

N° d'ordre :

THÈSES

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

pour obtenir

Le Grade de Docteur ès Sciences Physiques

par

Serge FENEUILLE

1 ère THESE : Etude théorique des configurations électroniques mélangées (1+1²).

2 ème THESE : Propositions données par la Faculté.

Soutenues le 1967 devant la Commission d'Examen

M. A. KASTLER..... Président
MM. P. JACQUINOT..... } Examineurs
B.R. JUDD..... }
C. MOSER..... } Invités
C. BLOCH..... }

PARIS 1967

Jury proposé :

MM. KASTLER
JACQUINOT
JUDD
MOSER
BLOCH

RESUME DE LA THESE DE DOCTORAT ES SCIENCES PHYSIQUES

Thèse présentée par Monsieur Serge FENEUILLE
sous la direction de Madame le Professeur COUTURE

" ETUDE THEORIQUE DES CONFIGURATIONS ELECTRONIQUES $(l+l')^N$ "

Dans le cadre de l'interprétation paramétrique des spectres atomiques complexes, une étude générale des configurations électroniques mélangées du type $(l+l')^N$ a été conduite à l'aide de la théorie des groupes continus, de la seconde quantification, et de ses représentations graphiques.

Les opérateurs infinitésimaux du groupe unitaire en $4(l+l'+1)$ dimensions, $\overset{U}{U}_{4(l+l'+1)}$, ont tout d'abord été identifiés aux opérateurs tensoriels doubles susceptibles de connecter les états $|\gamma SL\rangle$ des configurations $(l+l')^N$. Cette identification, associée à la réduction de $\overset{U}{U}_{4(l+l'+1)}$ à ses divers sous-groupes, a permis de classer les états considérés suivant leurs propriétés de symétrie dans les opérations du groupe symplectique $Sp_{4(l+l'+1)}$ et des produits directs $SU_2 \times R_{2(l+l'+1)}$ et $SU_2 \times R_{2l+1} \times R_{2l'+1}$. L'étude particulière de la symétrie symplectique qui laisse invariante les formes bilinéaires antisymétriques, a conduit à la définition d'un nombre de seniorité généralisé. Afin d'éviter l'introduction explicite des états

déterminantaux dans le calcul des éléments de matrice de l'hamiltonien entre les états caractérisés au moyen des représentations irréductibles de divers groupes continus, le concept de parenté fractionnelle a été généralisé aux configurations $(l+l')^N$; ces éléments de matrice ont été ainsi exprimés au moyen de coefficients de parenté fractionnelle qui permettent d'ignorer complètement les propriétés particulières des configurations $l^N, l^{N-1}l', \dots, ll'^{N-1}, l'^N$. Le calcul effectif de ces coefficients a été réalisé pour la configuration $(d+s)^3$.

Les coefficients de parenté fractionnelle ont été reliés ensuite aux éléments de matrice réduits des opérateurs annihilation-crédation qui ont conduit, d'autre part, à la définition d'un opérateur quasi-spin généralisé dont les valeurs propres ont été rattachées au nombre de seniorité. Ce formalisme permet d'exprimer très simplement la dépendance sur N des éléments de matrice entre les états des configurations $(l+l')^N$, de tout opérateur possédant des propriétés de transformation bien définies dans l'espace de quasi-spin.

Afin de mettre en évidence l'intérêt que peuvent présenter les résultats précédents, un certain nombre de problèmes physiques particuliers ont été examinés. Tout d'abord, la classification des opérateurs de l'interaction coulombienne à l'intérieur des configurations $(d+s)^N$ a permis de représenter celle-ci au moyen de sept termes $e_i E_i$ où les E_i sont des paramètres, et les e_i des opérateurs à deux électrons possédant des propriétés de transformations simples dans les opérations des groupes R_5, R_6 , et (pour certains d'entre eux) Sp_{12} . La dépendance sur N de leurs éléments de matrice a pu être exprimée de façon très simple, principalement par utilisation des propriétés du quasi-spin, et de nombreuses factorisations

qui permettent le calcul de tous ces éléments de matrice à partir d'un nombre restreint de coefficients, ont été réalisées.

La seconde quantification et sa ^{re}présentation graphique au moyen des diagrammes de Feynman a conduit ensuite à la détermination, pour les configurations $(l+l')^N$, des opérateurs effectifs qui rendent compte des effets d'interaction de configurations lointaines dans l'approximation du second ordre. La nécessité d'introduire les rangs des opérateurs relativement à l'espace de spin et à l'espace d'orbite pour pouvoir utiliser l'équivalence topologique des diagrammes de Jucys et de ceux de Feynman, a entraîné la modification de la représentation habituelle de ces derniers. Les résultats obtenus sont en parfaite analogie avec ceux qui sont valables pour les configurations d'électrons équivalents et une application particulière en a été faite aux configurations f^N et $(d+s)^N$.

Enfin, par la mise en évidence des propriétés de symétrie des opérateurs à trois particules pour les configurations $(d+s)^N$, il a été montré que cette interaction effective peut être représentée à l'aide de cinq paramètres additionnels seulement. Ainsi, pour les configurations $(d+s)^N$, la théorie des groupes, en apportant une réduction notable du nombre de paramètres réellement nécessaires pour représenter les interactions de configurations lointaines, permet de proposer une étude paramétrique de ces configurations qui est parfaitement cohérente avec l'approximation du champ central au second ordre de perturbation. Pour les configurations f^N au contraire, l'état actuel des données expérimentales conduit à penser que seule une théorie linéaire est applicable.

Il a donc été montré que l'ensemble des concepts introduits par la théorie des groupes continus et la seconde quantification dans l'étude

des configurations d'électrons équivalents, peut être généralisé aux configurations $(l+l')^N$. Les résultats ainsi obtenus présentent un intérêt théorique évident, et les problèmes physiques étudiés ont démontré que leur utilisation peut apporter de grandes simplifications dans l'étude paramétrique des configurations considérées.

A Monsieur le Professeur Jacquinet,
avec mes sentiments respectueux
et dévoués.

A handwritten signature in black ink, consisting of several vertical strokes and a horizontal crossbar, resembling the letters 'M' and 'F'.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été effectué au laboratoire Aimé Cotton. Je prie Messieurs les Professeurs P. Jacquinot et R. Chabbal d'accepter l'expression de mes remerciements pour l'accueil qu'ils m'y ont réservé.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur B.R. Judd dont l'enseignement a fourni à cette étude ses bases fondamentales, et qui m'a constamment soutenu et guidé de ses conseils bienveillants.

Mes remerciements s'adressent également à Madame le Professeur L. Couture pour le soutien qu'elle a bien voulu m'apporter dans la réalisation de ce travail.

Le calcul des éléments de matrice des opérateurs à trois particules a été réalisé par J. Schrijver, sur un programme de Y. Bordarier. Que tous deux veuillent bien accepter mes remerciements.

J'aimerais enfin remercier mes camarades du laboratoire, en particulier J. Bauche et M. Klapisch, dont les stimulantes discussions m'ont aidé à éclaircir un grand nombre de questions en relation avec mon travail.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION	1
NOTIONS FONDAMENTALES DE LA THEORIE DES GROUPES DE LIE	
I Groupes continus et groupes infinitésimaux associés	4
II Classification des groupes semi-simples	9
III Représentations des groupes semi-simples	15
IV Produit de Kronecker-Théorème de Wigner-Eckart	22
CLASSIFICATION DES ETATS (S,L) DES CONFIGURATIONS	
$(\mathcal{L}+\mathcal{L}')^N$. COEFFICIENTS DE PARENTE FRACTIONNELLE.	
I Opérateurs tensoriels (rappel)	26
II Relations de commutation-groupes infinitésimaux	28
III Représentations	31
IV Symétrie symplectique et séniorite	33
V Définition et factorisation des CPF	35
VI Les CPF $((d+\Delta)^2 \bar{\gamma} \bar{S} \bar{L} + \bar{\ell} \} (d+\Delta)^3 \gamma S L)$.	38
SECONDE QUANTIFICATION	
I Opérateurs annihilation-création (rappel)	46
II Caractère tensoriel des opérateurs annihilation-création	48
III Quasi-spin	50
IV Groupes	53
SYMETRIE DES OPERATEURS A UNE, DEUX ET TROIS	
PARTICULES POUR LES CONFIGURATIONS $(d+\Delta)^N$	
I Opérateurs à une particule	59

II Opérateurs de l'interaction coulombienne	61
III Interactions de configurations lointaines pour les configurations $(l+l')^N$	73
IV Opérateurs à trois particules	85
DISCUSSION DE L'ETUDE PARAMETRIQUE DES CONFIGURATIONS $(d+\Delta)^N$ et f^N_Δ	
I Configurations $(d+\Delta)^N$	96
II Configurations f^N_Δ	97
CONCLUSION	103
	106

INTRODUCTION

Depuis les premiers travaux de Slater¹ et leur extension dans le livre célèbre de Condon et Shortley², la théorie des spectres complexes n'a réalisé de progrès essentiels que dans la mesure où les méthodes subissaient elles-mêmes des bouleversements importants. L'hamiltonien du système noyau-électrons est en effet bien connu et l'approximation du champ central au premier ordre permet généralement de rendre compte d'un grand nombre de données expérimentales au moyen d'un nombre restreint de paramètres ajustables. La contribution majeure de Racah réside fondamentalement dans l'introduction de nouveaux concepts, opérateurs tensoriels^{3,4}, seniorité, parenté fractionnelle⁵ en particulier, et c'est la théorie des groupes de Lie qui l'a conduit par une remarquable interprétation des résultats qu'il avait obtenus antérieurement, à la classification des états des configurations f^N et à la détermination des énergies coulombiennes correspondantes^{6,7}. Ces méthodes ont permis de dégager le processus mathématique des règles énoncées par Slater, et ont conduit à une meilleure compréhension du problème à plusieurs particules; cependant, aussi bien dans l'oeuvre de Racah que dans les développements ultérieurs de Jahn⁸ et de Flowers⁹, leur application dans toute leur intégralité porte essentiellement sur les configurations d'électrons équivalents l^N . Il en est de même de l'application de la théorie des opérateurs annihilation-crédation et de la seconde quantification introduits récemment en spectroscopie atomique par Judd¹⁰ qui par ailleurs a remarquablement exposé dans son livre "Operator Techniques in Atomic Spectroscopy"¹¹, l'ensemble des méthodes de Racah. En 1958, Elliot¹² a montré que certains des résultats valables pour les configurations l^N pouvaient être facilement généralisés aux configurations mélangées;

les applications qu'il en a faites à différents modèles nucléaires ne présentaient qu'un intérêt restreint pour la spectroscopie atomique, mais les méthodes employées étaient susceptibles d'un grand développement.

L'ensemble de ce mémoire reprend le problème de l'application de la théorie des groupes de Lie à l'étude des configurations $(1+l')^N$ et de la généralisation à celles ^{-ci} d'un certain nombre de concepts qui apparaissent d'un intérêt considérable pour les configurations 1^N .

La première partie est consacrée à un rappel, dans la présentation de Racah⁷, des définitions, des théorèmes et des propriétés fondamentales de la théorie des groupes de Lie.

Dans une seconde partie, il est montré que les états des configurations $(1+l')^N$ peuvent être classés suivant leurs propriétés de symétrie dans les opérations de divers groupes unitaires et orthogonaux, un nombre de seniorité généralisée est défini en relation avec la symétrie, la notion de coefficients de parenté fractionnelle (C.P.F.) est discutée, et le calcul effectif de ces coefficients est réalisé pour $(d+s)^3$.

La définition des opérateurs annihilation-création et leurs propriétés d'anticommutation sont rappelées dans une troisième partie où également sont mises en évidence les propriétés tensorielles de ces opérateurs, et leur relation avec les coefficients de parenté fractionnelle; un opérateur quasi-spin généralisé est défini et l'application d'une seconde quantification est ainsi réalisée.

La quatrième partie est consacrée à l'application à des problèmes

physiques particuliers, des résultats précédemment obtenus. L'interaction coulombienne à l'intérieur d-es configurations $(d+s)^N$ est étudiée au moyen des méthodes proposées, et ce problème simple et bien connu est remarquablement adapté pour mettre en évidence l'intérêt qu'elles présentent. Dans le cadre de l'approximation du champ central, les opérateurs effectifs à deux et trois particules qui représentent les effets de second ordre sur les configurations $(l+l')^N$ sont déterminés. La symétrie des opérateurs à trois particules pour les configurations $(d+s)^N$ est examinée dans les transformations orthogonale et symplectique, et dans l'espace de quasi-spin. La possibilité d'introduire ces opérateurs dans une étude paramétrique est discutée dans une cinquième partie.

Parmi les méthodes et les raisonnements que nous avons utilisés, nombreux sont ceux qui sont en complète analogie avec ceux de Racah ou de Judd et nous n'avons pas jugé utile de les reproduire dans ce mémoire. Les démonstrations d'ordre purement mathématique en ont été également écartées, mais nous avons tenu à conserver, dans la mesure du possible, le maximum de généralité à la fois dans les méthodes et dans les résultats.

NOTIONS FONDAMENTALES DE LA THEORIE
DES GROUPES DE LIE

I GROUPES CONTINUS ET GROUPES INFINITESIMAUx ASSOCIES

Soit un élément x_0 d'un espace vectoriel E_n de dimension n ; cet élément est défini, sur une base donnée, par n composantes, $x_0^1, \dots, x_0^i, \dots, x_0^n$.
Considérons un ensemble de transformations, dépendant d'un ensemble de r paramètres $a = (a^1, \dots, a^k, \dots, a^r)$ qui transforment x_0 en x . Cette transformation peut être définie au moyen de n équations :

$$x^j = f^j(x_0^1, \dots, x_0^n; a^1, \dots, a^r). \quad (1.1)$$

Nous supposons que l'ensemble des paramètres a définit de façon unique et complète la transformation, c'est-à-dire qu'il n'existe pas deux transformations définies par deux ensembles distincts a et a' qui soient identiques pour tout élément x_0 .

Par définition, l'ensemble des transformations f formera un groupe d'ordre r si les conditions suivantes sont satisfaites :

1. deux transformations successives $x = f(x_0, a)$ et $x' = f(x, b)$ ont pour résultat celui d'une transformation appartenant à l'ensemble, ce qui signifie qu'on peut trouver r paramètres c^p :

$$c^p = \varphi^p(a, b), \quad (1.2)$$

tels que $x' = f(x_0, c)$;

2. à chaque transformation de l'ensemble correspond une transformation

inverse, appartenant à l'ensemble.

Si nous transformons x_0 en x , puis inversement x en x_0 , nous obtenons une transformation qui appartient au groupe; cette transformation est la représentation identité à laquelle nous pouvons faire correspondre un ensemble de paramètres nuls; en d'autres termes, nous supposons que

$$x = f(x, 0) \quad (1.3)$$

L'idée fondamentale de Lie ¹³ a été de ne pas considérer la totalité du groupe mais uniquement les transformations infiniment voisines de l'identité, c'est-à-dire les transformations infinitésimales. Or un changement infinitésimal de x peut être obtenu de deux manières différentes, soit en modifiant les paramètres a de la transformation générale $x = f(x, a)$ d'une quantité infinitésimale da , soit en introduisant des paramètres infinitésimaux δa dans l'équation (1-3); nous pouvons donc écrire :

$$x + dx = f(x_0, a + da) \quad \text{ou} \quad x + dx = f(x, \delta a),$$

ou encore en utilisant la convention d'Einstein :

$$dx = \frac{\partial f(x_0, a)}{\partial a^\sigma} da^\sigma \quad \text{ou} \quad dx = \left(\frac{\partial f(x, a)}{\partial a^\sigma} \right)_{a=0} \delta a^\sigma \quad (1.4)$$

L'équation (1-2) permet d'écrire :

$$a + da = \varphi(a, \delta a),$$

et l'équation (1-3) :

$$a = \varphi(a, 0),$$

en conséquence :

$$da^p = \mu_\tau^p(a) \delta a^\tau \quad \text{où} \quad \mu_\tau^p(a) = \left(\frac{\partial \varphi^p(a, b)}{\partial b^\tau} \right)_{b=0} \quad (1.5)$$

Le système d'équations précédent permet d'exprimer δa comme combinaison linéaire de da :

$$\delta a^\sigma = \lambda_\rho^\sigma(a) da^\rho \quad \text{où} \quad \lambda_\rho^\sigma \mu_\tau^\rho = \delta_\tau^\sigma \quad (1.6)$$

Si nous posons

$$U_\sigma^i(x) = \left(\frac{\partial f^i(x, a)}{\partial a^\sigma} \right)_{a=0} \quad (1.7)$$

les équations (1.4) et (1.6) permettent d'écrire :

$$\frac{\partial x^i}{\partial a^p} = U_\tau^i(x) \lambda_\rho^\tau(a) \quad (1.8)$$

S'il est possible de construire une transformation finie par une succession de transformations infinitésimales, alors l'équation (1.8) doit être complètement intégrable et en conséquence :

$$\frac{\partial^2 x^i}{\partial a^\tau \partial a^p} = \frac{\partial^2 x^i}{\partial a^p \partial a^\tau}$$

ce qui conduit à :

$$\left(U_\kappa^j \frac{\partial U_\sigma^i}{\partial x^j} - U_\sigma^j \frac{\partial U_\kappa^i}{\partial x^j} \right) \lambda_\tau^\kappa \lambda_\rho^\sigma + U_\sigma^i \left(\frac{\partial \lambda_\rho^\sigma}{\partial a^\tau} - \frac{\partial \lambda_\tau^\sigma}{\partial a^\rho} \right) = 0,$$

ou encore, en tenant compte de (1.6) :

$$U_\kappa^j \frac{\partial U_\sigma^i}{\partial x^j} - U_\sigma^j \frac{\partial U_\kappa^i}{\partial x^j} = C_{\kappa\sigma}^\nu(a) U_\nu^i \quad (1.9)$$

$$\text{où} \quad C_{\kappa\sigma}^\nu(a) = \left(\frac{\partial \lambda_\tau^\nu}{\partial a^\rho} - \frac{\partial \lambda_\rho^\nu}{\partial a^\tau} \right) \mu_\kappa^\tau \mu_\sigma^\rho \quad (1.10)$$

Mais les $U_\sigma^i(x)$ sont indépendants de a , et linéairement indépendants, en conséquence les quantités $C_{\kappa\sigma}^\nu$ sont indépendantes de a .

Dans la transformation infinitésimale de X , une fonction $F(X)$ se transforme en $F(X) + dF(X)$; cette transformation est effectuée par l'opérateur :

$$S_a = 1 + \delta a^\sigma X_\sigma,$$

$$\text{où} \quad X_\sigma = U_\sigma^i(x) \frac{\partial}{\partial x^i}. \quad (1.11)$$

Les opérateurs X_σ sont appelés opérateurs infinitésimaux du groupe et l'équation (1.9) impose qu'ils vérifient la condition suivante :

$$[X_\sigma, X_\rho] = C_{\sigma\rho}^\tau X_\tau \quad (1.12)$$

Les quantités $C_{\sigma\rho}^\tau$ sont appelées constantes de structure du groupe.

La condition précédente, telle qu'elle a été établie, est une condition nécessaire; Lie¹³ a montré qu'elle est également suffisante,

c'est-à-dire qu'un ensemble d'opérateurs qui vérifient cette condition peut être considéré comme formant les opérateurs infinitésimaux d'un groupe.

Il faut remarquer que les opérateurs S_a contiennent uniquement des termes du premier ordre. Dans une suite de transformations telle que $S_b S_a S_b^{-1} S_a^{-1}$, ces termes disparaissent, et en conséquence, il semble que dans l'expression de S_a des termes d'ordre supérieur doivent être considérés. En fait, on peut montrer qu'il n'est jamais nécessaire d'aller plus loin que le second ordre et que dans tous les cas, les expressions telles que $S_b S_a S_b^{-1} S_a^{-1}$ peuvent être écrites :

$$1 + \delta a^\sigma \delta b^\rho [X_\rho, X_\sigma],$$

ce qui lève la difficulté.

Comme pour les groupes finis, un groupe est dit abélien si tous ses éléments S_a commutent; dans ce cas, toutes les constantes de structure sont nulles :

$$C_{\rho\tau}^\sigma = 0. \quad (1.13)$$

Un sous-groupe est défini comme un ensemble de transformations qui appartiennent au groupe et qui elles-mêmes satisfont aux conditions d'existence d'un groupe. Si X_1, \dots, X_p sont les opérateurs infinitésimaux du sous-groupe, alors :

$$C_{\rho\tau}^\sigma = 0 \quad \rho, \tau \leq p, \sigma > p. \quad (1.14)$$

Un sous-groupe invariant contient tous les conjugués de ses éléments, c'est-à-dire que pour tout élément S_a du sous-groupe, et tout élément S_b du groupe, $S_b S_a S_b^{-1}$ appartient également au sous-groupe. La condition sur les constantes de structure s'écrit alors :

$$C_{\rho\tau}^\sigma = 0 \quad \rho \leq p, \sigma > p. \quad (1.15)$$

Si les opérateurs infinitésimaux X_τ d'un groupe \mathcal{K} peuvent être séparés en deux ensembles $\tau \leq p$ et $\tau > p$, qui forment respectivement les opérateurs infinitésimaux de deux sous-groupes invariants \mathcal{G} et \mathcal{H} , alors :

$$\begin{aligned} C_{\rho\tau}^\sigma &= 0 & \rho \leq p, \tau > p, \\ C_{\rho\tau}^\sigma &= 0 & \tau > p, \sigma \leq p, \\ \text{et} \quad C_{\rho\tau}^\sigma &= 0 & \rho \leq p, \tau > p; \end{aligned} \quad (1.16)$$

tous les éléments de \mathcal{G} et de \mathcal{H} commutent et le groupe \mathcal{K} est appelé produit direct de \mathcal{G} et de \mathcal{H} , ce que l'on écrit :

$$\mathcal{K} = \mathcal{G} \times \mathcal{H} = \mathcal{H} \times \mathcal{G}.$$

Un groupe est dit simple s'il ne contient pas de sous-groupe invariant en dehors de la transformation unité, il est dit semi-simple s'il ne contient pas de sous-groupe invariant abélien en dehors de la transformation unité. Un groupe simple est nécessairement semi-simple.

La distinction entre groupes semi-simples et groupes contenant un ou plusieurs sous-groupes invariants abéliens est fondamentale. Un critère d'identification des groupes semi-simples peut être très simplement exprimé à l'aide du tenseur symétrique $g_{\rho\sigma}$, construit à partir des constantes de structure : $g_{\rho\sigma} = C_{\rho\lambda}^\mu C_{\sigma\mu}^\lambda$. En effet, les conditions (1.13) et (1.15) montrent immédiatement que, si le groupe est semi-simple,

$$|g_{\rho\sigma}| \neq 0.$$

Cartan¹⁴ a montré que cette condition est également suffisante. En conséquence, pour les groupes semi-simples, le tenseur $g_{\rho\sigma}$ peut être considéré comme tenseur métrique fondamental, et il permet de définir ainsi une relation d'orthogonalité entre les opérateurs infinitésimaux.

II CLASSIFICATION DES GROUPES SEMI-SIMPLES

Cette classification est due essentiellement à Cartan¹⁴ et repose sur l'emploi d'un système de coordonnées standard pour l'ensemble des opérateurs infinitésimaux d'un groupe semi-simple. Afin d'obtenir ce système de coordonnées standard, on considère le problème aux valeurs

propres suivant : $[A, X] = \rho X$ (1.17)

où A est un opérateur infinitésimal fixé arbitrairement $A = a^\mu X_\mu$, tandis que $X = x^\nu X_\nu$ est un vecteur propre correspondant à la valeur propre ρ .

L'équation (1.12) permet d'écrire (1.17) explicitement :

$$a^\mu x^\nu c_{\mu\nu}^\tau X_\tau = \rho x^\tau X_\tau,$$

et le fait que les opérateurs infinitésimaux soient linéairement indépendants conduit à l'équation séculaire suivante :

$$\left| (a^\mu c_{\mu\nu}^\tau - \rho \delta_\nu^\tau) \right| = 0.$$

S'il existe r vecteurs propres, linéairement indépendants, ils peuvent être utilisés comme vecteurs de base d'un système de coordonnées, dans l'espace à r -dimensions. Cependant pour un choix quelconque de A , il n'existera pas généralement r vecteurs linéairement indépendants, et l'équation séculaire aura des racines dégénérées. En fait, pour les groupes semi-simples, Cartan a montré que si A est choisi de façon telle que l'équation séculaire ait le nombre maximum de racines distinctes, seule la racine $\rho = 0$ est dégénérée. Si l est la multiplicité de cette racine, il existe l vecteurs linéairement indépendants H_1, \dots, H_l , qui commutent l'un avec l'autre; l est appelé rang du groupe semi-simple. Aux $(r-l)$ racines distinctes non nulles, correspondent $(r-l)$ vecteurs propres linéairement indépendants

$E_\alpha, \dots, E_{(r-l)}$. Dans la notation de Racah⁷, les indices latins sont utilisés pour le sous-espace à l -dimensions, qui admet pour base les opérateurs H , les indices grecs $\alpha \dots \nu$, sont réservés au sous-espace à

$(r-l)$ dimensions qui admet pour base les opérateurs E et les trois indices ρ, σ, τ se réfèrent à l'espace à r dimensions, réunion des deux sous espaces précédents. Avec cette notation, les résultats précédents s'écrivent :

$$[A, H_i] = 0$$

$$[A, E_\alpha] = \alpha E_\alpha. \quad (1.18)$$

A est donc un vecteur propre correspondant à la valeur propre zéro, et par conséquent :

$$A = \lambda^i H_i.$$

Dans cette forme, les relations de commutation peuvent être écrites de façon standard. En particulier, il est évident que :

$$[H_i, H_k] = 0, \quad (1.19)$$

et l'identité de Jacobi permet de montrer sans difficulté que :

$$[H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha, \quad (1.20)$$

ce qui conduit immédiatement à :

$$\alpha = \lambda^i \alpha_i.$$

Les quantités α_i peuvent être considérées comme les composantes covariantes d'un vecteur α dans un espace à l -dimensions, que l'on convient d'appeler racine du groupe considéré.

L'application de l'identité de Jacobi au commutateur $[E_\alpha, E_\beta]$ permet également de montrer que ce dernier est nul dans le cas où $\alpha + \beta$ n'est pas une racine; dans le cas contraire, il prend la forme suivante :

$$[E_\alpha, E_\beta] = N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta}. \quad (1.21)$$

Le critère de Cartan impose en outre que $-\alpha$ soit une racine si α est une racine, et l'on obtient alors :

$$[E_\alpha, E_{-\alpha}] = \alpha^i H_i, \quad (1.22)$$

où les α^i sont les composantes contravariantes du vecteur α .

Enfin, le tenseur métrique de l'espace à l -dimensions, g_{ik} , s'exprime comme seule fonction des α_j , plus précisément :

$$g_{ik} = \sum_{\alpha} \alpha_i \alpha_k, \quad (1.23)$$

et après une normalisation convenable, on obtient :

$$g_{\beta\alpha} = g_{\alpha\beta} = \delta_{-\alpha\beta}$$

La classification des groupes semi-simples repose essentiellement sur une propriété fondamentale des racines, à savoir que si α et β sont racines, $2 \frac{(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)}$ est un entier et le vecteur $\beta - 2 \frac{(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha)} \alpha$ est également une racine. En outre on peut montrer que l'espace à l - dimensions a une métrique proprement euclidienne. Ce dernier théorème permet de représenter graphiquement les vecteurs racines dans un espace euclidien ordinaire, une telle représentation graphique est appelée figure des racines. A partir des restrictions trouvées par Schouten¹⁵ sur les diagrammes qui peuvent être considérés comme figure des racines d'un groupe de Lie semi-simple, Van der Waerden¹⁶ a obtenu la classification complète (déjà trouvée algébriquement par Cartan¹⁴) des groupes semi-simples. La méthode de Shouten et Van der Wearden utilise la propriété fondamentale des racines énoncée ci-dessus.

Soient deux racines α et β et ϕ leur angle; ces deux racines sont telles que: $(\alpha, \beta) = \frac{m}{2} (\alpha, \alpha) = \frac{n}{2} (\beta, \beta)$,
où m et n sont des entiers. En conséquence,

$$\cos^2 \phi = \frac{(\alpha, \beta)}{(\alpha, \alpha) (\beta, \beta)} = \frac{mn}{4}$$

et les seules valeurs de ϕ possibles sont $0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{3}$ et $\frac{\pi}{2}$; les valeurs correspondantes du rapport $\frac{(\alpha, \alpha)}{(\beta, \beta)}$ sont 1, 3, 2, 1 et indéterminée.

Le problème est donc de construire des diagrammes qui satisfassent à ces conditions et tels que le critère de Cartan soit vérifié. En outre, comme Cartan l'a montré, tout groupe semi-simple est un produit direct de groupes simples; il suffit donc de s'intéresser uniquement à ces derniers c'est-à-dire de considérer les seuls diagrammes qui ne peuvent pas être décomposés

en parties orthogonales, chacune de celles-ci correspondant à un sous-groupe invariant.

Dans un espace à deux dimensions, seuls peuvent être obtenus les trois diagrammes de la figure 1, et dans un espace à trois dimensions il n'est possible de construire que les trois diagrammes de la figure 2. Les lettres qui les caractérisent sont celles utilisées par Cartan. Ces diagrammes peuvent être généralisés à un espace à l -dimensions. Soit en effet un ensemble de e_i vecteurs unité mutuellement orthogonaux.

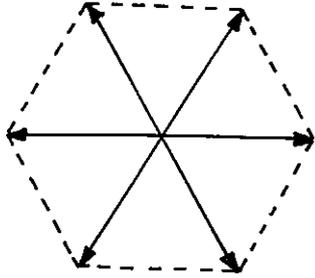
A_l - Les diagrammes A_2 et A_3 peuvent être considérés comme formés par tous les vecteurs $e_i - e_k$, i et k variant de 1 à $l+1$. Par généralisation A_l sera obtenu à partir des $l(l+1)$ différences $e_i - e_k$ de $l+1$ vecteurs unités e_i . L'ordre du groupe est donc $l(l+2)$.

B_l - Les diagrammes B_2 et B_3 peuvent être généralisés par construction de tous les vecteurs $\pm e_i$ et $\pm e_i \pm e_k$, i et k variant de 1 à l . L'ordre du groupe est donc $l(2l+1)$.

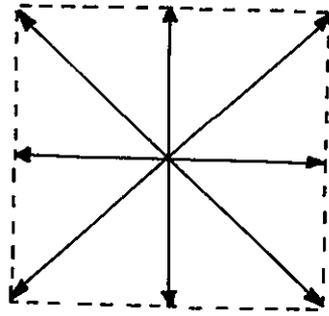
C_l - La généralisation de C_2 et C_3 conduit à considérer C_l comme formé de tous les vecteurs $\pm 2e_i$ et $\pm e_i \pm e_k$, i et k variant de 1 à l ; l'ordre du groupe est le même que pour B_l .

D_l - Pour $l > 2$, le diagramme des vecteurs $\pm e_i \pm e_k$, i et k variant de 1 à l représente un groupe simple; l'ordre de ce groupe est $l(2l-1)$. Pour $l = 2$, le diagramme ainsi obtenu est constitué de deux paires de vecteurs orthogonaux, et le groupe correspondant n'est pas simple.

Van der Waerden a montré qu'en dehors de ces quatre grande classes, il existe seulement cinq diagrammes simples. L'un d'entre eux,

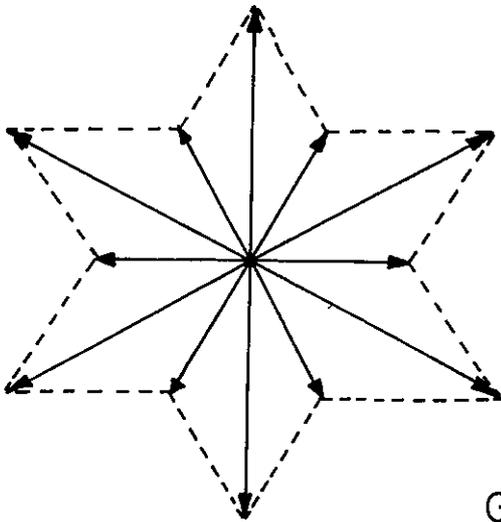


A₂



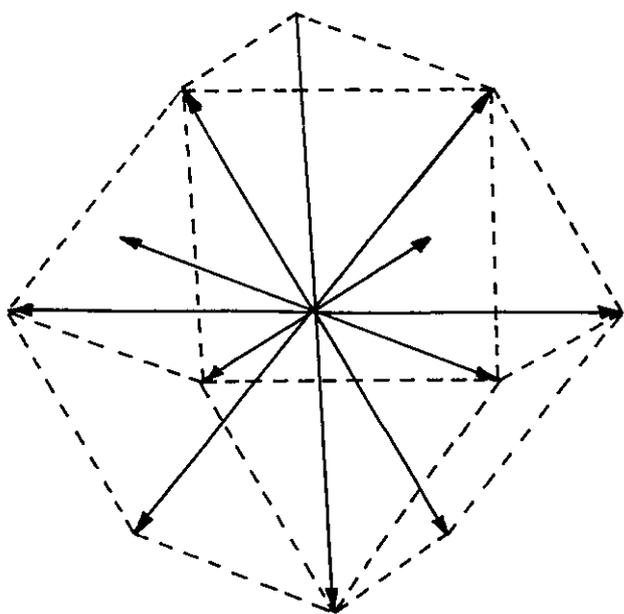
B₂

C₂



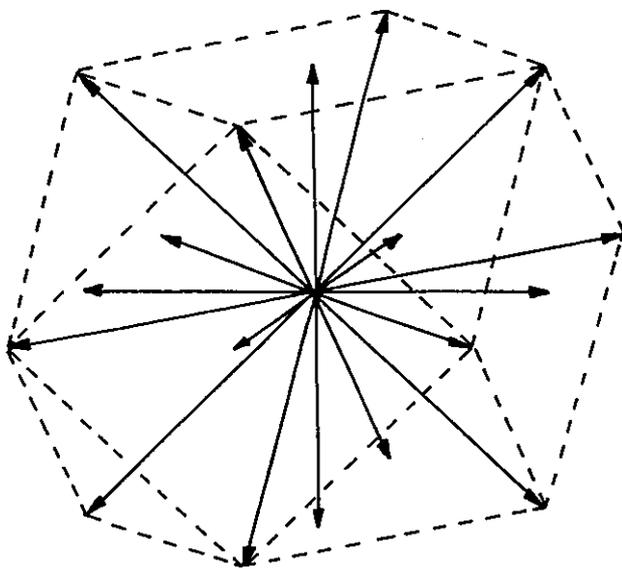
G₂

Figure 1



$\left. \begin{matrix} A_3 \\ D_3 \end{matrix} \right\}$

B_3



C_3

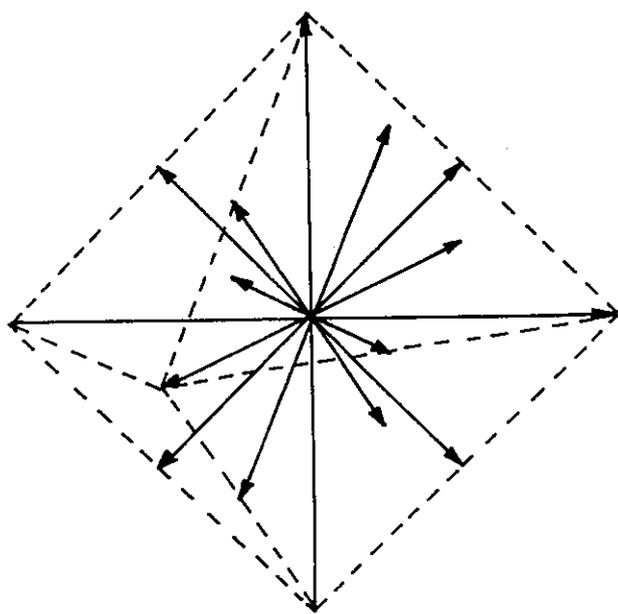


Figure 2

est G_2 dont les racines sont représentées par les six vecteurs $e_i - e_j$ ($i, j = 1, 2, 3$) et les six vecteurs $\pm 2e_i \mp e_j \mp e_k$ ($i, j, k = 1, 2, 3$); l'ordre de ce groupe est 14. Les quatre autres diagrammes ont été appelés par Cartan E_6 (ordre 78), E_7 (ordre 133), E_8 (ordre 248) et F_4 (ordre 52)

Les réalisations les plus simples des groupes caractérisés par les figures des racines A_ℓ, B_ℓ, C_ℓ et D_ℓ , sont respectivement le groupe linéaire spécial, ou son sous-groupe unitaire, le groupe orthogonal dans un espace de dimension impaire, le groupe symplectique et le groupe orthogonal dans un espace de dimension paire.

Pour le groupe complètement linéaire en $\ell+1$ dimensions $GL_{\ell+1}$ les opérateurs :

$$X_{ik} = x^i \frac{\partial}{\partial x^k},$$

peuvent être considérés comme opérateurs infinitésimaux, leurs relations de commutation sont les suivantes :

$$[X_{ik}, X_{mn}] = \delta_{km} X_{in} - \delta_{in} X_{mk}.$$

Cependant le groupe complètement linéaire n'est pas un groupe simple car l'opérateur $\sum_j X_{jj}$ commute avec tous les opérateurs du groupe. Pour obtenir un groupe simple, il suffit de réduire le groupe linéaire complet à sa

partie unimodulaire; ce sous-groupe est le groupe linéaire spécial, et les

opérateurs X_{ii} doivent être remplacés par $X'_{ii} = X_{ii} - \frac{1}{\ell+1} \sum_j X_{jj}$.

Ce changement n'affecte pas les relations de commutation, et ces opé-

rateurs correspondant à la figure A_ℓ , si nous faisons l'identification

suivante :

$$X'_{ii} \equiv H_i, \quad X_{ik} \equiv E_{(e_i - e_k)}$$

Les opérateurs H_i sont au nombre de $\ell+1$, mais seuls ℓ d'entre-eux sont indépendants puisqu'ils vérifient la relation :

$$\sum_i H_i = 0.$$

Le groupe orthogonal en $2\ell+1$ dimensions, $O_{2\ell+1}$, admet pour invariant la forme quadratique :

$$\sum_{k=-\ell}^{\ell} x^k x^{-k} = x_0^2 + 2 \sum_{k=1}^{\ell} x^k x^{-k};$$

ses opérateurs infinitésimaux peuvent être choisis égaux à :

$$X_{ik} = -X_{ki} = x^i \frac{\partial}{\partial x^{-k}} - x^k \frac{\partial}{\partial x^{-i}} \quad (i, k = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell).$$

Les relations de commutation sont les suivantes :

$$[X_{ik}, X_{mn}] = \delta_{0k+m} X_{in} - \delta_{0k+n} X_{im} - \delta_{0i+m} X_{kn} + \delta_{0i+n} X_{km}.$$

Ces opérateurs correspondent à la figure B_{ℓ} si nous faisons l'identification suivante :

$$X_{i-i} \equiv H_i, \quad X_{\pm i \pm k} \equiv E_{(\pm e_i \pm e_k)}, \quad X_{0 \pm k} \equiv E_{(\pm e_k)}.$$

Au groupe symplectique en 2ℓ dimensions $Sp_{2\ell}$ qui admet pour invariant la forme bilinéaire antisymétrique :

$$\sum_{k=1}^{\ell} (x^k y^{-k} - x^{-k} y^k),$$

peuvent être associés les opérateurs infinitésimaux suivants :

$$X_{ik} = X_{ki} = (-1)^{i+1} x^i \frac{\partial}{\partial x^{-k}} + (-1)^{k+1} x^k \frac{\partial}{\partial x^{-i}}.$$

Les relations d'anticommuation sont les suivantes :

$$[X_{ik}, X_{mn}] = (-1)^{m+1} \delta_{0k+m} X_{in} + (-1)^{n+1} \delta_{0k+n} X_{im} + (-1)^{m+1} \delta_{0i+m} X_{kn} + (-1)^{n+1} \delta_{0i+n} X_{km}.$$

Ces opérateurs correspondent au diagramme C_{ℓ} , si nous faisons l'identification suivante :

$$X_{ii} \equiv H_i, \quad X_{\pm i \pm k} \equiv E_{(\pm e_i \pm e_k)}$$

Pour le groupe orthogonal en 2ℓ dimensions $O_{2\ell}$ qui admet pour invariant la forme quadratique :

$$\sum_{k=1}^{\ell} x^k x^{-k},$$

nous pouvons choisir les mêmes opérateurs que pour $O_{2\ell+1}$ en éliminant la valeur $k, i = 0$. Ces opérateurs correspondent à la figure D_{ℓ} si la même identification est faite que pour $O_{2\ell+1}$.

Les groupes $GL_{\ell+1}$, $O_{2\ell+1}$ et $O_{2\ell}$ sont souvent trop généraux et il est intéressant de les réduire à leur partie unitaire. Il leur

correspond alors respectivement le groupe unitaire spécial SU_{l+1} et les groupes de rotation R_{2l+1} et R_{2l} . Finalement, nous pouvons donc faire l'identification suivante :

$$A_l \quad - \quad SU_{l+1}$$

$$B_l \quad - \quad R_{2l+1}$$

$$C_l \quad - \quad SP_{2l}$$

$$D_l \quad - \quad R_{2l}$$

III REPRÉSENTATIONS DES GROUPES SEMI-SIMPLES

Un groupe de transformations linéaires d'un espace vectoriel \mathcal{R} homomorphe à un groupe donné, est appelé représentation de ce groupe ; la dimension, N , de \mathcal{R} est aussi appelée degré de la représentation. Si

$U(s)$ et $U(t)$ sont les matrices correspondantes aux éléments s et t , du groupe, il y a homomorphisme si :

$$U(s) U(t) = U(st).$$

Deux représentations $U(s)$ et $V(s)$ sont dites équivalentes s'il existe une matrice constante A , telle que :

$$A U(s) A^{-1} = V(s), \text{ quel que soit } s.$$

Une représentation est dite réductible si elle laisse un sous-espace \mathcal{R}_1 de \mathcal{R} invariant; elle est dite complètement réductible, si elle laisse invariants deux sous-espaces \mathcal{R}_1 et \mathcal{R}_2 de \mathcal{R} tels que

$$\mathcal{R}_1 \cap \mathcal{R}_2 = \mathcal{R}.$$

Un groupe de Lie est défini par r opérateurs infinitésimaux, et leurs relations de commutation; de façon analogue, une représentation de ce groupe est déterminée par la donnée de r matrices D_ρ qui vérifient l'équation suivante :

$$[D_\rho, D_\sigma] = c_{\rho\sigma}^\tau D_\tau$$

En particulier, une représentation est écrite sous sa forme standard, si les matrices H_i et E_α combinaisons linéaires des D_ρ vérifient les mêmes relations de commutation que les opérateurs correspondants.

Si u est un vecteur de l'espace \mathcal{R} tel que :

$$H_i u = m_i u,$$

u est un vecteur propre des l matrices H_i ; l'ensemble des valeurs propres $m_1, \dots, m_i, \dots, m_l$ peut être considéré comme formant les composantes contravariantes d'un vecteur m dans l'espace à l - dimensions, et l'on convient d'appeler ce vecteur m le poids de u , l'espace à l - dimensions est dit espace des poids.

Un certain nombre de théorèmes relatifs à l'existence et aux propriétés des poids ont été établis par Weyl¹⁷:

- 1 Toute représentation a au moins un poids
- 2 Un vecteur u de poids m qui est une combinaison linéaire de vecteurs u de poids $m^{(k)}$ tous différents de m , est nécessairement nul.
- 3 Des vecteurs de poids différents sont linéairement indépendants et il existe donc au plus N poids distincts.
- 4 Si m est un vecteur de poids m , $H_i u$ et $E_\alpha u$ ont pour poids respectifs, m et $m + \alpha$.

5 Pour tout poids m et toute racine α , $2 \frac{(m \cdot \alpha)}{(\alpha \cdot \alpha)}$ est un entier et $m - 2 \frac{(m \cdot \alpha)}{(\alpha \cdot \alpha)} \alpha$ est un poids.

6 Les poids m et $m - 2 \frac{(m \cdot \alpha)}{(\alpha \cdot \alpha)} \alpha$ ont même multiplicité.

7 Tous les poids possibles appartiennent à un réseau qui est invariant dans les opérations du groupe fini S , groupe des symétries par rapport aux hyperplans passant par l'origine et perpendiculaires aux racines.

8 Les poids qui peuvent être obtenus à partir d'un autre poids dans les opérations de S sont dits équivalents et ont même multiplicité.

L'application des théorèmes précédents aux quatre grandes classes de groupe semi-simples conduit aux résultats suivants :

Pour le groupe A_ℓ quels que soient i et k , $m_i - m_k$ est un entier $\sum_i m_i = 0$ et tous les m_i sont des fractions de dénominateur $\ell + 1$ qui diffèrent d'un entier, le groupe S est le groupe de toutes les permutations des composantes de m

Dans le cas de B_ℓ tous les m_i sont soit entiers, soit demi-entiers, et le groupe S est le groupe des permutations des composantes de m avec un nombre quelconque de changements de signe.

Pour C_ℓ tous les m_i sont entiers, et le groupe S est identique à celui de B_ℓ .

Les poids de D_ℓ sont les mêmes que pour B_ℓ , mais le groupe S est réduit à celui des permutations des composantes avec un nombre pair

de changements de signe.

La classification des poids des repr-ésentations et par là, celle des représentations irréductibles d'un groupe semi-simple nécessite l'introduction d'un certain nombre de définitions. En particulier, un poids \mathbf{m} est dit positif, si la première de ses composantes non nulle est positive; un poids \mathbf{m} est dit plus haut qu'un poids \mathbf{m}' , si le poids $\mathbf{m} - \mathbf{m}'$ est positif; un poids est appelé dominant s'il est plus haut que ses équivalents.

Ces définitions posées, il est possible de montrer :

1. que pour toute représentation irréductible son poids le plus haut est simple, c'est-à-dire qu'il ne lui correspond qu'un seul vecteur propre.
 2. que deux représentations irréductibles sont équivalentes si leurs poids les plus hauts sont égaux,
 3. qu'il existe, pour tout poids dominant, une représentation irréductible qui a ce poids comme poids le plus haut.
- Toute représentation irréductible peut donc être complètement caractérisée par la donnée de son poids le plus haut.

Cette classification des représentations irréductibles d'un groupe semi-simple permet en fait de classer toutes les représentations de ce groupe, puisque Weyl¹⁷ a montré que toute représentation d'un groupe semi-simple est complètement réductible, c'est-à-dire décomposable en ses

composantes irréductibles. La démonstration de Weyl contient une intégration sur la totalité des éléments du groupe, intégration analogue à la sommation utilisée pour les groupes finis. Une preuve infinitésimale de la réductibilité complète a été donnée par Casimir¹⁸ pour le groupe orthogonal en trois dimensions O_3 . Cette preuve fait intervenir l'opérateur:

$$G = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad \text{qui commute avec les opérateurs infinitésimaux } J_x, J_y \text{ et } J_z.$$

Dans le but de généraliser cette démonstration, Casimir a introduit pour tout groupe semi-simple, un opérateur qui commute avec tous les opérateurs infinitésimaux du groupe. Cet opérateur est défini par la relation :

$$G = g^{\rho\sigma} X_\rho X_\sigma.$$

G peut être exprimé sous forme standard :

$$G = g^{ik} H_i H_k + \sum_{\alpha} E_{\alpha} E_{-\alpha}, \quad (1.25)$$

et sous cette forme, les valeurs propres de G peuvent être très facilement déterminées. En effet, soient \mathbf{m} le poids le plus haut d'une représentation irréductible et \mathbf{u} le vecteur propre correspondant dans l'espace \mathcal{R} :

$$G \mathbf{u} = [g^{ik} m_i m_k + \sum_{\alpha} E_{\alpha} E_{-\alpha}] \mathbf{u},$$

pour les racines positives α^+ , $E_{\alpha} \mathbf{u} = 0$ et en conséquence on peut écrire :

$$G \mathbf{u} = [g^{ik} m_i m_k + \sum_{\alpha^+} [E_{\alpha}, E_{-\alpha}]] \mathbf{u} = [(m \cdot m) + \sum_{\alpha^+} (\alpha \cdot m)] \mathbf{u};$$

si les vecteurs \mathbf{R} et \mathbf{K} sont définis par les relations suivantes :

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha^+} \alpha,$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{m} + \mathbf{R},$$

la valeur propre de G peut être écrite :

$$\lambda = \mathbf{K}^2 - \mathbf{R}^2. \quad (1.26)$$

Il faut remarquer que la dimension de la représentation irréductible considérée s'exprime très simplement en fonction des vecteurs R et K . plus précisément Weyl¹⁷ a montré que :

$$D(m) = \prod_{\alpha^+} \frac{(\alpha \cdot K)}{(\alpha \cdot R)}. \quad (1.27)$$

Si le poids le plus haut d'une représentation irréductible détermine complètement la ν -valeur propre correspondante de l'opérateur de Casimir, il n'en est pas de même généralement du contraire, et l'opérateur G par conséquent, était inefficace pour atteindre le but que s'était proposé Casimir. Cependant cet opérateur apparaît d'une très grande utilité dans certains problèmes particuliers .

Le problème de la construction d'un ensemble complet d'opérateurs qui commutent avec tous les opérateurs du groupe et dont les valeurs propres caractérisent complètement la représentation irréductible, a été finalement résolu par Van der Waerden, qui a ainsi donné une preuve purement infinitésimale de la réductibilité totale de toute représentation d'un groupe semi-simple.

Le g -groupe linéaire complet et son sous-groupe unitaire ne sont pas des groupes semi-simples; cependant, produits directs d'un groupe semi-simple et d'un groupe abélien, ces groupes possèdent de nombreuses propriétés des groupes semi-simples, et en particulier, les relations de commutation peuvent être mises sous forme standard; si les opérateurs H_i sont identifiés aux X_{ii} , on peut voir facilement que les composantes d'un poids sont alors toutes des entiers, et que le groupe S est identique à celui de A_ℓ . Il est évident qu'une base \mathcal{R} d'une repré-

sentation irréductible de $GL_{\ell+1}$ ou $U_{\ell+1}$ est également base d'une représentation irréductible de $SU_{\ell+1}$; soient λ et m , les poids respectifs de ces représentations, la relation entre les X_{ii} et les X'_{ii} conduit immédiatement à :

$$m_i = \lambda_i - \frac{1}{\ell+1} \sum_j \lambda_j .$$

Si on limite le groupe complètement linéaire à son sous-groupe unitaire, on montre que les représentations :

$(\lambda_1 \dots \lambda_j \dots \lambda_{\ell+1})$ et $(\lambda_1 + e \dots \lambda_j + e \dots \lambda_{\ell+1} + e)$ sont équivalentes, et en conséquence, la somme $\sum_j \lambda_j$ peut être alors prise entière quelconque à la seule condition toutefois qu'elle conduise à des λ tous entiers. Le poids le plus haut de toute représentation irréductible de $U_{\ell+1}$ peut donc être écrit :

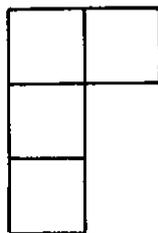
$$[\mu_1 \dots \mu_i \dots \mu_{\ell+1}] ,$$

où les μ vérifient les relations :

$$\mu_i \geq \mu_{i+1} \quad \forall i ,$$

$$\mu_{\ell+1} = 0 .$$

Cette partition peut être représentée graphiquement au moyen d'une figure contenant $\mu = \sum_j \mu_j$ cases réparties en ℓ rangées, chaque rangée commençant à partir d'une même ligne verticale et le nombre de cases dans chaque rangée successive étant $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_i, \dots, \mu_{\ell}$. Par exemple à la représentation $[2110 \dots 0]$ correspond la figure suivante :



Une telle figure est appelée diagramme de Young. Or, il sera montré dans la seconde partie, qu'une des opérations fondamentales dans l'application de la théorie des groupes de Lie à la spectroscopie atomique, est l'étude des réductions :

$$U_{l+1} \supset SU_{l+1} \supset R_l \quad \text{et} \quad U_{2l} \supset SP_{2l} ;$$

dans ces réductions, les représentations du groupe unitaire se décomposent en représentations irréductibles du sous-groupe considéré, et le problème essentiel consiste à déterminer cette décomposition.

La solution générale en a été donnée par Littlewood¹⁹ et dans les deux cas considérés, elle se réduit à un ensemble d'opérations simples sur les diagrammes d'Young, qui ont été données explicitement par Jahn⁸, Flowers⁹ et Murnaghan²⁸. Les diagrammes d'Young jouent également un rôle fondamental dans le calcul des produits de Kronecker qui seront définis dans le chapitre suivant.

IV- PRODUIT DE KRONECKER-THEOREME DE WIGNER-ECKART

Soient deux ensembles de vecteurs propres u_k et u'_j bases respectives de deux espaces vectoriels R_N et R'_N , sur lesquels sont définies deux représentations irréductibles d'un groupe de Lie. Les poids respectifs des vecteurs u_k et u'_j peuvent être notés $m^{(k)}$ et $m'^{(j)}$. Aux deux espaces vectoriels R_N et R'_N , il est toujours possible de faire correspondre un espace vectoriel à NN' dimensions, produit tensoriel des deux espaces précédents, noté : $R_N \otimes R'_N$, qui admet pour base l'ensemble des produits tensoriels : $u_k \otimes u'_j$. Par définition :

$$H_i u_k = m_i^{(k)} u_k \quad \text{et} \quad H_i u'_j = m_i'^{(j)} u'_j ;$$

Or, l'opérateur H_i est un opérateur différentiel et en conséquence,

$$H_i(u_k \otimes u'_j) = (u_k \otimes (H_i u'_j)) + ((H_i u_k) \otimes u'_j) = (m_i^{(k)} + m_i^{(j)})(u_k \otimes u'_j);$$

en d'autres termes, les mn' produits tensoriels $u_k \otimes u'_j$ forment la base d'une représentation appelée produit de Kronecker des deux représentations initiales, dont la dimension est le produit des dimensions de ces deux représentations, et dont les différents poids consistent dans toutes les sommes possibles des différents poids initiaux. Cette représentation est en général réductible, et le problème est de déterminer cette réduction c'est-à-dire de trouver le nombre de fois qu'apparaît une représentation irréductible, caractérisée par son poids le plus haut m'' dans la réduction du produit de Kronecker $m \otimes m'$; ce nombre sera noté $\mathcal{L}(m, m', m'')$.

La réduction cherchée peut être réalisée pour tout groupe de Lie à l'aide d'une méthode générale proposée par Weyl, mais elle ne se réduit à un ensemble de règles simples que pour les groupes unitaires $U_{\ell+1}$. Ces règles ont été données par Littlewood sous la forme suivante :

Les diagrammes de Young, et en conséquence les représentations irréductibles correspondantes qui apparaissent dans la réduction du produit de Kronecker :

$$[\lambda_1 \dots \lambda_i \dots \lambda_\ell 0] \otimes [\mu_1 \dots \mu_k \dots \mu_\ell 0],$$

sont ceux qui peuvent être construits en ajoutant au diagramme

$[\lambda_1 \dots \lambda_i \dots \lambda_\ell 0]$, μ_1 cases contenant le même symbole α , μ_2 cases contenant le même symbole β , etc....., et tels que :

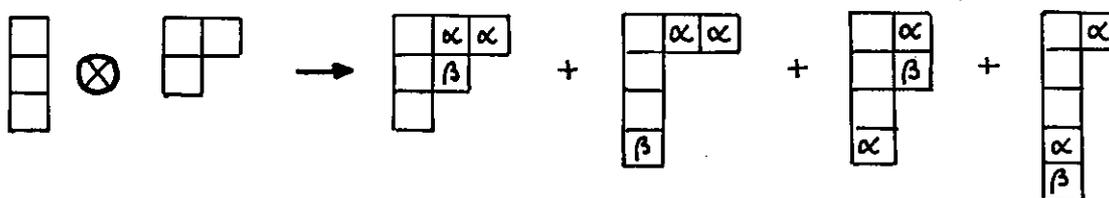
1- après l'addition de chaque ensemble de cases caractérisées par un même symbole, il n'y ait pas deux symboles identiques dans la même colonne,

2- si l'ensemble des symboles ajoutés est lu de droite à gauche dans les rangées successives, on obtienne une permutation de réseau de :

$$\alpha^{\mu_1} \beta^{\mu_2} \gamma^{\mu_3} \dots$$

A titre d'exemple, l'application des règles précédentes au produit de Kronecker : $[111 0 \dots 0] \otimes [210 \dots 0]$,

conduit aux diagrammes suivants :



La connaissance des divers produits de Kronecker d'un groupe unitaire et celle de ses réductions à ses divers sous-groupes, permet de déterminer les produits de Kronecker de ces sous-groupes, et c'est cette méthode que nous utiliserons dans les parties suivantes pour calculer les produits de Kronecker des groupes orthogonaux et symplectiques, que nous avons à considérer.

de

La détermination des divers produits Kronecker des représentations irréductibles d'un groupe donné, est en effet essentielle à l'emploi du théorème fondamental de l'application de la théorie des groupes de Lie à la mécanique quantique, le théorème de Wigner Eckart²¹. Ce théorème permet l'utilisation des propriétés de transformation de fonctions d'ondes et d'opérateurs, dans les opérations d'un groupe donné pour le calcul d'éléments de matrice tels que : $(\phi_i | h_j | \theta_k)$

L'énoncé suivant peut en être donné :

Si,

1. les p fonctions ϕ_i forment une base orthonormée pour la représentation irréductible Γ_P d'un groupe G ,

2. les q opérateurs h_j forment une base orthonormée pour la r -représentation irréductible Γ_Q de G ,

3. les r fonctions θ_k forment une base orthonormée pour la représentation irréductible Γ_R de G ,

l'élément de matrice $(\phi_i | h_j | \theta_k)$ peut être écrit sous la forme suivante :

$$\sum_{\beta} A_{\beta} (\Gamma_P \beta_i | \Gamma_Q j; \Gamma_R k),$$

où les coefficients A_{β} sont indépendants de i, j et k , et où les symboles β sont utilisés pour distinguer les différentes représentations irréductibles équivalentes Γ_P qui apparaissent dans la réduction du produit de Kronecker $\Gamma_Q \otimes \Gamma_R$. La somme comporte donc $\mathcal{L}(\Gamma_Q \Gamma_R \Gamma_P)$ termes et si $\mathcal{L}(\Gamma_Q \Gamma_R \Gamma_P)$ est nul, alors :

$$(\phi_i | h_j | \theta_k) = 0.$$

CLASSIFICATION DES ETATS (S, L) DES CONFIGURATIONS $(\ell + \ell')^N$
 COEFFICIENTS DE PARENTE FRACTIONNELLE

I OPERATEURS TENSORIELS (RAPPEL)

Le concept d'opérateur tensoriel introduit par Racah³ trouve son origine dans la nécessité d'utiliser des opérateurs dont les propriétés de transformation soient bien définies, pour pouvoir appliquer le théorème de Wigner-Eckart. Or les propriétés de transformation d'un opérateur dans les opérations de R_3 sont complètement déterminées par les relations de commutation de cet opérateur avec les opérateurs infinitésimaux de R_3 , exprimés sous leur forme standard :

$$J_z, J_+ \text{ et } J_- .$$

En outre, il est bien connu que l'ensemble des harmoniques sphériques Y_{kq} , pour une valeur de k donnée, forme la base de la représentation irréductible D_k de R_3 . Pour qu'il en soit de même des opérateurs que nous écrivons $T_q^{(k)}$, il suffit que les relations de commutation des $T_q^{(k)}$ avec J_z, J_\pm soient identiques à celles des Y_{kq} . La seule partie de J qui ne commute pas avec les Y_{kq} est l'opérateur moment angulaire orbital l défini par :

$$l_z = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad l_\pm = e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

et en conséquence, nous affirmerons que l'opérateur $T_q^{(k)}$ comprenant les $(2k+1)$ composantes $T_q^{(k)}$ est un opérateur tensoriel de rang k , si chacune de ses composantes vérifie les conditions suivantes :

$$[J_z, T_q^{(k)}] = q T_q^{(k)} ; \quad [J_\pm, T_q^{(k)}] = \{k(k+1) - q(q \pm 1)\}^{1/2} T_{q \pm 1}^{(k)} .$$

D'après le théorème de Clebsch-Gordan, la représentation \mathcal{D}_K apparaît au plus une fois dans la décomposition du produit de Kronecker $\mathcal{D}_k \otimes \mathcal{D}_{K'}$ et par conséquent le théorème de Wigner-Eckart permet d'écrire :

$$(\gamma K M_K | T_q^{(k)} | \gamma' K' M'_K) = A (K M_K | k q; K' M'_K),$$

où K et K' sont deux moments angulaires de même type, $(|)$ un coefficient de Clebsch-Gordan et A une quantité indépendante de M_K, q et M'_K . L'expression précédente peut encore être écrite sous la forme suivante :

$$(\gamma K M_K | T_q^{(k)} | \gamma' K' M'_K) = (-1)^{K-M_K} \begin{pmatrix} K & k & K' \\ -M_K & q & M'_K \end{pmatrix} (\gamma K || T^{(k)} || \gamma' K')$$

où le coefficient de Clebsch-Gordan a été transformé en symbole $3-j$; le facteur $(\gamma K || T^{(k)} || \gamma' K')$ indépendant de M_K, q , et M'_K est appelé élément de matrice réduit.

Pour pouvoir étudier les relations en espace de spin et espace d'orbite, il est essentiel d'utiliser des opérateurs possédant des propriétés de transformation bien définies relativement à ces deux espaces.

C'est ce qui a amené la définition des tenseurs doubles $T^{(\kappa k)}$

L'opérateur $T^{(\kappa k)}$ comprenant les $(2\kappa+1)(2k+1)$ composantes

est un opérateur tensoriel double de rang κ relativement au spin total et de rang k relativement au moment angulaire orbital total si ses

composantes vérifient les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} [L_3, T_{\pi q}^{(\kappa k)}] &= q T_{\pi q}^{(\kappa k)}, \\ [L_{\pm}, T_{\pi q}^{(\kappa k)}] &= \{k(k+1) - q(q \pm 1)\}^{1/2} T_{\pi q \pm 1}^{(\kappa k)}, \\ [S_3, T_{\pi q}^{(\kappa k)}] &= \pi T_{\pi q}^{(\kappa k)}, \\ [S_{\pm}, T_{\pi q}^{(\kappa k)}] &= \{\kappa(\kappa+1) - \pi(\pi \pm 1)\}^{1/2} T_{\pi \pm 1 q}^{(\kappa k)}. \end{aligned}$$

Pour ces opérateurs le théorème de Wigner-Eckart prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} & (\gamma S M_S L M_L | T_{\pi q}^{(\kappa k)} | \gamma' S' M_S' L' M_L') \\ & = (-1)^{S+L-M_S-M_L} \begin{pmatrix} S & \kappa & S' \\ -M_S & \pi & M_S' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & k & L' \\ -M_L & q & M_L' \end{pmatrix} (\gamma S L || T^{(\kappa k)} || \gamma' S' L'). \end{aligned}$$

et ils sont parfaitement définis quand sont précisés leurs éléments de matrice réduits entre deux fonctions monoélectroniques.

II RELATIONS DE COMMUTATION - GROUPES INFINITESIMAUX

No-us définissons les tenseurs $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b)$ par la relation suivante :

$$(\Delta l''' || w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b) || \Delta l'') = \delta(l_a, l''') \delta(l_b, l'') \{[\kappa][k]\}^{1/2}, \quad (2.1)$$

où les symboles l représentent en fait la donnée de deux nombres quantiques monoélectroniques n et l , et où les symboles $[\]$ ont leur signification habituelle $[\kappa] = 2\kappa + 1$. Les composantes $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b)$ de ces tenseurs agissent donc sur une fonction monoélectronique

$|\Delta l''' m_a''' m_b'''\rangle$ de façon telle que :

$$\begin{aligned} w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b) |\Delta l''' m_a''' m_b'''\rangle & = \sum_{l'' m_a'' m_b''} \delta(l_a, l''') \delta(l_b, l'') (-1)^{l'''+\Delta-m_b''-m_a''} \\ & \{[\kappa][k]\}^{1/2} \begin{pmatrix} \Delta & \kappa & \Delta \\ -m_a''' & \pi & m_a'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l''' & k & l'' \\ -m_b''' & q & m_b'' \end{pmatrix} |\Delta l''' m_a''' m_b'''\rangle. \end{aligned}$$

Il s'en suit que les opérateurs $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b)$ vérifient la relation :

$$\begin{aligned} [w_{\pi_1 q_1}^{(\kappa_1 k_1)}(l_a, l_b), w_{\pi_2 q_2}^{(\kappa_2 k_2)}(l_c, l_d)] & = \sum_{\kappa_3 k_3 \pi_3 q_3} (-1)^{1+\kappa_3+k_3-q_3-\pi_3} \{[\kappa_1][\kappa_2][\kappa_3]\}^{1/2} \\ & \times \{[\kappa_1][\kappa_2][\kappa_3]\} \begin{pmatrix} \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa_1 & \kappa_2 & \kappa_3 \\ \Delta & \Delta & \Delta \end{pmatrix} \\ & \times \left[\delta(l_b, l_c) (-1)^{l_a+l_d+\kappa_1+\kappa_2+k_1+k_2} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_d & l_a & l_b \end{pmatrix} w_{\pi_3 q_3}^{(\kappa_3 k_3)}(l_a, l_d) \right. \\ & \left. - \delta(l_a, l_d) (-1)^{l_b+l_c+\kappa_3+k_3} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_c & l_b & l_a \end{pmatrix} w_{\pi_3 q_3}^{(\kappa_3 k_3)}(l_c, l_b) \right] \quad (2.2) \end{aligned}$$

Ces opérateurs peuvent donc être regardés comme les opérateurs infinitésimaux d'un groupe au sens de Lie. Si nous nous limitons au cas où l_a, l_b, l_c, l_d sont identiques à l ou l' , les conditions triangulaires sur les symboles 6-j indiquent qu'il n'est utile de considérer que les $(4l+2)^2$ composantes: $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l, l)$ ($\kappa=0,1; 0 \leq k \leq 2l$), les $(4l'+2)^2$ composantes: $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l', l')$ ($\kappa=0,1; 0 \leq k \leq 2l'$), et les $8(2l+1)(2l'+1)$ composantes: $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l, l')$ et $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l', l)$ ($\kappa=0,1; |l-l'| \leq k \leq l+l'$). Or, du fait des relations d'orthogonalité satisfaites par les symboles 3-j, les $16(l+l'+1)^2$ matrices de degré $4(l+l'+1)$ dont les éléments sont définis par :

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{ccc} \Delta & l''' & m_\Delta''' \\ & m_\Delta''' & m_\Delta''' \end{array} \middle| w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b) \middle| \begin{array}{ccc} \Delta & l'' & m_\Delta'' \\ & m_\Delta'' & m_\Delta'' \end{array} \right) \\ &= \delta(l_a, l''') \delta(l_b, l'') (-1)^{l''' + \Delta - m_\Delta'' - m_\Delta''} \{[\kappa][k]\}^{1/2} \\ & \times \begin{pmatrix} \Delta & \kappa & \Delta \\ -m_\Delta''' & \pi & m_\Delta'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l''' & k & l'' \\ -m_\Delta''' & q & m_\Delta'' \end{pmatrix}, \quad (l''', l_a, l_b, l'' \equiv l, l') \end{aligned}$$

sont linéairement indépendantes, et elles forment un ensemble linéaire complet de matrices de degré $4(l+l'+1)$; il s'en suit que les opérateurs précédents peuvent être considérés comme les opérateurs infinitésimaux du groupe linéaire complet en $4(l+l'+1)$ dimensions ou de son sous-groupe unitaire $U_{4(l+l'+1)}$. Ce groupe n'est pas simple, car l'opérateur: $\{[l]+[l']\}^{-1/2} ([l']^{1/2} w^{(00)}(l', l') + [l]^{1/2} w^{(00)}(l, l))$, commute avec tous les autres opérateurs infinitésimaux de ce groupe, mais en écartant cet opérateur de cet ensemble, nous limitons $U_{4(l+l'+1)}$ au groupe unitaire spécial $SU_{4(l+l'+1)}$, groupe semi-simple de dimensions $(4l+4l'+3)(4l+4l'+5)$.

Le groupe unitaire spécial contient un certain nombre de sous-groupes, et en particulier, on peut montrer facilement que les opérateurs de ce groupe pour lesquels $\kappa = 0$, forment un groupe invariant; il en est de même pour les trois composantes du tenseur

$$\{ [l] + [l'] \}^{-1/2} \{ [l']^{1/2} w^{(10)}(l', l') + [l]^{1/2} w^{(10)}(l, l) \}.$$

Ces dernières constituent les opérateurs infinitésimaux du groupe SU_2 , et les tenseurs:

$$\{ [l] + [l'] \}^{-1/2} \{ [l]^{1/2} w^{(00)}(l', l') - [l']^{1/2} w^{(00)}(l, l) \},$$

$$w^{(0k)}(l, l) \quad (0 < k \leq 2l),$$

$$w^{(0k)}(l', l') \quad (0 < k \leq 2l'),$$

$$w^{(0k)}(l, l') \text{ et } w^{(0k)}(l', l) \quad (|l - l'| \leq k \leq |l + l'|),$$

peuvent être considérés comme ceux du groupe unitaire spécial en $2(l + l' + 1)$ dimensions, $SU_{2(l+l'+1)}$. Le groupe $SU_{4(l+l'+1)}$ peut donc être

réduit au produit direct $SU_2 \times SU_{2(l+l'+1)}$ et cette réduction permet l'indépendance des transformations relativement aux espaces

de spin et d'orbite. Le groupe $SU_{2(l+l'+1)}$ est lui-même réductible; en effet, les opérateurs $w^{(0k)}(l, l)$ et $w^{(0k)}(l', l')$

correspondant à des valeurs impaires de k ainsi que les opérateurs

$$2^{-1/2} \{ w^{(0k)}(l, l') - (-1)^k w^{(0k)}(l', l) \}$$

constituent les opérateurs d'un groupe; ce groupe est le groupe des rotations en $2(l + l' + 1)$

dimensions $R_{2(l+l'+1)}$. Remarquons enfin que ce dernier groupe

peut être réduit au produit direct de R_{2l+1} et $R_{2l'+1}$ d'opérateurs infinitésimaux respectifs: $w^{(0k)}(l, l)$ et $w^{(0k)}(l', l')$

(k impair). Chacun des termes de ce produit direct et lui-même peuvent

être évidemment limités au groupe R_3 et l'ensemble des résultats

précédents peut-être représenté par les séquences :

$$\begin{aligned} & SU_2 \times SU_{2(l+l'+1)} \subset SU_{4(l+l'+1)} \subset U_{4(l+l'+1)}, \\ R_3 \subset R_{2l+1} (R_3) \times R_{2l'+1} (R_3) \subset R_{2(l+l'+1)} \subset SU_{2(l+l'+1)}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

II REPRESENTATIONS

Si nous considérons les opérateurs $W_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b)$, sommes sur tous les électrons des opérateurs monoélectroniques $w_{\pi q}^{(\kappa k)}(l_a, l_b)$, ces opérateurs satisfont à l'équation (2-2); ils décrivent une transformation simultanée de toutes les fonctions d'onde monoélectroniques et les fonctions d'onde à N électrons $| (l+l')^N \gamma S M_S L M_L \rangle$ forment la base d'une représentation de $U_{4(l+l'+1)}$. Ces fonctions d'onde sont totalement antisymétriques relativement à l'échange de deux électrons, et l'on montre que la représentation considérée, de degré $\binom{4(l+l'+1)}{N}$, est irréductible; elle peut d'autre part être caractérisée par son poids le plus haut que l'on écrit :

$$\left[\overbrace{1 \dots 10 \dots}^N \right]_{4(l+l'+1)}$$

Il faut noter ici que la représentation $\left[\overbrace{1 \dots 10 \dots}^{4(l+l'+1)-N} \right]$ est strictement identique à la représentation précédente; cette identité introduit formellement l'équivalence trou-particule et permet de réduire l'étude des configurations $(l+l')^N$ à celles pour lesquelles N est inférieur ou égal à $2(l+l'+1)$.

Dans la réduction :

$$U_{4(l+l'+1)} \supset SU_{4(l+l'+1)} \supset SU_2 \times SU_{2(l+l'+1)},$$

cette représentation se décompose en un certain nombre de représentations de $SU_{2(l+l'+1)}$, à chacune desquelles est associée une valeur de spin S ; cette méthode de combinaison des fonctions de spin et d'orbite utilise

les propriétés des tableaux d'Young, elle a été décrite en grand détail par Judd¹¹ et elle permet de montrer que les représentations de $SU_{2(\ell+\ell'+1)}$ obtenues dans la réduction considérée, correspondent à des représentations de $U_{2(\ell+\ell'+1)}$ dont le poids le plus haut est nécessairement de la forme :

$$\left[\underbrace{2 \dots 2}_a \underbrace{1 \dots 1}_b \dots 10 \dots 0 \right]$$

où $b=2S$ et $2a+b=N$. La donnée de cette réduction est donc identique à celle de N et S . Il n'en est plus de même des autres réductions obtenues dans le paragraphe précédent et chaque état (S, L) de la configuration $(\ell + \ell')^N$ pourra être caractérisé par le produit de deux représentations respectives \mathcal{V} et \mathcal{V}' des groupes $R_{2\ell+1}$ et $R_{2\ell'+1}$, et une représentation \mathcal{W} du groupe $R_{2(\ell+\ell'+1)}$. Nous noterons cet état :

$$|(\ell + \ell')^N, \mathcal{W}, \mathcal{V}(L_1) \times \mathcal{V}'(L_2), SL\rangle$$

Il peut arriver, si ℓ ou ℓ' sont identiques à f que cette classification ne soit pas suffisante, mais on peut alors lui adjoindre la donnée d'une représentation du groupe G_2 , sous-groupe de R_7 . Les réductions précédentes et les règles d'embranchement correspondantes peuvent être déduites des règles de Littlewood¹⁹ et de Murnaghan²⁰ explicitées par Jahn⁸ et Judd¹¹. La connaissance du degré des représentations irréductibles est souvent extrêmement utile dans la détermination de ces règles d'embranchement; l'application de la formule (1.27) de Weyl aux différents groupes considérés permet de calculer pour chacun d'eux le degré d'une représentation irréductible en fonction de son poids le plus haut; plus précisément on obtient :

pour $U_{\nu+1}$

$$D[\lambda_1 \dots \lambda_{\nu+1}] = \prod_{h > k=1}^{\nu+1} (h-k + \lambda_k - \lambda_h) / (h-k),$$

pour $R_{2\nu+1}$,

$$D(\omega_1, \dots, \omega_\nu) = \prod_{h>k} \frac{(\omega_h + \omega_k + 2\nu + 1 - h - k)}{2\nu + 1 - h - k} \\ \times \prod_{h>k} \frac{(\omega_k - \omega_h + h - k)}{(h - k)} \prod_k \frac{(2\omega_k + 2\nu + 1 - 2k)}{(2\nu + 1 - 2k)},$$

et pour $R_{2\nu}$,

$$D(\omega_1, \dots, \omega_\nu) = \prod_{h>k} \frac{(\omega_h + \omega_k + 2\nu - k - h)}{(2\nu - k - h)} \prod_{h>k} \frac{(\omega_k - \omega_h + h - k)}{(h - k)}.$$

IV SYMETRIE SYMPLECTIQUE ET SENIORITE

Il a été vu précédemment que la réduction de $SU_{4(l+l'+1)}$ à $SU_2 \times SU_{2(l+l'+1)}$ n'apportait aucune donnée supplémentaire à celle de N et S et en conséquence, qu'elle ne présentait pas d'intérêt dans la classification des états (S, L) des configurations $(l+l')^N$. Il existe cependant un autre mode de décomposition de $SU_{4(l+l'+1)}$, et cette réduction apparaît d'un intérêt beaucoup plus grand que la précédente. La relation (2.2) montre en effet que parmi les opérateurs infinitésimaux de $SU_{4(l+l'+1)}$, les $(2l+1)(4l+3)$ opérateurs : $w^{(\alpha k)}(l, l)$, et les $(2l'+1)(4l'+3)$ opérateurs : $w^{(\alpha k)}(l', l')$ pour lesquels $\alpha + k$ est impair, ainsi que les $4(2l+1)(2l'+1)$ opérateurs :

$$2^{-1/2} \{ w^{(\alpha k)}(l, l') - (-1)^{\alpha+k} w^{(\alpha k)}(l', l) \},$$

forment un sous-groupe de $SU_{4(l+l'+1)}$. Ce groupe de transformations dans un espace à $4(l+l'+1)$ dimensions est d'ordre $2(l+l'+1)(4l+4l'+5)$; il s'agit du groupe symplectique $Sp_{4(l+l'+1)}$ dont les opérations laissent invariant l'état :

$$(2l+2l'+2)^{-1/2} \{ [l]^{1/2} | l^{2,1} S \rangle + [l']^{1/2} | l'^{2,1} S \rangle \}.$$

Il est clair, d'après ce qui a été vu précédemment que le groupe $SP_{4(l+l'+1)}$ peut être limité au produit direct $SU_2 \times R_{2(l+l'+1)}$; la séquence alternative de celle obtenue dans le paragraphe précédent est donc :

$$SU_2 \times R_{2(l+l'+1)} \subset SP_{4(l+l'+1)} \subset SU_{4(l+l'+1)} \quad (2.4)$$

Chaque état (S, L) des configurations $(l+l')^N$ peut donc être caractérisé par une représentation \mathcal{Y} du groupe $SP_{4(l+l'+1)}$; les représentations \mathcal{Y} sont définies par $2(l+l'+1)$ nombres entiers $(\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_{2(l+l'+1)})$ tels que $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{2(l+l'+1)} \geq 0$; leur degré s'exprime en fonction des σ de la façon suivante :

$$D(\sigma_1, \dots, \sigma_\nu) = \prod_i \frac{(\sigma_i + \nu - i + 1)}{(\nu - i + 1)} \prod_{k > i} \frac{(\sigma_i - \sigma_k + k - i)(\sigma_i + \sigma_k + 2\nu - i - k + 2)}{(k - i)(2\nu + 2 - i - k)}$$

La réduction $SU_{4(l+l'+1)} \supset SP_{4(l+l'+1)}$ et les règles d'embranchement correspondantes peuvent être obtenues à partir des règles générales de Littlewood¹⁸. Elles ont été données explicitement par Flowers⁹, et la décomposition de la représentation $[1 \dots \underbrace{\dots}_{N} 1 0 \dots 0]$ est particulièrement simple :

$$[1 \dots 10 \dots 0] \rightarrow \underbrace{(1 \dots 1 0 \dots 0)}_N + \underbrace{(1 \dots 1 0 \dots 0)}_{N-2} + \dots ;$$

le dernier terme de cette décomposition est, suivant la parité de N ,

$$(0 \dots 0) \text{ ou } (10 \dots 0) . \text{ Si } N \text{ est supérieur à } 2(l+l'+1) \text{ l'équivalence trou-particule établie précédemment doit être utilisée. Puisque}$$

les valeurs de σ sont au plus égales à 1, toutes les représentations \mathcal{Y} qui interviennent dans la classification des états (S, L) des configurations $(l+l')^N$ peuvent donc être caractérisées par la donnée d'un seul nombre ν , défini par la relation :

$$\nu = \sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_{2(l+l'+1)} \quad (2.5)$$

Ce nombre est l'analogie du nombre de séniorité défini par Racah⁵ pour les configurations l^N . A chaque état des configurations étudiées, pourra donc être associée une valeur de la séniorité qui caractérisera

complètement les propriétés de transformation de cet état, dans la symétrie symplectique. L'ensemble des nombres quantiques introduits à l'aide de la théorie des groupes continus est donc finalement le suivant :

$$((l+l')^N \nu \tau \mathcal{V}(L_1) \times \mathcal{V}'(L_2) SL)$$

Il faut remarquer ici que la donnée simultanée de ν et de S peut ne plus être strictement équivalente à celle de τ comme c'est le cas pour les configurations l^N ; elle contient toujours cependant une grande part de l'information sur les propriétés de transformation de l'état considéré dans les opérations du groupe $R_{2(l+l'+1)}$; en particulier ; les valeurs propres de l'opérateur de Casimir de ce groupe s'expriment de façon très simple en fonction de S et ν :

$$G(R_{2(l+l'+1)})U = \frac{1}{4(l+l')} \left[\frac{\nu}{2} (4l'+4l+6-\nu) - 2S(S+1) \right] U. \quad (2.6)$$

A titre d'exemple, nous donnons dans les tableaux I, II, III et IV toutes les réductions nécessaires à la classification des configurations $(d+s)^N$; les trois premières sont extraites de l'ouvrage de Judd¹¹.

V. DEFINITION ET FACTORISATION DES COEFFICIENTS DE PARENTE FRACTIONNELLE

L'intérêt de la classification des états d'une configuration au moyen des représentations irréductibles de différents groupes continus, réside principalement dans le fait que ces états sont parfaitement caractérisés sans qu'il soit nécessaire de construire les combinaisons linéaires de produits déterminantaux correspondantes. Pour éviter totalement le calcul explicite de ces combinaisons linéaires il est essentiel que les éléments de matrice de tout opérateur puissent être déterminés sans qu'il soit nécessaire d'introduire les états déterminantaux.

TABLEAU I

$$U_6 \longrightarrow R_6$$

[000000]	(000)
[100000]	(100)
[110000]	(110)
[200000]	(000) (200)
[111000]	(11±1)
[210000]	(100) (210)
[211000]	(110) (21±1)
[220000]	(000) (200) (220)
[211100]	(11±1) (210)
[221000]	(100) (210) (22±1)
[211110]	(110) (200)
[221100]	(110) (21±1) (220)
[222000]	(000) (200) (220) (22±2)

TABLEAU II

R_6	$\xrightarrow{\hspace{2cm}}$	R_5
(000)		(00)
(100)		(00) (10)
(110)		(10) (11)
(11±1)		(11)
(200)		(00) (10) (20)
(210)		(10) (11) (20) (21)
(21±1)		(11) (21)
(220)		(20) (21) (22)
(22±1)		(21) (22)
(22±2)		(22)

TABLEAU III

R_5	\longrightarrow	R_3
(00)		S
(10)		D
(11)		P F
(20)		D G
(21)		P D F G H
(22)		S D F G I

TABLEAU IV

Sp_{12}	\longrightarrow	$SU_2 \times R_6$
(000000)		$^1(000)$
(100000)		$^2(100)$
(110000)		$^1(200)^3(110)$
(111000)		$^2(210)^4(11\pm 1)$
(111100)		$^1(220)^3(21\pm 1)^5(110)$
(111110)		$^2(22\pm 1)^4(210)^6(100)$
(111111)		$^1(22\pm 2)^3(220)^5(200)^7(000)$

Développant une idée de Backer et Goudsmit²², Racah⁵, par la définition de la notion de parenté fractionnelle, a donné la solution de ce problème pour les configurations d'électrons équivalents l^N . Le principe peut en être généralisé sans difficultés aux configurations $(l+l')^N$ et ainsi le calcul des éléments de matrice de tout opérateur entre les états (S, L) de ces configurations possédant des propriétés de symétrie bien définies pourra être effectué sans que l'on doive exprimer ces états comme combinaisons linéaires d'états des différentes configurations $l^N, l^{N-1}l', \dots, l l'^{N-1}, l'^N$.

Si nous utilisons pour caractériser les ensembles de nombres quantiques respectifs des états des configurations $(l+l')^N, (l+l')^{N-1}$ et $(l+l')$ les abréviations suivantes :

$$(l+l')^N \gamma S M_S L M_L \equiv \Omega,$$

$$(l+l')^{N-1} \bar{\gamma} \bar{S} \bar{M}_S \bar{L} \bar{M}_L \equiv \bar{\Omega},$$

$$(l+l') \bar{l} \bar{m}_s \bar{m}_l \equiv \omega, \quad (\bar{l} = l, l'),$$

il est clair, étant donné^{es} les propriétés des états déterminantaux, que nous pouvons écrire :

$$|\Omega\rangle = \sum_{\bar{\Omega}, \omega} (\bar{\Omega}; \omega | \Omega) |\omega_n\rangle |\Omega\rangle$$

où l'indice n se réfère au $n^{\text{ième}}$ électron.

L'élément de matrice d'un opérateur à une particule $F = \sum_i f_i$ entre deux états de la configuration $(l+l')^N$ est n fois l'élément de matrice de f_n et, par conséquent :

$$(\Omega | F | \Omega') = n \sum_{\bar{\Omega}, \omega, \omega'} (\Omega | \bar{\Omega}; \omega) (\bar{\Omega}; \omega' | \Omega') (\omega_n | f_n | \omega'_n). \quad (2.8)$$

Le problème se réduit donc au calcul des coefficients: $(\Omega | \bar{\Omega}; \omega)$.

Ces coefficients permettent également, par un calcul en chaîne, d'évaluer les éléments de matrice d'un opérateur à deux particules du type $G = \sum_{i>j} g_{ij}$; en effet parmi les $\frac{1}{2} n(n-1)$ opérateurs que contient G , $\frac{1}{2} (n-1)(n-2)$ d'entre eux ne s'adressent pas au $n^{\text{ième}}$ électron, et en conséquence :

$$(\Omega | G | \Omega') = [n/(n-2)] (\Omega | \sum_{j < i \neq n} g_{ij} | \Omega'),$$

ou encore :

$$(\Omega | G | \Omega') = [n/(n-2)] \sum_{\bar{\Omega}, \bar{\Omega}', \omega} (\Omega | \bar{\Omega}; \omega) (\bar{\Omega}' | \omega | \Omega') (\bar{\Omega} | \sum_{j < i \neq n} g_{ij} | \bar{\Omega}'). \quad (2.9)$$

Ce résultat peut être généralisé à des opérateurs à p particules, et finalement, il sera possible de calculer tout élément de matrice de n 'importe quel opérateur à l'aide des seuls coefficients :

$$((l+l')^{N-1} \bar{\gamma} \bar{S} \bar{M}_S \bar{L} \bar{M}_L; (l+l') \bar{e} m_s m_e | (l+l')^N \gamma S M_S L M_L).$$

Nous avons vu précédemment que l'on peut considérer γ comme l'ensemble des nombres quantiques $\tau, \nu(L_1) \times \nu'(L_2)$, et ν et le fait que ces nombres quantiques soient des représentations irréductibles de divers groupes continus permet, par application d'un théorème dû à Racah⁶ de réaliser la factorisation suivante :

$$\begin{aligned} & ((l+l')^{N-1} \bar{\tau} \bar{\nu}(\bar{L}_1) \times \bar{\nu}'(\bar{L}_2) \bar{S} \bar{M}_S \bar{L} \bar{M}_L; (l+l') \bar{e} m_s m_e | (l+l')^N \tau \nu(L_1) \times \nu'(L_2) S M_S L M) \\ &= (\bar{S} \bar{M}_S \Delta m_s | \bar{S} \Delta S M_S) (\bar{L} \bar{M}_L \bar{e} m_e | \bar{L} \bar{e} L M_L) \\ & \times ((l+l')^{N-1} \bar{\tau} \bar{\nu}(\bar{L}_1) \times \bar{\nu}'(\bar{L}_2) \bar{\nu} \bar{S} \bar{L} + \bar{e} R (l+l')^N \tau \nu(L_1) \times \nu'(L_2) \nu S L). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Les coefficients $(+ \{ \})$ sont appelés coefficients de parenté fractionnelle (CPF). Ces coefficients peuvent être eux mêmes factorisés comme nous le verrons en détail dans le calcul effectif des CPF $((d+\delta)^2 + \{ \} (d+\delta)^3)$

Les éléments de matrice réduits des opérateurs tensoriels doubles définis dans le premier paragraphe peuvent être exprimés très simplement en fonction des CPF. Plus précisément l'équation (2.8)

permet d'écrire :

$$\begin{aligned}
 & ((l+l')^N \gamma_{SL} \| W^{(\kappa k)}(l_a, l_b) \| (l+l')^N \gamma' S' L') \\
 &= N \sum_{\substack{\bar{\gamma} \bar{S} \bar{L} \\ \bar{L} + \bar{S} + l_b + \delta + L + S + k + \kappa}} ((l+l')^{N-1} \bar{\gamma} \bar{S} \bar{L} + l_b) \| (l+l')^N \gamma' S' L') ((l+l')^N \gamma_{SL} \| (l+l')^{N-1} \bar{\gamma} \bar{S} \bar{L} + l_a) \\
 (-1) & \{ [L][L'][S][S'][k][\kappa] \}^{1/2} \begin{Bmatrix} L & k & L' \\ l_b & \bar{L} & l_a \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S & \kappa & S' \\ \frac{1}{2} & \bar{S} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix}. \quad (2.11)
 \end{aligned}$$

Ainsi donc, si les CPF sont déterminés, les éléments de matrice réduits de tout opérateur à une particule peuvent être calculés très facilement; nous avons vu qu'il en était de même pour les éléments de matrice de tout opérateur à p particules, et en conséquence, le calcul des CPF évite dans tous les cas, la construction explicite des fonctions d'onde. Nous avons calculé les CPF pour la configuration $(d+\delta)^3$; la méthode que nous avons utilisée est susceptible d'être généralisée à toute configuration $(l+l')^N$ et comme l'ont montré Putter et Nielson²³ pour les configurations f^N serait bien adaptée à un calcul sur machine électronique.

VI- LES CPF $((d+\delta)^2 \bar{\gamma} \bar{S} \bar{L} + \bar{l} \{ \} (d+\delta)^3 \gamma_{SL})$

Pour les configurations $(d+\delta)^N$, l'ensemble des nombres quantiques γ se réduit à une représentation irréductible \mathcal{W} de R_6 \mathcal{V} de R_5 et ν de Sp_{12} . Le théorème de Racah permet alors de réaliser

la factorisation suivante :

$$\begin{aligned} & ((d+\delta)^{N-1} \bar{\omega} \bar{\nu} \bar{\nu} \bar{S} \bar{L} + \bar{\ell}) \} (d+\delta)^N \omega \nu \nu S L) \\ & = (\bar{\omega} \bar{\nu} + \bar{\ell} | \omega \nu) (\bar{\nu} \bar{L} + \bar{\ell} | \nu L) \\ & \quad \times ((d+\delta)^{N-1} \bar{\nu} \bar{S} + (d+\delta) \} (d+\delta)^N \nu S) . \end{aligned} \quad (2.12)$$

L'orthonormalité des fonctions à n particules impose que :

$$\sum_{\bar{\Omega}, \omega} (\bar{\Omega}; \omega | \Omega) (\bar{\Omega}; \omega | \Omega') = \delta(\Omega, \Omega')$$

et en conséquence, les divers coefficients $(+|)$ et $(+\})$ doivent vérifier les relations d'orthogonalité suivantes :

$$\sum_{\bar{\nu} \bar{\ell}} (\omega' \nu | \bar{\omega} \bar{\nu} + \bar{\ell}) (\bar{\omega} \bar{\nu} + \bar{\ell} | \omega \nu) = \delta(\omega, \omega'), \quad (2.13)$$

$$\sum_{\bar{\nu} \bar{\ell}} (\nu' L | \bar{\nu} \bar{L} + \bar{\ell}) (\bar{\nu} \bar{L} + \bar{\ell} | \nu L) = \delta(\nu, \nu'), \quad (2.14)$$

$$\text{et} \quad \sum_{\bar{\nu} \bar{S}} ((d+\delta)^{N-1} \bar{\nu} \bar{S} + (d+\delta) \} (d+\delta)^N \nu S)^2 = 1. \quad (2.15)$$

A) Coefficients $(\bar{\nu} \bar{L} + \bar{\ell} | \nu L)$

Ces coefficients peuvent être séparés en deux catégories suivant la valeur de $\bar{\ell}$: $(\bar{\nu} \bar{L} + (10)2 | \nu L)$ et $(\bar{\nu} \bar{L} + (00)0 | \nu L)$.

Ces derniers coefficients ne sont différents de zéro que dans le cas où $\bar{\nu}$ et \bar{L} sont respectivement identiques à ν et L et les relations d'orthonormalité nous permettent de les choisir dans ce cas égaux à un.

Nous écrirons donc :

$$(\bar{\nu} \bar{L} + (00)0 | \nu L) = \delta(\bar{\nu}, \nu) \delta(\bar{L}, L).$$

Pour calculer les coefficients $(\bar{\nu} \bar{L} + (10)2 | \nu L)$, nous utilisons une méthode très voisine de celle employée par Nutter et Nielson²³ pour les configurations f^N . Cette méthode repose sur les propriétés de l'opérateur de Casimir du groupe R_5 : $G(R_5) = \frac{1}{3} [(V^{(1)}(d,d))^2 + (V^{(3)}(d,d))^2]$. (2.16)

où les $V^{(k)}$ sont définis par la relation : $V^{(k)} = 2^{1/2} W^{(0k)}$

En effet si nous appliquons l'opérateur de Casimir aux deux membres de

$$\text{l'équation: } |\nu L\rangle = \sum_{\bar{\nu} \bar{L}} (\nu L | \bar{\nu} \bar{L} + (10)2) | \bar{\nu} \bar{L} \rangle \quad (10)2$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned} & G(\nu)(\bar{\nu} \bar{L} + (10)2 | \nu L) = \\ & \left[G(\bar{\nu}) + G(10) + \frac{2}{3} \sum_{k=1,3} (\bar{\nu} \bar{L} \| V^{(k)} \| \bar{\nu} \bar{L}) [k]^{1/2} \begin{Bmatrix} \bar{L} & 2 & L \\ 2 & \bar{L} & k \end{Bmatrix} (-1)^{\bar{L}+L} \right] (\bar{\nu} \bar{L} + (10)2 | \nu L) \\ & + \sum_{\bar{L}'} \left[\frac{2}{3} \sum_{k=1,3} (\bar{\nu} \bar{L} \| V^{(k)} \| \bar{\nu} \bar{L}') [k]^{1/2} \begin{Bmatrix} \bar{L}' & 2 & L \\ 2 & \bar{L}' & k \end{Bmatrix} (-1)^{\bar{L}'+L} \right] (\bar{\nu} \bar{L}' + (10)2 | \nu L). \quad (2.17) \end{aligned}$$

Les éléments de matrice réduits $(\bar{\nu} \bar{L} \| V^{(k)} \| \bar{\nu} \bar{L})$ sont identiques à ceux des opérateurs $V^{(k)}$ pris entre les états de configurations d^N caractérisés par la représentation $\bar{\nu}$ et ces derniers sont tabulés dans le livre de Nielson et Koster²⁴. Les relations d'orthonormalité et l'équation précédente permettent donc de calculer tous les coefficients $(\bar{\nu} \bar{L} + (10)2 | \nu L)$ dont nous avons besoin, à un facteur de phase près, évidemment. Les résultats ont été portés dans le tableau V, et à titre d'exemple, nous donnons ci-dessous le calcul détaillé des coefficients $((20) \bar{L}' + (10)2 | (10)2)$.

Le tableau II nous indique que \bar{L}' ne peut prendre comme valeur que 2 ou 4 ;

$$\text{posons: } ((20)2 + (10)2 | (10)2) = a$$

$$\text{et } ((20)4 + (10)2 | (10)2) = b.$$

Les valeurs propres de $G(R_5)$ sont données par la relation:

$$G(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{6} [\omega_1(\omega_1+3) + \omega_2(\omega_2+1)], \quad (2.18)$$

en conséquence :

$$G(20) = 5/3 \quad \text{et} \quad G(10) = 2/3.$$

D'autre part, le fait que: $V^{(1)}(d, dt) = 10^{-1/2} L$,

et les tables de Nielson et Koster donnent immédiatement :

$$((20)2 \parallel V^{(1)}(d, d) \parallel (20)2) = ((10)2 \parallel V^{(1)}(d, d) \parallel (10)2) = 3^{1/2},$$

$$((20)4 \parallel V^{(1)}(d, d) \parallel (20)4) = 18^{1/2},$$

$$((20)2 \parallel V^{(3)}(d, d) \parallel (20)2) = (d^2 \frac{1}{2} D \parallel V^{(3)}(d, d) \parallel d^2 \frac{1}{2} D) = -(64/7)^{1/2},$$

$$((20)2 \parallel V^{(3)}(d, d) \parallel (20)4) = (d^2 \frac{1}{2} D \parallel V^{(3)}(d, d) \parallel d^2 \frac{1}{2} G) = -(90/7)^{1/2},$$

$$((20)4 \parallel V^{(3)}(d, d) \parallel (20)4) = (d^2 \frac{1}{2} G \parallel V^{(3)}(d, d) \parallel d^2 \frac{1}{2} G) = (99/7)^{1/2}.$$

Finalement, nous obtenons :

$$\begin{cases} 3a - 5^{1/2} b = 0 \\ a^2 + b^2 = 1 \end{cases}$$

soit :

$$\begin{cases} ((20)2 + (10)2 \mid (10)2) = \pm (5/14)^{1/2}, \\ ((20)4 + (10)2 \mid (10)2) = \pm (9/14)^{1/2}. \end{cases}$$

Ce résultat permet d'ailleurs, par utilisation des relations d'orthonormalité, d'écrire immédiatement :

$$\begin{cases} ((20)2 + (10)2 \mid (21)2) = \pm (9/14)^{1/2}, \\ ((20)4 + (10)2 \mid (21)2) = \mp (5/14)^{1/2}. \end{cases}$$

B) Coefficients $(\bar{w} \bar{v} + \bar{l} \mid w v)$.

La méthode utilisée pour calculer ces coefficients est en tout point analogue à celle que nous avons employée pour déterminer les coefficients $(\bar{v} \bar{L} + (10)2 \mid v L)$.

TABLEAU V
 $(\bar{21} \bar{L} + (10) 21 \bar{21} L)$

$\bar{21} \bar{L}$	$(00)_0$	$(10)_2$	$(11)_1$	$(11)_3$	$(20)_2$	$(20)_4$
$(00)_0$	0	1	0	0	0	0
$(10)_2$	1	0	$(3/10)^{1/2}$	$(7/10)^{1/2}$	$(5/14)^{1/2}$	$(9/14)^{1/2}$
$(11)_1$	0	1	$(8/15)^{1/2}$	$(7/15)^{1/2}$	0	0
$(11)_3$	0	1	$(1/5)^{1/2}$	$-(4/5)^{1/2}$	0	0
$(20)_2$	0	1	0	0	0	0
$(20)_4$	0	1	0	0	0	0
$(21)_1$	0	0	$-(7/15)^{1/2}$	$(8/15)^{1/2}$	1	0
$(21)_2$	0	0	$(7/10)^{1/2}$	$-(3/10)^{1/2}$	$(9/14)^{1/2}$	$-(5/14)^{1/2}$
$(21)_3$	0	0	$(4/5)^{1/2}$	$(1/5)^{1/2}$	$(2/7)^{1/2}$	$(5/7)^{1/2}$
$(21)_4$	0	0	0	-1	$-(10/21)^{1/2}$	$(11/21)^{1/2}$
$(21)_5$	0	0	0	1	0	1

Cette fois, c'est l'opérateur de Casimir du groupe R_6 qui y joue un rôle fondamental. Cet opérateur s'exprime en fonction des opérateurs infinitésimaux de R_6 de la façon suivante :

$$G' = G(R_6) = \frac{1}{4} \left[(V^{(1)}(d,d))^2 + (V^{(3)}(d,d))^2 - (\bar{V}^{(2)}(d,d))^2 \right], \quad (2.19)$$

et ses valeurs propres sont données par la relation :

$$G'(\nu_1, \nu_2, \nu_3) = \frac{1}{8} \left[\nu_1(\nu_1+4) + \nu_2(\nu_2+2) + \nu_3^2 \right]. \quad (2.20)$$

Plus précisément, nous avons appliqué aux deux membres de l'équation

$$|\tau W \tau L) = \sum (\bar{W} \bar{V} \bar{L} + (100) \bar{v} \bar{e} | \tau W \tau L) | \bar{W} \bar{V} \bar{L} | (100) \bar{v} \bar{e}),$$

l'opérateur $-8G(R_6) + 6G(R_5) = 2(\bar{V}^{(2)}(d,d))^2$, ce qui nous a conduit à l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & \left\{ 8G'(\tau W) - 8G'(\bar{W}) - 8G'(100) - 6G(\tau V) + 6G(\bar{V}) + 6G(\bar{v}) \right. \\ & \left. + (-1)^{\bar{L}+L} \begin{Bmatrix} \bar{L} & \bar{e} & L \\ \bar{e} & \bar{L} & 2 \end{Bmatrix} (\bar{W} \bar{V} \bar{L} \| \bar{V}^{(2)} \| \bar{W} \bar{V} \bar{L}) ((100) \bar{v} \bar{e} \| \bar{V}^{(2)} \| (100) \bar{v} \bar{e}) \right\} \\ & \times (\bar{W} \bar{V} + (100) \bar{v} | \tau W \tau V) (\bar{V} \bar{L} + \bar{v} \bar{e} | \tau V L) + \sum_{\bar{L}' \bar{e}' \bar{V}' \bar{v}'} \left[2(-1)^{\bar{L}'+L} \begin{Bmatrix} \bar{L} & \bar{e} & L \\ \bar{e}' & \bar{L}' & 2 \end{Bmatrix} \right. \\ & \left. \times (\bar{W} \bar{V} \bar{L} \| \bar{V}^{(2)} \| \bar{W}' \bar{V}' \bar{L}') ((100) \bar{v} \bar{e} \| \bar{V}^{(2)} \| (100) \bar{v}' \bar{e}') (\bar{W}' \bar{V}' + (100) \bar{v}' | \tau W \tau V) \right. \\ & \left. \times (\bar{V}' \bar{L}' + \bar{v}' \bar{e}' | \tau V L) \right] = 0 \end{aligned} \quad (2.21)$$

Ce système d'équations permet de déterminer les coefficients $(\bar{W} \bar{V} + (100) \bar{v} | \tau W \tau V)$ si les coefficients $(\bar{V}' \bar{L}' + \bar{v}' \bar{e}' | \tau V L)$ ont été calculés préalablement; une difficulté apparaît dans le cas où τW est tel que ν_3 est différent de zéro; en effet, si ν_3 est différent de zéro, les représentations (ν_1, ν_2, ν_3) et $(\nu_1, \nu_2, -\nu_3)$ apparaissent simultanément, et l'équation précédente, laisse subsister une indétermination sur les coefficients correspondants puisque $G(\nu_1, \nu_2, \nu_3) = G(\nu_1, \nu_2, -\nu_3)$;

en fait, cette indétermination peut être levée de façon arbitraire, car nous verrons que nous n'aurons jamais à distinguer les représentations (v_1, v_2, v_3) et $(v_1, v_2, -v_3)$. Les résultats ont été portés dans le tableau VI, pour les seules représentations apparaissant dans $(d+\delta)^3$

$$c) \underline{\text{Coefficients } ((d+\delta)^{N-1} \bar{v} \bar{S} + (d+\delta)) \} (d+\delta)^N v S}.$$

Nous avons utilisé pour calculer ces coefficients une méthode en analogie parfaite avec celle valable pour les configurations d'électrons équivalents l^N . Il n'est d'ailleurs plus nécessaire de réduire le problème à celui des configurations $(d+\delta)^N$ et nous considérons plus généralement les coefficients $((l+l')^N \bar{v} \bar{S} + (l+l')) \} (l+l')^N v S$. L'idée de base de cette méthode, décrite en grand détail dans le livre de Judd¹¹ pour les électrons équivalents, est de calculer les éléments de matrice d'opérateurs dont les valeurs propres sont déjà connues, et qui fournissent ainsi les relations entre les CPF; en outre ces opérateurs doivent être choisis tels que l'on puisse éviter l'introduction des coefficients précédents, c'est-à-dire, tels que leurs valeurs propres soient indépendantes de L. Par exemple nous pouvons choisir les opérateurs à deux particules parfaitement scalaires :

$$\Gamma = 2 \sum_{i>j} \mathbf{A}_i \cdot \mathbf{A}_j \quad \text{et} \quad \Gamma' = \bar{\Gamma} + \frac{1}{2} \Gamma$$

$$\text{où } \bar{\Gamma} = (l+l') G(R_{2(l+l'+1)}) - 2N \frac{(2l+2l'+1)}{8}.$$

L'opérateur Γ nous fournit la relation suivante :

$$S(S+1) - \frac{3}{4} N = \frac{N}{N-2} \sum_{\bar{v} \bar{S}} ((l+l')^{N-1} \bar{v} \bar{S} + (l+l')) \} (l+l')^N v S)^2 [\bar{S}(\bar{S}+1) - \frac{3}{4} (N-1)],$$

TABLEAU VI

$$(\overline{W} \overline{V} + \overline{E} | \overline{W} \overline{V})$$

\overline{W}	(000)	(110)	(110)	(200)	(200)	(200)
\overline{V}	(00)	(10)	(11)	(00)	(10)	(20)
\overline{E}	0	2	0	2	0	2
$\overline{W} \overline{V}$	1	0	0	0	0	0
(100) (00)	0	0	0	$(1/4)^{1/2}$	0	$-(3/4)^{1/2}$
(10)	0	1	0	0	0	0
(210) (10)	0	$-(1/5)^{1/2}$	0	$(4/5)^{1/2}$	0	$-(15/100)^{1/2}$
(11)	0	$-(4/5)^{1/2}$	0	$(1/5)^{1/2}$	0	$-(48/75)^{1/2}$
(20)	0	0	0	$(1/3)^{1/2}$	$(2/3)^{1/2}$	0
(21)	0	0	0	0	0	1
(111) (11)	0	0	0	0	0	0
(11-1) (11)	0	0	0	$-(1/3)^{1/2}$	$(1/6)^{1/2}$	$-(1/3)^{1/2}$
(111) (11)	0	0	0	$(1/3)^{1/2}$	$(1/2)^{1/2}$	$(2/3)^{1/2}$
(11-1) (11)	0	0	0	$-(1/3)^{1/2}$	$(1/6)^{1/2}$	$(1/2)^{1/2}$

et l'expression des valeurs propres de Γ' permet d'écrire :

$$\begin{aligned} & \nu (4(\ell + \ell') + 6 - \nu) - N(4\ell + 4\ell' + 5) \\ &= \frac{N}{N-2} \sum_{\bar{\nu}, \bar{S}} ((\ell + \ell')^{N-1} \bar{\nu} \bar{S} + (\ell + \ell')) \{ (\ell + \ell')^N \nu S \}^2 [\bar{\nu}(4(\ell + \ell') + 6 - \nu) - (N-1)(4\ell + 4\ell' + 5)] \end{aligned}$$

Si nous tenons compte du fait que pour ν et S donnés, il existe au plus quatre coefficients correspondant à $\bar{S} = S \pm 1/2$ et $\bar{\nu} = \nu \pm 1$, ces deux relations associées à la relation de normalisation permettent de calculer les carrés des coefficients $((\ell + \ell')^N \bar{\nu} \bar{S} + (\ell + \ell')) \{ (\ell + \ell')^N \nu S \}$; plus précisément, on obtient pour les configurations $(d + \delta)^N$:

$$\begin{aligned} ((d + \delta)^{N-1} \nu - 1 S - \frac{1}{2} + (d + \delta)) \{ (d + \delta)^N \nu S \}^2 &= \frac{(14 - N - \nu)(\nu + 2S + 2)S}{2N(7 - \nu)(2S + 1)}, \\ ((d + \delta)^{N-1} \nu - 1 S + \frac{1}{2} + (d + \delta)) \{ (d + \delta)^N \nu S \}^2 &= \frac{(14 - N - \nu)(\nu - 2S)(S + 1)}{2N(7 - \nu)(2S + 1)}, \\ ((d + \delta)^{N-1} \nu + 1 S - \frac{1}{2} + (d + \delta)) \{ (d + \delta)^N \nu S \}^2 &= \frac{(N - \nu)(16 - \nu + 2S)S}{2N(7 - \nu)(2S + 1)}, \\ ((d + \delta)^{N-1} \nu + 1 S + \frac{1}{2} + (d + \delta)) \{ (d + \delta)^N \nu S \}^2 &= \frac{(N - \nu)(14 - \nu - 2S)S}{2N(7 - \nu)(2S + 1)}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Ces équations laissent évidemment subsister le problème des phases à associer aux coefficients considérés. Puisque nous disposons seulement d'un facteur de phases pour tous les CPF d'un état $|(d + \delta)^N \mathcal{W} \mathcal{V} \nu S L\rangle$, les phases ne sont plus indépendantes de celles choisies pour les coefficients $(\bar{\mathcal{W}} \bar{\mathcal{V}} \bar{L} + (100) \bar{\nu} \bar{\ell} | \mathcal{W} \mathcal{V} L)$. Suivant Racah⁶, nous choisissons les phases suivantes pour les coefficients $((d + \delta)^{N-1} \nu S + (d + \delta)) \{ (d + \delta)^N \nu S \}$:

$$\begin{aligned} & (-1)^{\bar{S}} \quad \text{si } \nu \text{ est impair} \\ & (-1)^{\bar{S} + \frac{1}{2}(\bar{\nu} - \nu)} \quad \text{si } \nu \text{ est pair;} \end{aligned}$$

Les phases des autres coefficients tabulés dans les tableaux V et VI ont été déterminées de façon cohérente avec ce choix. Les CPF de $(d+\Delta)^3$ ont été portés dans le tableau VII.

Remarquons que les CPF ainsi définis sont différents de ceux calculés par Meskhov²⁵ dont la classification des états des configurations $(l+l')^N$ conserve la donnée des nombres respectifs d'électrons l et d'électrons l' .

SECONDE QUANTIFICATION

Les méthodes de la seconde quantification se sont révélées extrêmement fructueuses dans des domaines aussi variés que la supraconductivité et les forces de paires intranucléaires; leur application à la théorie du modèle en couches du noyau a été la source d'un grand nombre de travaux mais ce n'est que très récemment qu'une adaptation particulière à la spectroscopie atomique en a été faite par Judd¹⁰. Les progrès apportés par la seconde quantification proviennent principalement de l'utilisation des opérateurs annihilation-crédation, et du caractère tensoriel qui peut leur être attaché. La définition de l'opérateur quasi-spin permet en outre d'examiner de façon simple des propriétés qui dépendent du nombre d'électron, et la détermination des opérateurs effectifs qui rendent compte des effets d'un ordre de perturbation donné est grandement simplifiée par le fait qu'il est possible, dans ce formalisme, de ne pas préciser les états perturbateurs. Nous avons appliqué l'ensemble de ces propriétés à l'étude des configurations $(l + l')^N$ et nous rappelons ci-dessous les définitions et les résultats les plus importants de Judd que nous avons utilisés dans cette étude.

I OPERATEURS ANNIHILATION-CREATION

Les opérateurs annihilation-crédation permettent d'exprimer sous forme opérationnelle les propriétés caractéristiques des fonctions

d'onde . Soit en effet un état déterminantal à N électrons normalisé $\{\alpha\beta \dots \nu\}$, où chaque lettre grecque représente un ensemble de quatre nombres quantiques $(n \ell m_s m_l)$; les opérateurs créations $a_\alpha^+, a_\beta^+, \dots, a_\nu^+$ et annihilation $a_\nu, \dots, a_\beta, a_\alpha$ sont définis par les équations suivantes :

$$\begin{aligned} a_\alpha^+ a_\beta^+ \dots a_\nu^+ |0\rangle &\equiv \{\alpha, \beta, \dots \nu\} \\ (0| a_\nu \dots a_\beta a_\alpha &\equiv \{\alpha, \beta, \dots \nu\}^* \end{aligned} \quad (3.1)$$

où $|0\rangle$ représente l'état vide. Les propriétés bien connues des déterminants, et l'orthonormalité des états déterminantaux conduisent pour les opérateurs annihilation-crédation aux relations d'anticommutation suivantes:

$$\begin{aligned} a_\xi^+ a_\eta^+ + a_\eta^+ a_\xi^+ &= 0, \\ a_\xi a_\eta + a_\eta a_\xi &= 0, \\ a_\eta a_\xi^+ + a_\xi^+ a_\eta &= \delta(\xi, \eta); \end{aligned}$$

et aussi, à l'équation : $a_\eta |0\rangle = 0$. (3.2)

Les opérateurs à une et deux particules, $F = \sum_i f_i$ et $G = \sum_{i>j} g_{ij}$, qui apparaissent dans l'hamiltonien habituel de l'atome peuvent être exprimés à partir des opérateurs annihilation-crédation de la façon suivante :

$$F = \sum_{\xi, \eta} a_\xi^+ (\xi | f | \eta) a_\eta, \quad (3.3)$$

$$G = \frac{1}{2} \sum_{\xi, \eta, \zeta, \lambda} a_\xi^+ a_\eta^+ (\xi_1 \eta_2 | g_{12} | \zeta_1 \lambda_2) a_\lambda a_\zeta, \quad (3.4)$$

et le procédé se généralise aux opérateurs à trois particules, par exemple, pour lesquels on obtient :

$$T = \sum_{i \neq j \neq k} g_{ijk} = \sum_{\substack{\xi \eta \lambda \\ \zeta \kappa \epsilon}} a_\xi^+ a_\eta^+ a_\lambda^+ (\xi_1 \eta_2 \lambda_3 | g_{123} | \zeta_1 \kappa_2 \epsilon_3) a_\epsilon a_\kappa a_\zeta. \quad (3.5).$$

II CAPACTERE TENSORIEL DES OPERATEURS ANNIHILATION-CREATION

Le caractère tensoriel des opérateurs annihilation-crédation a été mis clairement en évidence par Judd¹⁰. Plus précisément, les relations de commutation des opérateurs a_{σ}^+ ($\sigma \equiv n \ell m_s m_l$) relativement aux opérateurs moments angulaires S et L montrent que pour n et ℓ donnés les $[s][l]$ opérateurs a_{σ}^+ ($-s \leq m_s \leq s; -l \leq m_l \leq l$) forment les composantes d'un tenseur double a^+ de rangs respectifs $s = \frac{1}{2}$ et l , relativement à l'espace de spin et à l'espace d'orbite. Il en est de même des $[s][l]$ opérateurs \tilde{a}_{σ} définis à partir des opérateurs annihilation d'un électron ($n\ell$), a_{ξ} , par la relation :

$$\tilde{a}_{\sigma} = (-1)^{\alpha} a_{\xi}$$

où $\sigma \equiv n \ell m_s m_l$, $\alpha \equiv s + l - m_s - m_l$ et $\xi \equiv n \ell -m_s -m_l$; le tenseur double correspondant est noté a . Pour des raisons de commodité, nous pouvons convenir d'extraire n et l de l'ensemble des nombres quantiques représentés par une lettre grecque et d'attribuer à chaque couple $(n \ell)$ particulier une lettre latine; a pour $(n_a \ell_a)$ et b pour $(n_b \ell_b)$ par exemple.

Les tenseurs a^+ et b ayant des rangs bien déterminés nous pouvons les coupler en utilisant les règles habituelles de l'algèbre tensorielle; plus précisément nous pouvons écrire :

$$(a^+ b)_{\pi q}^{(\kappa k)} = \sum_{\xi \eta} (\Delta m_{s\xi} \Delta m_{s\eta} | \Delta s \kappa \pi) (l_a m_{l\xi} l_b m_{l\eta} | l_a l_b k q) a_{\xi}^+ \tilde{b}_{\eta};$$

et le théorème de Wigner-Eckart permet d'écrire le second membre de cette équation comme :

$$-\sum_{\xi\eta} a_{\xi}^{+} (l_a \xi | w_{\eta q}^{(xk)}(l_a, l_b) | l_b \eta) a_{\eta} \equiv -W_{\eta q}^{(xk)}(l_a, l_b),$$

où les opérateurs $W_{\eta q}^{(xk)}(l_a, l_b)$ sont ceux qui ont été définis précédemment.

Nous obtenons ainsi l'équivalence suivante :

$$(a^{+} b)^{(xk)} \equiv -W^{(xk)}(l_a, l_b), \quad (3.6)$$

qui peut être regardée comme la généralisation de l'équation de Judd :

$$(a^{+} a)^{(xk)} \equiv -W^{(xk)}.$$

Les éléments de matrice réduits des tenseurs a^{+} et a à l'intérieur des configurations d'électrons équivalents l^N ont été reliés par Judd¹⁰ aux coefficients de parenté fractionnelle ($l^{N-1} \bar{\zeta} \bar{S} \bar{L} + l \} l^N \tau S L$); par une méthode très semblable nous avons pu obtenir les équations suivantes où les symboles a et b sont relatifs aux électrons $(n l)$ et $(n' l')$:

$$((l+l')^N \tau S L \| a^{+} \| (l+l')^{N-1} \bar{\zeta} \bar{S} \bar{L}) = (-1)^N N^{1/2} [S][L]^{1/2} ((l+l')^N \tau S L \| (l+l')^{N-1} \bar{\zeta} \bar{S} \bar{L} + l),$$

$$((l+l')^{N-1} \bar{\zeta} \bar{S} \bar{L} \| b \| (l+l')^N \tau S L) = (-1)^{N+\bar{S}-S+l'-L+\bar{L}} ((l+l')^{N-1} \bar{\zeta} \bar{S} \bar{L} + l \} (l+l')^N \tau S L), \quad (3.7)$$

tout à fait analogues,

et celles obtenues en permutant simultanément les symboles a, b et l, l' .

Le fait d'avoir identifié les éléments de matrice réduits des opérateurs annihilation-crédation aux coefficients de parenté

fractionnelle permet de déterminer dans un formalisme purement tensoriel toutes les formules où apparaissent des CPF. Considérons à titre d'exemple le tenseur double : $(a^+ b)^{(\kappa k)}$, équivalent à $-W^{(\kappa k)}(l_a, l_b)$; l'équation (7.I.I.) d'Edmonds²⁶ permet immédiatement d'écrire :

$$\begin{aligned}
 & -((l+l')^N \tau_{SL} \| (a^+ b)^{(\kappa k)} \| (l+l')^N \tau'_{S'L'}) = \\
 & \{ [L][k] \}^{1/2} (-1)^{L+S+\kappa+S'+L+k+L'} \sum_{\bar{L} \bar{S} \bar{L}} \begin{Bmatrix} \delta & \kappa & \delta \\ S & \bar{S} & S' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_b & k & l_a \\ L & \bar{L} & L' \end{Bmatrix} \\
 & ((l+l')^N \tau_{SL} \| a^+ \| (l+l')^{N-1} \bar{L} \bar{S} \bar{L}) ((l+l')^{N-1} \bar{L} \bar{S} \bar{L} \| b \| (l+l')^N \tau'_{S'L'});
 \end{aligned}$$

si l'on remplace les éléments de matrice réduits des tenseurs a^+ et b par les CPF correspondants on obtient l'équation suivante :

$$\begin{aligned}
 & ((l+l')^N \tau_{SL} \| W^{(\kappa k)}(l_a, l_b) \| (l+l')^N \tau'_{S'L'}) = \\
 & N \sum_{\bar{L} \bar{S} \bar{L}} ((l+l')^{N-1} \bar{L} \bar{S} \bar{L} + l_b) \| (l+l')^N \tau'_{S'L'} \| ((l+l')^N \tau_{SL} \| (l+l')^{N-1} \bar{L} \bar{S} \bar{L} + l_a) \\
 & \times (-1)^{\bar{L} + \bar{S} + l_b + \delta + L + S + k + \kappa} \{ [L][L'] [S][S'] [k][\kappa] \}^{1/2} \\
 & \times \begin{Bmatrix} \delta & \kappa & \delta \\ S & \bar{S} & S' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_b & k & l_a \\ L & \bar{L} & L' \end{Bmatrix} .
 \end{aligned}$$

On retrouve ainsi, en utilisant uniquement les propriétés des opérateurs tensoriels, l'équation (2.II) établie précédemment.

III QUASI-SPIN

L'idée fondamentale qui a conduit à l'introduction de l'opérateur quasi-spin est de trouver un opérateur qui permette de considérer les opérateurs annihilation-crédation comme deux aspects d'une même entité. Par analogie avec les résultats de Judd¹⁰, Flowers et Szpikowski²⁷, nous avons défini les opérateurs suivants, où les symboles

a et b sont relatifs à présent aux électrons (nl) et $(n'l')$:

$$\begin{aligned} Q_+ &= \frac{1}{2} [\Delta]^{1/2} \left\{ [l]^{1/2} (a^\dagger a^\dagger)^{(00)} + [l']^{1/2} (b^\dagger b^\dagger)^{(00)} \right\}, \\ Q_- &= -\frac{1}{2} [\Delta]^{1/2} \left\{ [l]^{1/2} (a a)^{(00)} + [l']^{1/2} (b b)^{(00)} \right\}, \quad (3.8) \\ Q_3 &= -\frac{1}{4} [\Delta]^{1/2} \left\{ [l]^{1/2} [(a^\dagger a)^{(00)} + (a a^\dagger)^{(00)}] + [l']^{1/2} [(b^\dagger b)^{(00)} + (b b^\dagger)^{(00)}] \right\}. \end{aligned}$$

Les relations d'anticommuation entre les opérateurs annihilation et création permettent de démontrer les équations suivantes :

$$\begin{aligned} [Q_+, Q_-] &= 2Q_3, \\ [Q_3, Q_+] &= Q_+, \\ [Q_3, Q_-] &= -Q_-, \end{aligned} \quad (3.9)$$

qui sont formellement identiques aux relations de commutation entre les composantes S_3, S_+ et S_- du spin total \mathbf{S} ; on dit par analogie que Q_3, Q_+ et Q_- forment les composantes du quasi-spin \mathbf{Q} .

L'équivalence (3.6) permet de calculer sans difficultés les valeurs propres des opérateurs $(a^\dagger a)^{(00)}$ et $(b^\dagger b)^{(00)}$ et les relations d'anticommuation conduisent à l'équation suivante, établie par Judd :

$$(a a^\dagger)^{(00)} - (a^\dagger a)^{(00)} = [\Delta]^{1/2} [l]^{1/2}$$

Il s'ensuit que les valeurs propres M_Q de Q_3 peuvent être écrites :

$$M_Q = -1/2 [2(l+l'+1) - N] \quad (3.10)$$

La v -aleur maximum de M_Q est trouvée quand $N = \nu$, et par conséquent :

$$Q = 1/2 [2(l+l'+1) - \nu]. \quad (3.11)$$

Il semble donc que le quasi-spin ne soit qu'une autre façon de regarder la séniorité puisque la donnée de (Q, M_Q) est équivalente à celle de (ν, N) ; cependant, ce formalisme présente un grand avantage, relativement à la séniorité, du fait de son caractère opérationnel qui permet

d'examiner les propriétés des états et des opérateurs dans l'espace de quasi-spin à l'aide des techniques habituelles de l'algèbre tensorielle.

Il est possible de préciser le caractère tensoriel du formalisme quasi-spin. En effet, les résultats de Lawson et Mac Farlane²⁸ permettent de montrer que les $[\Delta] [\ell]$ composantes de \mathbf{a}^+ et les $[\Delta] [\ell]$ composantes de \mathbf{a} forment ensemble les $[q] [\Delta] [\ell]$ composantes d'un tenseur triple $\mathbf{a}^{(q\Delta\ell)}$ où $q = 1/2$. Les procédés habituels de couplage peuvent être étendus sans difficultés et nous définissons le tenseur composé suivant :

$$\chi^{(k_1 k_2 k_3)}_{(\ell_1, \ell_2)} = (\mathbf{a}^{(q\Delta\ell_2)} \mathbf{b}^{(q\Delta\ell_1)})^{(k_1 k_2)} \quad (3.12)$$

Le quasi-spin, le spin et le moment orbital peuvent être exprimés à partir de ces tenseurs triples; plus précisément :

$$\begin{aligned} Q &= -1/2 \{ [\ell]^{1/2} \chi^{(100)}(\ell, \ell) + [\ell']^{1/2} \chi^{(100)}(\ell', \ell') \} \\ S &= -1/2 \{ [\ell]^{1/2} \chi^{(010)}(\ell, \ell) + [\ell']^{1/2} \chi^{(010)}(\ell', \ell') \} \\ L &= - \left[\{ \ell(\ell+1)(2\ell+1)/3 \}^{1/2} \chi^{(001)}(\ell, \ell) \right. \\ &\quad \left. + \{ \ell'(\ell'+1)(2\ell'+1)/3 \}^{1/2} \chi^{(001)}(\ell', \ell') \right], \quad (3.13) \end{aligned}$$

résultat qui établit la correspondance étroite entre spin et quasi-spin.

Comme nous l'avons déjà signalé, le formalisme quasi-spin permet par application du théorème de Wigner-Eckart d'exprimer de façon simple la dépendance sur N des éléments de matrice réduits

des opérateurs tensoriels. En particulier, si un certain opérateur tensoriel T possède un rang déterminé K par rapport au quasi-spin, ce théorème permet immédiatement d'écrire la relation suivante :

$$\frac{((l+l')^N \psi \parallel T \parallel (l+l')^N \psi')}{((l+l')^v \psi \parallel T \parallel (l+l')^N \psi')} = (-1)^{\frac{N}{2}-v} \frac{\begin{pmatrix} \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-v] & K & \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-v] \\ \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-N] & 0 & \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-N] \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-v] & K & \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-v] \\ \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-v] & 0 & \frac{1}{2}[2(l+l'+1)-v] \end{pmatrix}} \quad (3.14)$$

Ce résultat peut être regardé comme une généralisation des équations obtenues par Judd dans le paragraphe 8 de la référence 10.

Nous en montrerons toute l'importance dans l'étude des propriétés de symétrie des opérateurs à 2 et 3 particules pour les configurations $(d+s)^N$.

IV GROUPES

Les $8(l+l'+1)$ opérateurs a_{ξ}^+ , a_{η} , b_{ξ}^+ , et b_{σ} ne forment pas les opérateurs infinitésimaux d'un groupe de Lie; cependant il n'en est plus de même si nous leur adjoignons les $4(l+l'+1)(8l+8l'+7)$ commutateurs non nuls qui peuvent être construits à partir de ces opérateurs. Parmi ces $4(l+l'+1)(8l+8l'+9)$ opérateurs, les $4(l+l'+1)$ commutateurs :

$$H_{\xi} = \frac{1}{2} [a_{\xi}^+, a_{\xi}] \quad \text{et} \quad H_{\sigma} = \frac{1}{2} [b_{\sigma}^+, b_{\sigma}]$$

commutent avec eux-mêmes, et correspondent aux opérateurs abstraits

H de Weyl définis dans la première partie; ils permettent en conséquence de trouver la figure des racines du groupe considéré, et celle-ci nous

a conduit à identifier ce groupe au groupe des rotations dans un espace à $(8l+8l'+9)$ dimensions : $R_{8(l+l'+9)}$. Les $4(l+l'+1)$ $(8l+8l'+7)$ commutateurs considérés précédemment vérifient également la condition fondamentale de Lie et en conséquence constituent les opérateurs infinitésimaux d'un sous-groupe de $R_{8(l+l'+9)}$ qui admet les mêmes opérateurs H que ce dernier; ce groupe est le groupe des rotations dans un espace en $8(l+l'+1)$ dimensions : $R_{8(l+l'+1)}$. Il est clair d'après l'équivalence (3.12) que les opérateurs de ce groupe peuvent être exprimés comme des combinaisons linéaires des tenseurs triples $X^{(K\kappa k)}(l_2, l'_2)$ où l_2 et l'_2 sont identiques à l ou l' . En fait, seuls interviennent les tenseurs $X^{(K\kappa k)}(l, l)$ et $X^{(K\kappa k)}(l', l')$ pour lesquels $K+\kappa+k$ est impair, ainsi que les tenseurs $X^{(K\kappa k)}(l, l') - (-1)^{K+\kappa+k} X^{(K\kappa k)}(l', l)$, linéairement indépendants, ces tenseurs peuvent être regardés comme les opérateurs infinitésimaux de $R_{8(l+l'+1)}$. Nous pouvons isoler parmi ces opérateurs les $16(l+l'+1)^2$ qui correspondent à une projection nulle de K ; le calcul montre qu'ils forment les opérateurs infinitésimaux d'un groupe pouvant être identifié à : $U_{4(l+l'+1)}$. Une autre décomposition peut être également réalisée; en effet, nous pouvons ne considérer que les opérateurs:

$$\{[l] + [l']\}^{-1/2} \left\{ [l]^{1/2} X^{(100)}(l, l) + [l']^{1/2} X^{(100)}(l', l') \right\},$$

$$X^{(0\kappa k)}(l, l), X^{(0\kappa k)}(l', l') \quad (\kappa+k, \text{impair})$$

$$\text{et } \left[X^{(0\kappa k)}(l, l') - (-1)^{\kappa+k} X^{(0\kappa k)}(l', l) \right];$$

ils constituent les opérateurs infinitésimaux du produit direct

$$SU_2 \times Sp_{4(l+l'+1)},$$

et cette décomposition permet d'obtenir l'association entre quasi-spin et symétrie symplectique. Bien d'autres réductions peuvent encore être envisagées, mais nous ne considérons ici que les deux précédentes qui peuvent être poursuivies à l'aide des résultats obtenus dans la partie précédente; nous les écrivons :

$$\begin{aligned} R_{8(l+l')+9} &\supset R_{8(l+l'+1)} \supset U_{4(l+l'+1)}, \\ R_{8(l+l')+9} &\supset R_{8(l+l'+1)} \supset SU_2 \times Sp_{4(l+l'+1)} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Parmi les opérateurs infinitésimaux du groupe $R_{8(l+l')+9}$ se trouvent tous les opérateurs création de la couche $l+l'$, en conséquence, l'ensemble des états de toutes les configurations $(l+l')^N$ ($0 \leq N \leq 4(l+l'+1)$) peut être regardé comme la base d'une représentation de $R_{8(l+l')+9}$; on peut montrer que le poids maximum de cette représentation est $(1/2, 1/2, \dots, 1/2)$, et par conséquent, que cette dernière est irréductible. Dans la réduction, $R_{8(l+l')+9} \supset R_{8(l+l'+1)}$, cette représentation se décompose en deux représentations irréductibles $(1/2, 1/2, \dots, 1/2)$ et $(1/2, 1/2, \dots, -1/2)$. La première contient tous les états de toutes les configurations pour lesquelles N est pair, la seconde, tous les états de toutes les configurations pour lesquelles N est impair. La suite des réductions écrites précédemment peut être facilement obtenue à partir des résultats de la seconde partie.

L'ensemble des notions introduites dans cette partie et les résultats que nous y avons énoncés n'apportent aucun élément nouveau quant à la classification des termes des configurations $(l+l')^N$ puisque de ce point de vue quasi-spin et séniorité sont équivalents, mais il

n'en sera plus de même dans la classification des opérateurs agissant entre ces états, puisque la connaissance des propriétés de ceux-ci relativement au quasi-spin permet de trouver la dépendance sur N de leurs éléments de matrice.

SYMETRIE DES OPERATEURS A UNE, DEUX ET TROIS
PARTICULES POUR LES CONFIGURATIONS $(d+\Delta)^N$

Nous avons montré dans les parties précédentes que l'ensemble des concepts introduits par l'intermédiaire de la théorie des groupes de Lie, dans l'étude des configurations d'électrons équivalents l^N , peut être généralisé aux configurations mélangées $(l+l')^N$. Il est possible, en particulier, de classer les différents états (S, L) de ces configurations à l'aide des représentations irréductibles des groupes $R_{2(l+l'+1)}$ et $R_{2l+1} \times R_{2l'+1}$; l'étude du groupe symplectique en $4(l+l'+1)$ dimensions nous a permis d'introduire le concept de séniorité, et la définition d'un opérateur quasi-spin généralisé nous a conduits à appliquer une seconde quantification. Nous nous proposons dans cette partie d'appliquer l'ensemble de ces résultats au cas particulier des configurations $(d+\Delta)^N$ et d'étudier les propriétés de symétrie, dans les différents groupes considérés, des principales interactions que l'on peut rencontrer à l'intérieur de ces configurations. Cette étude nous a tout d'abord conduite à établir une correspondance entre les opérateurs monoélectroniques $w^{(xk)}(l_a, l_b)$ et les états (S, L) de la configuration $(d+\Delta)^2$; cette correspondance nous a permis immédiatement de préciser les propriétés de symétrie des opérateurs à une particule, et en particulier du couplage spin-orbite. Nous avons ensuite examiné le cas des opérateurs de l'interaction coulombienne, et calculé les coefficients de Clebsh-Gordan nécessaires

à la construction des opérateurs à deux particules, parfaitement scalaires et possédant des propriétés de symétrie bien définies. Afin de permettre une comparaison précise entre les résultats désormais classiques de Racah et notre propre calcul, nous avons exprimé les états (S, L) des configurations $(d + \Delta)^N$ comme combinaisons linéaires de fonctions $|d^N \nu SL\rangle$, $|d^{N-1} \nu' S' L', \Delta, \nu SL\rangle$ et $|d^{N-2} \Delta^2 \nu SL\rangle$.

Les nombreuses relations que nous avons obtenues entre les divers éléments de matrice des opérateurs de l'interaction coulombienne nous ont permis d'exprimer l'ensemble de ceux-ci à partir d'un nombre restreint de coefficients et par là, de démontrer l'intérêt que peuvent présenter les résultats établis dans les parties précédentes. Là était le but de cette première étude pour laquelle nous avons choisi en conséquence un problème simple et bien connu avant d'aborder d'autres applications d'un intérêt actuel plus important mais également d'une complexité plus grande. Parmi celles-ci, nous avons retenu les effets des interactions de configurations lointaines sur les configurations

$(d + \Delta)^N$. Nous avons tout d'abord montré que dans une théorie paramétrique, ces effets peuvent être représentés dans l'approximation de second ordre au moyen d'opérateurs effectifs à deux et trois particules que nous avons déterminés. Ces résultats qui sont en parfaite analogie avec ceux valables pour les configurations d'électrons équivalents, ^{10,29,30,31} ont été obtenus par l'emploi de la seconde quantification et de ses représentations graphiques. Nous avons ensuite étudié les propriétés de symétrie des opérateurs à trois particules à l'intérieur des configurations $(d + \Delta)^N$ dans les opérations des groupes R_5 et R_6 .

la symétrie symplectique (Sp_{12}) et l'espace de quasi-spin ont été également examinés, et finalement l'ensemble de ces résultats a permis de montrer que l'interaction effective à trois particules peut être représentée pour les configurations $(d+\Delta)^N$ au moyen de cinq paramètres additionnels seulement. Nous avons ainsi montré qu'il est possible d'envisager une étude paramétrique des configurations $(d + \Delta)^N$, qui sans introduire un nombre de paramètres trop élevé serait parfaitement cohérente avec l'approximation du second ordre de la théorie du champ central.

I SYMETRIE DES OPERATEURS A UNE PARTICULE

Aussi bien pour l'interaction coulombienne que pour les interactions effectives à trois particules, les opérateurs de base monoélectroniques sont tous de la forme :

$$W^{+(xk)}(l_a, l_b) = W^{(xk)}(l_a, l_b) + (-1)^{x+k} W^{(xk)}(l_b, l_a).$$

Pour définir les propriétés de transformation de ces opérateurs, il suffit d'étudier leurs relations de commutation avec les opérateurs infinitésimaux des groupes R_{2l+1} , $R_{2l'+1}$, $R_{2(l+l'+1)}$, et $Sp_4(l+l'+1)$; Ces opérateurs infinitésimaux sont tous de la forme :

$$W^{-(xk)}(l_a, l_b) = W^{(xk)}(l_a, l_b) - (-1)^{x+k} W^{(xk)}(l_b, l_a),$$

et l'équation (2.2.) permet de montrer sans difficulté la relation suivante :

$$\begin{aligned}
& \left[W_{\pi_1 q_1}^{-(\chi_1 k_1)}(l_a, l_b), W_{\pi_2 q_2}^{+(\chi_2 k_2)}(l_c, l_d) \right] = \sum_{\chi_3 \pi_3 k_3 q_3} (-1)^{1+\chi_3+k_3-\pi_3-q_3} \{[\chi_1][\chi_2][\chi_3]\}^{1/2} \\
& \{[k_1][k_2][k_3]\}^{1/2} \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 & \chi_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \chi_1 & \chi_2 & \chi_3 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \\
& \left[\delta(l_b, l_c) (-1)^{l_a+l_d+\chi_1+\chi_2+k_1+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_d & l_a & l_b \end{Bmatrix} W_{\pi_3 q_3}^{+(\chi_3 k_3)}(l_a, l_d) \right. \\
& + \delta(l_b, l_d) (-1)^{l_c+l_a+\chi_1+k_1} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_c & l_a & l_b \end{Bmatrix} W_{\pi_3 q_3}^{+(\chi_3 k_3)}(l_a, l_c) - \delta(l_a, l_d) (-1)^{l_b+l_c} \\
& \left. \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_c & l_b & l_a \end{Bmatrix} W_{\pi_3 q_3}^{+(\chi_3 k_3)}(l_b, l_c) - \delta(l_a, l_c) (-1)^{l_b+l_d+\chi_2+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_d & l_b & l_a \end{Bmatrix} W_{\pi_3 q_3}^{+(\chi_3 k_3)}(l_b, l_d) \right] \quad (4.1)
\end{aligned}$$

Si maintenant nous définissons les fonctions d'onde $|l_a l_b S M_S L M_L\rangle^*$ par la relation: $|l_a l_b S M_S L M_L\rangle^* = (-1)^{l_b} |l_a l_b S M_S L M_L\rangle$, où $|l_a l_b S M_S L M_L\rangle$ est un état antisymétrisé de la configuration $(l + l')^2$, on peut montrer à l'aide du théorème de Wigner-Eckart que :

$$\begin{aligned}
& \bar{W}_{\pi_1 q_1}^{(\chi_1 k_1)}(l_a, l_b) |l_c l_d \chi_2 \pi_2 k_2 q_2\rangle^* = \sum_{\chi_3 k_3 \pi_3 q_3} (-1)^{1+\chi_3+k_3-\pi_3-q_3} \\
& \begin{Bmatrix} \chi_1 & \chi_2 & \chi_3 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 & \chi_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} \{[\chi_1][\chi_2][\chi_3][k_1][k_2][k_3]\}^{1/2} \\
& \left[\delta(l_b, l_c) (-1)^{l_a+l_d+\chi_1+\chi_2+k_1+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_d & l_a & l_b \end{Bmatrix} |l_a l_d \chi_3 \pi_3 k_3 q_3\rangle^* \right. \\
& + \delta(l_b, l_d) (-1)^{l_c+l_a+\chi_1+k_1} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_c & l_a & l_b \end{Bmatrix} |l_a l_c \chi_3 \pi_3 k_3 q_3\rangle^* \\
& - \delta(l_a, l_d) (-1)^{l_c+l_b} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_c & l_b & l_a \end{Bmatrix} |l_b l_c \chi_3 \pi_3 k_3 q_3\rangle^* \\
& \left. - \delta(l_a, l_c) (-1)^{l_d+l_b+\chi_2+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ l_d & l_b & l_a \end{Bmatrix} |l_b l_d \chi_3 \pi_3 k_3 q_3\rangle^* \right] \quad (4.2)
\end{aligned}$$

La comparaison de ces deux équations montre immédiatement l'identité des coefficients respectifs de $|l_a l_b \kappa \pi k q\rangle^*$ et de $W_{\pi q}^{+(\kappa k)}(l_a, l_b)$ et nous pouvons affirmer que $W_{\pi q}^{+(\kappa k)}(l_a, l_b)$ se transforme comme $(-1)^{l_b} |l_a l_b \kappa \pi k q\rangle$. Dans le cas particulier des configurations $(d+\Delta)^N$, il suffit donc de classer les états de $(d+\Delta)^2$ et de les exprimer comme combinaisons linéaires des états des configurations d^2 , $d\Delta$ et Δ^2 pour atteindre les propriétés de transformation des opérateurs $W_{\pi q}^{+(\kappa k)}(l_a, l_b)$. Les résultats ont été portés dans le tableau VIII. Les propriétés de transformation des opérateurs à une particule agissant sur un système à N électrons $W_{\pi q}^{+(\kappa k)}(l_a, l_b)$ sont évidemment les mêmes que celles des opérateurs monoélectroniques, et en particulier le tableau VIII montre que l'interaction spin-orbite uniquement relative aux électrons d , se transforme comme $(110)(11)_2^3 P_0$; cette propriété est cependant sans grand intérêt, car les interactions à une particule ne peuvent évidemment connecter les configurations d^N , $d^{N-1}\Delta$, et $d^{N-2}\Delta^2$, et en conséquence, les avantages de la méthode disparaissent.

II SYMETRIE DES OPERATEURS DE L'INTERACTION COULOMBIENNE

L'interaction coulombienne \mathcal{H}_1 entre les différents états des configurations $(d+\Delta)^N$ peut être écrite à l'aide des opérateurs $W_{\pi q}^{+(\kappa k)}(l_a, l_b)$ définis précédemment. Plus précisément, \mathcal{H}_1 prend la forme suivante :

TABLEAU VIII

${}^1_0(00)$	(00)	$6^{-1/2} \{ 5^{1/2} d^2 \ 1S\rangle + d^2 \ 1S\rangle \}$	$6^{-1/2} \{ 5^{1/2} W^{(00)}(d,d) + W^{(00)}(d,d) \}$
${}^3_2(110)$	(11)	$ d^2 \ 3P\rangle$	$W^{(11)}(d,d)$
		$ d^2 \ 3F\rangle$	$W^{(13)}(d,d)$
	(10)	$ d\ d, \ 3D\rangle$	$2^{-1/2} \{ W^{(12)}(d,d) - W^{(12)}(d,d) \}$
(200)	(00)	$6^{-1/2} \{ d^2 \ 1S\rangle - 5^{1/2} d^2 \ 1S\rangle \}$	$6^{-1/2} \{ W^{(00)}(d,d) - 5^{1/2} W^{(00)}(d,d) \}$
	(20)	$ d^2 \ 1D\rangle$	$W^{(02)}(d,d)$
		$ d^2 \ 1G\rangle$	$W^{(04)}(d,d)$
	(10)	$ d\ d, \ 1D\rangle$	$2^{-1/2} \{ W^{(02)}(d,d) + W^{(02)}(d,d) \}$

TABLEAU IX

(000000)	(000000)	${}^1(000)$
$\otimes(110000)$	(110000)	${}^1(200)$
(110000)	(000000)	${}^1(000)$
	(110000)	${}^1(200)$
	(111100)	${}^1(220)$
	(220000)	${}^1(000) \ 1(200) \ 1(220) \ 1(400)$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = \sum_{i>j} \left\{ 2F_0(\Delta) (w_i^{(00)}(\Delta, \Delta) \cdot w_j^{(00)}(\Delta, \Delta)) + 10F_0(d) (w_i^{(00)}(d, d) \cdot w_j^{(00)}(d, d)) \right. \\ \left. + 20^{1/2} F_0(d, \Delta) \left[(w_i^{(00)}(d, d) \cdot w_j^{(00)}(\Delta, \Delta)) + (w_i^{(00)}(\Delta, \Delta) \cdot w_j^{(00)}(d, d)) \right] \right. \\ \left. + 28F_2(d) (w_i^{(02)}(d, d) \cdot w_j^{(02)}(d, d)) + 140F_4(d) (w_i^{(04)}(d, d) \cdot w_j^{(04)}(d, d)) \right. \\ \left. + 2G_2(d, \Delta) (w_i^{+(02)}(d, \Delta) \cdot w_j^{+(02)}(d, \Delta)) \right. \\ \left. + 140^{1/2} H_2(d, \Delta) \left[(w_i^{(02)}(d, d) \cdot w_j^{+(02)}(d, \Delta)) + (w_i^{+(02)}(d, \Delta) \cdot w_j^{(02)}(d, d)) \right] \right\}, \quad (4.3) \end{aligned}$$

où la somme est faite sur les électrons et où les paramètres F_k , G_k et H_k sont ceux définis par Racah⁵. Les résultats du tableau VIII nous indiquent que l'ensemble des opérateurs de base de \mathcal{H}_1 se transforme comme $[(200)+(000)]$ de R_6 et $[(110000)+(000000)]$ de Sp_{12} . Les produits scalaires $w_i^{+(0k)}(l_a, l_b) \cdot w_j^{+(0k)}(l_c, l_d)$ se transforment naturellement comme la représentation 1S de $SU_2 \times R_3$ mais ils n'ont pas de propriétés de transformation simples dans les opérations des groupes R_6 , R_5 et Sp_{12} , et le premier problème est donc de trouver des combinaisons linéaires de ces opérateurs qui se transforment comme une représentation \mathcal{W} donnée de R_6 et une représentation \mathcal{V} donnée de R_5 . Le cas de la symétrie symplectique sera étudié ultérieurement.

A) Classification des opérateurs et définition des paramètres

Les représentations \mathcal{W} et \mathcal{V} qui interviennent effectivement dans cette classification sont celles qui, parfaitement symétriques, apparaissent dans la réduction des divers produits de Kronecker $[(000)(00)+(200)(00), (40), (20)]^2$ et contiennent une représentation S dans la réduction à R_3 du groupe considéré, c'est-à-dire $2(000)(00), 2(200)(00), (220)(22), (400)(00)$ et $(400)(30)$.

\mathcal{H}_1 peut donc être mis sous la forme suivante :

$$E_0 e_0 + E_1 e_1 + E_2 e_2 + E_3 e_3 + E_4 e_4 + E_5 e_5 + E_6 e_6,$$

où les opérateurs à deux électrons $e_0, e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6$ se transforment respectivement comme: $(000)(00)$, $(000)(00)$, $(200)(00)$, $(200)(00)$, $(220)(22)$, $(400)(00)$ et $(400)(30)$ et où E_1, E_2, E_3, E_4, E_5 et E_6 sont des paramètres, combinaisons linéaires des intégrales F_k, G_k et H_k introduites précédemment.

Le calcul des formes explicites des opérateurs nécessite celui des coefficients de Clebsch-Gordan :

$$(\tau \nu S | \tau_1 \nu_1 k; \tau_2 \nu_2 k).$$

Il est possible de factoriser ces coefficients de la façon suivante :

$$(\tau \nu S | \tau_1 \nu_1 k; \tau_2 \nu_2 k) = (\tau \nu | \tau_1 \nu_1 + \tau_2 \nu_2) (\nu S | \nu_1 k + \nu_2 k),$$

et les conditions d'orthonormalisation conduisent aux relations :

$$\sum_k (\nu S | \nu_1 k + \nu_2 k) (\nu_1 k + \nu_2 k | \nu' S) = \delta(\nu, \nu'),$$

$$\sum_{\nu_1 \nu_2} (\tau \nu | \tau_1 \nu_1 + \tau_2 \nu_2) (\tau_1 \nu_1 + \tau_2 \nu_2 | \tau' \nu) = \delta(\tau, \tau'). \quad (4.4)$$

Ces différents coefficients ont été calculés par une méthode analogue à celle utilisée pour les coefficients de parenté fractionnelle.

En posant :

$$E_0 = 2 \sum_{i>j} (w_i^{(00)}(\Delta, \Delta) \cdot w_j^{(00)}(\Delta, \Delta)),$$

$$E_1 = 2 \sum_{i>j} (w_i^{(00)}(d, d) \cdot w_j^{(00)}(\Delta, \Delta)) + (w_i^{(00)}(\Delta, \Delta) \cdot w_j^{(00)}(d, d)),$$

$$E_2 = 2 \sum_{i>j} (w_i^{(00)}(d, d) \cdot w_j^{(00)}(d, d)),$$

$$\varepsilon_3 = 2 \sum_{i>j} (w_i^{(02)}(d,d) \cdot w_j^{(02)}(d,d)),$$

$$\varepsilon_4 = 2 \sum_{i>j} (w_i^{(04)}(d,d) \cdot w_j^{(04)}(d,d)),$$

$$\varepsilon_5 = \sum_{i>j} (w_i^{+(02)}(d,\Delta) \cdot w_j^{+(02)}(d,\Delta)),$$

$$\varepsilon_6 = 2 \sum_{i>j} (w_i^{(02)}(d,d) \cdot w_j^{+(02)}(d,\Delta)) + (w_i^{+(02)}(d,\Delta) - w_j^{(02)}(d,d)),$$

Nous avons obtenu finalement :

$$e_0 = \varepsilon_0 + \sqrt{5}\varepsilon_1 + 5\varepsilon_2,$$

$$e_1 = \frac{5}{6}\varepsilon_0 - \frac{\sqrt{5}}{6}\varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2}{6} + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 + \varepsilon_5,$$

$$e_2 = -\frac{5}{3}\varepsilon_0 - \frac{2}{3}\sqrt{5}\varepsilon_1 + \frac{5}{3}\varepsilon_2,$$

$$e_3 = -\frac{20}{6}\varepsilon_0 + \frac{4\sqrt{5}}{6}\varepsilon_1 - \frac{4}{6}\varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 - 2\varepsilon_5,$$

$$e_4 = 18\varepsilon_3 - 5\varepsilon_4,$$

$$e_5 = \frac{35}{2}\varepsilon_0 - \frac{7\sqrt{5}}{2}\varepsilon_1 + \frac{7}{2}\varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 - 7\varepsilon_5,$$

$$e_6 = \varepsilon_6;$$

en conséquence :

$$F_0 = \frac{1}{12} \left[-25F_0(d) + 30F_0(d,\Delta) + 7F_0(\Delta) \right],$$

$$F_1 = \frac{1}{20} \left[70F_2(d) + 630F_4(d) + \frac{35}{2}F_0(d) - 15F_0(d,\Delta) - \frac{5}{2}F_0(\Delta) \right],$$

$$F_2 = \left[\frac{15}{2}F_0(d) - 6F_0(d,\Delta) - \frac{3}{2}F_0(\Delta) \right],$$

$$F_3 = \frac{1}{25} \left[35F_2(d) + 315F_4(d) - 10G_2(d,\Delta) - 35F_0(d) + 30F_0(d,\Delta) + 5F_0(\Delta) \right],$$

$$F_4 = \left[\frac{1}{2}F_2(d) - \frac{5}{2}F_4(d) \right]$$

$$F_5 = \frac{1}{100} \left[10F_2(d) - 90F_4(d) + \frac{105}{2}F_0(d) - 45F_0(d,\Delta) - \frac{15}{2}F_0(\Delta) \right]$$

$$F_6 = 35H_2^{1/2}(d,\Delta).$$

B) Symétrie symplectique et quasi-spin

Les opérateurs de base à partir desquels nous avons construit les opérateurs ne forment pas une représentation complète du groupe Sp_{12} et, a priori, les opérateurs e_i ne possèdent pas de propriétés de transformation simples dans la symétrie symplectique. Cependant, si nous avons adjoint aux opérateurs de base précédents $w^{(11)}(d,d)$, $w^{(13)}(d,d)$ et $w^{(12)}(d,d) - w^{(12)}(d,d)$, nous aurions pu construire des opérateurs combinaisons linéaires de produits scalaires des précédents, se transformant comme une représentation donnée \mathcal{U} de Sp_{12} , \mathcal{W} de R_6 et \mathcal{V} de R_5 . Les représentations intervenant réellement dans ce calcul sont celles qui apparaissent dans la décomposition des divers produits de Kronecker $[(00000) + (110000)]^2$ et contiennent une représentation ${}^1\mathcal{S}_3$ dans la réduction à $SU_2 \times R_3$. Nous les avons portées dans le tableau IX. Or, il apparaît que la représentation ${}^1(400)$ de $SU_2 \times R_6$ se trouve uniquement dans la décomposition de la représentation (220000) de Sp_{12} ; nous pouvons donc affirmer que les opérateurs e_5 et e_6 se transforment comme cette représentation. D'autre part, l'opérateur e_2 est le seul qui, parfaitement symétrique, corresponde au produit de Kronecker $(00000) \otimes (110000)$, il se transforme donc comme (110000) . Il est possible de la même manière, de montrer que l'opérateur e_0 se transforme comme (000000) ; l'opérateur e_1 ne possède pas de propriétés de transformation simples dans la symétrie symplectique, mais nous verrons que ceci ne constitue pas une difficulté dans le calcul de ces éléments de matrice. Les opérateurs e_3 et e_4 ne se transforment pas

comme des représentations bien définies de Sp_{12} , mais on peut montrer que les opérateurs $e_3 + \Omega_1$, ($\Omega_1 = 4G(R_6) - \frac{9}{2}G(R_5)$) et $e_4 + \Omega_2$ ($\Omega_2 = -9G(R_5) + L^2$) qui, dans les groupes R_6 et R_5 ont les mêmes propriétés de transformation que e_3 et e_4 , se transforment respectivement comme (110000) et (111100).

D'après ce qui a été vu dans la seconde partie, les éléments de matrice de Ω_1 et Ω_2 qui se transforment tous les deux comme (220000) peuvent être calculés très facilement, et par conséquent, l'étude des opérateurs $e_3 + \Omega_1$ et $e_4 + \Omega_2$ qui permet d'utiliser les propriétés de la symétrie symplectique, conduira sans difficulté aux résultats cherchés pour e_3 et e_4 .

Il a été montré dans la troisième partie que tous les états de toutes les configurations $(d+\Delta)^N$ forment pour N pair, la représentation irréductible $(1/2 \ 1/2 \ \dots \ 1/2)$ et pour N impair, la représentation $(1/2 \ 1/2 \ \dots \ -1/2)$ de R_{24} . Judd⁴⁰ a montré en outre que :

$$(1/2 \ 1/2 \ \dots \ \pm 1/2) \otimes (1/2 \ 1/2 \ \dots \ \pm 1/2) = \\ (00\dots 0) + (110\dots 0) + (11110\dots 0) + \dots + (11\dots 1\pm 1).$$

Pour obtenir la relation entre le quasi-spin et la symétrie symplectique, il suffira donc d'étudier la décomposition des représentations apparaissant dans la partie droite de l'équation ci-dessus, dans la réduction à $SU_2 \times Sp_{12}$. En outre, puisque nous nous intéressons

à des opérateurs à deux électrons, nous pourrions nous limiter aux représentations $(11 \dots 10 \dots)$ de R_{24} pour lesquelles le nombre de symboles 1 est inférieur ou égal à 4^{10} ; les résultats ont été portés dans le tableau X. Il apparaît qu'à une représentation donnée

\mathcal{Y} de Sp_{12} ne correspond pas en général une valeur déterminée du quasi-spin; cependant, à la représentation $(11110 \dots 0)$ est associée une valeur unique de quasi-spin égale à 2, nous pouvons donc affirmer que l'opérateur $e_4 + \Omega_2$ possède un rang 2 relativement au quasi-spin. Les opérateurs e_5 et e_6 sont, quant à eux, parfaitement scalaires dans cet espace, puisque à la représentation (220000) correspond une valeur nulle du quasi-spin. Nous montrerons plus loin toute l'importance de ces résultats.

C) Éléments de matrice

L'application des propriétés de transformation des opérateurs dans les différents groupes considérés, au calcul de leurs éléments de matrice réside essentiellement dans l'emploi du théorème de Wigner-Eckart. L'utilisation de ce dernier nécessite la connaissance des coefficients $c(W_1 W_2 W)$ nombre de fois qu'apparaît la représentation irréductible W d'un groupe donné dans le produit direct $W_1 \times W_2$ du même groupe. Nous avons calculé ces coefficients (tableaux XI, XII, XIII, XIV, XV) par diverses méthodes proposées par Weyl¹⁷. Afin de pouvoir comparer nos résultats à ceux obtenus à l'aide des méthodes classiques et de préciser la phase des éléments de matrice non diagonaux, nous avons exprimé nos états $|(d+\delta)^N \nu \tilde{W} \tilde{V} SL)$ comme combinaisons linéaires des états $|d^N \nu SL)$, $|d^{N-1} \nu' S' L', \delta, SL)$ et $|d^{N-2} \delta^2 \nu SL)$,

TABLEAU X

R_{24}	$SU_2 \times Sp_{12}$
(0 . . . 0)	$^1(000000)$
(110 . . . 0)	$^1(200000)$
	$^3(000000) (110000)$
(11110...0)	$^1(000000) (110000) (220000)$
	$^3(110000) (200000) (211000)$
	$^5(000000) (110000) (111100)$

TABLEAU XI

$\mathcal{L}(\mathcal{V}\mathcal{V}'(22))$

(00)	(10)	(11)	(20)	(21)	(22)
0	0	0	0	0	1
	0	0	0	1	1
		1	0	1	1
			1	1	1
				2	1
					1

TABLEAU XII

$\mathcal{L}(\mathcal{V}\mathcal{V}'(30))$

(00)	(10)	(11)	(20)	(21)	(22)
0	0	0	0	0	0
	0	0	1	0	0
		0	0	1	0
			0	1	0
				0	1
					0

TABLEAU XV

$c(\tau\tau'(220))$

	(000)	(100)	(110)	(11±1)	(200)	(210)	(21±1)	(220)	(22±1)	(22±2)
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
		0	0	0	0	1	0	0	2	0
			1	0	0	0	2	2	0	0
				2	0	2	0	0	2	0
					1	0	2	1	0	2
						3	0	0	4	0
							6	2	0	2
								3	0	2
									4	0
										2

TABLEAU XVI

$(d+\delta)^3$

${}^2_1(100)$	(00)	$ d^2_0^1S, \delta, {}^2S)$
	(10)	$5^{-1/2} \{ d\delta^2_1^2D) + 2 d^3_1^2D) \}$
${}^2_3(210)$	(10)	$5^{-1/2} \{ 2 d\delta^2_1^2D) - d^3_1^2D) \}$
	(11)	$ d^2_2^3P, \delta, {}^2P), F$
	(20)	$ d^2_2^1D, \delta, {}^2D), G$
	(21)	$ d^3_3^2P), D, F, G, H$
${}^4_3(11\pm1)$	(11)	$2^{-1/2} \{ d^2_2^3P, \delta, {}^4P) \pm d^3_3^4P) \}$

TABLEAU XVII

		$(d+\Delta)^4$
${}^1_0(000)$	(00)	$3^{-1/2} \{ d^2 \Delta^2 {}^1_0S) + 2^{1/2} d^4 {}^1_0S) \}$
${}^1_2(000)$	(00)	$3^{-1/2} \{ 2^{1/2} d^2 \Delta^2 {}^1_0S) - d^4 {}^1_0S) \}$
	(10)	$ d^3 {}^2_1D, \Delta, {}^1_1D)$
	(20)	$2^{-1} \{ 3^{1/2} d^4 {}^1_2D) + d^2 \Delta^2 {}^1_2D) \}, G$
${}^1_4(220)$	(20)	$2^{-1} \{ d^4 {}^1_2D) - 3^{1/2} d^2 \Delta^2 {}^1_2D) \}, G$
	(21)	$ d^3 {}^2_3P, \Delta, {}^1_3P), D, F, G, H$
	(22)	$ d^4 {}^1_4S), D, F, G, I$
${}^3_2(110)$	(10)	$ d^3 {}^2_1D, \Delta, {}^3_1D)$
	(11)	$2^{-1} \{ 3^{1/2} d^4 {}^3_2P) + d^2 \Delta^2 {}^3_2P) \}, F$
${}^3_4(21\pm 1)$	(11)	$\pm 2^{-1/2} \{ 2^{-1} [d^4 {}^3_2P) - 3^{1/2} d^2 \Delta^2 {}^3_2P)] \pm d^3 {}^4_3P, \Delta, {}^3_3P) \}, F$
	(21)	$2^{-1} \{ d^4 {}^3_4P) \pm d^3 {}^2_3P, \Delta, {}^3_3P) \}, D, F, G, H$
${}^5_4(110)$	(10)	$ d^4 {}^5_4D)$
	(11)	$ d^3 {}^4_3P, \Delta, {}^5_3P), F$

TABLEAU XVIII

$$(d+\Delta)^5$$

$\frac{2}{1}(100)$	(00)	$ d^4_0 S, \Delta, {}^2S)$
	(10)	$5^{-1/2} \{ 3^{-1/2} d^5_1 {}^2D) + 2^{1/2} d^3 \Delta^2 {}^2_1 D) \}$
$\frac{2}{3}(210)$	(10)	$5^{-1/2} \{ -2^{1/2} d^5_1 {}^2D) + 3^{1/2} d^3 \Delta^2 {}^2_1 D) \}$
	(11)	$ d^4_2 {}^3P, \Delta, {}^2P), F$
	(20)	$ d^4_2 {}^1D, \Delta, {}^2D), G$
	(21)	$3^{-1/2} \{ 2^{1/2} d^5_3 {}^2P) + d^3 \Delta^2 {}^2_3 P) \}, D, F, G, H$
$\frac{2}{5}(22\pm 1)$	(21)	$\mp 2^{-1/2} \{ 3^{-1/2} [d^5_3 {}^2P) - 2^{1/2} d^3 \Delta^2 {}^2_3 P)] \pm d^4_4 {}^3P, \Delta, {}^2P), D, F, G, H$
	(22)	$2^{-1/2} \{ d^5_5 {}^2S) \pm d^4_4 {}^1S, \Delta, {}^2S) \}, D, F, G, I$
$\frac{4}{3}(11\pm 1)$	(11)	$2^{-1/2} \{ 3^{-1/2} [2^{1/2} d^5_3 {}^4P) + d^3 \Delta^2 {}^4_3 P)] \pm d^4_2 {}^3P, \Delta, {}^4P) \}, F$
$\frac{4}{5}(210)$	(10)	$ d^4_4 {}^5D, \Delta, {}^4D)$
	(11)	$3^{-1/2} \{ 2^{1/2} d^3 \Delta^2 {}^4_3 P) - d^5_3 {}^4P) \}, F$
	(20)	$ d^5_5 {}^4D), G$
	(21)	$ d^4_4 {}^3P, \Delta, {}^4P), D, F, G, H$
$\frac{6}{5}(100)$	(00)	$ d^5_5 {}^6S)$
	(10)	$ d^4_4 {}^5D, \Delta, {}^6D)$

TABLEAU XIX

$$(d+\delta)^6$$

${}^1_0(000)$	(00)	$2^{-1/2} \{ d^6_0 S) + d^4 \delta^2_0 S) \}$
${}^1_2(200)$	(00)	$2^{-1/2} \{ d^6_0 S) - d^4 \delta^2_0 S) \}$
	(10)	$ d^5_1{}^2 D, \delta, {}^1 D)$
	(20)	$2^{-1/2} \{ d^6_2{}^1 D) - d^4 \delta^2_2{}^1 D) \}, G$
${}^1_4(220)$	(20)	$2^{-1/2} \{ d^6_2{}^1 D) + d^4 \delta^2_2{}^1 D) \}, G$
	(21)	$ d^5_3{}^2 P, \delta, {}^1 P), D, F, G, H$
	(22)	$2^{-1/2} \{ d^6_4{}^1 S) + d^4 \delta^2_4{}^1 S) \}, D, F, G, I$
${}^1_6(22\pm 2)$	(22)	$2^{-1/2} \{ 2^{-1/2} [d^6_4{}^1 S) - d^4 \delta^2_4{}^1 S)] \pm d^5_5{}^2 S, \delta, {}^1 S) \}, D, F, G, I$
${}^3_2(110)$	(10)	$ d^5_1{}^2 D, \delta, {}^3 D)$
	(11)	$2^{-1/2} \{ d^6_2{}^3 P) + d^4 \delta^2_2{}^3 P) \}, F$
${}^3_4(21\pm 1)$	(11)	$\pm 2^{-1/2} \{ 2^{-1/2} [d^6_2{}^3 P) - d^4 \delta^2_2{}^3 P)] \pm d^5_3{}^4 P, \delta, {}^3 P) \}, F$
	(21)	$2^{-1/2} \{ 2^{-1/2} [d^6_4{}^3 P) + d^4 \delta^2_4{}^3 P)] \pm d^5_3{}^2 P, \delta, {}^3 P) \}, D, F, G, H$
${}^3_6(220)$	(20)	$ d^5_5{}^4 D, \delta, {}^3 D), G$
	(21)	$2^{-1/2} \{ d^6_4{}^3 P) - d^4 \delta^2_4{}^3 P) \}, D, F, G, H$
	(22)	$ d^5_5{}^2 S, \delta, {}^3 S), D, F, G, I$
${}^5_4(110)$	(10)	$2^{-1/2} \{ d^6_4{}^5 D) + d^4 \delta^2_4{}^5 D) \}$
	(11)	$ d^5_3{}^4 P, \delta, {}^5 P), F$
${}^5_6(200)$	(00)	$ d^5_5{}^6 S, \delta, {}^5 S)$
	(10)	$2^{-1/2} \{ d^6_4{}^5 D) - d^4 \delta^2_4{}^5 D) \}$
	(20)	$ d^5_5{}^4 D, \delta, {}^5 D), G$
${}^7(000)$	(00)	$ d^5_5{}^6 S, \delta, {}^7 S)$

des éléments diagonaux est identique à celle des éléments de matrice de Ω_1 , si l'on excepte toutefois le cas de $\mathcal{W} \equiv (210)$. Suivant les résultats obtenus dans la seconde partie, ces derniers prennent la forme suivante :

$$\begin{aligned} & ((d+\delta)^N (\nu_1 \nu_2 \nu_3) (\omega_1 \omega_2) SL | \Omega_1 | (d+\delta)^N (\nu_1 \nu_2 \nu_3) (\omega_1 \omega_2) SL) \\ &= \frac{1}{2} [\nu_1 (\nu_1 + 4) + \nu_2 (\nu_2 + 2) + \nu_3^2] - \frac{3}{4} [\omega_1 (\omega_1 + 3) + \omega_2 (\omega_2 + 1)]. \end{aligned}$$

L'opérateur e_2 se transforme comme (110000) de SP_{12} ; les coefficients $c(\nu_1 \nu_2 (110000))$ étant au plus égaux à 1, et vérifiant la règle de sélection $\Delta \nu = 0 \pm 2$, nous avons pu réaliser les factorisations suivantes :

$$\begin{aligned} & ((d+\delta)^N \nu \Psi | e_2 | (d+\delta)^N \nu \Psi') = \alpha(NS\nu) ((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_2 | (d+\delta)^\nu \nu \Psi'), \\ & ((d+\delta)^N \nu \Psi | e_2 | (d+\delta)^N \nu-2 \Psi') = \\ & \quad \beta(NS\nu) ((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_2 | (d+\delta)^\nu \nu-2 \Psi'). \end{aligned}$$

Le calcul montre que les coefficients $\alpha(NS\nu)$ et $\beta(NS\nu)$ sont indépendants de S et prennent la forme suivante :

$$\begin{aligned} \alpha(NS\nu) &= \frac{(N-1)(6-N)}{(\nu-1)(6-\nu)}, \\ \beta(NS\nu) &= \left[\frac{(N-1)^2 (14-\nu-N)(N+2-\nu)}{4(\nu-1)^2 (7-\nu)} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

Tous les éléments de matrice de e_2 peuvent donc être obtenus à partir des seuls $((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_2 | (d+\delta)^\nu \nu \Psi')$ et $((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_2 | (d+\delta)^\nu \nu-2 \Psi')$ que nous avons portés dans le tableau XX. Les propriétés de l'opérateur $e_3 + \Omega_1$ dans la symétrie symplectique nous ont permis de montrer la relation suivante :

$$((d+\delta)^N \nu \Psi | e_3 + \Omega_1 | (d+\delta)^N \nu \Psi') = b(NS\nu\nu') ((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_2 | (d+\delta)^\nu \nu \Psi').$$

TABLEAU XX

$$((d+\delta)^{\nu} \nu \Psi' | e_2 | (d+\delta)^{\nu} \nu \Psi)$$

${}^1_0(000)$	${}^1_0(000) (00)$	0	${}^5_6(200)$	${}^5_6(200)$	0
	${}^1_2(200) (00)$	$\frac{5^{1/2}}{3}$	${}^7_6(000)$	${}^7_6(000) (00)$	0
${}^1_2(200)$	${}^1_2(200) (00)$	$-\frac{4}{3}$	${}^2_1(100)$	${}^2_1(100) (00)$	-1
	(10)	$-\frac{2}{3}$		(10)	$-\frac{1}{5}$
	(20)	$\frac{1}{3}$	${}^2_3(210)$	${}^2_3(210) (10)$	$-\frac{8}{5}$
	${}^1_4(220) (20)$	$\frac{27^{1/2}}{2}$	${}^2_3(210)$	${}^2_3(210) (10)$	$-\frac{11}{5}$
${}^1_4(220)$	${}^1_4(220) (20)$	$-\frac{5}{2}$		(11)	-1
	(21)	-1		(20)	-1
	(22)	2		(21)	1
	${}^1_6(22\pm 2) (22)$	$\frac{5}{2^{1/2}}$	${}^2_5(22\pm 1)$	${}^2_5(22\pm 1) (21)$	$\frac{8}{3}$
${}^3_2(110)$	${}^3_2(110) (11)$	$\frac{1}{3}$	${}^2_5(22\pm 1)$	${}^2_5(22\pm 1) (21)$	$-\frac{4}{3}$
	(10)	$-\frac{2}{3}$		(22)	$\frac{4}{3}$
	${}^3_4(21\pm 1) (11)$	$\pm \frac{27^{1/2}}{8^{1/2}}$	${}^2_5(22\mp 1)$	${}^2_5(22\mp 1) (21)$	$\frac{2}{3}$
${}^3_4(21\pm 1)$	${}^3_4(21\pm 1) (11)$	$-\frac{7}{4}$		(22)	2
	(21)	$\frac{1}{2}$	${}^4_3(11\pm 1)$	${}^4_3(11\pm 1) (11)$	0
	${}^3_4(21\mp 1) (11)$	$\frac{3}{4}$		${}^4_3(11\mp 1) (11)$	1
	(21)	$\frac{3}{2}$		${}^4_5(210) (11)$	$\frac{8}{3}$
${}^3_4(21\pm 1)$	${}^3_6(220) (21)$	$\frac{5}{2^{1/2}}$	${}^4_5(210)$	${}^4_5(210) (10)$	$-\frac{2}{3}$
${}^3_6(220)$	${}^3_6(220)$	0		(11)	-2
${}^5_4(110)$	${}^5_4(110) (10)$	2		(20)	$\frac{10}{3}$
	(11)	-1		(21)	$-\frac{2}{3}$
	${}^5_6(200) (10)$	5	${}^6_5(100)$	${}^6_5(100) (00)$	$\frac{10}{3}$
				(10)	$-\frac{2}{3}$

Tous les éléments de matrice de e_3 peuvent donc être obtenus à partir de ceux de e_2 et de Ω_1 , si l'on connaît les coefficients $b(NS \nu \nu')$; ceux-ci sont en fait indépendants de S ; ils ont été portés dans le tableau XXI, pour des valeurs de N inférieures ou égales à 6.

c) Opérateurs e_4 (220)(22)

Nous avons montré dans le paragraphe précédent qu'il était intéressant d'étudier non pas e_4 mais $e_4 + \Omega_2$ puisque ce dernier opérateur possède des propriétés bien définies relativement à la symétrie symplectique et au quasi-spin. Les résultats obtenus dans la troisième partie permettent de trouver immédiatement la dépendance sur N des éléments de matrice de l'opérateur $e_4 + \Omega_2$ qui suit d'ailleurs la règle de sélection $\Delta \nu = 0, \pm 2, \pm 4$.

Plus précisément, les formules explicites des symboles 3-j données par Edmonds²⁶ conduisent aux relations suivantes :

$$\begin{aligned} & ((d+\delta)^N \nu \Psi | e_4 + \Omega_2 | (d+\delta)^N \nu \Psi') \\ &= \frac{3(6-N)^2 - (6-\nu)(8-\nu)}{2(6-\nu)(5-\nu)} ((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_4 + \Omega_2 | (d+\delta)^\nu \nu \Psi'), \\ & ((d+\delta)^N \nu \Psi | e_4 + \Omega_2 | (d+\delta)^N \nu-2 \Psi') \\ &= \frac{1}{2} \frac{6-N}{6-\nu} \left[\frac{(14-\nu-N)(N+2-\nu)}{4(7-\nu)} \right]^{1/2} ((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_4 + \Omega_2 | (d+\delta)^\nu \nu-2 \Psi'), \end{aligned}$$

TABLEAU XXI

$$b(N, \nu, \nu')$$

		1	2	4	6	3	5
ν	ν'						
0	0	0	0	0	0	-	-
2	0	5	0	0	$-(45)^{1/2}$	-	-
2	2	-4	-9	-9	-9	-	-
4	2	-	0	0	$-(100/27)^{1/2}$	-	-
4	4	-	-2	-2	-2	-	-
6	4	-	-	-	-1	-	-
6	6	-	-	-	0	-	-
1	1	-	-	-	-	$-15/2$	$-25/6$
3	1	-	-	-	-	$5/4$	$-(75/32)^{1/2}$
3	3	-	-	-	-	$-5/2$	$-25/6$
5	3	-	-	-	-	-	$5/8$
5	5	-	-	-	-	-	$-7/4$

$$\begin{aligned}
& ((d+\delta)^N \nu \Psi | e_4 + \Omega_2 | (d+\delta)^N \nu^{-4} \Psi') \\
&= \frac{1}{4} \left[\frac{(16-\nu-N)(14-\nu-N)(4+N-\nu)(2+N-\nu)}{2(8-\nu)(7-\nu)} \right]^{1/2} \\
&\quad \times ((d+\delta)^\nu \nu \Psi | e_4 + \Omega_2 | (d+\delta)^\nu \nu^{-4} \Psi').
\end{aligned}$$

Le tableau XI montre, par application du théorème de Wigner-Eckart, que si l'on excepte le cas $\mathcal{V} \equiv (22)$ la dépendance sur L des éléments diagonaux est identique à celle des éléments de matrice Ω_2 . Ceux-ci, d'après les résultats obtenus dans la seconde partie sont égaux à :

$$L(L+1) - \frac{3}{2} \omega_1(\omega_1+3) - \frac{3}{2}(\omega_2+1).$$

Le calcul montre, dans tous les cas, que l'on peut réaliser la factorisation suivante :

$$\begin{aligned}
& ((d+\delta)^N \nu \mathcal{W} \mathcal{V} S L | e_4 + \Omega_2 | (d+\delta)^N \nu' \mathcal{W}' \mathcal{V}' S L) \\
&= \mathcal{Y}(N, S, \mathcal{W}, \mathcal{W}', \mathcal{V}, \mathcal{V}') (\mathcal{V} | \varphi(L) | \mathcal{V}').
\end{aligned}$$

Nous avons porté dans les tableaux XXII et XXIII les coefficients \mathcal{Y} et $(|\varphi(L)|)$ qui ne peuvent pas être obtenus à l'aide des relations précédentes.

d) Opérateurs e_5 et e_6 (400)(00)(30)

Les coefficients $\mathcal{C}(\mathcal{W} \mathcal{W}'(400))$ et $\mathcal{C}(\mathcal{V} \mathcal{V}'(00))$ ne sont différents de zéro que si $\mathcal{W} \equiv \mathcal{W}'$ et $\mathcal{V} \equiv \mathcal{V}'$; ils sont en outre au plus égaux à 1 (tableau XV) comme d'ailleurs les coefficients $\mathcal{C}(\mathcal{V} \mathcal{V}'(30))$ (tableau XII). Il s'ensuit immédiatement, d'une part, que la matrice de e_5 est diagonale et que ses éléments sont indépendants de L , d'autre part, qu'il est possible de réaliser les factorisations suivantes :

TABLEAU XXIII

$(\tau | \varphi(L) | \tau')$

	S	(00)	(22)		P	(11)	(21)	
		0	$6(14)^{1/2}$			-7	$2(7)^{1/2}$	
			-24				-11	
D	(10)	(20)	(21)	(22)	F	(11)	(21)	(22)
	0	0	$3(21/5)^{1/2}$	$6(7)^{1/2}$		3	$3(2)^{1/2}$	0
		-9	0	$12(2)^{1/2}$			9	0
			0	0				-12
				-18				
G	(20)	(21)	(22)	H	(21)	I	(22)	
	5	0	$4(11)^{1/2}$		3		18	
		-7	0					
			-4					

TABLEAU XXIV

$y(\tau, \tau')$

(200)	(00)	21		(22±1)	(21)	-12
	(10)	-7			(22)	4
	(20)	1		(210)	(11)	$-\frac{21}{2}$
(220)	(20)	15			(10)	$\frac{35}{2}$
	(21)	-3			(20)	$-\frac{5}{2}$
	(22)	3		(21±1)	(11)	-14
(222)	(22)	0			(21)	2

$$((d+\delta)^N \nu \tau \mathcal{W} \mathcal{V} \mathcal{S} \mathcal{L} | e_5 | (d+\delta)^N \nu \tau \mathcal{W} \mathcal{V} \mathcal{S} \mathcal{L}) = \beta(N, \nu, S) \mathcal{Y}(\tau, \mathcal{V})$$

$$((d+\delta)^N \nu \tau \mathcal{W} \mathcal{V} \mathcal{S} \mathcal{L} | e_6 | (d+\delta)^N \nu \tau \mathcal{W} \mathcal{V}' \mathcal{S} \mathcal{L}) = \gamma(N, \nu, S) \\ \times (\tau | \chi(\mathcal{W}) | \tau') (\tau | \chi(\mathcal{L}) | \tau').$$

Nous avons vu précédemment que les opérateurs e_5 et e_6 sont parfaitement scalaires relativement au quasi-spin et en conséquence, les coefficients β et γ sont indépendants de N ; on peut montrer en outre qu'ils ne peuvent prendre que deux valeurs opposées suivant que $2S+1-\nu$ est inférieur ou supérieur à 8. Nous avons choisi :

$$\beta(\nu, S) = \pm 1 \text{ pour } (2S+1-\nu) \lesseqgtr 8, \\ \gamma(\nu, S) = \pm 1 \text{ pour } (2S+1-\nu) \lesseqgtr 8,$$

et tabulé les différents coefficients $\mathcal{Y}(\tau, \mathcal{V})$, $\chi(\tau)$ et $\chi(\mathcal{L})$ (tableaux XXIV, XXV, et XXVI).

En dehors de l'intérêt théorique évident que présentent les résultats précédents, ils permettent une vérification précise des résultats obtenus à l'aide des méthodes classiques, en particulier de ceux concernant les interactions $d^{N-1} \delta - d^N$ et $d^{N-1} \delta - d^{N-2} \delta^2$ calculés par Racah^{4,5}. En effet, nous avons montré que l'opérateur e_6 qui représente les effets de ces interactions se transforme comme $(220000)(400) (30)$ et qu'il est parfaitement scalaire dans l'espace de quasi-spin. Ces propriétés permettent de trouver immédiatement un grand nombre de relations entre les divers éléments de matrice de cet opérateur. Considérons par exemple l'élément de matrice suivant :

$$((d+\delta)^3 \begin{smallmatrix} 2 \\ 1 \end{smallmatrix} (100)(10) \mathcal{D} | e_6 | (d+\delta)^3 \begin{smallmatrix} 2 \\ 3 \end{smallmatrix} (210)(10) \mathcal{D}),$$

le théorème de Wigner-Eckart nous indique qu'il est nul, puisque le coefficient $\mathcal{C}((100)(210)(400))$ est lui-même égal à zéro (tableau XV)

TABLEAU XXV

$(\tau | \chi(\tau) | \tau')$

(200)	(10)	(20)	$20^{1/2}$
(210)	(10)	(20)	$(25/2)^{1/2}$
	(11)	(21)	$45^{1/2}$
	(20)	(21)	$-(45/2)^{1/2}$
(21±1)	(11)	(21)	$40^{1/2}$
(22±1)	(21)	(22)	$90^{1/2}$
(220)	(22)	(21)	$120^{1/2}$
	(20)	(21)	$60^{1/2}$

TABLEAU XXVI

$(\tau | \chi(L) | \tau')$

(10)	(20)	D	$(1/5)^{1/2}$
(11)	(21)	P	$(1/5)^{1/2}$
		F	$-(2/35)^{1/2}$
		D	$-(3/35)^{1/2}$
(20)	(21)	G	$(4/63)^{1/2}$
		D	$(3/35)^{1/2}$
(21)	(22)	F	$-(3/392)^{1/2}$
		G	$(11/504)^{1/2}$

Or le tableau XVII montre immédiatement que cet élément peut être mis sous la forme suivante :

$$5^{-1/2} (d s^2 \begin{smallmatrix} 2 \\ 1 \end{smallmatrix} D | e_6 | d^2 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D, \Delta, \begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} D) + 2 \cdot 5^{-1/2} (d^3 \begin{smallmatrix} 2 \\ 1 \end{smallmatrix} D | e_6 | d^2 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D, \Delta, \begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} D),$$

et suivant un résultat classique de Racah^{4,5},

$$(d s^2 \begin{smallmatrix} 2 \\ 1 \end{smallmatrix} D | e_6 | d^2 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D, \Delta, \begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} D) = -2^{1/2} (d s^1 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D | e_6 | d^2 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D) = 70^{1/2}$$

par conséquent,

$$(d^3 \begin{smallmatrix} 2 \\ 1 \end{smallmatrix} D | e_6 | d^2 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D, \Delta, \begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix} D) = -2^{-1} (d s^1 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D | e_6 | d^2 \begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix} D) = -(35/2)^{1/2},$$

résultat en accord avec celui de Racah⁵. Les exemples pourraient être multipliés, mais dans tous les cas, ils conduisent à des calculs aussi simples que les précédents, et nous pensons avoir suffisamment montré la facilité d'emploi de nos résultats.

III INTERACTIONS DE CONFIGURATIONS LOINTAINES POUR LES CONFIGURATIONS $(\ell + \ell')^N$

L'application de la théorie des groupes de Lie à l'étude des configurations d'électrons équivalents ℓ^N a trouvé récemment une de ses plus belles réussites dans l'étude des propriétés de symétrie des opérateurs effectifs à trois particules. Le nombre de paramètres introduits par cette interaction effective qui représente une part des effets des excitations monoélectroniques, était à priori assez élevé (quatre et dix respectivement pour les configurations d^N et f^N). L'utilisation des propriétés de transformation des opérateurs à trois particules a permis de réduire notablement le nombre de paramètres (deux et six respectivement pour d^N et f^N) réellement nécessaires pour décrire cette interaction effective.

Il était intéressant de voir quels opérateurs effectifs introduisent les interactions de configurations lointaines pour les configurations $(l + l')^N$ et quelle simplification est susceptible d'apporter la théorie des groupes continus à leur étude.

L'approximation du champ central dans l'interprétation des spectres atomiques trouve sa justification dans le fait que l'application du premier ordre de perturbation sur une configuration électronique donnée permet généralement de rendre compte d'un grand nombre de données expérimentales au moyen d'un nombre restreint de paramètres ajustables. Les différences observées entre les niveaux d'énergie ainsi calculés et leurs valeurs expérimentales peuvent être cependant assez importantes, et elles ne proviennent pas en général des interactions réelles spin-spin ou spin-autre-orbite par exemple qui ont été négligées dans l'hamiltonien du système; elles sont attribuées habituellement aux "interactions" de configurations. Celles-ci, plus ou moins arbitrairement, peuvent être séparées en deux catégories :

- 1) interactions fortes qui nécessitent l'extension de la base initiale à un certain nombre souvent très limité d'autres configurations
 - 2) interactions faibles ou lointaines qui peuvent être traitées par application d'ordres de perturbations supérieurs sur la base initiale
- L'introduction des interactions fortes entraîne la construction et la diagonalisation de matrices souvent très grandes et augmente notablement le nombre de paramètres à déterminer; si l'on étudie uniquement les niveaux de plus basse énergie des atomes ou des ions elles ne sont heureusement à considérer que pour les éléments lourds.

Au contraire, l'ensemble des interactions faibles laisse inchangée la taille des matrices et n'introduit qu'un nombre relativement petit de paramètres, elles peuvent cependant avoir des effets cumulatifs importants. En outre, elles peuvent être représentées au moyen d'opérateurs effectifs, qui dans une théorie paramétrique permettent d'ignorer complètement les propriétés des configurations perturbatrices. La détermination de ces opérateurs effectifs a été faite par Rajnak et Wybourne²⁹⁻³⁰, de façon précise, dans le cas de configurations d'électrons équivalents l^N . Leurs résultats qui trouvent leur origine dans les remarques de Backer Goudsmit montrent que la théorie "linéaire" était insuffisante : en effet, aux corrections de Trees³⁰ doivent être ajoutés des opérateurs à trois particules, et les effets combinés du couplage spin-orbite et de l'interaction coulombienne entraînent l'introduction d'opérateurs proportionnels à ceux de l'interaction spin-autre-orbite. Cependant, la simplicité de ces résultats ne justifiait pas le formalisme extrêmement lourd auquel étaient conduits Rajnak et Wybourne par l'utilisation des méthodes classiques, et la nécessité de définir les états des configurations perturbées et perturbatrices. Stein³² a apporté une première simplification en utilisant des opérateurs $U^{(k)}(l, l')$ d'Elliott¹², mais ce sont réellement la seconde quantification et les diagrammes de Feynman qui ont permis à Judd¹⁰ de donner au problème sa véritable solution. Ce sont ces méthodes que nous avons utilisées pour tenter de généraliser les résultats de Rajnak et Wybourne aux configurations mélangées du type : $l^N l'^{N'}$. En fait, nous avons montré que les

propriétés des opérateurs annihilation et création, ne pouvaient être utilisées avec efficacité que dans le cas où l'ensemble des configurations $l^N, l^{N-1}l', \dots, ll'^{N-1}, l'^N$ était susceptible d'être traité simultanément, et en conséquence, considéré comme une seule configuration que nous écrivons $(l+l')^N$. Ce cas est celui des configurations $(d+\Delta)^N$ des éléments de transition, et la conservation de la parité permet de lever la condition précédente pour les configurations $f^N \Delta$. En outre, les diagrammes de Feynmann se révélant inefficaces dans le traitement des opérateurs agissant simultanément sur l'orbite et le spin, nous avons été amenés à modifier ces diagrammes, ce qui nous a permis de retrouver les résultats de Rajnak et Wybourne³⁰ et de les généraliser sans difficulté aux configurations $(l+l')^N$.

A) Théorie du champ central et approximation du second ordre

La théorie du champ central consiste essentiellement à séparer l'hamiltonien habituel de l'atome en deux parties d'importance relative très différente :

$$H_0 = \sum_i \frac{P_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} + U(r_i),$$

et

$$H' = \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_i [\zeta(\Delta_i) \cdot l_i - U(r_i)] = G + \Lambda - V.$$

Les énergies des différentes configurations sont la somme des énergies monoélectroniques, valeurs propres de H_0 et le potentiel central $U(r)$ est choisi de façon telle que l'approximation d'ordre zéro soit aussi bonne que possible. Si l'ensemble des configurations $l^N, l^{N-1}l', \dots, ll'^{N-1}, l'^N$ doit être traité simultanément, $U(r)$ peut être choisi tel que les énergies monoélectroniques des électrons l et l' :

soient identiques; si cette condition n'est pas nécessaire (cas des configurations $f^N \Delta$), un choix raisonnable pour $U(r)$ est celui qui élimine l'action des couches complètes passives¹⁰. Dans les deux cas H' peut être traité alors par la théorie des perturbations, et la correction sur l'énergie est obtenue au premier ordre par diagonalisation de la matrice de H' sur les états $|X\rangle$ de la configuration $(l+l')^N$ d'énergie E_0 . Au second ordre, si celui-ci ne lève aucune dégénérescence pouvant subsister dans l'approximation du premier ordre, l'influence des états $|Y\rangle$ d'une configuration excitée d'énergie $E_0 + \Delta E$ entraîne la correction suivante :

$$-\frac{1}{\Delta E} \sum_Y (X|H'|Y)(Y|H'|X)$$

qui peut être écrite en termes d'opérateurs effectifs :

$$(X| \Omega_1 + \Omega_2 + \Omega_3 + \Omega_4 + \Omega_5 + \Omega_6 |X),$$

où

$$\Omega_1 = -\frac{1}{\Delta E} \sum_Y V|Y)(Y|V, \quad \Omega_2 = -\frac{1}{\Delta E} \sum_Y G|Y)(Y|G,$$

$$\Omega_3 = -\frac{1}{\Delta E} \sum_Y \Lambda|Y)(Y|\Lambda, \quad \Omega_4 = -\frac{2}{\Delta E} \sum_Y \Lambda|Y)(Y|G,$$

$$\Omega_5 = \frac{2}{\Delta E} \sum_Y \Lambda|Y)(Y|V, \quad \text{et} \quad \Omega_6 = \frac{2}{\Delta E} \sum_Y G|Y)(Y|V.$$

Les opérateurs Ω_1, Ω_2 et Ω_6 agissent uniquement sur l'orbite des électrons tandis que les opérateurs Ω_3, Ω_4 et Ω_5 agissent simultanément sur le spin et l'orbite. Dans tous les cas, cependant, les opérateurs G, Λ et V peuvent être exprimés dans la forme que leur donne la seconde quantification et la somme $\sum_Y |Y)(Y|$ peut être remplacée par un, car si les états $|Y\rangle$ ne forment pas un ensemble complet, les états manquants ne peuvent être connectés

avec les états $|X\rangle$. Les opérateurs annihilation-création qui apparaissent dans les expressions de G , Λ et V peuvent donc être rassemblés et l'on peut utiliser les relations d'anticommuation, en tenant compte des propriétés des états $|X\rangle$; ceci conduit à la construction d'un certain nombre de diagrammes de Feynmann qui permettent la détermination effective des opérateurs Ω ; cette méthode a été décrite en détail par Judd¹⁰ pour les configurations d'électrons équivalents, et elle peut être appliquée sans difficultés aux configurations mélangées à deux types d'électrons l et l' ; il faut noter cependant que pour pouvoir utiliser les propriétés fondamentales des opérateurs annihilation-création, il est essentiel que les électrons excités ne soient ni des électrons l ni des électrons l' c'est-à-dire que l'on n'ait pas à considérer les interactions du type :

$$l^N l'^{N'} \rightarrow l^{N-2} l'^{N'+2}$$

par exemple. En d'autres termes, ceci signifie que toutes les configurations $l^N, l^{N-1}l', \dots, ll'^{N-1}, l'^N$ doivent être traitées simultanément dans l'approximation du premier ordre, comme nous l'avons déjà signalé.

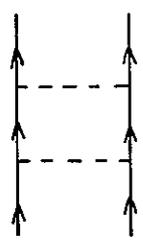
B) Opérateurs Ω_1, Ω_2 et Ω_6

Ces opérateurs agissent uniquement sur l'orbite des électrons, et peuvent être obtenus par généralisation immédiate des résultats de Judd¹⁰. Les effets de Ω_1 sont triviaux et dans une

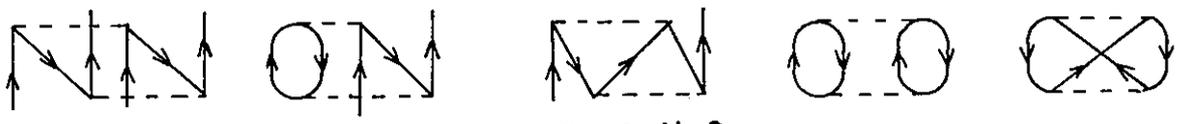
théorie paramétrique, il est possible d'en tenir compte au moyen des paramètres $F^0(l, l)$ et $F^0(l', l')$. Comme dans le cas des configurations l^N ²⁸ cinq types d'interactions seulement contribuent à Ω_2 et Ω_6 , et ne se réduisent pas au seul déplacement du centre de gravité de la configuration $(l+l')^N$; elles font intervenir les configurations excitées suivantes :

- a) $(l+l')^{N-2} l'' l'''$
- b) $(l+l')^{N+2} l''^{-1} l'''^{-1}$
- c) $(l+l')^N l''^{-1} l'''$
- d) $(l+l')^{N-1} l''$
- e) $(l+l')^{N+1} l''^{-1}$

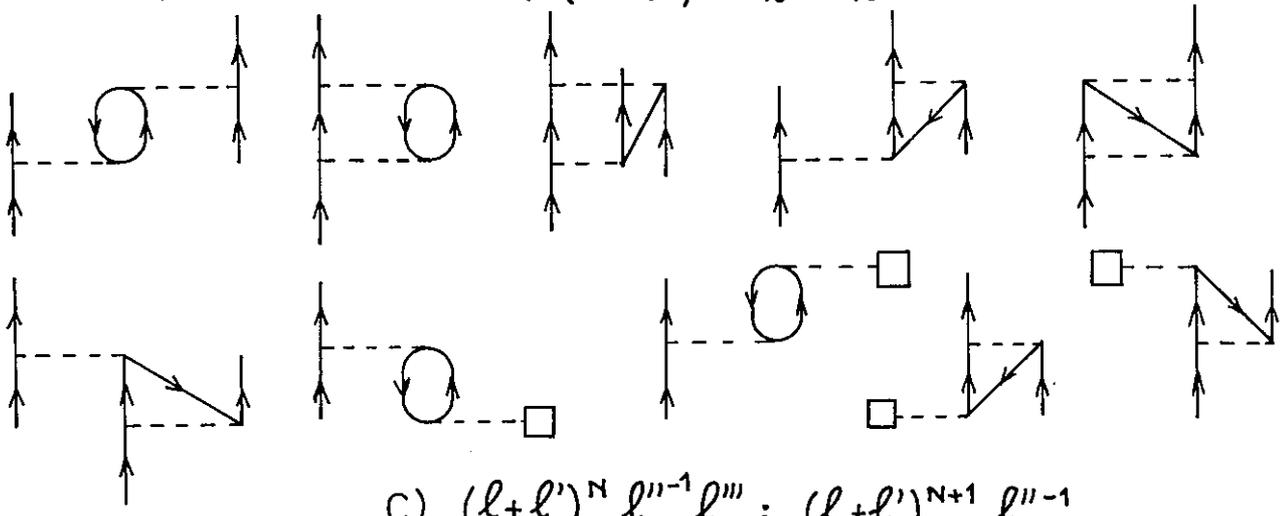
Cependant, si nous exceptons le cas des configurations $f^N \Delta$, nous devons tenir compte des effets des couches complètes et, aux schémas donnés par Judd¹⁰ (figure 3), doivent être ajoutés les 24 diagrammes de Safronova et Tolmachev³² reproduits dans la figure 4. En outre, les branches libres de ces diagrammes représentent soit des électrons l , soit des électrons l' et il existe pour chacun des types de diagramme reproduits dans les figures 3 et 4, plusieurs possibilités suivant les moments angulaires attribués à chacune des branches libres. Au cas D_2 de la figure 3, par exemple, correspondent les 24 diagrammes de la figure 5; le nombre d'opérateurs et de paramètres ainsi introduits semble devenir très grand, mais une étude algébrique complète permet de le réduire notablement. Tout d'abord si l et l' sont de parité différente, un certain nombre de diagrammes peut être éliminé a priori, les huit derniers de la figure 5 par exemple. Dans tous les cas nous pouvons utiliser l'équivalence entre le diagramme de la figure 6 et l'expression suivante, établie à l'aide



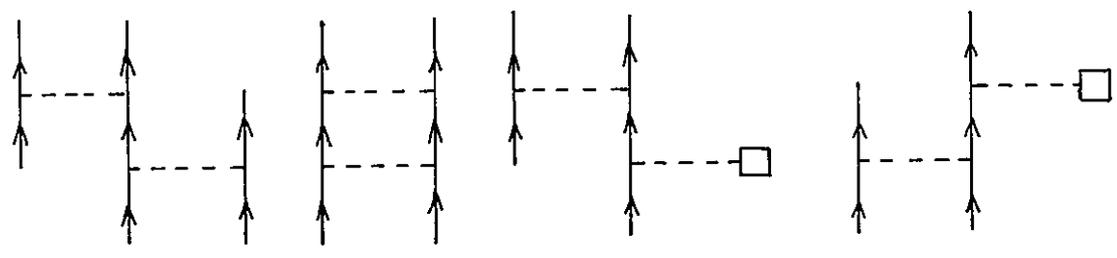
A) $(l+l')^{N-2} l'' l'''$



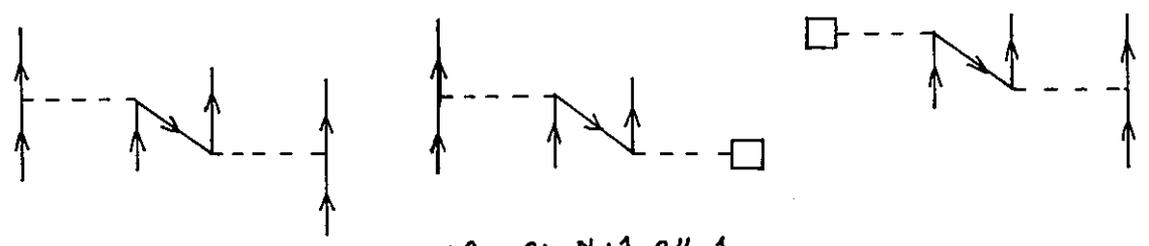
B) $(l+l')^{N+2} l''^{-1} l'''^{-1}$



C) $(l+l')^N l''^{-1} l'''$; $(l+l')^{N+1} l''^{-1}$

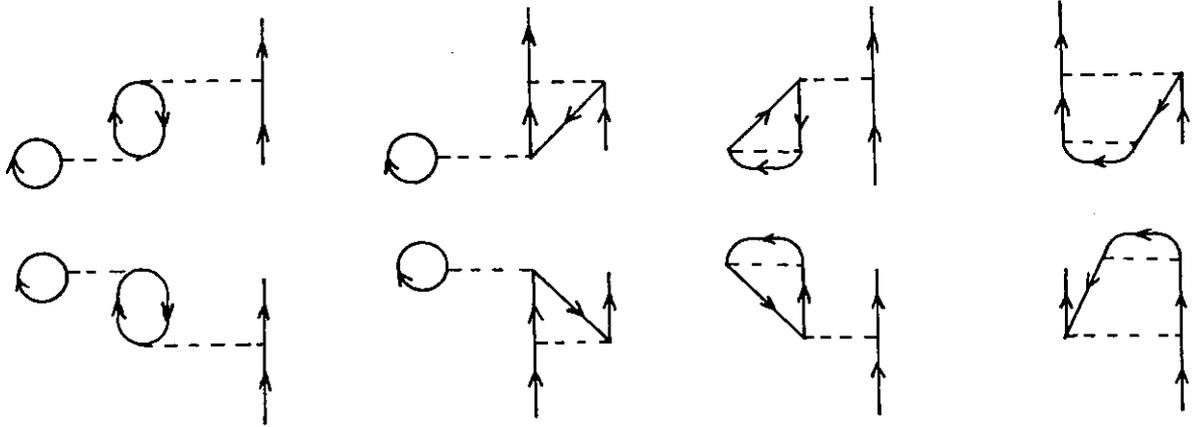


D) $(l+l')^{N-1} l''$

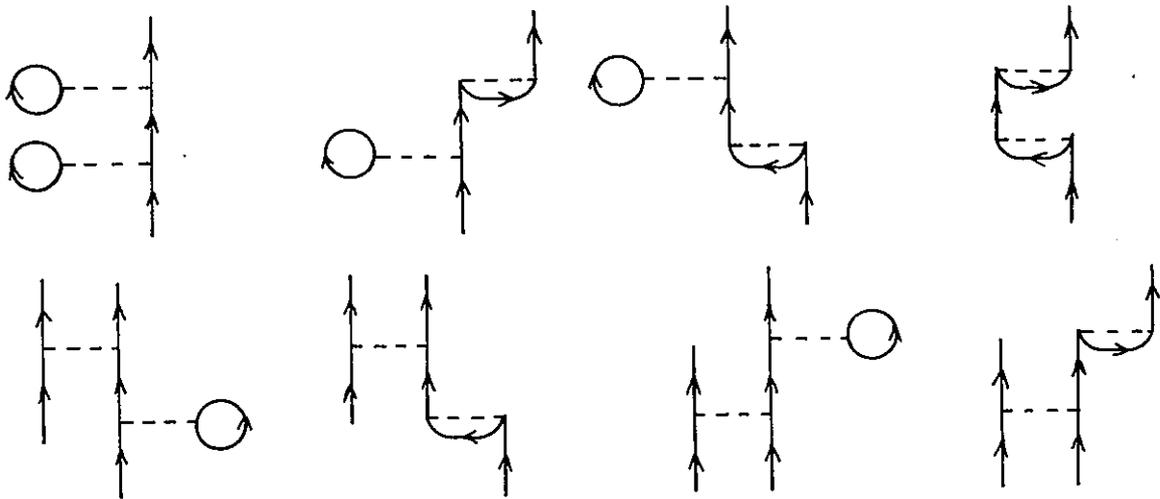


E) $(l+l')^{N+1} l''^{-1}$

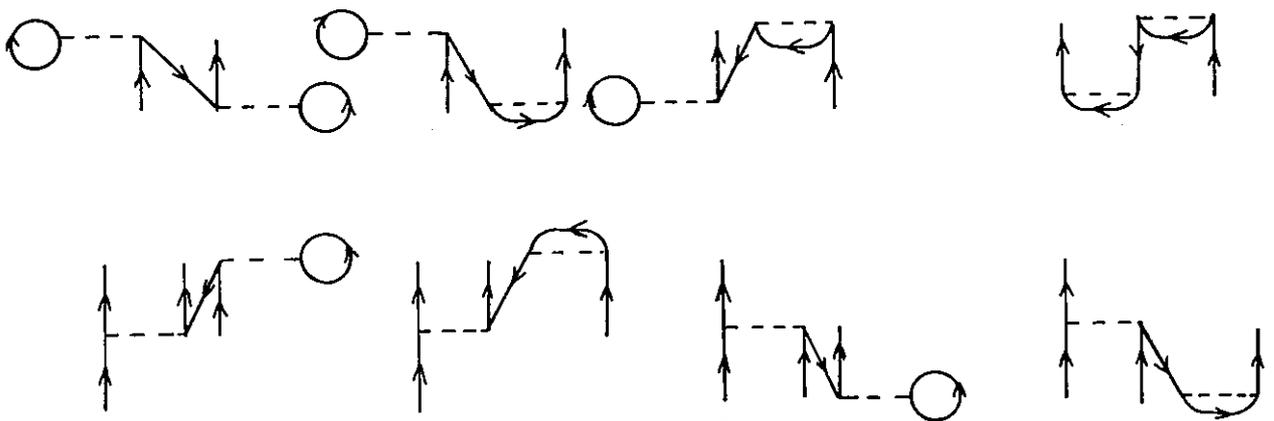
Figure 3



$$(l+l')^N l^{n-1} l''' ; (l+l')^{N+1} l^{n-1}$$



$$(l+l')^{N-1} l''$$



$$(l+l')^{N+1} l^{n-1}$$

Figure 4

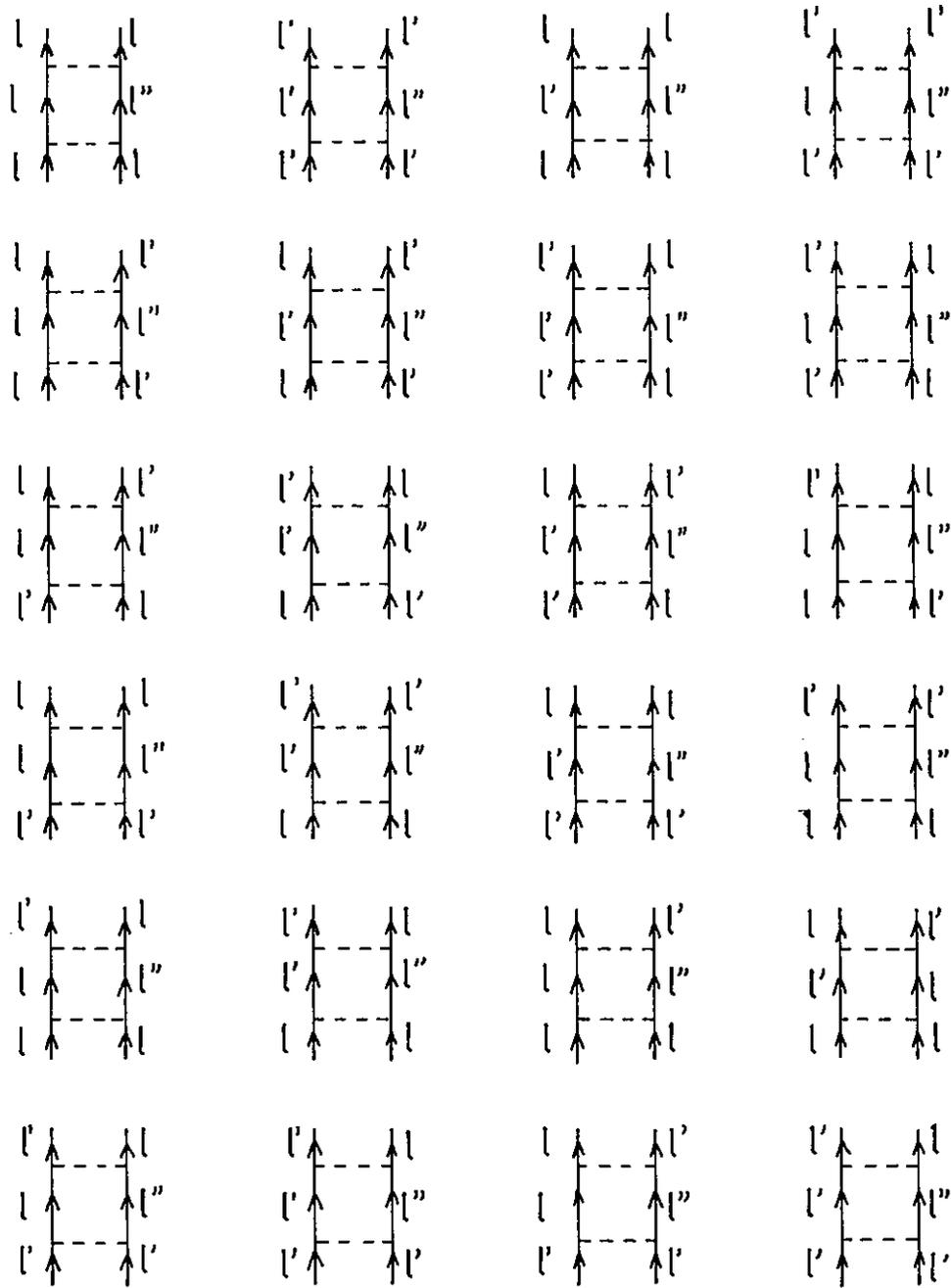


Figure 5

des règles de Jucys³⁴, et dans laquelle les opérateurs $u^{(k)}(l_a, l_b)$ sont ceux définis par Elliott¹² :

$$\sum_{k''} \chi(k''; a, b, c; d, e, f) \sum_{i>j} (u_i^{(k'')} (l_a, l_c) \cdot u_j^{(k'')} (l_d, l_f)),$$

$$\chi(k''; a, b, c; d, e, f) = \sum_{k, k'} [k''] (-1)^{k+k'+k''} \begin{Bmatrix} k & k' & k'' \\ l_c & l_a & l_b \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k & k' & k'' \\ l_f & l_d & l_e \end{Bmatrix}$$

$$\times (l_a \| c^{(k)} \| l_b) (l_b \| c^{(k')} \| l_c) (l_d \| c^{(k)} \| l_e) (l_e \| c^{(k')} \| l_f)$$

$$\times R^{(k)}(l_a, l_d; l_b, l_e) R^{(k')}(l_c, l_f; l_b, l_e) \left(-\frac{1}{\Delta E}\right).$$

Les 24 diagrammes de la figure 5 conduisent aux seuls opérateurs suivants, dont un grand nombre est déjà présent dans l'expression de l'interaction coulombienne à l'intérieur de la configuration $(l+l')^N$:

$$\sum_{k''} \chi^{(k'')} (l l l l) \sum_{i>j} (u_i^{(k'')} (l, l) \cdot u_j^{(k'')} (l, l))$$

$$\sum_{k''} \chi^{(k'')} (l' l' l' l') \sum_{i>j} (u_i^{(k'')} (l', l') \cdot u_j^{(k'')} (l', l'))$$

$$\sum_{k''} \chi^{(k'')} (l l l' l') \sum_{i>j} [(u_i^{(k'')} (l, l) \cdot u_j^{(k'')} (l', l')) + (u_i^{(k'')} (l', l') \cdot u_j^{(k'')} (l, l))]$$

$$\sum_{k'' \text{ pair}} \chi^{(k'')} (l l l l') \sum_{i>j} [(u_i^{(k'')} (l, l) \cdot \bar{u}_j^{(k'')} (l, l')) + (\bar{u}_i^{(k'')} (l, l') \cdot u_j^{(k'')} (l, l))]$$

$$\sum_{k'' \text{ impair}} \chi^{(k'')} (l l l l') \sum_{i>j} [(u_i^{(k'')} (l, l) \cdot \bar{u}_j^{(k'')} (l, l')) + (\bar{u}_i^{(k'')} (l, l') \cdot u_j^{(k'')} (l, l))]$$

$$\sum_{k'' \text{ pair}} \chi^{(k'')} (l' l' l' l') \sum_{i>j} [(u_i^{(k'')} (l', l') \cdot \bar{u}_j^{(k'')} (l', l')) + (\bar{u}_i^{(k'')} (l', l') \cdot u_j^{(k'')} (l', l'))]$$

$$\sum_{k'' \text{ impair}} \chi^{(k'')} (l' l' l' l') \sum_{i>j} [(u_i^{(k'')} (l', l') \cdot \bar{u}_j^{(k'')} (l', l')) + (\bar{u}_i^{(k'')} (l', l') \cdot u_j^{(k'')} (l', l'))]$$

$$\sum_{k''} \chi^{(k'')} (l l' l l') \sum_{i>j} (\bar{u}_i^{(k'')} (l, l') \cdot \bar{u}_j^{(k'')} (l, l))$$

$$\sum_{k''} \chi^{(k'')} (l l' l l') \sum_{i>j} (\bar{u}_i^{(k'')} (l, l') \cdot \bar{u}_j^{(k'')} (l, l))$$

$$\bar{u}_i^{+(k'')} (l, l') = u^{(k'')} (l, l') + (-1)^{k''} u^{(k'')} (l', l),$$

$$\bar{u}_i^{(k'')} (l, l') = u^{(k'')} (l, l') - (-1)^{k''} u^{(k'')} (l', l).$$

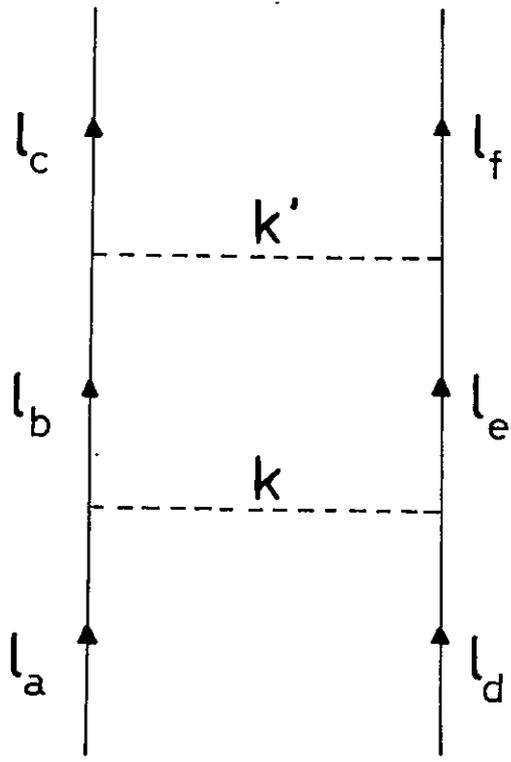


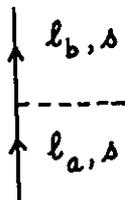
Figure 6

Tous les autres types de diagrammes des figures 3 et 4 peuvent être traités de manière analogue, et l'on montre ainsi que les opérateurs Ω_2 et Ω_3 sont représentés par un certain nombre d'interactions effectives à une, deux et trois particules. Les effets des opérateurs à une particule, de rang zéro, sont absorbés par les paramètres

$F^0(l,l)$ et $F^0(l',l')$; les opérateurs à deux particules sont ceux écrits précédemment, et les opérateurs à trois particules, parfaitement symétriques relativement à l'échange de deux électrons, sont construits à partir des opérateurs $U^{(k)}(l,l)$ ($0 < k \leq 2l$), $U^{(k)}(l',l')$ ($0 < k_{\text{pair}} \leq 2l'$) et $U^{+(k'')}(l,l')$ ($|l-l'| \leq k \leq (l+l')$, parité identique à celle de $l+l'$). L'analogie entre ces résultats et ceux qui ont été obtenus pour les configurations d'électrons équivalents, est évidente.

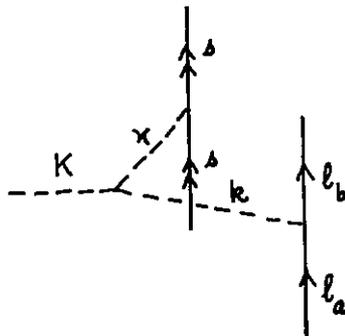
6) Opérateurs Ω_3 , Ω_4 et Ω_5

Ces opérateurs agissent sur le spin et l'orbite des électrons et le premier problème est de représenter graphiquement l'interaction spin-orbite. Suivant Goldstone³⁵, à un opérateur à un électron est associé le diagramme suivant :

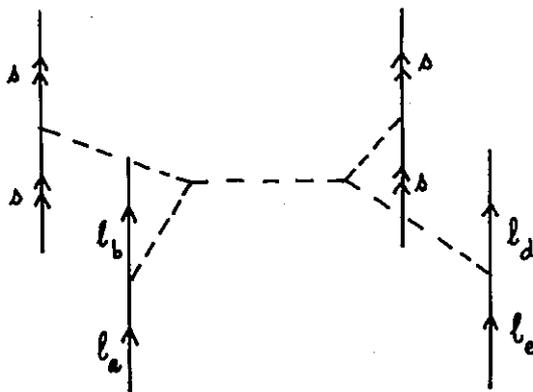


L'impossibilité d'introduire dans cette forme les rangs respectifs de l'opérateur relativement au spin et à l'orbite est évidente, seul peut être précisé le rang total. Pour remédier à cet inconvénient, nous représentons un opérateur à un électron de rang total K , et de rangs respectifs κ et k relativement au spin et l'orbite par le

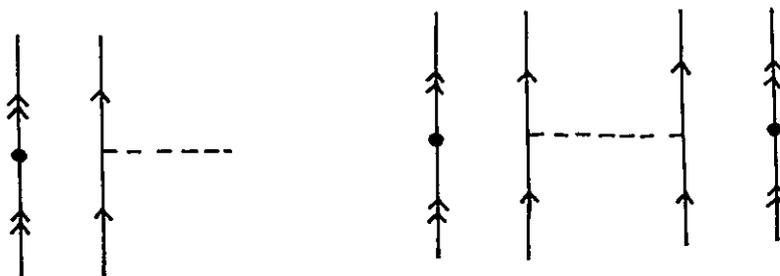
diagramme suivant :



de la même manière, un opérateur à deux électrons aura la représentation suivante :



Dans le cas où κ est égal à zéro (opérateurs indépendants du spin) les diagrammes précédents se réduisent immédiatement à ceux que nous avons utilisés dans le paragraphe précédent :



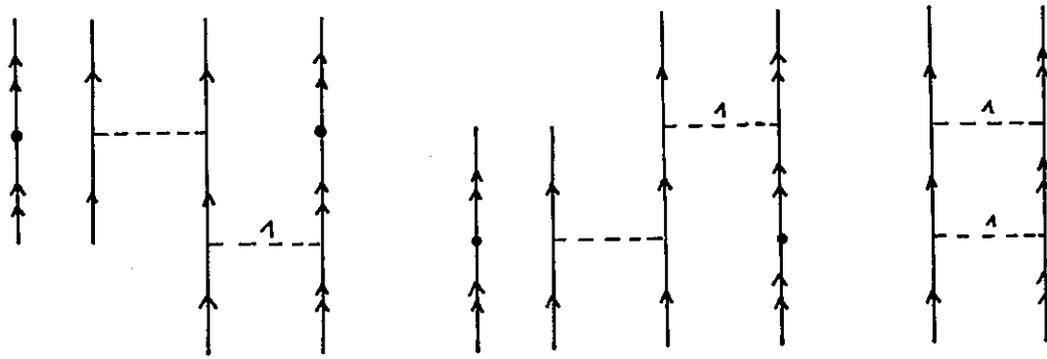
Dans tous les cas, la méthode qui a été résumée dans le paragraphe II peut être utilisée, et la construction des diagrammes correspondant à un certain type d'interaction s'obtient sans difficulté par généralisation des règles données par Judd¹⁰ pour les opérateurs indépendants du spin. Dans le cas considéré deux types d'interaction seulement contribuent à Ω_3 , Ω_4 et Ω_5 ; elles font intervenir les configurations excitées suivantes :

$$\begin{aligned} \text{a)} & ((nl) + (n'l'))^{N-1} (n''l) \text{ ou } (n''l') \\ \text{b)} & ((nl) + (n'l'))^{N+1} (n''l)^{-1} \text{ ou } (n''l')^{-1} \end{aligned}$$

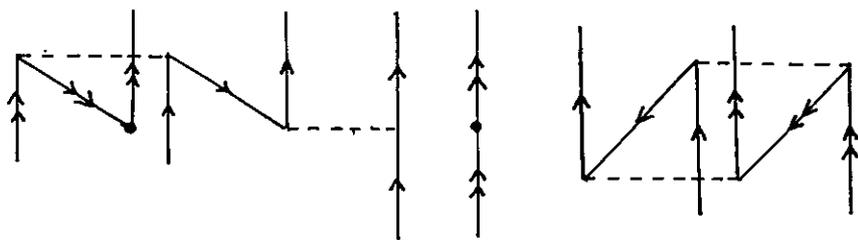
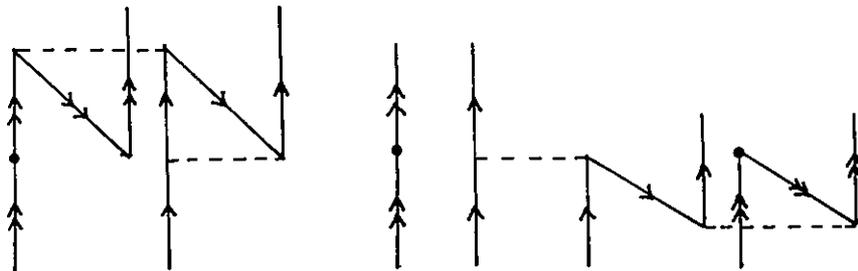
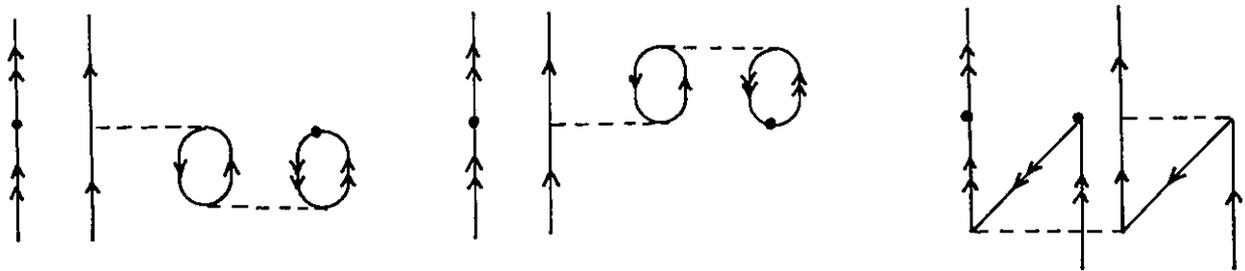
Les diagrammes correspondant à Ω_3 et Ω_4 ont été réunis dans la figure 7 (les effets de Ω_5 sont en effet triviaux). Ces diagrammes sont encore topologiquement identiques aux diagrammes moments angulaires de Jucys³⁴ et la correspondance entre le diagramme de la figure 8 et l'expression suivante par exemple peut être établie sans difficulté :

$$\begin{aligned} & (3l_a(l_{a+1})(2l_{a+1}))^{1/2} / 2 (l_a \parallel c^{(k)} \parallel l_d)(l_b \parallel c^{(k)} \parallel l_c) \\ & \zeta_2(nl_a, n'l_a) R^{(k)}(n'l_a, l_d; l_b, l_c) \times \left(-\frac{1}{\Delta E}\right) \\ & \sum_t (-1)^{k+t+1} [t] \begin{Bmatrix} k & t & 1 \\ l_a & l_a & l_d \end{Bmatrix} \sum_{i>j} (v_i^{(0k)k}(l_b, l_c) \cdot v_j^{(1t)k}(l_a, l_d)), \\ & ((l'' \parallel v^{(xk)}(l_a, l_b) \parallel l''') = \delta(l_b, l''') \delta(l_a, l''). \end{aligned}$$

Si nous considérons le cas où $l_a = l_b = l_c = l_d = l$, elle permet de retrouver dans sa forme tensorielle l'équation (14)³⁰ de Rajnak et Wybourne. Plus généralement, les branches libres de ces diagrammes



$$(l + l')^{N-1} l \text{ ou } l'$$



$$(l + l')^{N+1} l^{-1} \text{ ou } l'^{-1}$$

Figure 7

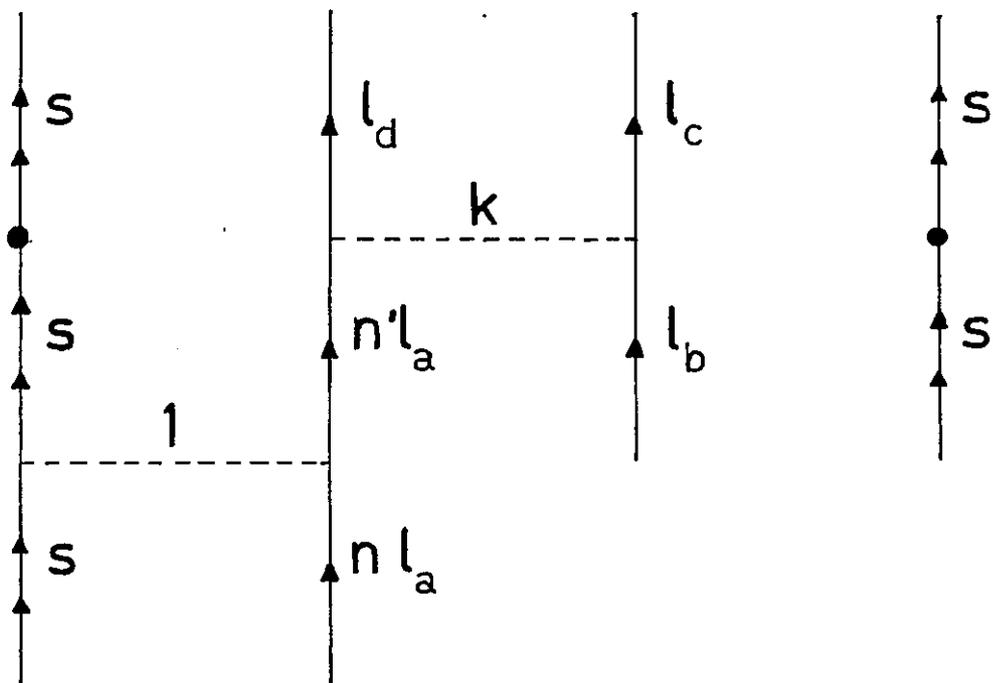


Figure 8

représentent soit des électrons l soit des électrons l' , et le diagramme précédent conduit aux opérateurs suivants :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l l l) \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l & l & l \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l, l) \cdot v_j^{(1t)k}(l, l)), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l' l' l' l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l' & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l', l') \cdot v_j^{(1t)k}(l', l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l' l' l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l' & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l, l) \cdot v_j^{(1t)k}(l', l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l' l' l l) \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l & l & l \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l', l') \cdot v_j^{(1t)k}(l, l)), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l l l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l' & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l, l) \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l l' l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l, l) \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l' l' l' l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l', l') \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l' l' l l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l' & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l', l') \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l' l l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l, l') \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l' l' l) \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l' & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{(0k)k}(l, l') \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l' l l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l' & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{+(0k)k}(l, l') \cdot v_j^{(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{k \text{ pair}} \gamma^{(k)}(l l' l' l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l' & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{+(0k)k}(l, l') \cdot v_j^{(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{\substack{k \\ \text{parité de } l+l'}} \gamma^{(k)}(l l' l l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{+(0k)k}(l, l') \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')), \\
 & \sum_{\substack{k \\ \text{parité de } l+l'}} \gamma^{(k)}(l l' l' l') \sum_{\substack{t \\ \text{impair}}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ l & l' & l' \end{Bmatrix} \sum_{i \neq j} (v_i^{+(0k)k}(l, l') \cdot v_j^{+(1t)k}(l, l')),
 \end{aligned}$$

$$(v^{+(xk)}(l, l') = v^{(xk)}(l, l') + (-1)^{x+k} v^{(xk)}(l', l)).$$

L'étude détaillée de l'ensemble des diagrammes de la figure 4 montre d'ailleurs que ces opérateurs représentent tous les effets Ω_3 , Ω_4 et Ω_5 qui ne se réduisent pas à une modification des paramètres $F^0(l,l)$, $F^0(l',l')$, $\zeta_2(l,l)$ et $\zeta_2(l',l')$.

En conséquence, l'ensemble de ces résultats montre que dans l'approximation du second ordre, tous les effets des interactions de configuration sur les configurations $(l+l')^N$ peuvent être représentés par :

- a) des opérateurs à deux et trois particules agissant uniquement sur l'orbite des électrons;
- b) deux opérateurs respectivement proportionnels au couplage spin-orbite des électrons l et des électrons l' ;
- c) des opérateurs à deux corps agissant simultanément sur le spin et l'orbite des électrons.

Qualitativement, ces résultats sont identiques à ceux obtenus pour les configurations d'électrons équivalents :

IV SYMETRIE DES OPERATEURS A TROIS PARTICULES POUR LES CONFIGURATIONS $(d+s)^N$.

Il a été montré dans le chapitre précédent qu'une partie des effets des excitations monoélectroniques sur les configurations $(l+l')^N$ peut être représentée dans l'approximation du second ordre au moyen d'opérateurs effectifs à trois particules. Ces opérateurs $V(k k' k'')$, scalaires et parfaitement symétriques relativement à

l'échange de deux électrons, sont construits à partir des opérateurs :

$$\begin{aligned} & \mathbf{v}^{(k)}(\ell, \ell) \quad (0 < k \text{ pair} \leq 2\ell), \quad \mathbf{v}^{(k)}(\ell', \ell') \quad (0 < k \text{ pair} \leq 2\ell'), \\ & \mathbf{v}^{+(k)}(\ell, \ell') = (\mathbf{v}^{(k)}(\ell, \ell') + (-1)^k \mathbf{v}^{(k)}(\ell', \ell)) 2^{-1/2} \quad (|\ell - \ell'| \leq k \leq \ell + \ell', \text{parité de } \ell + \ell'). \end{aligned}$$

Ces opérateurs sont définis par la relation suivante :

$(\ell'' \parallel \mathbf{v}^{(k)}(\ell_a, \ell_b) \parallel \ell''') = [k]^{1/2} \delta(\ell_a, \ell'') \delta(\ell_b, \ell''')$. Pour les configurations $(d+\Delta)^N (\ell=2, \ell'=0)$, ces opérateurs de base se réduisent à $\mathbf{v}^{(2)}(d, d)$, $\mathbf{v}^{(4)}(d, d)$ et $\mathbf{v}^{+(2)}(d, \Delta)$; dans tous les cas l'échange de deux quelconques de ces opérateurs laisse invariant $V(k k' k'')$ et en conséquence, seules les dix possibilités suivantes sont à considérer pour la triade $(k k' k'')$:

$$(222) \quad (222^{\dagger}) \quad (222^{\dagger\dagger}) \quad (222^{\dagger\dagger\dagger}) \quad (224) \quad (224^{\dagger}) \quad (224^{\dagger\dagger}) \quad (244) \quad (244^{\dagger}) \quad (444).$$

le nombre de paramètres ainsi introduits est donc assez élevé, mais il en était de même à priori pour les configurations d'électrons équivalents ^{10,29,32} et dans ce cas l'utilisation des propriétés de symétrie des opérateurs $V(k k' k'')$ dans les opérations de divers groupes continus a permis de réduire notablement le nombre de paramètres réellement nécessaires pour décrire l'interaction effective à trois particules ^{36,37}. Or, nous avons vu que l'ensemble des concepts introduits par l'intermédiaire de la théorie des groupes de Lie et de la seconde quantification, pour les configurations d'électrons équivalents ℓ^N , se généralise sans difficultés aux configurations $(\ell + \ell')^N$, et l'étude des propriétés de symétrie des opérateurs de l'interaction coulombienne à l'intérieur des configurations $(d+\Delta)^N$ a conduit à des résultats en parfaite analogie avec ceux obtenus par Racah⁶, pour des électrons équivalents. Il était donc possible d'étudier les propriétés de symétrie des opérateurs à trois

particules pour les configurations $(d+\Delta)^N$ et de chercher ainsi à réduire le nombre de paramètres nécessaires pour représenter cette interaction effective. En conséquence, nous avons construit des combinaisons linéaires des opérateurs $V(k k' k'')$ possédant des propriétés de symétrie bien définies dans les opérations des groupes de rotation R_5 et R_6 . Les propriétés de ces opérateurs ont été ensuite examinées dans la symétrie symplectique et relativement à l'espace de quasi-spin. Finalement, les résultats ainsi obtenus ont permis de montrer que pour les configurations $(d+\Delta)^N$, l'interaction effective à trois particules peut être représentée au moyen de cinq paramètres supplémentaires seulement.

A) Opérateurs

Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, les opérateurs de base $(2) (4) (2^+)$ peuvent être classés suivant leurs propriétés de transformation dans les opérations des groupes de rotation en cinq et six dimensions R_5 et R_6 (2) et (4) d'une part, et (2^+) d'autre part se transforment respectivement comme les représentations irréductibles (20) et (10) de R_5 . L'ensemble de ces trois opérateurs ne forme pas une représentation irréductible de R_6 , mais si nous ajoutons l'opérateur $(0) = 6^{-1/2} [v^{(0)}(d,d) - 5^{1/2} v^{(0)}(\Delta,\Delta)]$ qui se transforme comme (00) de R_5 , il constitue alors la représentation (200) de R_6 . Pour pouvoir construire des opérateurs à trois particules se transformant comme une représentation donnée \mathcal{W} de R_6 et \mathcal{V} de R_5 , il est donc nécessaire de considérer en plus des dix opérateurs introduits précédemment, les cinq opérateurs suivants :

$$(000) (022) (022^+) (022^{++}) (044).$$

L'introduction de ces opérateurs ne constitue pas une difficulté; il est en effet toujours possible dans le résultat final d'annuler les paramètres correspondants .

Les opérateurs à trois particules considérés sont parfaitement symétriques et scalaires; en conséquence, les représentations \mathcal{W} et \mathcal{V} qui interviennent effectivement dans leur classification sont celles qui apparaissent dans la réduction des divers produits de Kronecker $[(200)(00), (10), (20)]^3$, appartiennent à la représentation $[3]$ de U_{20} et contiennent une représentation S dans leur réduction au groupe R_3 , c'est-à-dire :

$$\begin{array}{cccccc} (600)(60) & (600)(30) & (600)(00) & (420)(42) & (420)(30) & (400)(30) \\ (400)(00) & (310)(30) & (222)(22) & (22-2)(22) & (220)(22) & 2(200)(00) \\ (000)(00) & & & & & \end{array}$$

Les opérateurs à trois particules se transformant comme \mathcal{W} de R_6 et \mathcal{V} de R_5 peuvent être écrits comme la composante scalaire $t(\mathcal{W}\mathcal{V})$ d'un tenseur généralisé. Plus précisément, si nous tenons compte des factorisations habituelles des coefficients (V-C), $t(\mathcal{W}\mathcal{V})$ peut être écrit sous la forme suivante :

$$t(\mathcal{W}\mathcal{V}) = \sum_{(k k' k'')} (k k' k'' | \mathcal{W}\mathcal{V}) V(k k' k'')$$

dans laquelle les coefficients $(k k' k'' | \mathcal{W}\mathcal{V})$ sont égaux à :

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathcal{W}'} ([1](200) + [1](200) | [2]\mathcal{W}') ([2]\mathcal{W}' + [1](200) | [3]\mathcal{W}) \\ & \sum_{\mathcal{V}'} ((200)\mathcal{V}_1 + (200)\mathcal{V}_2 | \mathcal{W}'\mathcal{V}') (\mathcal{W}'\mathcal{V}' + (200)\mathcal{V}_3 | \mathcal{W}\mathcal{V}) \\ & \times (\mathcal{V}_1 k + \mathcal{V}_2 k' | \mathcal{V}_3 k'') (\mathcal{V}' k'' + \mathcal{V}_3 k'' | \mathcal{V}0) \end{aligned}$$

Les coefficients qui interviennent dans l'expression de $(k k' k'' | \mathcal{W}\mathcal{V})$

vérifient les relations d'orthonormalité (4.4.).

Ces relations ont été extrêmement utiles dans la détermination effective de ces coefficients, qui a été conduite par l'emploi du théorème de Wigner-Eckart et d'une méthode de projection analogue à celle utilisée dans le calcul des coefficients de parenté fractionnelle. Cette méthode, qui repose essentiellement sur les propriétés des opérateurs de Casimir¹⁸ $G(R_6)$ et $G(R_5)$, nécessitait la connaissance des éléments de matrice réduits :

$$(\mathcal{W}\mathcal{V}k \parallel V^{(2)}(d,\delta) - V^{(2)}(\delta,d) \parallel \mathcal{W}'\mathcal{V}'k')$$

Or, la représentation (400) par exemple, n'apparaît pas dans la classification des états de $(d+\delta)^N$, il était donc impossible de calculer les éléments de matrice réduits :

$$((400)\mathcal{V}k \parallel V^{(2)}(d,\delta) - V^{(2)}(\delta,d) \parallel (400)\mathcal{V}'k')$$

à l'aide des techniques habituelles. Nous les avons donc déterminées par un calcul en chaîne, utilisant les éléments de matrice réduits :

$$((300)\mathcal{V}k \parallel V^{(2)}(d,\delta) - V^{(2)}(\delta,d) \parallel (300)\mathcal{V}'k')$$

eux-mêmes obtenus à partir des seuls :

$$((200)\mathcal{V}k \parallel V^{(2)}(d,\delta) - V^{(2)}(\delta,d) \parallel (200)\mathcal{V}'k')$$

qui peuvent être calculés par les méthodes classiques. Les résultats finaux nécessaires à la construction des opérateurs; $\mathcal{L}(\mathcal{W}\mathcal{V})$ ont été reportés dans les tableaux XXVII, XXVIII, XXIX, et XXX. Nous avons écarté de ces tableaux un certain nombre de coefficients égaux à l'unité.

Les coefficients $([1](200) + [1](200) \mid [2]\mathcal{W}')$ peuvent être pris égaux à un, et les coefficients $([2]\mathcal{W}' + [1](200) \mid [3]\mathcal{W})$ qui ont été reportés dans le tableau XXI, ont été déterminés de façon telle que les coefficients $(k k' k'' \mid \mathcal{W}\mathcal{V})$

TABLEAU XXVII

$$(\mathcal{V}' k'' | \mathcal{V}_1 k + \mathcal{V}_2 k') = (\mathcal{V}' k'' | \mathcal{V}_2 k' + \mathcal{V}_1 k)$$

k k'				22	42	44
\mathcal{V}_1	\mathcal{V}_2	k''	\mathcal{V}'			
(20)	(20)	0	(00)	$(5/14)^{1/2}$	0	$(9/14)^{1/2}$
			(22)	$(9/14)^{1/2}$	0	$(5/14)^{1/2}$
		2	(20)	$-(5/147)^{1/2}$	$(16/147)^{1/2}$	$(110/147)^{1/2}$
			(22)	$-(18/49)^{1/2}$	$(10/49)^{1/2}$	$-(11/49)^{1/2}$
			(40)	$-(176/294)^{1/2}$	$-(55/294)^{1/2}$	$(8/294)^{1/2}$
		4	(20)	$(80/1323)^{1/2}$	$(550/1323)^{1/2}$	$(143/1323)^{1/2}$
			(22)	$(704/1764)^{1/2}$	$(10/1764)^{1/2}$	$-(1040/1764)^{1/2}$
			(40)	$(715/1323)^{1/2}$	$(104/1323)^{1/2}$	$(400/1323)^{1/2}$
(20)	(10)	2	(10)	$(5/14)^{1/2}$	$(9/14)^{1/2}$	0
			(21)	$(9/14)^{1/2}$	$-(5/14)^{1/2}$	0
		4	(21)	$-(10/21)^{1/2}$	$(11/21)^{1/2}$	0
			(30)	$-(11/21)^{1/2}$	$(10/21)^{1/2}$	0

TABLEAU XXVIII

$$((200)\nu_1 + (200)\nu_2 | \tau\nu', \nu')$$

		(200)			(220)			(400)				
		(00)	(10)	(20)	(20)	(21)	(22)	(00)	(10)	(20)	(30)	(40)
ν_1	ν_2	$\tau\nu'$	ν'	ν'	ν'	ν'	ν'	ν'	ν'	ν'	ν'	ν'
(00)	(00)	$(1/20)^{1/2}$	0	0	0	0	0	0	$-(63/100)^{1/2}$	0	0	0
	(10)	0	0	$-(4/50)^{1/2}$	0	0	0	0	0	$-(21/50)^{1/2}$	0	0
	(20)	0	0	0	$(2/100)^{1/2}$	$-(6/20)^{1/2}$	0	0	0	0	$-(18/100)^{1/2}$	0
(10)	(00)	0	0	$-(4/50)^{1/2}$	0	0	0	0	0	$-(21/50)^{1/2}$	0	0
	(10)	$(5/20)^{1/2}$	$-(10/25)^{1/2}$	0	$(15/100)^{1/2}$	$-(5/20)^{1/2}$	0	0	$(35/100)^{1/2}$	0	$(60/100)^{1/2}$	0
	(20)	0	0	$(21/50)^{1/2}$	0	0	$-(1/2)^{1/2}$	0	0	$-(4/50)^{1/2}$	0	$(1/2)^{1/2}$
(20)	(00)	0	0	0	$(2/100)^{1/2}$	$-(6/20)^{1/2}$	0	0	0	0	$-(18/100)^{1/2}$	0
	(10)	0	0	$(21/50)^{1/2}$	0	0	$-(1/2)^{1/2}$	0	0	$-(4/50)^{1/2}$	0	$(1/2)^{1/2}$
	(20)	$(14/20)^{1/2}$	$(7/25)^{1/2}$	0	$(81/100)^{1/2}$	$(3/20)^{1/2}$	0	-1	$-(2/100)^{1/2}$	0	$-(4/100)^{1/2}$	1

TABLEAU XXIX

$$(\tau_0 | \tau' k'' + \tau_3 k'')$$

		τ	(60)	(42)	(30)	(22)	(00)
τ_3	$\tau' k''$						
(20)	(20) 2		0	0	0	$(9/14)^{1/2}$	$(5/14)^{1/2}$
	4		0	0	0	$-(5/14)^{1/2}$	$(9/14)^{1/2}$
(21)	2		0	0	$-(3/7)^{1/2}$	$(4/7)^{1/2}$	0
	4		0	0	$(4/7)^{1/2}$	$(3/7)^{1/2}$	0
(22)	2		0	$(11/21)^{1/2}$	0	$(10/21)^{1/2}$	0
	4		0	$-(10/21)^{1/2}$	0	$(11/21)^{1/2}$	0
(40)	2		$(26/35)^{1/2}$	$(9/35)^{1/2}$	0	0	0
	4		$-(9/35)^{1/2}$	$(26/35)^{1/2}$	0	0	0

TABLEAU XXX (SUITE)

τ_3	τ	τ'	τ	τ	(310)	(400)	(420)	(600)
(10)	(200)	(20)			$-(1/2)^{1/2}$	$(1/2)^{1/2}$	-	-
(20)		(10)			$(1/2)^{1/2}$	$(1/2)^{1/2}$	-	-
(10)	(220)	(20)			$-(3/4)^{1/2}$	$(1/4)^{1/2}$	-	-
(20)		(21)			$(1/4)^{1/2}$	$-(3/4)^{1/2}$	-	-
(00)	(400)	(30)	(30)		$(126/672)^{1/2}$	$(14/1568)^{1/2}$	$(1134/5600)^{1/2}$	$-(693/3675)^{1/2}$
(10)		(20)			$(56/672)^{1/2}$	$-(224/1568)^{1/2}$	$(1400/5600)^{1/2}$	$(1925/3675)^{1/2}$
(10)		(40)			$(385/672)^{1/2}$	$(385/1568)^{1/2}$	$-(385/5600)^{1/2}$	$(70/3675)^{1/2}$
(20)		(10)			$-(6/672)^{1/2}$	$(54/1568)^{1/2}$	$-(1350/5600)^{1/2}$	$(825/3675)^{1/2}$
(20)		(30)			$-(99/672)^{1/2}$	$(891/1568)^{1/2}$	$(1331/5600)^{1/2}$	$(162/3675)^{1/2}$
(20)	(220)	(22)	(42)		-	-	1	-
(20)	(400)	(40)			-	-	1	-
(20)	(400)	(40)	(60)		-	-	-	1

TABLEAU XXXI
 ([3] τ | [2] τ' + [1] (200))

τ	τ'	(000)	(200)	(220)	(400)
(000)		0	1	0	0
(200) _a		$(64/1320)^{1/2}$	$(500/1320)^{1/2}$	$-(756/1320)^{1/2}$	0
(200) _b		$(420/1320)^{1/2}$	$(336/1320)^{1/2}$	$(80/1320)^{1/2}$	0
(220)		0	$(1/6)^{1/2}$	$-(5/6)^{1/2}$	0
(22±2)		0	0	1	0
(310)		0	$-(6/15)^{1/2}$	$-(5/15)^{1/2}$	$(4/15)^{1/2}$
(400)		0	$-(7/15)^{1/2}$	0	$(8/15)^{1/2}$
(420)		0	0	$(5/9)^{1/2}$	$(4/9)^{1/2}$
(600)		0	0	0	1

soient invariants dans une permutation quelconque de k, k', k'' . Cette détermination a pu être faite sans aucune ambiguïté, sauf dans le cas $\mathcal{W} \equiv (200)$; dans ce dernier cas, la distinction entre les deux opérateurs $t((200)(00))$ ne peut être qu'arbitraire, elle a donc été faite de façon telle que l'un des opérateurs $t_a((200)(00))$ soit, en fait, un opérateur à deux particules: comme le montre le tableau XXXII, où est donné l'ensemble des coefficients $(k k' k'' | \mathcal{W} \mathcal{V})$ qui vérifient la relation d'orthonormalité suivante :

$$\sum_{(k k' k'')} n(k k' k'') (k k' k'' | \mathcal{W} \mathcal{V}) (k k' k'' | \mathcal{W}' \mathcal{V}') = \delta(\mathcal{W}, \mathcal{W}') \delta(\mathcal{V}, \mathcal{V}')$$

où $n(k k' k'') = 6$ si $k \neq k' \neq k''$, 3 si $k = k' \neq k''$, 1 si $k = k' = k''$.

B) Eléments de matrice et paramètres

Aux quinze opérateurs $t(\mathcal{W} \mathcal{V})$ doivent être associés quinze paramètres que nous noterons $T(\mathcal{W} \mathcal{V})$. En fait, nous savons à priori que parmi ceux-ci, dix seulement sont indépendants, puisque les cinq paramètres relatifs aux opérateurs $(000)(022)(02\bar{2})(0\bar{2}\bar{2})(044)$ doivent être choisis nuls. Nous pouvons convenir, par exemple, de représenter l'interaction effective à trois particules au moyen de dix paramètres: $T((000)(00)), T_a((200)(00)), T((400)(00)), T((220)(22))$, $T((420)(22)), T((310)(30)), T((400)(30)), T((420)(30)), T((420)(42))$ et $T((600)(60))$. En fait, un certain nombre d'entre eux peuvent être éliminés, en raison des propriétés de symétrie des opérateurs $t(\mathcal{W} \mathcal{V})$. Tout d'abord, la représentation (600) n'apparaît dans aucun des produits de Kronecker des diverses représentations de R_6 nécessaires à caractériser les états de $(d+b)^N$, et d'après le théorème de Wigner-Eckart, les éléments de matrice, entre ces états, des

TABLEAU XXXII

(k k' k'' | τ ν)

τ ν	(000) (00)	(200) _a (00)	(200) _b (00)	(400) (00)	(600) (00)
N	(98000) ^{-1/2}	(66) ^{-1/2}	(5659500) ^{-1/2}	(86436000) ^{-1/2}	(1800750) ^{-1/2}
k k' k''					
0 0 0	-(1560) ^{1/2}	(9) ^{1/2}	-(518616) ^{1/2}	-(37340352) ^{1/2}	(583443) ^{1/2}
0 2 2	(490) ^{1/2}	(5) ^{1/2}	(94080) ^{1/2}	(1555260) ^{1/2}	-(6615) ^{1/2}
0 4 4	(882) ^{1/2}	(9) ^{1/2}	(169344) ^{1/2}	(2799468) ^{1/2}	-(11907) ^{1/2}
2 2 2	-(675) ^{1/2}	0	(27225) ^{1/2}	-(36450) ^{1/2}	(50) ^{1/2}
2 2 4	(2160) ^{1/2}	0	-(87120) ^{1/2}	(116640) ^{1/2}	-(160) ^{1/2}
2 4 4	(14850) ^{1/2}	0	-(598950) ^{1/2}	(801900) ^{1/2}	-(1100) ^{1/2}
4 4 4	(3861) ^{1/2}	0	-(155727) ^{1/2}	(208494) ^{1/2}	-(286) ^{1/2}
0 2 ⁺ 2 ⁺	-(1960) ^{1/2}	(5) ^{1/2}	-(288120) ^{1/2}	-(576240) ^{1/2}	(324135) ^{1/2}
2 2 ⁺ 2 ⁺	(3675) ^{1/2}	0	(148225) ^{1/2}	-(3726450) ^{1/2}	(22050) ^{1/2}
4 2 ⁺ 2 ⁺	(6615) ^{1/2}	0	(266805) ^{1/2}	-(6707610) ^{1/2}	(39690) ^{1/2}
0 2 ⁺ 2 ⁺	0	0	0	0	0
2 2 ⁺ 2 ⁺	0	0	0	0	0
2 4 ⁺ 2 ⁺	0	0	0	0	0
4 4 ⁺ 2 ⁺	0	0	0	0	0
2 ⁺ 2 ⁺ 2 ⁺	0	0	0	0	0

TABLEAU XXII

(SUITE)

$\tau \nu$	(220) (22)	(22-2) (22)	(222) (22)	(420) (22)	(310) (30)
N	$(308700)^{-1/2}$	$(164640)^{-1/2}$	$(164640)^{-1/2}$	$(1852200)^{-1/2}$	$(11760)^{-1/2}$
kk'					
0 0 0	0	0	0	0	0
0 2 2	$(10584)^{1/2}$	$-(5292)^{1/2}$	$-(5292)^{1/2}$	$-(214326)^{1/2}$	0
0 4 4	$-(5880)^{1/2}$	$(2940)^{1/2}$	$(2940)^{1/2}$	$(119070)^{1/2}$	0
2 2 2	$-(32805)^{1/2}$	$-(7290)^{1/2}$	$-(7290)^{1/2}$	$(3645)^{1/2}$	0
2 2 4	$(24336)^{1/2}$	$(5408)^{1/2}$	$(5408)^{1/2}$	$-(2704)^{1/2}$	0
2 4 4	$-(990)^{1/2}$	$-(220)^{1/2}$	$-(220)^{1/2}$	$(110)^{1/2}$	0
4 4 4	$-(57915)^{1/2}$	$-(12870)^{1/2}$	$-(12870)^{1/2}$	$(6435)^{1/2}$	0
$0 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	0	0	0	0
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	$(19845)^{1/2}$	$-(4410)^{1/2}$	$-(4410)^{1/2}$	$(178605)^{1/2}$	0
$4 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	$-(11025)^{1/2}$	$(2450)^{1/2}$	$(2450)^{1/2}$	$-(99225)^{1/2}$	0
$0 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	0	0	0	$(294)^{1/2}$
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	$(10080)^{1/2}$	$-(10080)^{1/2}$	0	$-(1445)^{1/2}$
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 4 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	$-(5600)^{1/2}$	$(5600)^{1/2}$	0	$-(81)^{1/2}$
$4 \begin{smallmatrix} + \\ 4 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	$(6160)^{1/2}$	$(6160)^{1/2}$	0	$(990)^{1/2}$
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	0	0	0	$(2205)^{1/2}$

TABLEAU XXII

(SUITE)

$W \quad V$	(400) (30)	(420) (30)	(600) (30)	(420) (42)	(600) (60)
N	$(82320)^{-1/2}$	$(3600)^{-1/2}$	$(17150)^{-1/2}$	$(46305)^{-1/2}$	$(5145)^{-1/2}$
$k \quad k' \quad k''$					
0 0 0	0	0	0	0	0
0 2 2	0	0	0	0	0
0 4 4	0	0	0	0	0
2 2 2	0	0	0	$-(16038)^{1/2}$	$-(2288)^{1/2}$
2 2 4	0	0	0	$(440)^{1/2}$	$-(715)^{1/2}$
2 4 4	0	0	0	$-(1849)^{1/2}$	$(104)^{1/2}$
4 4 4	0	0	0	$(23400)^{1/2}$	$-(400)^{1/2}$
$0 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	0	0	0	0
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	0	0	0	0
$4 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	0	0	0	0	0
$0 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	$(196)^{1/2}$	$(162)^{1/2}$	$-(1617)^{1/2}$	0	0
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	$-(3630)^{1/2}$	$(135)^{1/2}$	$-(110)^{1/2}$	0	0
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 4 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	$-(6534)^{1/2}$	$-(3)^{1/2}$	$-(198)^{1/2}$	0	0
$4 \begin{smallmatrix} + \\ 4 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	$-(5940)^{1/2}$	$-(330)^{1/2}$	$-(180)^{1/2}$	0	0
$2 \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix} \begin{smallmatrix} + \\ 2 \end{smallmatrix}$	$-(13230)^{1/2}$	$-(1215)^{1/2}$	$(5390)^{1/2}$	0	0

opérateurs $\mathcal{L}((600)(00))$, $\mathcal{L}((600)(30))$ et $\mathcal{L}((600)(00))$ sont tous nuls; ces derniers peuvent donc être écartés de l'hamiltonien effectif. En outre, les triples produits de Kronecker $\mathcal{W} \otimes \mathcal{W}' \otimes (400)$ $\mathcal{V} \otimes \mathcal{V}' \otimes (00)$ et $\mathcal{V} \otimes \mathcal{V}' \otimes (30)$ contiennent, au plus, une fois la représentation identité? et pour $(d+\delta)^3$, $c(\mathcal{W} \mathcal{W} (400))$ n'est différent de zéro que dans le cas où $\mathcal{W} \equiv (210)$. Les éléments de matrice des opérateurs $\mathcal{L}((400)(30))$ et $\mathcal{L}((400)(00))$ sont donc respectivement proportionnels à ceux des opérateurs à deux particules e_6 et e_5 déjà introduits dans l'étude de l'interaction coulombienne à l'intérieur de $(d+\delta)^N$; leurs effets sont donc absorbés complètement par les paramètres E_5 et E_6 associés aux opérateurs e_5 et e_6 et dans une théorie paramétrique, nous pouvons choisir $T((400)(00)) = T((400)(30)) = 0$. Il en est de même des paramètres $T_a((200)(00))$ et $T((000)(00))$ puisque l'opérateur $\mathcal{L}_a((200)(00))$ est en fait un opérateur à deux particules, et que les effets de l'opérateur parfaitement scalaire $\mathcal{L}((000)(00))$ sont absorbés par e_0 et e_1 . Finalement, l'hamiltonien à trois particules peut être écrit sous la forme suivante :

$$T_1 \mathcal{L}_a((22)) + T_2 \mathcal{L}_b((22)) + T_3 \mathcal{L}((310)(30)) + T_4 \mathcal{L}((420)(30)) + T_5 \mathcal{L}((420)(42))$$

$$\left[\mathcal{L}_a((22)) = (27/50)^{1/2} \mathcal{L}((220)(22)) + (9/40)^{1/2} \mathcal{L}((222)(22)) + (9/40)^{1/2} \mathcal{L}((22-2)(22)) - (1/10)^{1/2} \mathcal{L}((420)(22)); \right.$$

$\left. \mathcal{L}_b((22)) = (27/35)^{1/2} \mathcal{L}((220)(22)) + (8/35)^{1/2} \mathcal{L}((420)(22)) \right]$
 dans laquelle les opérateurs $\mathcal{L}_a((22))$ et $\mathcal{L}((420)(42))$ sont respectivement identiques aux opérateurs \mathcal{L}_2 et \mathcal{L}_3 , déjà introduits dans l'étude des opérateurs à trois particules pour des électrons d

équivalents³⁷. Cinq paramètres additionnels seulement sont donc nécessaires pour décrire l'interaction effective à trois particules à l'intérieur des configurations $(d+\delta)^N$.

Les éléments de matrice des opérateurs $t(\mathcal{W}\mathcal{V})$ entre les états $|(d+\delta)^N \gamma SL\rangle$ s'expriment sans difficultés à partir de ceux des opérateurs $V(k, k', k'')$ pris entre les états $|d^N \nu SL\rangle$, $|d^{N-1} \nu' S' L', \delta, SL\rangle$ et $|d^{N-2} \nu'' S'' L'', \delta^2, SL\rangle$. Ces éléments de matrice nous ont été très aimablement communiqués par K. Rajnak et J. Schrijvers, et les résultats concernant la configuration $(d+\delta)^3$ ont été portés dans le tableau XXXIII. L'emploi du théorème de Wigner-Eckart permet de vérifier un grand nombre de ces résultats; en particulier, toutes les valeurs nulles correspondent à l'absence de la représentation identité dans les triples produits de Kronecker $c(\mathcal{W}\mathcal{W}'\mathcal{W}'')$ ou $c(\mathcal{V}\mathcal{V}'\mathcal{V}'')$ (un grand nombre de ces coefficients ont déjà été calculés dans le second chapitre, et nous avons porté dans le tableau XXXIV $c(\mathcal{W}\mathcal{W}'(22\pm 2))$, $c(\mathcal{W}\mathcal{W}'(310))$, $c(\mathcal{W}\mathcal{W}'(420))$ et $c(\mathcal{V}\mathcal{V}'(42))$. En outre, le fait par exemple que $c((20)(22)(20))$ soit égal à un permet de prévoir à priori que les équations :

$$\begin{aligned} & ((d+\delta)^3 (210)(20)^2 L | t((220)(22)) | (d+\delta)^3 (210)(20)^2 L) \\ &= -(135/196)^{1/2} ((d+\delta)^3 (210)(20)^2 L | t((222)(22)) | (d+\delta)^3 (210)(20)^2 L) \\ &= -(135/196)^{1/2} ((d+\delta)^3 (210)(20)^2 L | t((222)(22)) | (d+\delta)^3 (210)(20)^2 L) \\ &= -(27/98)^{1/2} ((d+\delta)^3 (210)(20)^2 L | t((420)(22)) | (d+\delta)^3 (210)(20)^2 L) \end{aligned}$$

restent valables quel que soit L .

TABLEAU XXXIII

$$((d+\delta)^3 \Psi | \mathcal{L}(\tau\tau) | (d+\delta)^3 \Psi')$$

$$2S1 \equiv (100) (00) \frac{2}{1}S$$

$$2P1 \equiv (210) (11) \frac{2}{3}P$$

$$2P2 \equiv (210) (21) \frac{2}{3}P$$

$$2D1 \equiv (100) (10) \frac{2}{1}D$$

$$2D2 \equiv (210) (10) \frac{2}{3}D$$

$$2D3 \equiv (210) (20) \frac{2}{3}D$$

$$2D4 \equiv (210) (21) \frac{2}{3}D$$

$$2F1 \equiv (210) (11) \frac{2}{3}F$$

$$2F2 \equiv (210) (21) \frac{2}{3}F$$

$$2G1 \equiv (210) (20) \frac{2}{3}G$$

$$2G2 \equiv (210) (21) \frac{2}{3}G$$

$$2H1 \equiv (210) (21) \frac{2}{3}H$$

$$4P1 \equiv (111) (11) \frac{4}{3}P$$

$$4P2 \equiv (11-1) (11) \frac{4}{3}P$$

$$4F1 \equiv (111) (11) \frac{4}{3}F$$

$$4F2 \equiv (11-1) (11) \frac{4}{3}F$$

TABLEAU XXXIII (SUITE)

Ψ	Ψ'	WV	$(000) (00)$	$(200)_2 (00)$	$(200) (00)_b$	$(400) (00)$	$(600) (00)$
		N	$192^{-1/2}$	$220^{-1/2}$	$92400^{-1/2}$	40^{-1}	
2S1	2S1		-16	-30	420	0	0
2P1	2P1		-1	-7	21	21	0
	2P2		0	0	0	0	0
2P2	2P2		-1	1	-3	-3	0
2D1	2D1		-16	-6	84	0	0
	2D2		0	-4	-252	0	0
	2D3		0	0	0	0	0
	2D4		0	0	0	0	0
2D2	2D2		-1	-7	21	-35	0
	2D3		0	0	0	0	0
	2D4		0	0	0	0	0
2D3	2D3		-1	5	-15	5	0
	2D4		0	0	0	0	0
2D4	2D4		-1	1	-3	-3	0
2F1	2F1		-1	-7	21	21	0
	2F2		0	0	0	0	0
2F2	2F2		-1	1	-3	-3	0
2G1	2G1		-1	5	-15	5	0
	2G2		0	0	0	0	0
2G2	2G2		-1	1	-3	-3	0
2H1	2H1		-1	1	-3	-3	0
4P1	4P1		8	0	0	0	0
	4P2		0	-4	210	0	0
4P2	4P2		8	0	0	0	0
4F1	4F1		8	0	0	0	0
	4F2		0	-4	210	0	0
4F2	4F2		8	0	0	0	0

TABLEAU XXXIII (SUITE)

ψ	ψ'	τ	τ	$(220) (22)$	$(222) (22)$	$(22-2)(22)$	$(420) (22)$	$(310) (30)$
		N	N	$25200^{-1/2}$	$2240^{-1/2}$	$2240^{-1/2}$	$151200^{-1/2}$	$22400^{-1/2}$
2S1	2S1			0	0	0	0	0
2P1	2P1			-21	21	21	567	0
	2P2			0	$-12(7)^{1/2}$	$12(7)^{1/2}$	0	$-3(210)^{1/2}$
2P2	2P2			87	9	9	-9	0
2D1	2D1			0	0	0	0	0
	2D2			0	0	0	0	0
	2D3			0	0	0	0	$32(21)^{1/2}$
	2D4			$12(105)^{1/2}$	0	0	0	0
2D2	2D2			0	0	0	0	0
	2D3			0	0	0	0	$9(21)^{1/2}$
	2D4			$3(105)^{1/2}$	$-3(105)^{1/2}$	$-3(105)^{1/2}$	$27(105)^{1/2}$	0
2D3	2D3			63	-27	-27	-81	0
	2D4			0	$12(6)^{1/2}$	$-12(6)^{1/2}$	0	$-45(3)^{1/2}$
2D4	2D4			24	0	0	-48	0
	2F1			9	-9	-9	-243	0
	2F2			0	$-18(2)^{1/2}$	$18(2)^{1/2}$	0	$-6(15)^{1/2}$
2F2	2F2			-33	-27	-27	-69	0
2G1	2G1			-35	15	15	45	0
	2G2			0	$6(10)^{1/2}$	$6(10)^{1/2}$	0	$30(3)^{1/2}$
2G2	2G2			31	21	21	43	0
2H1	2H1			-39	-9	-9	33	0
4P1	4P1			-210	84	-84	0	0
	4P2			0	84	84	0	0
4P2	4P2			-210	-84	84	0	0
4F1	4F1			180	-36	36	0	0
	4F2			0	-36	-36	0	0
4F2	4F2			180	36	-36	0	0

TABLEAU XXXIII (suite)

ψ \ ψ'		(400) (30)	(420) (30)	(600) (30)	(420) (42)	(600) (60)
N		$320^{-1/2}$	$2688^{-1/2}$		$16632^{-1/2}$	
2S1	2S1	0	0	0	0	0
2P1	2P1	0	0	0	0	0
	2P2	$-3(14)^{1/2}$	-3	0	0	0
2P2	2P2	0	0	0	-198	0
2D1	2D1	0	0	0	0	0
	2D2	0	0	0	0	0
	2D3	0	0	0	0	0
	2D4	0	0	0	0	0
2D2	2D2	0	0	0	0	0
	2D3	$-(35)^{1/2}$	$9(35)^{1/2}$	0	0	0
	2D4	0	0	0	0	0
2D3	2D3	0	0	0	0	0
	2D4	$-3(3)^{1/2}$	$3(3)^{1/2}$	0	0	0
2D4	2D4	0	0	0	132	0
2F1	2F1	0	0	0	0	0
	2F2	6	18	0	0	0
2F2	2F2	0	0	0	-33	0
2G1	2G1	0	0	0	0	0
	2G2	$2(5)^{1/2}$	$-2(5)^{1/2}$	0	0	0
2G2	2G2	0	0	0	55	0
2H1	2H1	0	0	0	-30	0
4P1	4P1	0	0	0	0	0
	4P2	0	0	0	0	0
4P2	4P2	0	0	0	0	0
4F1	4F1	0	0	0	0	0
	4F2	0	0	0	0	0
4F2	4F2	0	0	0	0	0

C) Symétrie symplectique et quasi-spin

Il a été montré antérieurement que les opérateurs de base à partir desquels ont été construits les opérateurs $t(WV)$ ne forment pas une représentation complète du groupe Sp_{12} ; en conséquence, les opérateurs $t(WV)$ ne possèdent pas, à priori, des propriétés de transformations simples dans la symétrie symplectique, et nous ne pouvons pas leur associer une représentation irréductible de Sp_{12} . Cependant, les opérateurs de base précédents sont proportionnels aux tenseurs doubles $\epsilon^{-1/2} [W^{(00)}(d,d) - 5^{1/2} W^{(00)}(d,\delta)]$, $W^{(02)}(d,d)$, $W^{(04)}(d,d)$, et $W^{+(02)}(d,\delta)$, et ces derniers, associés aux opérateurs $W^{(11)}(d,d)$, $W^{(13)}(d,d)$ et $W^{+(12)}(d,\delta)$ constituent la représentation (110000) de Sp_{12} . A partir de ces tenseurs doubles, il est possible de construire des opérateurs à trois particules, auxquels peut être associée une représentation donnée \mathcal{Y} de Sp_{12}^W , de R_6 et \mathcal{V} de R_5 . Les représentations parfaitement symétriques, sont celles qui, apparaissant dans la décomposition du produit Kronecker (110000)³, appartiennent à la représentation [3] de U_{65} , et contiennent une représentation 1S dans leur réduction à $SU_2 \times R_3$; ces représentations ainsi que leur réduction à $SU_2 \times R_6$ ont été portées dans le tableau XXXV. Nous constatons qu'à chaque représentation \mathcal{W} de R_6 peuvent être associées au moins deux représentations \mathcal{Y} de Sp_{12} . Cependant, le théorème de Wigner-Eckart nous montre immédiatement que les éléments de matrice d'un opérateur se transformant comme (330000) sont nécessairement nuls entre les états de $(d+\delta)^N$; en conséquence, aux représentations (400) et (420) peuvent être associées respectivement les représentations (220000) et (221100). Le premier de ces résultats, s'il

peut paraître sans grand intérêt puisque nous avons finalement écarté les opérateurs $t((400)(00))$ et $t((400)(30))$ de l'hamiltonien effectif, montre néanmoins que ces opérateurs à trois particules ont encore les mêmes propriétés de transformation dans la symétrie symplectique que leurs homologues à deux particules e_5 et e_6 . Pour ce qui est des opérateurs $t((420)(30))$, $t((420)(22))$ et $t((420)(42))$, le fait qu'ils se transforment comme (221100) nous permet d'affirmer que leurs éléments de matrice vérifieront la règle de sélection $\Delta v = 0, \pm 2$ puisque les nombres $c(vv'(221100))$ sont nuls si cette règle n'est pas satisfaite (tableau XXXVI). Les représentations (310) , (220) , et (22 ± 2) apparaissent au contraire dans plusieurs représentations de Sp_{12} , et dans ces cas, les opérateurs correspondants ne possèdent pas de propriétés simples relativement à la séniorité.

Nous avons indiqué dans le second chapitre comment on peut établir la relation entre quasi-spin et séniorité. Dans le cas particulier des opérateurs à trois particules, il suffit d'étudier les décompositions des représentations $(00 \dots 0)$, $(110 \dots 0)$, $(1110 \dots 0)$ et $(111110 \dots 0)$ du groupe R_{24} dans sa réduction à $SU_2 \times Sp_{12}$. Les trois premières ont été étudiées à propos des opérateurs à deux particules, et nous avons porté celle de $(111110 \dots 0)$ dans le tableau XXXVII. Il apparaît qu'à une représentation donnée \mathcal{Y} de Sp_{12} ne peut être associée en général une valeur unique du quasi-spin; pour la représentation (221100) cependant, le quasi-spin prend la seule valeur un, et les opérateurs à trois particules $t((420)\mathcal{V})$ possèdent, en conséquence, un rang 1

TABLEAU XXXV

Sp_{12}	\longrightarrow	$SU_2 \times R_6$
(000000)		$^1(000)$
(110000)		$^1(200)$
(111100)		$^1(220)$
(111111)		$^1(22\pm 2)$
(211000)		$^1(310)$
(220000)		$^1(000) (220) (200) (400)$
(221100)		$^1(200)^2 (220) (22\pm 2) (310) (32\pm 1) (420)$
(330000)		$^1(000) (200) (220) (22\pm 2) (310)^2 (400) (420) (600)$

TABLEAU XXXVI

$c(\nu \nu' (221100))$

0	1	2	3	4	5	6
0	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0
		0	0	1	0	0
			1	0	1	0
				1	0	1
					1	0
						0

TABLEAU XXXVII

R_{24}	\longrightarrow	$SU_2 \times Sp_{12}$
(1111110...0)		$^1(200000) (211000) (222000)$
		$^3(000000) (220000) (110000)^2$
		$(111100) (211000) (221100)$
		$^5(110000) (200000) (211000)$
		$(111100) (211110)$
		$^7(000000) (110000) (111100)$
		(111111)

relativement au quasi-spin, ce qui permet, par application du théorème de Wigner-Eckart, de préciser immédiatement la dépendance sur N de leurs éléments de matrice:

$$((d+\delta)^N \nu \psi | \mathfrak{t}((420)\mathcal{V}) | (d+\delta)^N \nu \psi') = \frac{6-N}{6-\nu} ((d+\delta)^\nu \psi | \mathfrak{t}((420)\mathcal{V}) | (d+\delta)^\nu \psi')$$

$$\begin{aligned} & ((d+\delta)^N \nu \psi | \mathfrak{t}((420)\mathcal{V}) | (d+\delta)^{N-2} \nu \psi') \\ &= \left[\frac{(14-N-\nu)(N+2-\nu)}{4(7-\nu)} \right]^{1/2} ((d+\delta)^\nu \psi | \mathfrak{t}((420)\mathcal{V}) | (d+\delta)^\nu \nu \psi'). \end{aligned}$$

De telles équations ne peuvent pas être trouvées pour les autres opérateurs $\mathfrak{t}(\mathcal{W}\mathcal{V})$ puisque ceux-ci ne possèdent pas de rang déterminé par rapport au quasi-spin. Il est évidemment possible de décomposer ces opérateurs en combinaisons linéaires d'opérateurs possédant soit des propriétés de transformation simples dans la symétrie symplectique, soit un rang parfaitement déterminé relativement au quasi-spin. Ces décompositions, qui sont analogues à celles que nous avons réalisées pour les opérateurs à deux particules :

$$e_3 = (e_3 + \Omega_1) - \Omega_1,$$

$$e_4 = (e_4 + \Omega_2) - \Omega_2,$$

ne présentent cependant, dans le cas considéré, qu'un médiocre intérêt.

DISCUSSION DE L'ETUDE PARAMETRIQUE
DES CONFIGURATIONS $(d+\delta)^N$ ET f_{δ}^N

Nous avons établi précédemment un certain nombre de résultats généraux valables pour l'ensemble des configurations mélangées $(l+l')^N$; cependant, dans l'application de ces résultats à des problèmes physiques particuliers, nous avons limité notre étude à celle des configurations f_{δ}^N et $(d+\delta)^N$. Ce choix nous a été imposé par le fait que, si l'on veut à la fois profiter des grandes simplifications apportées par la classification des états et des opérateurs à l'aide de la théorie des groupes continus, définir une seconde quantification et introduire des opérateurs effectifs qui rendent compte du second ordre de perturbation dans l'approximation du champ central, il est indispensable de pouvoir considérer la configuration $(l+l')^N$ comme bien isolée dans son ensemble. Cette condition, qui pour les configurations f_{δ}^N peut être levée par la conservation de la parité, est bien remplie, précisément, par les configurations $(d+\delta)^N$ des spectres I et II des éléments de transition³⁸: série du fer (Ti - Cu), série du palladium (Zr - Ag), série du platine (Hf - Pt); à la limite, on peut même la considérer comme satisfaite dans les spectres II de ces éléments. Ainsi, nos résultats qui à première vue pouvaient paraître d'un emploi limité, sont susceptibles d'être utilisés dans

l'interprétation de plus de soixante spectres complexes. Indépendamment de l'étude de ce champ d'application, l'étude des configurations $(d+\Delta)^N$ pourrait fournir un excellent test du bien fondé de l'introduction des opérateurs à trois particules dans une théorie paramétrique. En effet, on pourrait penser que les configurations d'électrons équivalents l^N sont plus adaptées à cette étude, mais les configurations d^N ne peuvent être considérées comme bien isolées que pour les spectres IV des éléments de transition dont la classification reste assez imprécise³⁹, et il semble que l'interprétation élémentaire des configurations f^N ne soit pas encore assez avancée pour permettre l'introduction d'interactions effectives plus complexes⁴⁰. Au contraire, les configurations des spectres I et II des éléments de transition sont très bien connues d'un point de vue expérimental, elles ont déjà donné lieu à un grand nombre d'études paramétriques^{41,42,43,44}, et ce cas relativement simple devait montrer de façon décisive si la théorie non linéaire des interactions de configurations permet ou non d'améliorer notablement l'accord entre les résultats théoriques et les données expérimentales.

I CONFIGURATIONS $(d+\Delta)^N$

A) Etudes antérieures

Les différents spectres des éléments de transition ont donné lieu, depuis les premiers travaux de Slater, à un grand nombre d'interprétations théoriques, et c'est à leur sujet qu'ont été introduites les premières corrections aux formules du premier

ordre de perturbation, corrections qui constituent ce que l'on convient d'appeler "la théorie linéaire de l'interaction de configurations"^{22,31}. Cependant, afin d'éviter des calculs trop complexes, les premières études concernaient essentiellement des spectres très simples, pour lesquels l'emploi d'un trop grand nombre de paramètres conduisait à des résultats peu significatifs. Les performances des calculatrices électroniques ont permis de se libérer des limitations techniques imposées par la longueur et la complexité des calculs numériques, et ainsi Racah et Shadmí ont pu conduire de façon très exhaustive l'étude des spectres II des trois séries des éléments de transition^{41,42,44} et celle, moins complète, des spectres III correspondants⁴³. Cette étude comprend en fait les deux étapes suivantes :

1) dans l'approximation du premier ordre (à laquelle sont apportées plusieurs corrections), calcul des niveaux d'énergie à l'aide d'un certain nombre de paramètres d'interactions, librement ajustables, des diverses configurations de chaque spectre;

2) expression comme fonction linéaire (avec, dans certains cas, une petite correction quadratique) du nombre atomique, des paramètres correspondants de tous les spectres de la même séquence.

Le succès de cette méthode est assez impressionnant, puisque pour les spectres II du groupe du fer, par exemple, elle conduit à interpréter 405 niveaux à l'aide de 25 paramètres seulement, et avec une erreur quadratique moyenne, au sens de Racah, égale à 243 cm^{-1} . Il n'est pas de notre propos de discuter ici quelle justification théorique on peut trouver à cette méthode

interpolative ou quelle est la signification des paramètres obtenus, mais pour bien préciser la différence entre le traitement employé par Shadmi et celui que nous proposons, il nous faut mettre en question le bien fondé des paramètres d'interactions utilisés par cet auteur. En effet, Shadmi considère que les différents paramètres de Slater, les constantes de couplage spin-orbite, et les corrections linéaires de Trees^{43,44} sont en progression arithmétique pour les trois configurations d^N , $d^{N-1}\Delta$, et $d^{N-2}\Delta^2$. Il est bien évident que si l'on relie, en particulier, les paramètres de Slater aux intégrales correspondantes, ces paramètres doivent être identiques pour les trois configurations; toutefois, si ces dernières sont assez éloignées les unes des autres, on peut, pour différencier les divers paramètres d'interaction, tirer argument du fait que, dans tous les cas, ceux-ci contiennent une partie effective qui peut être différente pour les trois configurations. Cependant, pour les spectres I et II des éléments de transition, les configurations d^N , $d^{N-1}\Delta$, et $d^{N-2}\Delta^2$ sont extrêmement mélangées; l'interprétation du spectre II du Molybdène, par exemple, conduit Shadmi⁴² à attribuer aux centres de gravité respectifs des configurations d^5 , $d^4\Delta$ et $d^3\Delta^2$, les énergies suivantes rapportées à celle du fondamental :

$$26475, 38719, \text{ et } 54987 \text{ cm}^{-1}$$

alors que chacune de ces configurations s'étend sur plus de 40.000 cm^{-1}

Il semble donc que si l'on veut rester parfaitement cohérent avec la théorie du champ central, l'on doive attribuer à tous les paramètres une même valeur pour les trois configurations d^N , $d^{N-1}\Delta$, et $d^{N-2}\Delta^2$, quitte à introduire tous les paramètres d'interactions

imposés par le second ordre de perturbation, afin d'améliorer l'écart entre les résultats théoriques et les valeurs expérimentales. Il faut noter à ce propos que les seules corrections du second ordre utilisées par Shadmi sont celles de Trees³⁰⁻⁴⁴ relatives aux électrons d , et pour les spectres II des éléments de la série du fer⁴⁴, une interaction à trois particules rattachée aux excitations monoélectroniques $3d \rightarrow 3d$.

B) Discussion de la méthode proposée.

Bien qu'elle soit susceptible d'apporter d'importantes simplifications dans le calcul des éléments de matrice, la classification, à l'aide de la théorie des groupes, des opérateurs de l'interaction coulombienne à l'intérieur des configurations $(d+\Delta)^N$ ne permet pas de réduire le nombre de paramètres nécessaires à décrire cette interaction. Nous pouvons donc choisir indifféremment les paramètres habituels de Slater ou leurs combinaisons linéaires, E_i , définies précédemment dans le second paragraphe de la quatrième partie. Dans ce dernier cas, le paramètre E_0 dont le rôle se borne à déplacer en bloc l'ensemble de la configuration, pourra être choisi tel que le niveau fondamental se confonde avec l'origine des énergies. Si nous appliquons les résultats du paragraphe III de la quatrième partie aux configurations $(d+\Delta)^N$ ($l=2, l'=0$), les seuls opérateurs additionnels à deux particules introduits par les "interactions" de configurations lointaines, dans l'approximation du second ordre, sont les suivants :

$$\chi^{(1)}(d d d d) \sum_{i>j} (\mathbf{v}_i^{(1)}(d, d) \cdot \mathbf{v}_j^{(1)}(d, d)), \quad \chi^{(3)}(d d d d) \sum_{i>j} (\mathbf{v}_i^{(3)}(d, d) \cdot \mathbf{v}_j^{(3)}(d, d)),$$

$$\bar{\chi}^{(2)}(d \Delta d \Delta) \sum_{i>j} (\bar{\mathbf{v}}_i^{(2)}(d, \Delta) \cdot \bar{\mathbf{v}}_j^{(2)}(d, \Delta)).$$

On peut voir facilement qu'à un déplacement près de la configuration qui peut être absorbé par E_0 , ces trois opérateurs peuvent être remplacés par :

$$\propto L^2 + \beta G(R_5) + \gamma G(R_6)$$

où L , $G(R_5)$ et $G(R_6)$ représentent respectivement le moment orbital et les opérateurs de Casimir des groupes de rotation R_5 et R_6 . Ainsi nous constatons qu'aux corrections de Trees déjà introduites pour les seuls électrons d , doit être ajouté un troisième terme spécifique des configurations $(d+\delta)^N$.

L'interaction effective à trois particules, qui représente une part des effets des excitations monoélectroniques, a été étudiée en grand détail dans le chapitre IV de la quatrième partie. Le principal résultat que nous avons obtenu est que cette interaction effective peut être décrite au moyen de cinq paramètres additionnels seulement. Ainsi pour les opérateurs agissant uniquement sur l'orbite des électrons, l'approximation du champ central, poussée au deuxième ordre de perturbation, est complètement représentée par quinze paramètres indépendants. Comparé à celui des données expérimentales, et même à celui des paramètres utilisés dans les études antérieures, ce nombre reste assez petit pour qu'une étude paramétrique puisse être réalisée selon la méthode que nous proposons.

La situation pour les opérateurs agissant simultanément sur le spin et l'orbite des électrons semble moins favorable; en effet,

à l'interaction spin-orbite des électrons d , doivent être ajoutés les cinq opérateurs à deux particules suivants :

$$\begin{aligned}
 & \gamma^{(2)}(d d d d) \sum_{i \neq j} (w_i^{(02)2}(d, d) \cdot w_j^{(11)2}(d, d)) - (8/3)^{1/2} (w_i^{(02)2}(d, d) \cdot w_j^{(13)2}(d, d)), \\
 & \gamma^{(4)}(d d d d) \sum_{i \neq j} (w_i^{(04)4}(d, d) \cdot w_j^{(13)4}(d, d)), \\
 & \gamma^{(2)}(d \Delta d d) \sum_{i \neq j} (w_i^{(02)2}(d, \Delta) \cdot w_j^{(11)2}(d, d)) - (8/3)^{1/2} (w_i^{(02)2}(d, \Delta) \cdot w_j^{(13)2}(d, d)), \\
 & \gamma^{(2)}(d d d \Delta) \sum_{i \neq j} (w_i^{(02)2}(d, d) \cdot w_j^{(12)2}(d, \Delta)), \\
 & \gamma^{(2)}(d \Delta \Delta d) \sum_{i \neq j} (w_i^{(02)2}(d, \Delta) \cdot w_j^{(12)2}(d, \Delta)).
 \end{aligned}$$

Il est évidemment possible de classer ces opérateurs à l'aide de représentations irréductibles des groupes R_6 et R_5 , et d'étudier leurs propriétés dans la symétrie symplectique et l'espace de quasi-spin; cette étude que nous avons réalisée d'une manière identique à celle décrite dans la précédente partie, a conduit à des résultats tout à fait analogues à ceux de Judd⁴⁵ valables pour les électrons d équivalents. Nous n'avons pas jugé utile de reproduire ici des résultats, d'autant plus qu'ils ne permettent aucune réduction du nombre de paramètres nécessaires à décrire l'interaction effective à deux particules agissant simultanément sur le spin et l'orbite des électrons. Ainsi, pour les configurations $(d + \Delta)^N$, nous obtenons, en tenant compte des quinze paramètres déjà introduits, un total de vingt-et-un paramètres indépendants pour décrire complètement le premier et le second ordre de perturbation dans l'approximation du champ central.

Ce nombre n'est pas trop élevé, relativement à celui des données expérimentales, et on peut penser appliquer à la détermination de ces paramètres une méthode interpolative analogue à celle utilisée par Racah et Shadmi. Dans le traitement indépendant des différents spectres, il serait sans doute préférable de ne pas considérer les interactions effectives à deux particules agissant sur le spin et l'orbite des électrons, et de leur substituer les trois paramètres ζ_2 , ζ'_2 et ζ''_2 , en progression arithmétique, introduits par Shadmi. Certes, la cohérence interne du traitement que nous proposons s'en trouverait dans une certaine mesure affaiblie, mais la réduction du nombre de paramètres ainsi effectuée, permettrait sans doute, de tester avec plus d'acuité le bien fondé de l'introduction, dans une théorie paramétrique, des opérateurs à trois particules agissant uniquement sur l'orbite des électrons.

II CONFIGURATIONS $f^N \Delta$

Nous avons réalisé pour les configurations $f^N \Delta$ une étude en tous points analogue à celle que nous avons décrite pour les configurations $(d+\Delta)^N$. Nous avons montré, dans ce cas, que vingt-quatre paramètres doivent être introduits pour représenter complètement le premier et le second ordre de l'approximation du champ central, compte tenu des réductions apportées par la théorie des groupes et la conservation de la parité. Ce nombre est dans tous les cas beaucoup trop élevé relativement à celui des données expérimentales. Cependant une première approximation pourrait consister à tenir compte de tous les opérateurs à deux particules agissant uniquement sur l'orbite des électrons; dans

cette théorie "linéaire", les seuls opérateurs qui ne préexistent pas dans l'approximation du premier ordre sont les suivants :

$$\chi^{(1)}(ffff) \sum_{i>j} (v_i^{(1)}(f,f) \cdot v_j^{(1)}(f,f)),$$

$$\chi^{(3)}(ffff) \sum_{i>j} (v_i^{(3)}(f,f) \cdot v_j^{(3)}(f,f)),$$

$$\chi^{(5)}(ffff) \sum_{i>j} (v_i^{(5)}(f,f) \cdot v_j^{(5)}(f,f)),$$

$$\bar{\chi}^{(3)}(f_{\Delta} f_{\Delta}) \sum_{i>j} ((v_i^{(3)}(f,\Delta) + v_i^{(3)}(\Delta,f)) \cdot (v_j^{(3)}(f,\Delta) + v_j^{(3)}(\Delta,f))).$$

les trois premiers d'entre eux sont ceux déjà introduits dans l'étude des configurations f^N . Ainsi, dans le cas où les interactions de configurations au deuxième ordre sont limitées à la théorie linéaire, neuf paramètres seulement sont à considérer et ce nombre est suffisamment petit pour permettre une comparaison avec l'expérience (configuration $4f^2 6\Delta$ de Pr III, par exemple^{45,47}).

Il est clair qu'à un déplacement près de la configuration, les quatre opérateurs précédents peuvent être remplacés par :

$$\alpha L^2 + \beta G(R_7) + \gamma G(G_2) + \delta G(R_8)$$

où les trois premiers termes correspondent aux corrections habituelles de Trees pour les électrons f . Le quatrième terme spécifique des configurations $f^N \Delta$ fait intervenir l'opérateur de Casimir du groupe de rotation en huit dimensions, R_8 , dont les valeurs propres sont les suivantes :

$$G(R_8)(\omega_1 \omega_2 \omega_3 \omega_4) = \frac{1}{12} [\omega_1(\omega_1+6) + \omega_2(\omega_2+4) + \omega_3(\omega_3+2) + \omega_4^2]$$

Si l'on veut profiter de la simplicité de ce résultat, il est donc essentiel de classer les termes des configurations f^N_{Δ} suivant les représentations irréductibles de R_8 . Nous avons réalisé cette classification à l'aide des méthodes générales, ^{décrites} précédemment dans la seconde partie; les résultats pour $N < 4$ ont été portés dans le tableau XXXVIII.

TABLEAU XXXVIII

CLASSIFICATION DES CONFIGURATIONS

$$f^{\rho N} \Delta$$

N = 1	³ (1100) (100) (10) F
	¹ (2000) (100) (10) F
N = 2	⁴ (1110) (110) (11) PH
	(10) F
	² (2100) (200) (20) DGI
	(110) (11) PH
	(10) F
	² (1000) (000) (00) S
N = 3	⁵ (1110) (111) (20) DGI
	(10) F
	(00) S
	³ (2110) (210) (21) DFGHKL
	(20) DGI
	(11) PH
	(111) (20) DGI
	(10) F
	(00) S
	³ (1100) (100) (10) F
¹ (2200) (210) (21) DFGHKL	
(20) DGI	
(11) PH	
¹ (2000) (100) (10) F.	

CONCLUSION

Dans le cadre de l'interprétation paramétrique des spectres atomiques complexes, une étude générale des configurations électroniques mélangées du type $(l+l')^N$ a été conduite à l'aide de la théorie des groupes continus, de la seconde quantification et de ses représentations graphiques.

Les opérateurs infinitésimaux du groupe unitaire en $4(l+l'+1)$ dimensions, $U_{4(l+l'+1)}$ ont tout d'abord été identifiés aux opérateurs tensoriels doubles susceptibles de connecter les états $|\gamma SL\rangle$ des configurations $(l+l')^N$. Cette identification, associée à la réduction de $U_{4(l+l'+1)}$ à ses divers sous-groupes, a permis de classer les états considérés suivant leurs propriétés de symétrie dans les opérations du groupe symplectique $Sp_{4(l+l'+1)}$ et des produits directs $SU_2 \times R_{2(l+l'+1)}$ et $SU_2 \times R_{2l+1} \times R_{2l'+1}$. L'étude particulière de la symétrie symplectique qui laisse invariante les formes bilinéaires antisymétriques, a conduit à la définition d'un nombre de séniorité généralisé. Afin d'éviter l'introduction explicite des états déterminantaux dans le calcul des éléments de matrice de l'hamiltonien, entre les états caractérisés au moyen des représentations irréductibles de divers groupes continus, le concept de parenté fractionnelle a été généralisé aux configurations $(l+l')^N$; ces éléments de matrice ont été ainsi exprimés au moyen de coefficients de parenté fractionnelle qui permettent d'ignorer complètement les propriétés particulières des configurations $l^N, l^{N-1}l', \dots, l'l'^{N-1}, l'^N$. Le calcul effectif de ces coefficients

a été réalisé pour la configuration $(d+\Delta)^3$

Les coefficients de parenté fractionnelle ont été reliés ensuite aux éléments de matrice réduits des opérateurs annihilation-création qui ont conduit, d'autre part, à la définition d'un opérateur quasi-spin généralisé dont les valeurs propres ont été rattachées au nombre de séniorité. Ce formalisme permet d'exprimer très simplement la dépendance sur N des éléments de matrice entre les états des configurations $(l+l')^N$ de tout opérateur possédant des propriétés de transformation bien définies dans l'espace de quasi-spin.

Afin de mettre en évidence l'intérêt que peuvent présenter les résultats généraux précédents, un certain nombre de problèmes physiques particuliers ont été examinés. Tout d'abord, la classification des opérateurs de l'interaction coulombienne à l'intérieur des configurations $(d+\Delta)^N$ a permis de représenter celle-ci au moyen de sept termes $e_i E_i$ où les E_i sont des paramètres, et les e_i , des opérateurs à deux électrons possédant des propriétés de transformation simples dans les opérations des groupes R_5, R_6 et (pour certains d'entre eux) Sp_{12} . La dépendance sur N de leurs éléments de matrice a pu être exprimée de façon très simple, principalement par utilisation des propriétés du quasi-spin, et de nombreuses factorisations qui permettent le calcul de tous ces éléments de matrice à partir d'un nombre restreint de coefficients, ont été réalisées.

La seconde quantification et sa présentation graphique au moyen des diagrammes de Feynman a conduit ensuite à la détermination, pour les configurations $(l+l')^N$, des opérateurs effectifs qui rendent

compte des effets d'interaction de configurations lointaines dans l'approximation du second ordre. La nécessité d'introduire les rangs des opérateurs relativement à l'espace de spin et à l'espace d'orbite pour pouvoir utiliser l'équivalence topologique des diagrammes de Jucys et de ceux de Feynman, a entraîné la modification de la représentation habituelle de ces derniers. Les résultats obtenus sont en parfaite analogie avec ceux qui sont valables pour les configurations d'électrons équivalents et, une application particulière en a été faite aux configurations $f^N \Delta$ et $(d+\Delta)^N$.

Enfin, par la mise en évidence des propriétés de symétrie des opérateurs à trois particules pour les configurations $(d+\Delta)^N$, il a été montré que cette interaction effective peut être représentée à l'aide de cinq paramètres additionnels seulement. Ainsi, pour les configurations $(d+\Delta)^N$, la théorie des groupes, en apportant une réduction notable du nombre de paramètres réellement nécessaires pour représenter les interactions de configurations lointaines, permet de proposer une étude paramétrique de ces configurations qui est parfaitement cohérente avec l'approximation du champ central au second ordre de perturbation. Pour les configurations $f^N \Delta$ au contraire, l'état actuel des données expérimentales conduit à penser que seule une théorie linéaire est applicable.

IL a donc été montré que l'ensemble des concepts introduits par la théorie des groupes continus et la seconde quantification dans l'étude des configurations d'électrons équivalents, peut être généralisé aux configurations $(l+l')^N$. Les résultats ainsi obtenus présentent

un intérêt théorique évident, et les problèmes physiques étudiés ont démontré que leur utilisation peut apporter de grandes simplifications dans l'étude paramétrique des configurations considérées.

BIBLIOGRAPHIE

- 1 Slater J.C., Phys. Rev, 1929, **34**, 1293
- 2 Condon E.U. & Shortley G.H. The Theory of Atomic Spectra, 1935, Cambridge University Press, New York.
- 3 Racah G., Phys. Rev., 1942, **61**, 186.
- 4 Racah G., Phys. Rev., 1942, **62**, 438.
- 5 Racah G., Phys. Rev., 1943, **63**, 367
- 6 Racah G., Phys. Rev., 1949, **76**, 1352.
- 7 Racah G., Group Theory and Spectroscopy, 1951, mimeographed lecture notes, Princeton.
- 8 Jahn H.A., Proc. Roy. Soc. (London), 1950, **A205**, 192.
- 9 Flowers B.H., Proc. Roy Soc. (London), 1952, **A242**, 248.
- 10 Judd B.R. Second Quantization & Atomic Spectroscopy, 1967, The Johns Hopkins Press, Baltimore.
- 11 Judd B.R., Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, 1963, Mc Graw-Hill Book Co. Inc., New York.
- 12 Elliott J.P., Proc. Roy. Soc., 1958, **A 245**, 128
- 13 Lie S. & Scheffers G., Vorlesunger über kontinuierliche Grupper, 1893, Leipzig.
- 14 Cartan E. Sur la structure des groupes de transformations finis et continus (thèse), 1894, Nony, Paris.
- 15 Schouten J.A. Vorlesung über die Theorie des Halbeinfachen Kontinuierliche Gruppen, 1926-1927, mimeographed notes, Leiden.
- 16 Van der Waerden B.L., Math. Z, 1953, **37**, 446
- 17 Weyl H. The classical groups, 1946, Princeton University Press, Princeton, N.J.

- 18 Casimir H. Proc. Koninkl Akad. Amsterdam, 1931, **34**, 844.
- 19 Littlewood S.E. The Theory of Group characters, 1950, Oxford University Press; New York.
- 20 Murnaghan F.D. The Theory of Group Representations, 1963, Dover Publications, New York.
- 21 Eckart C. Revs. Modern Phys., 1930, **2**, 305.
Wigner E.P., Gruppentheorie, 1931, F. Vieweg und Sohn, Brunswick.
- 22 Bacher R.F. & Goudsmit S. Phys. Rev., 1934, **46**, 948.
- 23 Nutt P. & Nielson C., Raytheon Technical Memorandum T-331, 1963.
- 24 Nielson C.W. & Koster G.F., Spectroscopic Coefficients for the p^N , d^N and f^N configurations, 1963, The M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts.
- 25 Meskhov, Phys. Rev., 1953, **91**, 871.
- 26 Edmonds A.R., Angular Momentum in Quantum Mechanics, 1957, Princeton University Press, Princeton N.J.
- 27 Flowers B.H. & Szpikowski S., Proc. Phys. Soc. (London), 1964, **84**, 673.
- 28 Lawson R.D. & Mac Farlane M.H. Nuclear Physics, 1965, **66**, 80.
- 29 Raynak K. & Wybourne B.G., Phys. Rev., 1963, **132**, 280.
- 30 Raynak K. & Wybourne B.G., Phys. Rev., 1964, **134**, A596.
- 31 Trees R.E., Phys. Rev., 1951, **83**, 756; **84**, 1089.
- 32 Stein J., résultats rapportés par Racah au collège de France, Paris 1964.
- 33 Safronova U. & Tolmachev, Lietuvos Fizikos Ripkirys, 1964, **IV2**, 249.
- 34 Jucys A., Levinsonas J. & Vanagas V., Mathematical Apparatus of the Theory of Angular Momentum, 1960, Vilna.
- 35 Goldstone J. Proc. Roy. Soc. (London) 1957, **A239**, 267.
- 36 Judd B.R., Phys. Rev., 1966, **141**, 4.

- 37 Feneuille S., C. R. Acad. Sci., 1966, **262**, 23.
- 38 Moore C.E., Atomic Energy Levels, 1949, 1952, N.B.S. Circular 467.
- 39 Noorman P.E. & Schrijver J., Physica, 1966, **32**, 357.
- 40 Rajnak K., J.O.S.A., 1965, **55**, 126.
- 41 Racah G. & Shadmi Y., Bull. Res. Counc. Israël, 1959, **8F**, 15.
- 42 Shadmi Y., Bull. Res. Counc. Israël, 1961, **9F**, 141.
- 43 Shadmi Y., Bull. Res. Counc. Israël, 1962, **10F**, 109.
- 44 Shadmi Y., Phys. Rev., 1965, **A139**, 43.
- 45 Judd B.R., Proceedings of the Zeeman centennial conference, Amsterdam, 1965.
- 46 Sugar J., J.O.S.A., 1963, **53**, 831.
- 47 Spector N., J.O.S.A., 1964, **54**, 1359.

La majeure partie de cette thèse a été publiée dans les articles suivants:

Application de la théorie des Groupes de Lie aux configurations mélangées, J. Phys., 1967, **27**, 61-66.

Symétrie des opérateurs de l'interaction coulombienne pour les configurations $(d+s)^N$; J. Phys., 1967, **28**, 315-328.

Interaction de configurations lointaines pour les configurations $(1+l')^N$; J. Phys., (sous presse).

Opérateurs à trois particules pour les configurations $(d+s)^N$; accepté par le Journal de Physique.

