

В этой формуле зависимость от  $j$  матричного элемента инварианта  $T_0^{(0)}$  выражается через  $6j$ -символ.

Явный вид инвариантного оператора находим из формулы (П5.9):

$$T_0^{(0)} = \sum_{q_1} (-1)^{k_1 - q_1} (2k_1 + 1)^{-1/2} R_{q_1}^{(k_1)} S_{-q_1}^{(k_1)},$$

если подставить в нее известные коэффициенты Клебша — Гордана. Но обычно пишут

$$R^{(k_1)} \cdot S^{(k_1)} = (-1)^{k_1} (2k_1 + 1)^{1/2} T_0^{(0)} = \sum_{q_1} (-1)^{q_1} R_{q_1}^{(k_1)} S_{-q_1}^{(k_1)}$$

и называют  $(R^{(k_1)} \cdot S^{(k_1)})$  скалярным произведением двух неприводимых наборов операторов  $R_{q_1}^{(k_1)}$  и  $S_{-q_1}^{(k_1)}$ . В частности, для операторов углового момента с  $k = 1$  имеем

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} = -J_+ J_- - J_- J_+ + J_0 J_0 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2,$$

что согласуется с обычным определением скалярного произведения двух векторов. Нужно помнить, что эти два способа определения инварианта  $T_0^{(0)}$  различаются множителем  $(-1)^{k_1} (2k_1 + 1)^{1/2}$ .

Некоторые из полученных выше формул можно было бы вывести и непосредственно из известных ранее формул без применения эквивалентных операторов. Например, формулы (8.28) и (8.39) — это частные случаи формулы (П5.15), а на основании формулы (П5.14) мы в следующем параграфе выведем выражения для относительных интенсивностей переходов.

### § 3. ИНТЕНСИВНОСТИ ПЕРЕХОДОВ

Мы уже говорили о правилах отбора для испускания и поглощения электрического дипольного излучения в гл. 5, § 4 и гл. 8, § 1. В случае  $LS$ -связи для многоэлектронного атома они таковы:

$$S' = S, \quad J' = J, J \pm 1, \quad L' = L \pm 1, \quad (\text{П5.16})$$

причем, как обычно, исключаются переходы вида  $0 \rightarrow 0$  по  $L$  и  $J$ . Здесь мы обозначили начальные состояния через  $SLJ$ , а конечные — через  $S'L'J'$ . Эти правила следуют непосредственно из того, что дипольный оператор инвариантен в спиновом пространстве и является вектор-

ным оператором в координатном пространстве. Теперь можно на основании теоремы Вигнера—Эккарта вычислить отношения интенсивностей перехода между двумя термами при разных  $J$  и  $J'$ . Фактически нам необходимо обобщение этой теоремы, которое дается формулой (П5.14). Установив соответствие  $(j_1 j_2 j'_1 j'_2 jj' mm' k_1) \rightarrow (LSL'SJJ'MM'1)$  и обозначив дипольный оператор через  $\mathbf{V}_q^{(1)}$ , имеем

$$\langle LSJM | \mathbf{V}_q^{(1)} | L'SJ'M' \rangle = (-1)^{L+S+J'-1} C(J'1J, M'qM) \times \\ \times [(2L+1)(2J'+1)]^{1/2} \cdot \left\{ \begin{matrix} J & J' & 1 \\ L' & L & S \end{matrix} \right\} \langle LS || \mathbf{V}^{(1)} || L'S \rangle.$$

Интенсивности переходов обычно определяются как суммы квадратов матричных элементов оператора  $\mathbf{V}_q^{(1)}$ , просуммированных по всем возможным проекциям  $M$  и  $M'$  начальных и конечных состояний. Нормировка коэффициентов Клебша—Гордана дает

$$\sum_{M'} C^2(J'1J, M'qM) = 1,$$

так что интенсивность перехода имеет вид

$$S(J, J') = (2J+1)(2L+1)(2J'+1) \left\{ \begin{matrix} J & J' & 1 \\ L & L & S \end{matrix} \right\}^2 \times \\ \times \langle LS || \mathbf{V}^{(1)} || L'S \rangle^2. \quad (\text{П5.17})$$

Таким образом, не имея никаких детальных сведений о волновой функции, можно сказать, что при данных  $L$  и  $L'$  зависимость от  $J$  и  $J'$  дается формулой

$$S(J, J') \sim (2J+1)(2J'+1) \left\{ \begin{matrix} J & J' & 1 \\ L & L & S \end{matrix} \right\}^2.$$

Это соотношение называется правилом интенсивностей Хёнля—Кронига. Простое правило сумм можно получить, если просуммировать интенсивности по всем конечным состояниям. Согласно формуле (П5.13),  $6j$ -символы должны удовлетворять условию нормировки

$$\sum_{j_{12}} (2j_{12}+1)(2j_{13}+1) \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_{12} & j_2 \\ j & j_{13} & j_3 \end{matrix} \right\}^2 = 1.$$

Просуммировав по  $J'$ , получим для зависимости полной интенсивности от  $J$  формулу

$$\sum_{J'} S(J, J') \sim (2J+1)$$

которая эквивалентна другому хорошо известному эмпирическому правилу.

Для квадрупольных переходов интенсивности можно вычислить точно так же по формуле вида (П5.17), но с  $k_1 = 2$  вместо  $k_1 = 1$ .

Если уровень энергии с угловым моментом  $J$  расщепляется на  $2J+1$  подуровня за счет магнитного поля (гл. 8, § 5, случай атома водорода и рис. 8.1, в), относительные интенсивности переходов между состояниями с разными  $M$  можно найти, пользуясь вышеприведенными формулами. В качестве примера рассмотрим излучение, поляризованное в плоскости  $xy$ , так что для дипольного оператора  $\zeta = \pm 1$  и, следовательно,  $M' = M \mp 1$ . Тогда, опуская суммирование, приводящее к выражению (П5.17), получаем для интенсивностей формулу

$$S(J, J', M, M') = C^2 (J' | J, M' \pm 1 | M) (2L+1) (2J'+1) \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} J & J' & 1 \\ L' & L & S \end{matrix} \right\}^2 \langle LS_{\parallel} \mathbf{V}^{(1)} \| L'S \rangle^2.$$

Так, например, отношение интенсивностей для двух переходов  $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$  и  $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ , показанных на рис. 8.1, в (для обоих переходов  $M = -1/2$  и  $M' = +1/2$ ), равно

$$\frac{C^2 (3/2 | 1^1/2, 1/2 | -1 | -1/2) \times 4 \times \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 3/2 & 1 \\ 1 & 0 & 1/2 \end{matrix} \right\}^2}{C^2 (1/2 | 1^1/2, 1/2 | -1 | -1/2) \times 2 \times \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ 1 & 0 & 1/2 \end{matrix} \right\}^2} - \frac{1}{2}.$$

Значения коэффициентов берутся из книги Ротенберга и др. (см. литературу к гл. 7). Из-за наличия здесь коэффициентов Клебша—Гордана это отношение отличается от значения 2, даваемого формулой (П5.17) для отношения полных интенсивностей переходов из  $1s_{1/2}$  в  $2p_{3/2}$  и  $2p_{1/2}$ .