

b) Si le signe * existe on calcule l'option (2) $\pi_1 \sum_2 \pi_2 \left[\sum_3 \pi_3 \left[\dots \left[\sum_n \pi_n \right] \dots \right] \right]$

c) Si le signe / existe les matrices calculées seront envoyées en mémoire sous forme de tables pouvant être utilisées à la suite, dans le calcul d'une autre formule.

Nous avons vu l'utilité de cette possibilité dans la 1^{ère} partie

- Ordres N1 = LISTE 3 (S2, L2, N2, M2) , M2 = LISTE 4 (S3, L3, N3)

M1 = LISTE 5 (S5, L5, N5)

NP1 = LISTE 3 (SP2, LP2, NP2, MP2), MP2 = LISTE 4 (SP3, LP3, NP3)

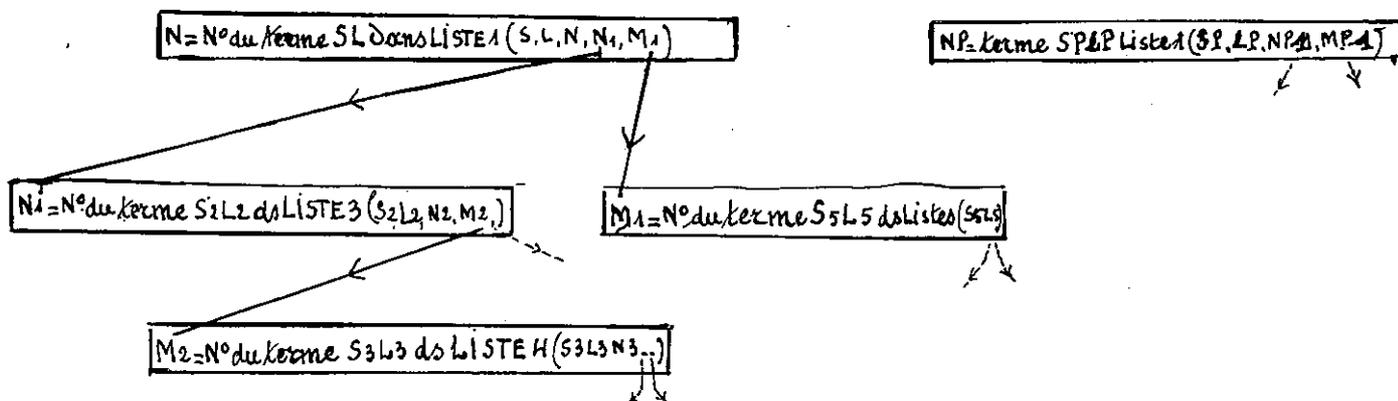
MP1 = LISTE 5 (SP5, LP5, NP5)

Chaque ordre N = correspond aux données d'une nouvelle recherche de parents.

Ici les ordres N1 et M1 permettent de définir complètement le vecteur ligne [S, L, N), c'est-à-dire permettent de rechercher tous les nombres quantiques qui apparaissent dans la formule et qui ont servi à définir (S L N)

Les ordres NP1 et MP1 définissent le vecteur colonne

On a donc ici le schéma de recherches suivant :



les données mises en mémoire doivent permettre d'aller chercher à partir d'un terme NSL appartenant à une liste j d'un π_i , les ancêtres successifs S2L2N2, S3L3N3, S5L5N5 etc.. dont on a besoin.

On va ranger en mémoire les chemins à parcourir, et nous verrons plus loin que c'est le sous-programme "AVANCE" qui effectuera les recherches à partir de ces données.

L'organigramme (1) nous montre comment la machine range les renseignements nécessaire suivants, à partir des données perforées sur cartes N1 =, N2=, etc..:

- NOLIS (J,J) = N° de la j^{ème} liste primaire du π_i
- NVS (I,J,K) = N° de la k^{ème} variable, de la j^{ème} liste primaire, de π_i
- NBVAR (I,J) = Nombre de variables de la j^{ème} liste de π_i (si > 3 il existe des recherches)
- NBLIST (I) = Nombre de liste de π_i
- NBRECH (I,J) = nombre de liste secondaires intéressantes attachées à la j^{ème} liste de π_i
- NBVARA (I,J,L) = Nombre de variables de la l^{ème} liste secondaire, de la j^{ème} liste de π_i

- NVA (I,J,L,K) = N° de la k^{ème} variable de la l^{ème} liste, secondaire, de j^{ème} liste de π_i
- NBCHEM (J,J,L) = parenté de la l^{ème} liste secondaire de la j^{ème} liste primaire de π_i ou encore nombre de chemins ou nombre de listes à parcourir à partir de la j^{ème} liste pour arriver à la l^{ème} (1=père, mère, 2 g^{rds} parents, etc....)
- CHEMIN (I,J,L,M) = N° du m^{ième} parent, de l^{ième} liste secondaire, de la j^{ème} liste primaire de π_i ou encore, les noms des listes à parcourir à partir de la j^{ème} pour arriver à la l^{ème}
- BUT (I,J,K) = le dernier de ces chemins (sert de vérification).

- DECODAGE de la FORMULE proprement dite:

(-1)(J+L+S) 6J(.....).....somme (LISTE(S5,L5,N5)6J(.....).....)

- La machine range les renseignements suivants :

- Le nombre de π

- Pour chaque $\pi_i > 1$

- Le nombre et les n^{os} des listes sur lesquelles on somme

- La recherche des parents si elle existe (on passe donc dans l'organigramme (1) pour $i > 1$)

- La structure de chaque π_i ($i=1$ à n):

- Nombre de variables de phase

- Nombre de crochets

- Nombre de 3J

- " 6J

- " 9J

etc.....

- Les arguments de ces fonctions.

par exemple pour $6J(S,L,1/2,J,2,1)$ dans π_i on aura

$$V6J(I,K,1) = \text{N}^\circ \text{ de la variable } S \quad > 50$$

$$V6J(I,K,2) = \text{N}^\circ \quad " \quad L \quad > 50$$

$$V6J(I,K,3) = 2 \times 1/2 \quad < 50$$

$$V6J(I,K,6) = 2 \quad < 50$$

Donc dans la mémoire $V6J(I,K,L)$ on trouve le $1^{i\text{ème}}$ argument du $k^{i\text{ème}}$ $6J$ du π_i . Si cet argument est > 50 , c'est le n° d'une variable.

Si cet argument est < 50 , c'est une constante doublée

Nous allons voir qu'on peut traiter de la même manière les variables et les constantes sans être obligé de vérifier si les arguments sont $<$ ou $>$ 50

Pour cela on range dans le tableau $JV(i)$, pour $i = 1$ à 50, la suite de nombres $1, 2, \dots, 50$ Alors $JV(i) = i$, si $i < 50$ (durant toute l'exécution)

On peut donc considérer une constante k comme une variable n° $2k$ dont la valeur doublée est rangée dans la mémoire $JV(2k)$

$$\underline{JV(2k) = 2k} \quad \underline{2k < 50}$$

D'autre part après chaque avancement de variables, la valeur instantanée doublée de la variable n° j ($j > 50$) est rangée dans la mémoire $JV(j)$

$$\underline{JV(j) = 2 \times S = 4} \text{ par exemple } \underline{j > 50}$$

Alors dans les deux cas on obtient les valeurs instantanées des arguments $V6J(I,K,L)$ en faisant

$N = V6J (I, K, L)$
$V = JV (N)$

ex : $N=V6J(J, K, 1) = 52$ $N=V6J(J, K, 3) = 2$
 $V=JV (52) = 2S=4$ $V=JV (2) = 2$

Résumons comment s'est fait la transmission des valeurs instantanées des variables :

1°) Existence d'un certain nombre de variables $S, L, S_1, L_1, \dots, J, K, \dots$ auxquelles on attribue un n° $n > 50$ et dont les valeurs successives sont rangées dans le tableau $JV (n)$

2°) Les constantes sont considérées comme des variables. On leur attribue un n° m égal au double de leur valeur. On les range dans le même tableau $JV (m)$ $m < 50$

3°) Existence d'un nombre de fonctions dont les arguments sont des variables S, L, \dots ou des constantes. On range dans des tableaux les n°^{os} de ces variables Ex $V6J(I, K, J)$

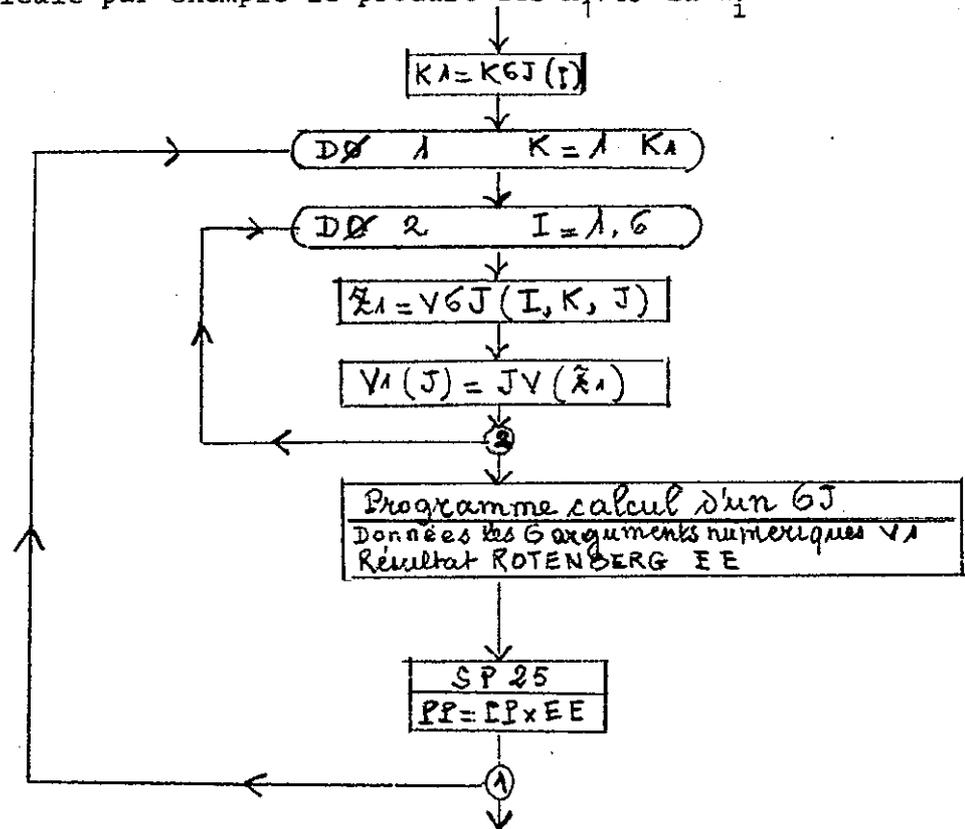
4°) Les 50 premières mémoires du tableau JV contiennent les nombres de 1 à 50.

5°) L'avancement des variables détermine les valeurs de toutes les variables $m > 50$ et les range dans $JV (m)$

6°) On connaît alors les valeurs numériques des arguments

Ex: $\begin{cases} V_{6J}(I, K, J) = 52 = \text{n}^\circ \text{ de la variable du } j^{\text{ème}} \text{ argument du } k^{\text{ème}} \text{ } 6J \text{ du } \pi_i \\ JV(52) = 4 \end{cases}$ La valeur instantanée du $j^{\text{ème}}$ argument, du $k^{\text{ème}}$ $6J$, du π_i est égale à la valeur instantanée de la variable n°52

La figure (a) montre comment le sous-programme "bloc calcul" SP4 calcule par exemple le produit des $k_1 \times 6J$ du π_i



2°) L'Avancement des boucles extérieures

On a vu dans le décodage qu'il existe deux sortes de boucles extérieures

a) Les boucles définies du type J et nécessitant les données suivantes

DEFINITION S + L = J
BOUCLE J

b) Les boucles simples du type K

BOUCLE K = 2, 8, 2

L'organigramme (fig 2) montre le mécanisme d'avancement.

Le programme recherche d'abord les minimum et maximum des variables des boucles définies en allant chercher dans la liste correspondante à SL le minimum de (S-L)

et le maximum de S+L

Supposons que m boucles du type a et b soient ainsi préparées, c à d COVARB = m, chacune exécutable α_i fois, alors le groupe d'ordres Construction de $\prod \alpha_{ij}$ sera exécutable $\alpha_1 \times \alpha_2 \dots \alpha_m$ fois c'est-à-dire qu'on va construire successivement $\alpha_1 \times \alpha_2 \dots \alpha_m$ matrices (α_{ij}) différentes

par exemple n aura l'ordre suivant :

$$\begin{array}{l}
 - \underline{k = 2} \\
 J = 1 \quad (\alpha_{ij}) \quad J = 2 \quad (\alpha_{ij}) \quad J = Jm \\
 - \underline{k = 4} \\
 \underline{J=1} \quad (\alpha_{ij}) \quad J = 2 \quad (\alpha_{ij}) \quad J = Jm \\
 \text{etc.....}
 \end{array}$$

Note

Il n'est pas gênant pour "Assac" d'avoir sur bande l'ordre également possible :

$$\begin{array}{l}
 - J = 1 \\
 \quad \quad k=2 \quad \quad k = 4 \\
 - J = 2 \\
 \quad \quad k=2 \quad \quad k = 4
 \end{array}$$

3°) Construction d'une matrice (a_{ij})

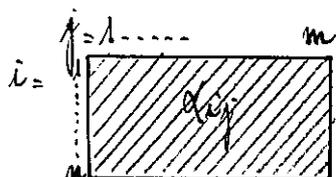
Elle est schématisée dans l'organigramme (3)

Le programme prépare les deux boucles principales nécessaires en recherchant l'adresse des 1er termes et derniers termes de chacune des 2 listes. Supposons n termes dans la liste (1)

La boucle (1) est exécutable n fois

Si l'option choisie est

-a) Rectangulaire

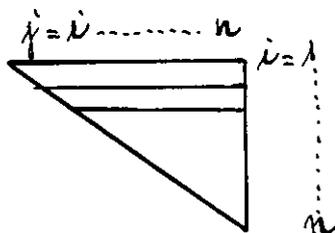


La liste (2) est différente de la liste (1) Supposons qu'elle comporte m termes. Alors pour chaque exécution de la boucle (1), la boucle (2) est exécutable m fois.

C'est-à-dire que le groupe d'ordres :

<p>Appel du bloc calcul d'une formule = 1 élément a_{ij}</p>

est exécutable $n \times m$ fois



On a bien calculé $n \times m$ coefficients d'une matrice rectangulaire

- b) Triangulaire

La liste (2) est identique à la liste (1) et comporte donc n termes. Cette fois pour chaque exécution de la boucle (1), l'indice j de la boucle (2) variera de i à n seulement et on calculera donc les

$\frac{n(n+1)}{2}$ coefficients d'une matrice triangulaire.

- c) Diagonale

i varie de 1 à n	Boucle exécutable n fois
et j = i	Boucle exécutable 1 fois

On calcule ainsi les n éléments d'une matrice diagonale. On voit d'autre part qu'à chaque calcul d'un élément de matrice on fait appel 2 fois au programme " AVANCE" - Une fois pour rechercher les parents du $i^{\text{ème}}$ terme de la boucle 1
- Une fois pour rechercher les parents du $j^{\text{ème}}$ terme de la boucle 2

Lorsqu'une matrice est calculée on l'édite (papier-bande ou carte) sous la forme ligne, colonne, élément,.....

4°) Recherche des parents successifs par le sous-programme "AVANCE"

On a vu en détail dans la partie "décodage" la mise en mémoire des principaux renseignements indispensables aux recherches des parents successifs d'un terme donné n d'une liste primaire j d'un π_i construite à partir d'une série de listes secondaires.

L'organigramme (4) montre l'utilisation de ces données pour aller chercher les ancêtres successifs dont on a besoin pour calculer la formule.

Le sous-programme SP5 fig.5 organise le calcul de la formule. Il calcul d'abord π_1 pour qui toutes les variables sont maintenant avancées.

Si l'option choisie est (2) la suite des calculs se fera dans le sous-programme "PRODUC", expliqué en b).

Si l'option choisie est (1), la boucle (1) additionne les groupes $(\sum_i \pi_i)$ une fois qu'ils sont calculés à l'aide du sous programme SP2 BIS expliqué en a). Elle calcule donc $(\sum \pi_1) + (\sum \pi_2) + \dots$

Lorsqu'on sort de SP5 un élément (α_{ij}) est fini de calculer

a) le sous programme "SP2 BIS"

Calcule un groupe $\sum_i \pi_i$

Cette somme peut se faire sur 1,2...4 listes ou sur aucune comme dans le cas :

$$\pi_1 \left[\pi_2 + \pi_3 \right]$$

Chaque somme $\sum_i \pi_i$ se réduit ici à un terme et SP2 BIS se contente de calculer un π_1

L'organigramme (6) montre bien les différents cas possibles.

D'autre part on remarquera les différents appels "AVANCE" pouvant aller chercher les parents des termes des listes " principales muettes" sur lesquelles on somme

b) Le sous-programme " PRODUC "

Il sait calculer 4 sommes imbriquées, chaque somme pouvant se faire sur deux listes maximum.

$$\pi_1 \sum_2 \pi_2 \left[\sum_3 \pi_3 \left[\sum_4 \pi_4 \left[\sum_5 \pi_5 \right] \right] \right]$$

En fait nous n'avons donné dans l'organigramme (7) que la méthode pour imbriquer 2 sommes à 2 listes. Le principe est le même pour en imbriquer n

c) Le sous-programme "Bloc Calcul" SP4

Cette partie du programme est restée presque identique à celle de l'ancien programme "A" et nous renvoyons à la thèse d'Y BORDARIER pour les organigrammes de SP4 qui calcule le produit de toutes les fonctions 3J, 6J, 9J etc... contenues dans un π_i , calculées elles mêmes à l'aide des sous-programmes 3J, 6J, 9J etc... et des sous-programmes d' "Algèbre Rotenberg" : multiplication de 2 nombres Rotenberg, division, puissance, addition etc.....

Fig - 1

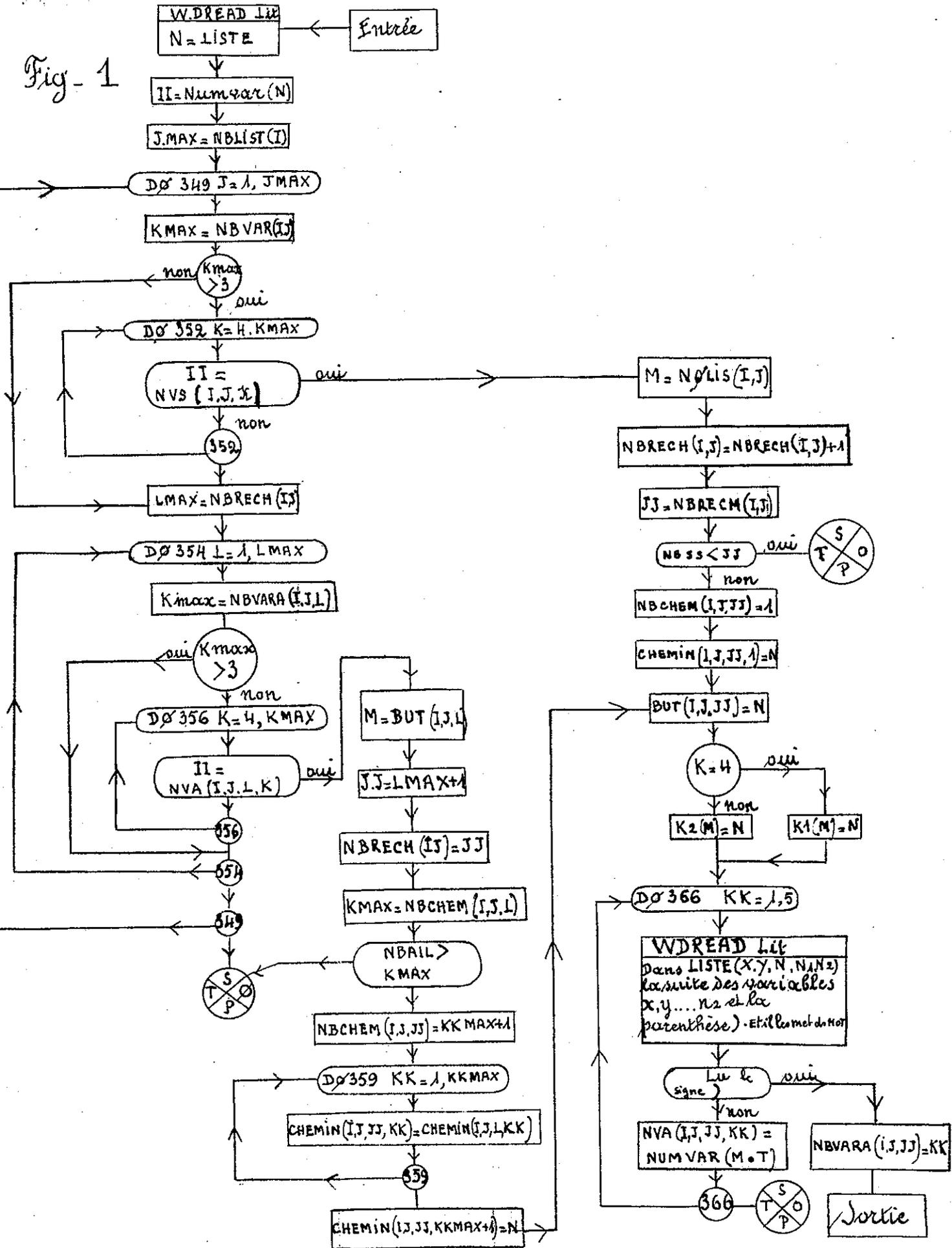
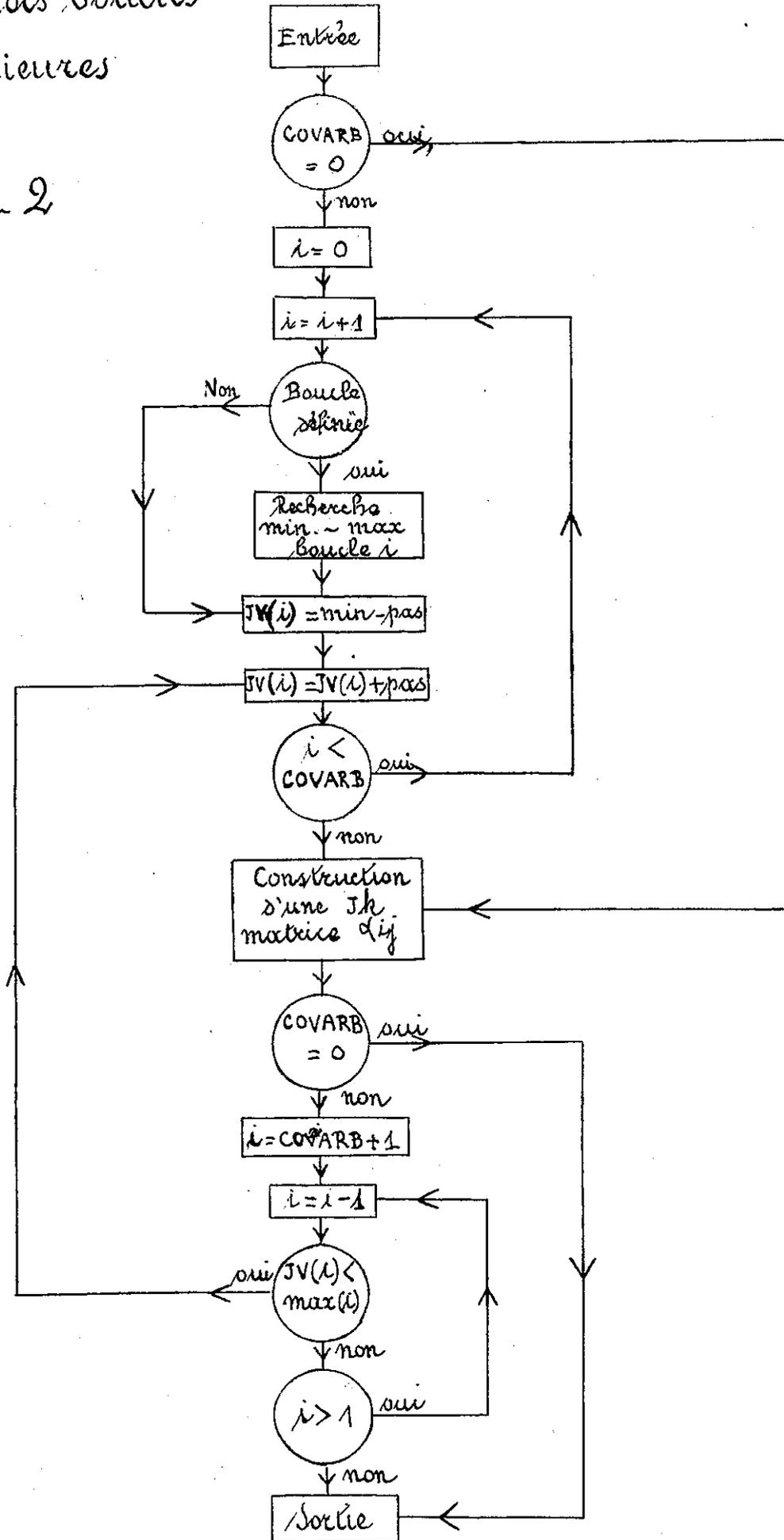


Schéma des Boucles extérieures

Fig. 2



Construction d'une
matrice $\begin{pmatrix} J & k \\ \alpha & ij \end{pmatrix}$

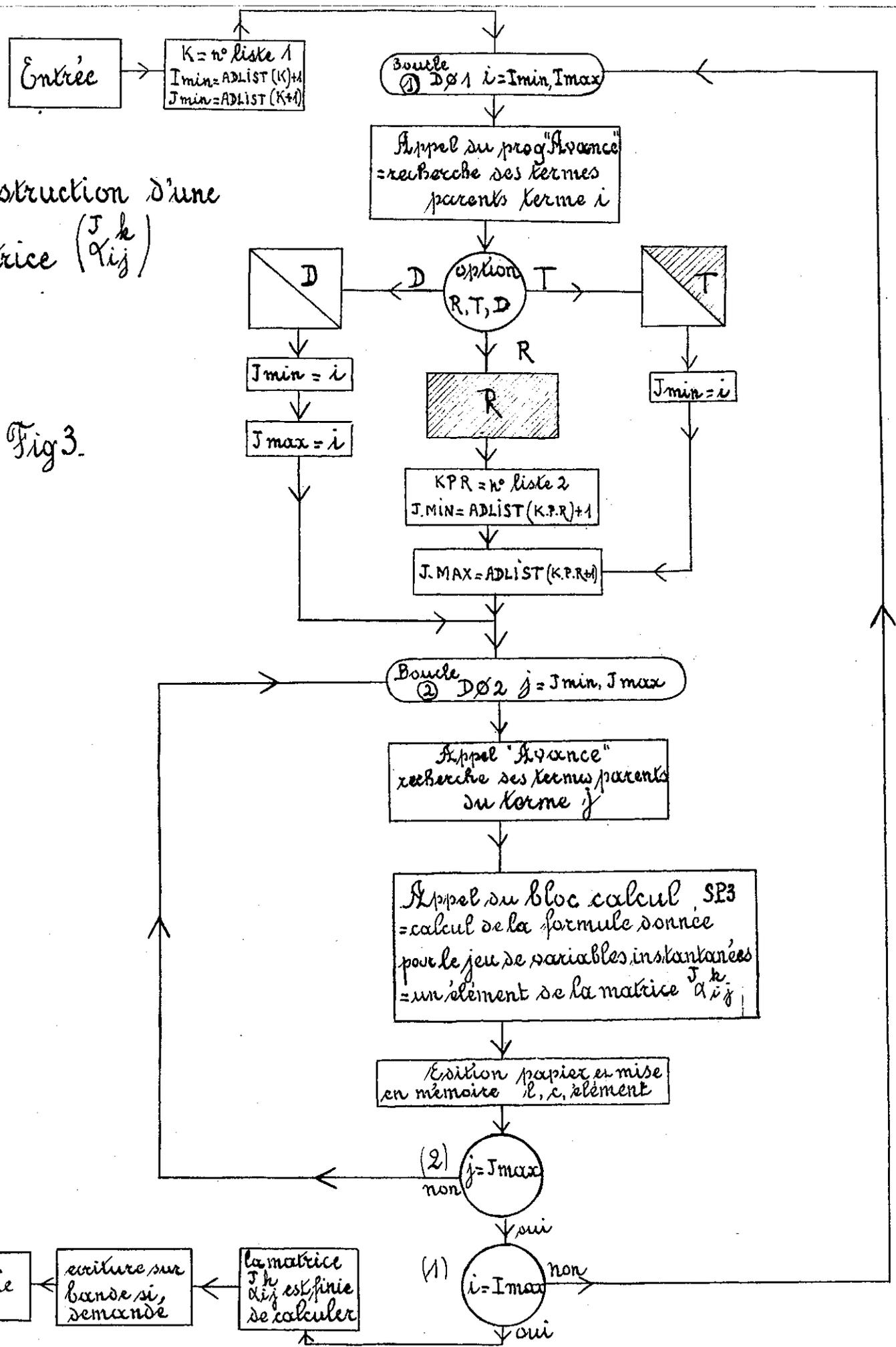


Fig 3.

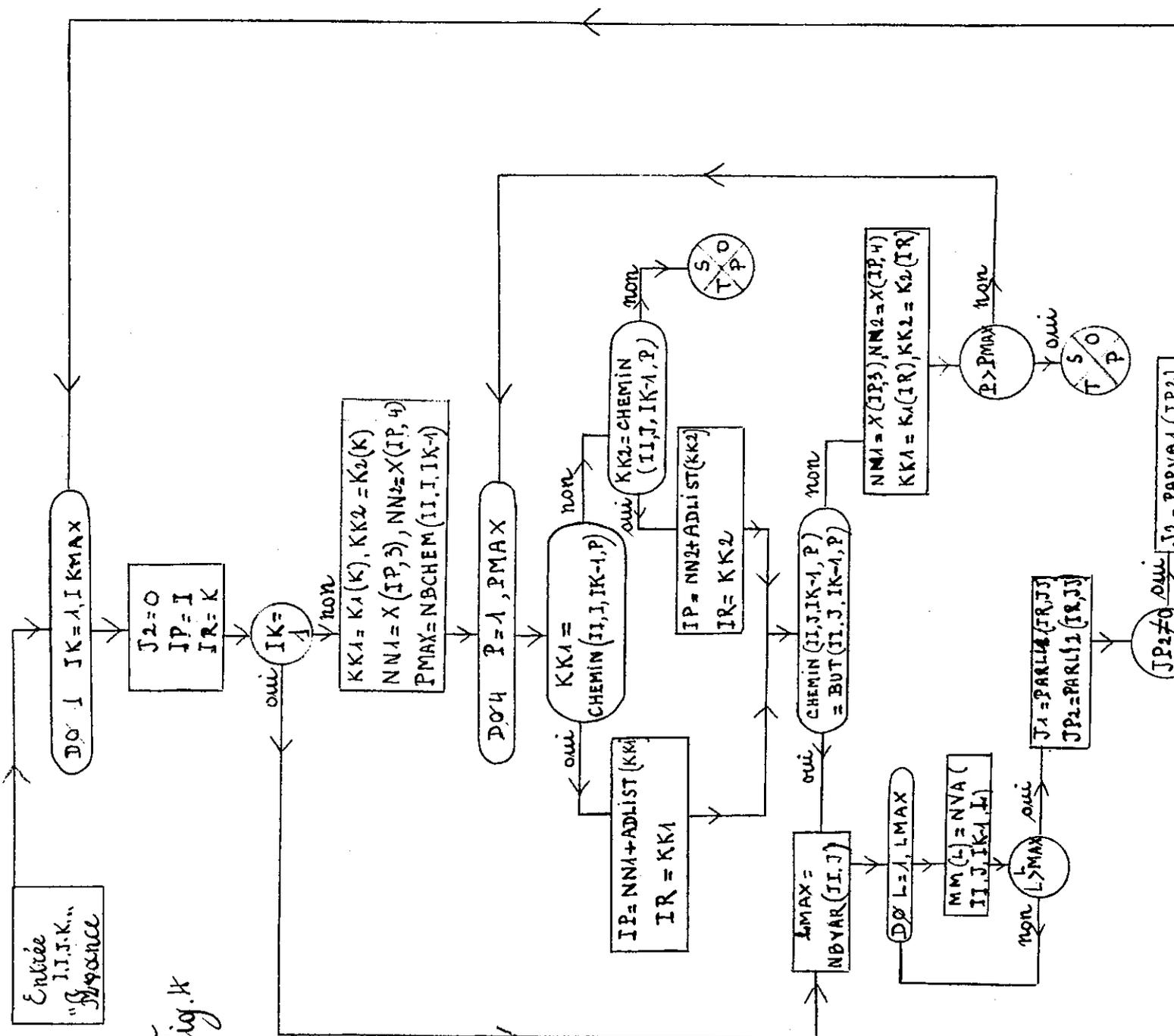
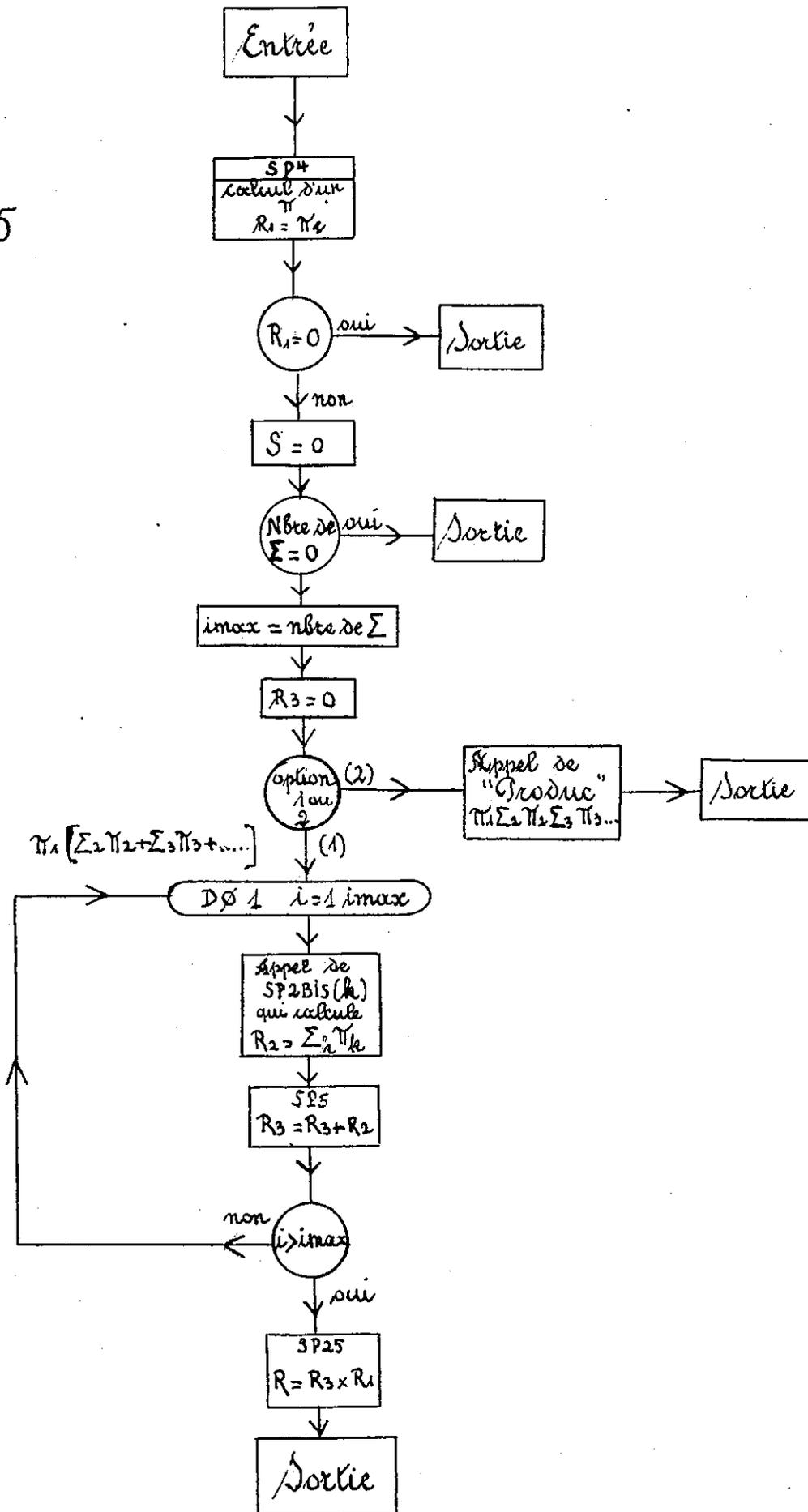


Fig. 11

Fig. 5



SP2BIS (i, R2)

Entrée

R2 = 0

n = nb liste(i)

Fig. 6

n = 0

SP4
R3 = Πi

SP5
R2 = R2 + R3

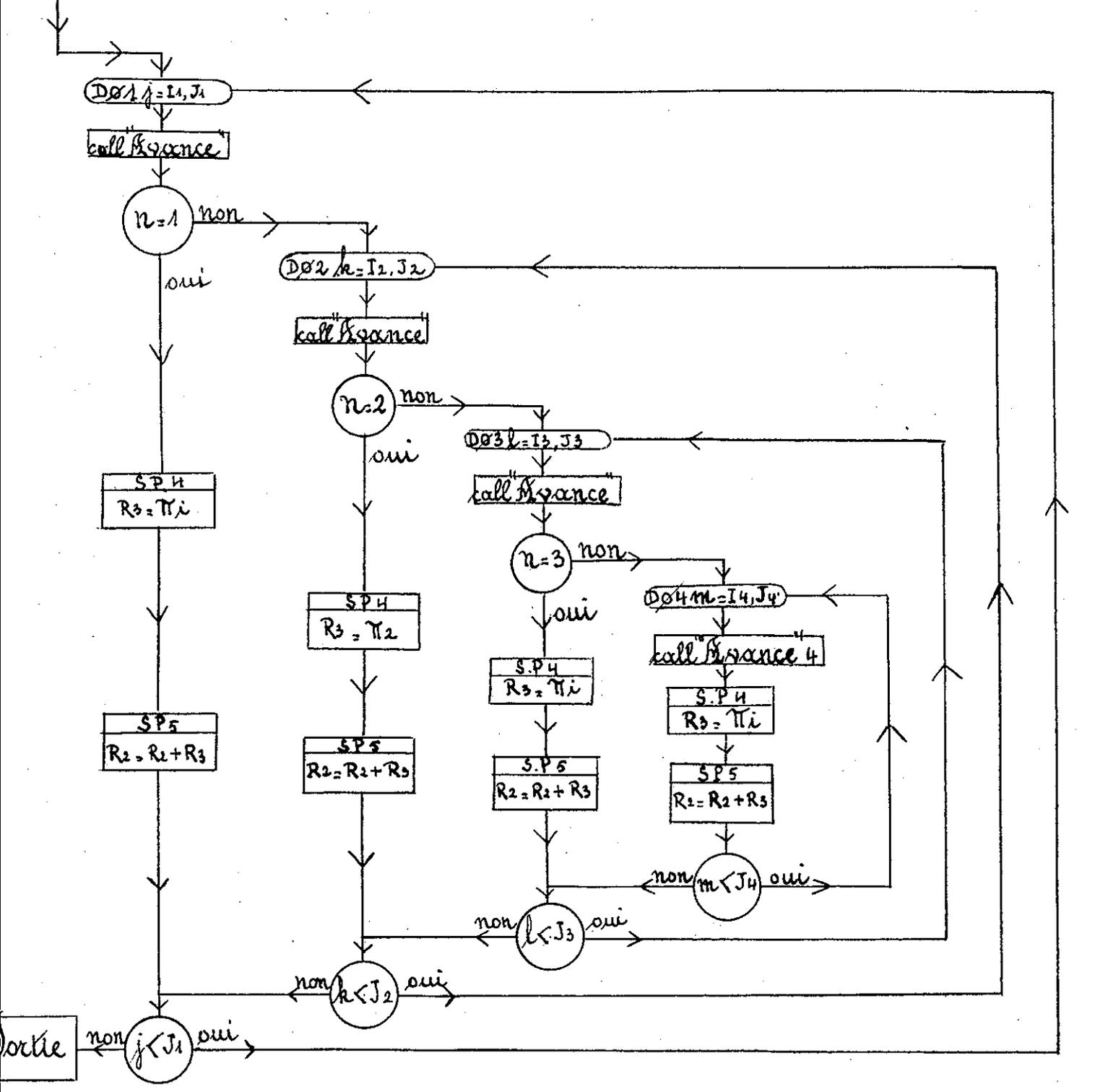
Sortie

$P_1 = \text{N}^\circ \text{ LIS}(i, 1)$
 $I_1 = \text{ADLIST}(P_1) + 1$
 $J_1 = \text{ADLIST}(P_1 + 1)$

$P_2 = \text{N}^\circ \text{ LIS}(i, 2)$
 $I_2 = \text{ADLIST}(P_2) + 1$
 $J_2 = \text{ADLIST}(P_2 + 1)$

$P_3 = \text{N}^\circ \text{ LIS}(i, 3)$
 $I_3 = \text{ADLIST}(P_3) + 1$
 $J_3 = \text{ADLIST}(P_3 + 1)$

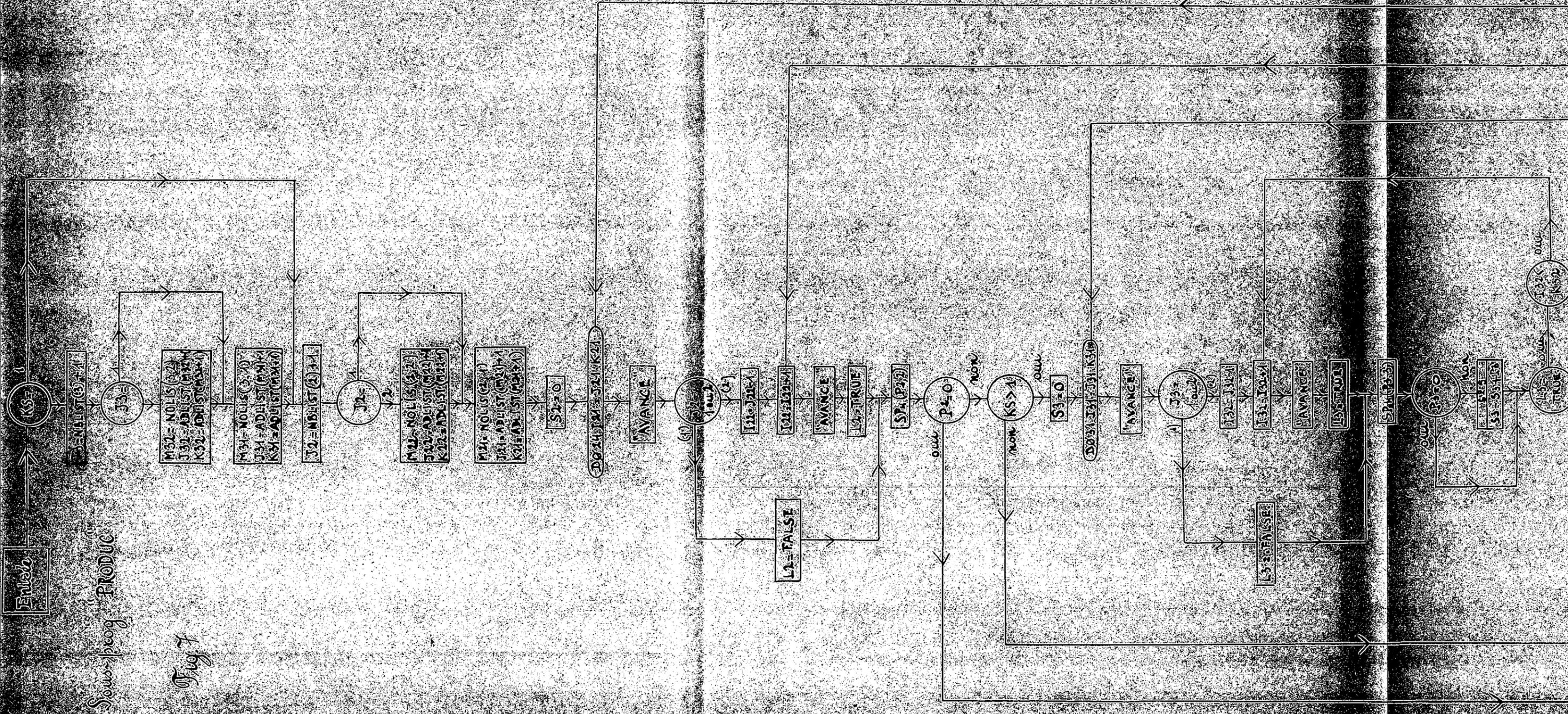
$P_4 = \text{N}^\circ \text{ LIS}(i, 4)$
 $I_4 = \text{ADLIST}(P_4) + 1$
 $J_4 = \text{ADLIST}(P_4 + 1)$

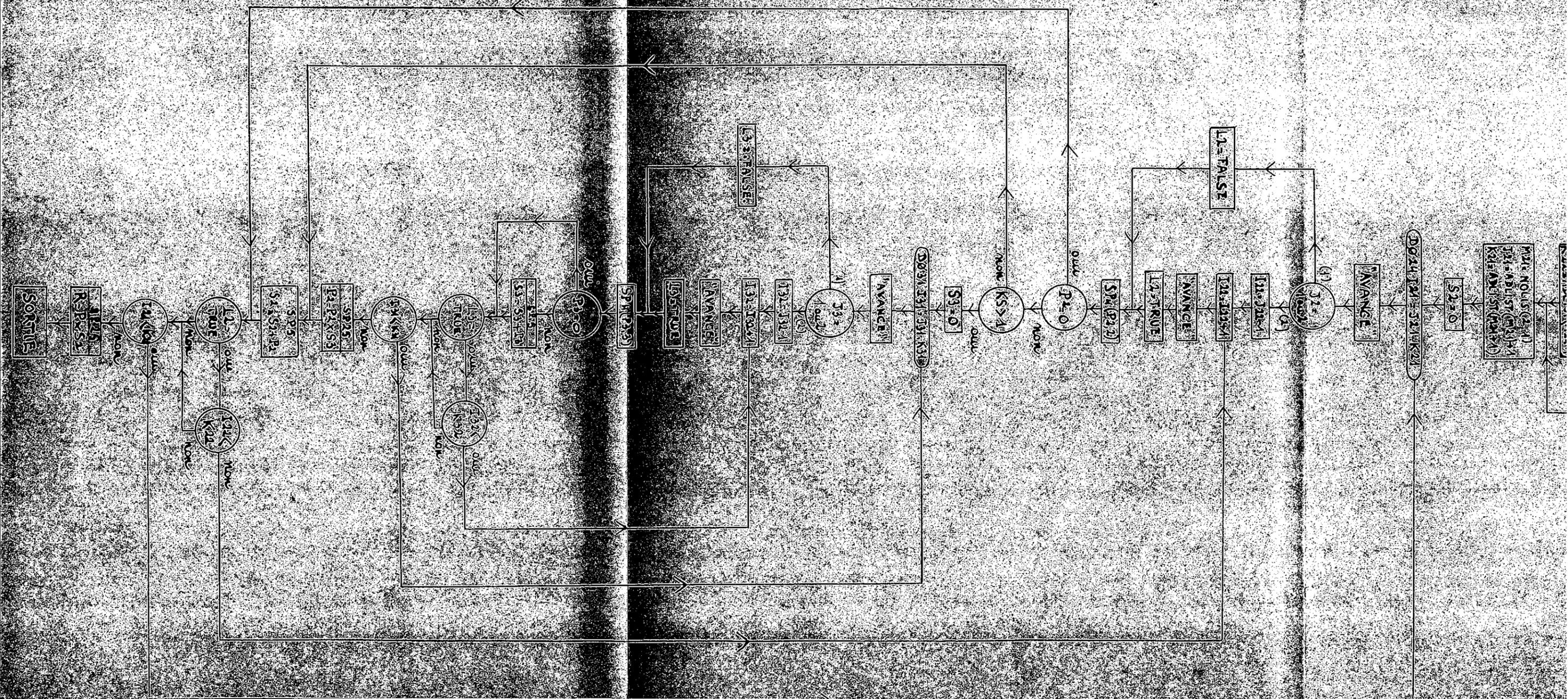


Entree

Sous-program "PRODUC"

Fig. 7





R E F E R E N C E S

- 1 - Y. BORDARIER, Thèse de 3ème Cycle, Paris (1964)
- 2 - E.U. CONDON & G.H. SHORTLEY, "The Theory of Atomic Spectra", Cambridge University Press, Cambridge (1935)
- 3 - J.C. SLATER, Phys. Rev., 34, 1293 (1929)
- 4 - J.C. SLATER, "Quantum Theory of Atomic Structure", Mc Graw Hill Book Co., In., New-York (1960)
- 5 - R.E. TREES, W.F. CAHILL & P. RABINOWITZ, J. Res. NBS, 55, 335 (1965)
- 6 - G. RACAH, I Phys. Rev., 61, 186 (1942)
- 7 II Phys. Rev., 62, 438 (1942)
- 8 III Phys. Rev., 63, 367 (1943)
- 9 IV Phys. Rev., 76, 1352 (1949)
- 10 Physica, 16, 651 (1950)
- 11 - B.R. JUDD, "Operator Techniques in Atomic Spectroscopy", Mc Graw Hill Book Co., New-York (1963)
- 12 - Y. BORDARIER, Thèse 3ème Cycle, p. 14
- 13 - Y. BORDARIER, Thèse 3ème Cycle, p. 10
- 14 - W. ALBERTSON, Phys. Rev., 47, 370 (1935)
- 15 - P. BRIX, Zh. Physik, 126, 431 (1949)
- 16 - A.R. STRIGANOV, V.A. KATULIN & V.V. ELISEEV, Optika i Spektr., 12, 171, 196 (translation : Opt. Spectr. 12, 91, 1962)
- 17 - P. STRIGANOV & N.A. KULAZHENKOVA, Optika i Spektr, 16, 6, (1964)
- 18 - J. BLAISE, C. MORILLON, M.G. SCHWEIGHOFER & J.L. VERGES, Communication à la Zeeman Conference, Amsterdam 6 - 11 Sept. (1965)
- 19 - B.G. WYBOURNE, J. Chem. Phys., 36, 9, 2295 (1962)

- 11 - G.H. DIEKE & R. SARUP, J. Chem. Phys., 36, 371 (1962)
- 12 - G.S. OFELT, J. Chem. Phys., 38, 2171 (1963)
- 13 - H. LAMMERMANN, Zh. Physik, 150, 551 (1958)
H. LAMMERMANN, Zh. Physik, 160, 355 (1960)
A. FRIEDERICH, K.H. HELLWEGE & H. LAMMERMANN, Zh. Physik, 158, (251,
(1960)
A. FRIEDERICH, K.H. HELLWEGE & H. LAMMERMANN, Zh. Physik, 159, 524,
(1960)
M.S. MAGNO, Ph. Dissertation, John Hopkins University (1957)
- 14 B.R. JUDD, Phys. Rev., 125, 2, 613 (1962)
- 15 G. RACAH & U. GANIEL, J. Opt. Soc. Amer., 56, 893 (1966)
- 16 P. CAMUS, J. Phys., 27, 717, (1966)
- 17 J. SUGAR, Communication personnelle
- 18 Z. GOLDSCHMIDT & Y. BORDARIER, Yb II, non publié.
- 19 A.S. KING, Astrophys. J., 82, 140 (1935)