



INTRODUCTION DES OPÉRATEURS EFFECTIFS DANS L'INTERPRÉTATION PARAMÉTRIQUE DES CONFIGURATIONS $(d + s)^8$ DE Os I ET DE Fe I, ET $(d + s)^4$ DE V II ET Nb II.

J. Schrijver

► To cite this version:

J. Schrijver. INTRODUCTION DES OPÉRATEURS EFFECTIFS DANS L'INTERPRÉTATION PARAMÉTRIQUE DES CONFIGURATIONS $(d + s)^8$ DE Os I ET DE Fe I, ET $(d + s)^4$ DE V II ET Nb II.. Journal de Physique Colloques, 1969, 30 (C1), pp.C1-49-C1-49. 10.1051/jphyscol:1969114 . jpa-00213645

HAL Id: jpa-00213645

<https://hal.science/jpa-00213645>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

INTRODUCTION DES OPÉRATEURS EFFECTIFS DANS L'INTERPRÉTATION PARAMÉTRIQUE DES CONFIGURATIONS ($d + s$)⁸ DE Os I ET DE Fe I, ET ($d + s$)⁴ DE V II ET Nb II.

J. SCHRIJVER

Laboratoire Aimé Cotton, Orsay, et Zeeman Laboratorium, Amsterdam.

Le travail qui fait l'objet de cette communication sera publié dans *Physica*.

MATRICES DE TRANSFORMATION DU COUPLAGE LS AU COUPLAGE LL

A. CARLIER

Laboratoire Aimé Cotton, Orsay

Résumé. — Nous avons calculé les matrices de transformation du couplage $L-S$ au couplage $L-L$ pour les configurations d^n . Nous nous apprêtons à le faire pour les configurations f^n . Nous mettons au point un programme calculant des coefficients de Clebsch-Gordan.

Abstract. — We have calculated the transformation matrices from $L-S$ to LL coupling for d^n configurations. We are preparing to do the same for the f^n configurations. We are writing a program to calculate Clebsch-Gordan coefficients.

La classification usuelle des états de f^n est basée sur la séparation des espaces de spin et d'orbite :

$$U(4l + 2) \supset U(2) \times U(2l + 1).$$

Dans un article récent [1], B. R. Judd montre que si l'on abandonne le spin total S on peut utiliser une réduction plus symétrique :

$$U(4l + 2) \supset U_A(2l + 1) \times U_B(2l + 1)$$

correspondant à la séparation des électrons de $m_s = \frac{1}{2}$ et ceux de $m_s = -\frac{1}{2}$.

L'énergie électrostatique, calculée dans le couplage LS , mélange fortement les trois 5D de f^6 . Au contraire, les mêmes calculs en couplage LL donnent des vecteurs propres purs à 98 %. Nous avons donc pensé qu'il serait peut-être intéressant d'introduire le couplage LL dans nos calculs des configurations du samarium, et en particulier pour $f^6(d + s)$. S dans ce couplage n'est plus défini et l'énergie de spin-orbite ne se calcule pas facilement. Aussi, pour obtenir les matrices en LL , nous avons prévu de calculer les matrices de passage du couplage LS au couplage LL . On peut écrire pour f^n :

$$\begin{aligned} |f^n WU\tau SLM_L M_S\rangle &= \sum \langle [\lambda_A W_A U_A L_A] \times \\ &\times [\lambda_B W_B U_B L_B] L | \lambda WU\tau SLM_L M_S\rangle \times \\ &\times |[\lambda_A] W_A U_A L_A\rangle |[\lambda_B] W_B U_B L_B\rangle. \end{aligned}$$

Les coefficients se factorisent en :

$$\begin{aligned} &\langle [\lambda_A] W_A + [\lambda_B] W_B | [\lambda] W \rangle \times \\ &\times \langle W_A U_A + W_B U_B | WU \rangle \times \\ &\times \langle U_A L_A + U_B L_B | U\tau L \rangle. \end{aligned}$$

La méthode utilisée est semblable à celle décrite par Nutter et Nielson [2] et par Feneuille [3].

Avant d'entreprendre les calculs pour f^n nous avons préféré éprouver la méthode sur le cas plus simple de d^n .

Les calculs pour f^n sont très longs et nous avons trouvé plus utile d'entreprendre la mise au point d'un programme capable de calculer des coefficients de Clebsch-Gordan très généraux.

Bibliographie

- [1] JUDD (B. R.) *Phys. Rev.*, 1967, **162**, 28.
- [2] NUTTER (P.) et NIELSON (C.), Raytheon Technical Memorandum, 1963, 331.
- [3] FENEUILLE (S.), Thèse, Paris, 1967.