Глава 24

КОЭФФИЦИЕНТЫ РАКА

Выводы формул Хёнля — Кронига для интенсивностей и правила интервалов Ланде, изложенные в предыдущей главе, представляют частные случаи вычисления матричных элементов неприводимого тензорного оператора, с заданными трансформационными свойствами не только относительно вращений всех координат, но также относительно вращений спиновых и обычных координат в отдельности. Операторы $\mathsf{T}^{(\sigma\rho)}$ этого рода были определены[1]) в соотношениях (23.13а) и (23.13б). Операторы, неприводимые относительно одновременных вращений как спинов, так и пространственных координат, могут быть получены из них с помощью линейных комбинаций:

$$\mathsf{T}_{\omega}^{(\tau)} = \sum_{\rho} s_{\omega\rho\tau-\rho}^{(qp)} \mathsf{T}_{qp}^{(\rho,\,\tau-\rho)}. \tag{24.1}$$

Используя соотношения (23.13а), (23.13б) и (17.16б), а также соотношения ортогональности (17.28) для s, легко показать, что

$$\mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{T}_{\omega}^{(\tau)}\mathsf{O}_R = \mathsf{D}^{(\omega)}(R)_{\tau\tau'}\mathsf{T}_{\omega}^{(\tau')}. \tag{24.1а}$$

Фактически оператор этого рода уже рассматривался при выводе правила интервалов Ланде. Оператор спин-орбитального взаимодействия есть скаляр ($\omega = 0$), составленный из операторов, являющихся векторами как по отношению к вращению спинов ($q = 1$), так и по отношению к вращениям координат ($p = 1$).

Аналогично, волновые функции Ψ_m^{NSLJ} и $\Psi_{m'}^{N'S'L'J'}$, которые входят в матричный элемент, имеют определенные трансформационные свойства (определяемые квантовым числом J) по отношению к вращениям всех координат. Эти волновые функции имеют

---

[1]) Читатель помнит, что $\mathsf{T}^{(\sigma\rho)}$ есть $\sigma\rho$-компонента тензора ранга q по отношению к спиновым вращениям O_R и ранга p по отношению к вращениям координат P_R. Оператор $\mathsf{T}_{\omega}^{(\tau)}$ в (24.1) является компонентой τ тензора ранга ω по отношению к совместным вращениям координат и спинов $\mathsf{O}_R = \mathsf{O}_R\mathsf{P}_R$.

также определенные трансформационные свойства по отношению к вращениям спиновых и обычных координат в отдельности. Двумя соответствующими квантовыми числами являются S и L. В результате матричные элементы вида

$$\left(\Psi_{m'}^{N'S'L'J'}, \mathsf{T}_{\omega}^{(\tau)}\Psi_{m}^{NSLJ}\right) \tag{24.E.1}$$

для всех допустимых значений J, J', ω, m, m', τ могут быть выражены через одну постоянную. Этими допустимыми значениями являются просто те значения, для которых существуют Ψ и T_{ω}. Значения J ограничиваются векторным сложением: $|S-L| \leqslant J \leqslant S+L$; ограничением для m будет $-J \leqslant m \leqslant J$ и т. д. Трудность, с которой мы встретились при вычислениях, заключалась в том, что выражение, полученное при использовании характеристик волновых функций и операторов по отношению к вращениям всех координат J, J', ω, не находится в естественной связи с выражением, получаемым при использовании трансформационных свойств по отношению к вращениям спиновых и обычных координат в отдельности. Выражение (23.18) является выражением первого рода, а выражение (23.15а) — выражением последнего рода. В вычислении, следующем за (23.18), выражение (23.15а) преобразуется к виду (23.18). Возможность такого преобразования показывает, что между коэффициентами векторного сложения s имеются важные соотношения, которые до сих пор еще не рассматривались. Дальнейшее изложение в этой главе будет посвящено более подробному изучению свойств представлений $\mathfrak{D}^{(J)}$ (в частности, условий их вещественности), симметрии коэффициентов векторного сложения [уже упоминавшихся в связи с формулами (17.27)] и, наконец, общей форме соотношений, которые позволили нам, в частности, преобразовать выражение (23.15а) к виду (23.18).

Важность явных и общих формул для сравнения матричных элементов вида (24.E.1) с различными J, J', ω, m, m', τ была ясно показана в книге Кондона и Шортли[1]). Явный вид общих формул для такого сравнения впервые указал Рака́[2]). За последнее время по этому вопросу был опубликован ряд монографий[3]), которые рассматривают его значительно подробнее, чем это сделано в настоящей главе.

---

[1]) См. цитированную на стр. 186 книгу Е. Кондона и Г. Шортли.

[2]) См. цитированные на стр. 227 работы Рака́. См. также U. Fano, G. Racah, Irreducible Tensorial Sets, New York, 1959.

[3]) См. цитированную на стр. 215 монографию М. Роуза, а также A. R. Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, 1957. В последней монографии наши $s_{J\mu\nu}^{(LS)}$ обозначены через $(L\mu S\nu \mid LSJ\mu+\nu)$.

Комплексно-сопряженные представления

Условия вещественности неприводимых представлений играют существенную роль в дальнейшем анализе. Эти результаты были получены впервые двумя основателями теории представлений — Фробениусом и Шуром[1]), и мы воспользуемся ими также в гл. 26.

В предыдущих главах были описаны различные способы получения новых представлений из заданного представления или из пары представлений. К ним будет добавлен новый, хотя и вполне очевидный путь: переход к комплексному сопряжению. Если $\mathbf{D}(R)$ образуют представление группы, то и $(\mathbf{D}(R))^*$ образует представление, т. е. представление образуют матрицы, элементы которых являются комплексно-сопряженными элементам $\mathbf{D}(R)$. Ясно, что из соотношения $\mathbf{D}(R)\mathbf{D}(S)=\mathbf{D}(RS)$ следует $\mathbf{D}(R)^*\mathbf{D}(S)^*=\mathbf{D}(RS)^*$. Далее, если представление $\mathbf{D}(R)$ неприводимо, то это же относится и к комплексно-сопряженному представлению $\mathbf{D}(R)^*$. Если преобразование с матрицей $\mathbf{S}$ преобразует все $\mathbf{D}(R)$ к приведенному виду, показанному на стр. 105, то $\mathbf{S}^*$ будет приводить $\mathbf{D}(R)^*$ к аналогичному виду.

Комплексное сопряжение приводит к важному различию между неприводимыми представлениями: представление $\mathbf{D}(R)^*$ может быть либо эквивалентным, либо неэквивалентным представлению $\mathbf{D}(R)$. Так как характер представления $\mathbf{D}(R)^*$ является комплексно-сопряженным характеру $\chi(R)$ представления $\mathbf{D}(R)$ и так как два представления эквивалентны, если совпадают их характеры (см. стр. 106), то представление $\mathbf{D}(R)$ *будет эквивалентным комплексно-сопряженному представлению* $\mathbf{D}(R)^*$, *если его характер веществен*, т. е. если все числа $\chi(R)$ вещественны. В противном случае $\mathbf{D}(R)$ и $\mathbf{D}(R)^*$ будут неэквивалентными.

Формулы (15.26) и (15.28) показывают, что все неприводимые представления трехмерной группы вращений, а также двумерной унимодулярной унитарной группы, имеют вещественные характеры. То же самое относится ко всем группам, в которых каждый элемент находится в том же классе, что и обратный ему. В этом легче всего убедиться, если рассматривать представления в унитарном виде. Тогда из соотношения

$$\mathbf{D}(R^{-1})=\mathbf{D}(R)^{\dagger} \tag{24.2}$$

следует, что характеры матриц для R и R^{-1} являются комплексно-сопряженными. Если R и R^{-1} принадлежат одному и тому же классу, характеры R и R^{-1} также равны. Следовательно, они вещественны. Такое положение имеет место в случае трехмерной группы вращений, двумерной унимодулярной унитарной группы, а также в случае группы *всех* двумерных вещественных ортогональных матриц. Оно не относится к группе двумерных чистых вращений, и эта последняя имеет представления как с вещественными, так и с комплексными характерами (см. гл. 14).

---

[1]) G. Frobenius, I. Schur, Berl. Ber., 1906, S. 186.

Если $\mathbf{D}(R)$ унитарно и имеет вещественный характер, то существует такая унитарная матрица $\mathbf{C}$, которая преобразует $\mathbf{D}(R)^*$ в $\mathbf{D}(R)$. Тогда

$$\mathbf{C}\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(R)^* \mathbf{C}. \tag{24.3}$$

Если представление $\mathbf{D}(R)$ неприводимо, то $\mathbf{C}$ в (24.3) определяется однозначно, с точностью до постоянного множителя. *Кроме того, матрица* $\mathbf{C}$ *либо симметрична, либо антисимметрична.* Чтобы доказать эту теорему, возьмем соотношение, комплексно-сопряженное соотношению (24.3), и умножим его на $\mathbf{C}$ слева. Тогда

$$\mathbf{C}\mathbf{C}^*\mathbf{D}(R)^* = \mathbf{C}\mathbf{D}(R)\mathbf{C}^* = \mathbf{D}(R)^*\mathbf{C}\mathbf{C}^*. \tag{24.3а}$$

Последнее выражение получается, если снова использовать (24.3). Если представление $\mathbf{D}(R)^*$ неприводимо, то матрица $\mathbf{C}\mathbf{C}^*$, которая коммутирует с ним, должна быть кратной единичной матрице: $\mathbf{C}\mathbf{C}^* = c\mathbf{1}$. Кроме того, поскольку $\mathbf{C}$ унитарна, $\mathbf{C}^T\mathbf{C}^* = \mathbf{1}$; отсюда вытекает, что $\mathbf{C} = c\mathbf{C}^T$. Транспонирование этого соотношения дает $\mathbf{C}^T = c\mathbf{C}$, так что $\mathbf{C} = c^2\mathbf{C}$, $c = \pm 1$. Это дает

$$\mathbf{C} = \pm\mathbf{C}^T. \tag{24.3б}$$

Далее, легко убедиться в том, что если $\mathbf{C}$ симметрична для представления $\mathbf{D}(R)$, то она будет симметрична и для эквивалентного представления $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{D}(R)\mathbf{S}$. Аналогичное утверждение относится и к тому случаю, когда $\mathbf{C}$ антисимметрична, так что возможность, следующая из (24.3б), дает классификацию неприводимых представлений с вещественными характерами на представления, для которых $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$, и представления, для которых $\mathbf{C} = -\mathbf{C}^T$.

Резюмируем полученные выше результаты. *Если* $\mathbf{D}(R)$ *есть унитарное неприводимое представление, то таким же будет представление* $\mathbf{D}(R)^*$. *Представления* $\mathbf{D}(R)$ *и* $\mathbf{D}(R)^*$ *неэквивалентны, если* $\chi(R)$ *комплексны для любых* R. Неприводимое представление этого рода будет называться комплексным. *Если* $\chi(R)$ *вещественны, то* $\mathbf{D}(R)$ *и* $\mathbf{D}(R)^*$ *эквивалентны. Унитарная матрица* $\mathbf{C}$, *которая преобразует одно из них в другое, либо симметрична, либо антисимметрична.* В первом случае представление будет называться *потенциально-вещественным*, а во втором случае — *псевдовещественным*.

Основание для такой терминологии заключается в том, что $\mathbf{D}(R)$ фактически можно придать вещественный вид, если матрица $\mathbf{C}$ в соотношении (24.3) симметрична. Это следует из следующей леммы[1]). *Если матрица* $\mathbf{C}$ *одновременно симметрична*

[1]) Эта лемма играет важную роль в теории матрицы рассеяния.

и унитарна, то можно считать ее собственные векторы вещественными. Из

$$\mathbf{C}\boldsymbol{v} = \omega\boldsymbol{v} \tag{24.4}$$

при умножении слева на $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}^{\dagger} = \mathbf{C}^{*}$ следует, что $\boldsymbol{v} = \omega\mathbf{C}^{*}\boldsymbol{v}$. Поскольку модуль собственного значения унитарной матрицы равен 1, комплексное сопряжение последнего соотношения дает

$$\mathbf{C}\boldsymbol{v}^{*} = \omega\boldsymbol{v}^{*}. \tag{24.4а}$$

Если $\boldsymbol{v}$ и $\boldsymbol{v}^{*}$ различны, то они могут быть заменены их вещественной *и* мнимой частями. Если $\boldsymbol{v}$ и $\boldsymbol{v}^{*}$ различаются лишь постоянным множителем, они могут быть заменены их вещественной *или* мнимой частями. Отсюда вытекает, что симметричная унитарная матрица $\mathbf{C}$ может быть записана в виде

$$\mathbf{C} = \mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}\mathbf{r}, \tag{24.4б}$$

где $\mathbf{r}$ — вещественная ортогональная матрица, $\mathbf{r}'\mathbf{r} = \mathbf{1}$, а $\boldsymbol{\omega}$ — диагональная матрица. Запишем $\boldsymbol{\omega}$ в виде квадрата другой диагональной матрицы $\boldsymbol{\omega}_1$; модуль диагональных элементов матрицы $\boldsymbol{\omega}_1$ равен 1, причем $\boldsymbol{\omega}_1^{-1} = \boldsymbol{\omega}_1^{*}$. Следовательно, (24.3) принимает вид

$$\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}_1^2\mathbf{r}\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(R)^{*}\,\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}_1^2\mathbf{r}$$

или, если умножить это равенство на $\boldsymbol{\omega}_1^{-1}\mathbf{r} = \boldsymbol{\omega}_1^{*}\mathbf{r}$ слева и на $\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}_1^{-1} = \mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}_1^{*}$ справа,

$$\boldsymbol{\omega}_1\mathbf{r}\mathbf{D}(R)\,\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}_1^{*} = \boldsymbol{\omega}_1^{*}\mathbf{r}\mathbf{D}(R)^{*}\,\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}_1. \tag{24.4в}$$

Левая и правая части последнего равенства являются комплексно-сопряженными друг другу; следовательно, обе части равенства вещественны. Отсюда следует, что $\mathbf{D}(R)$ становится вещественным, если его подвергнуть преобразованию $\mathbf{r}^{-1}\boldsymbol{\omega}_1^{*} = (\boldsymbol{\omega}_1\mathbf{r})^{-1}$. Обратно, если $\mathbf{D}(R)$ может быть преобразовано к вещественному представлению, матрица $\mathbf{C}$ должна быть симметричной. Ясно, что $\mathbf{C}$ симметрична (а именно, является постоянной матрицей), если $\mathbf{D}(R)$ уже вещественно. Поэтому она симметрична для всякой другой формы этого представления. Далее, отсюда следует, что если $\mathbf{C}$ в (24.3) антисимметрична, то $\mathbf{D}(R)$ не может быть сделано вещественным с помощью преобразования подобия.

Определим, наконец, матрицу $\mathbf{C}^{(J)}$, которая преобразует неприводимое представление $\mathfrak{D}^{(J)}$ трехмерной группы вращений в комплексно-сопряженное представление $\mathfrak{D}^{(J)*}$. Матрицы $\mathbf{C}^{(J)}$ играют также важную роль в квантовой теории поля. Так как соотношение (24.3) должно выполняться для всякого вращения, применим его прежде всего к вращению на угол α вокруг оси Z. В этом

случае $\mathfrak{D}^{(j)}$ является диагональной матрицей и nm-элементы левой и правой частей (24.3) равны

$$C_{nm}^{(j)} e^{im\alpha} = e^{-in\alpha} C_{nm}^{(j)}. \tag{24.5}$$

Так как это равенство должно выполняться для любого α, матричный элемент $C_{nm}^{(j)}$ обращается в нуль во всех случаях, кроме случая $n+m=0$,

$$C_{nm}^{(j)} = c_m^{(j)} \delta_{n,\,-m}. \tag{24.5а}$$

Применим затем (24.3) к произвольному элементу группы, но выпишем только $(-j, \mu)$-элемент (24.3). Соответствующие $\mathfrak{D}^{(j)}$ особенно просты. Имеем

$$c_j^{(j)} \mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{j\mu} = \mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})^*_{-j\,-\mu}\, c_\mu^{(j)}, \tag{24.5б}$$

или, в силу (15.27а) и (15.27б),

$$c_j^{(j)} \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu}\frac{1}{2}\beta \sin^{j-\mu}\frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma} =$$

$$= (-1)^{j-\mu} \sqrt{\binom{2j}{j+\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu}\frac{1}{2}\beta \sin^{j-\mu}\frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma} c_\mu^{(j)},$$

откуда

$$c_\mu^{(j)} = c_j^{(j)} (-1)^{j-\mu}, \tag{24.5в}$$

так как $j-\mu$ всегда является целым числом [1]). Поскольку $\mathbf{C}$ определяется из соотношения (24.3) только с точностью до множителя, выберем $c_j^{(j)} = 1$; тогда из (24.5а) получим

$$C_{nm}^{(j)} = (-1)^{j-m} \delta_{n,\,-m} = (-1)^{j+n} \delta_{n,\,-m}. \tag{24.6}$$

Все элементы матрицы $\mathbf{C}^{(j)}$ равны нулю, кроме тех, которые лежат на косой диагонали. Эти элементы равны поочередно $+1$ и -1, начиная с $+1$ в верхнем правом углу и кончая в нижнем левом углу числом $+1$, если j — целое число, и -1, если j — полуцелое:

$$\mathbf{C}^{(j)} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ . & \dots & . & . & . \\ . & \dots & . & . & . \\ . & \dots & . & . & . \end{pmatrix}. \tag{24.6а}$$

Поэтому $\mathbf{C}$ симметрична для целых j и антисимметрична для полуцелых j; первые из этих представлений потенциально-веще-

[1]) В настоящей книге все показатели основания (-1) являются целыми числами.

ственны, а последние — псевдовещественны. Мы замечаем также, что прямое произведение двух потенциально-вещественных представлений или двух псевдовещественных представлений содержит только потенциально-вещественные неприводимые компоненты. Неприводимые части прямого произведения потенциально-вещественного представления и псевдовещественного представления все псевдовещественны[1]). То обстоятельство, что представления $\mathfrak{D}^{(j)}$ с целыми j могут быть приведены к вещественному виду, можно было бы усмотреть из того факта, что мы могли бы использовать в (15.5) вещественные линейные комбинации $Y^l_m + Y^l_{-m}$ и $i(Y^l_m - Y^l_{-m})$ сферических функций. Соответствующие $\mathfrak{D}^l$ имели бы вещественный вид. Если в соотношение (24.3) подставить явное выражение матрицы $\mathbf{C}$, оно принимает вид

$$\mathfrak{D}^{(j)}(R)^*_{m'm} = (-1)^{m-m'}\,\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{-m',\,-m}; \tag{24.7}$$

это может быть показано также непосредственно. Естественно, что вид $\mathbf{C}^{(j)}$ зависит от того, в какой форме взяты $\mathfrak{D}^{(j)}$, но симметричность или антисимметричность их не могут измениться.

Симметричная форма коэффициентов векторного сложения

Коэффициенты векторного сложения были первоначально определены в (17.16) как элементы матрицы $\mathbf{S}$, которая преобразует прямое произведение двух представлений к приведенному виду (17.15). Они вошли в (17.18) — и это является их наиболее важной функцией в качестве коэффициентов, позволяющих образовать функции, принадлежащие m-й строке неприводимого представления $\mathfrak{D}^{(L)}$ из произведений функций ψ_μ и $\bar{\psi}_\nu$, принадлежащих соответственно μ-й строке $\mathfrak{D}^{(l)}$ и ν-й строке $\mathfrak{D}^{(\bar{l})}$. Они выполняют ту же функцию в (22.27), где волновая функция с квантовыми числами J, m была получена в виде

$$\Psi^J_m = \sum_\mu s^{(LS)}_{J\mu m-\mu}\,\Xi^{SL}_{m-\mu,\,\mu}, \tag{24.8}$$

т. е. выражена через волновые функции Ξ, которые преобразуются операторами Q_R и P_R по представлениям $\mathfrak{D}^{(S)}$ и $\mathfrak{D}^{(L)}$ и принадлежат $(m-\mu)$-й и μ-й строкам этих представлений соответственно.

---

[1]) См. дальнейшее обсуждение этих соотношений и других характеристик неприводимых представлений в работе: E. P. Wigner, Am. Journ. Math., 63, 57 (1941); см. также S. W. Mackey, Am. Journ. Math., 73, 576 (1951).

Ни в одном из этих случаев три представления $\mathfrak{D}^{(L)}$, $\mathfrak{D}^{(l)}$, $\mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ или $\mathfrak{D}^{(J)}$, $\mathfrak{D}^{(S)}$, $\mathfrak{D}^{(L)}$ не входят симметрично. Формула (17.22)

$$\int \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu}\,\mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu}\,\mathfrak{D}^{(L)}(R)^{*}_{\mu'+\nu';\,\mu+\nu}\,dR = \frac{h s^{(l\bar{l})}_{L\mu'\nu'} s^{(l\bar{l})}_{L\mu\nu}}{2L+1} \qquad (24.8а)$$

ближе всего подходит к удовлетворению этого требования, и она будет нашей отправной точкой; здесь $h = \int dR$ — объем группы. Несколько более симметричной формой соотношения (24.8а) является

$$\int \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu}\,\mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu}\,\mathfrak{D}^{(L)}(R)^{*}_{m'm}\,dR = \frac{h S_{Lm';\,\mu'\nu'} S_{Lm;\,\mu\nu}}{2L+1}, \qquad (24.8б)$$

где $\mathbf{S}$ — первоначальная матрица, которая преобразует $\mathfrak{D}^{l} \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ к приведенному виду. Согласно (17.20а) и (17.20б),

$$S_{Lm;\,\mu\nu} = \delta_{m,\,\mu+\nu} s^{(l\bar{l})}_{L\mu\nu}. \qquad (24.8в)$$

Интеграл (24.8б) обращается в нуль во всех случаях, кроме случая $m' = \mu' + \nu'$ и $m = \mu + \nu$; при тех же условиях отличны от нуля и коэффициенты $\mathbf{S}$. Поскольку $\mathbf{C}^{\dagger}\mathfrak{D}^{*}\mathbf{C} = \mathbf{C}^{T}\mathfrak{D}^{*}\mathbf{C} = \mathfrak{D}$, левая часть (24.8б) будет симметричной по l, $\bar{l}$, L, если умножить ее на $C_{m'\lambda'} C_{m\lambda}$ и просуммировать по m' и m. В правую часть можно подставить значение $\mathbf{C}$ из (24.6):

$$\int \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu}\,\mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu}\,\mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\lambda'\lambda}\,dR =$$
$$= \frac{h\,(-1)^{L-\lambda'} S_{L,\,-\lambda';\,\mu'\nu'}\,(-1)^{L-\lambda} S_{L,\,-\lambda;\,\mu\nu}}{2L+1}. \qquad (24.8г)$$

Поэтому, если положить

$$\frac{(-1)^{L-\lambda} S_{L,\,-\lambda;\,\mu\nu}}{\sqrt{2L+1}} \sim \begin{pmatrix} l & \bar{l} & L \\ \mu & \nu & \lambda \end{pmatrix},$$

то l, $\bar{l}$ и L будут входить симметрично. По причинам, которые станут ясными в дальнейшем, положим

$$\begin{pmatrix} l & \bar{l} & L \\ \mu & \nu & \lambda \end{pmatrix} = (-1)^{l-\bar{l}-L} \frac{(-1)^{L-\lambda} S_{L,\,-\lambda;\,\mu\nu}}{\sqrt{2L+1}}. \qquad (24.9)$$

При внесении этого выражения в (24.8б) множитель $(-1)^{l-\bar{l}-L}$ исчезает, так как он появляется в обоих матричных коэффициентах S и так как $l - \bar{l} - L$ обязательно является целым числом; число L является целым или полуцелым в зависимости от того, целым или полуцелым является число $l + \bar{l}$, т. е. $l + \bar{l} - 2\bar{l} = l - \bar{l}$.

Выражение (24.9) называется $3j$-символом; его выражение через s в более симметричных обозначениях имеет вид

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} s^{(j_1 j_2)}_{j_3 m_1 m_2} \delta_{m_1+m_2+m_3,\,0}. \qquad (24.9а)$$

Поскольку коэффициенты s определены только при том условии, что j_1, j_2 и j_3 образуют векторный треугольник, т. е. если их сумма является целым числом и если $|j_1-j_2| \leqslant j_3 \leqslant j_1+j_2$ (или, что равносильно, если ни одно из j не больше, чем сумма двух других), $3j$-символы также определены лишь при этом условии. Дальнейшие вычисления упрощаются, если положить, что $3j$-символы обращаются в нуль, если величины j не образуют векторного треугольника. Аналогичным образом исключается необходимость указывать пределы суммирования, если приписать значение нуль тем $3j$-символам, для которых абсолютное значение какого-либо m больше соответствующего j. Поэтому в дальнейшем мы примем эти условия.

$3j$-символ, определенный равенством (24.9а), не вполне симметричен. Полная симметрия не может быть достигнута, поскольку в случае, когда, например, два из j равны, коэффициенты s не являются симметричными функциями индексов строк m. Однако $3j$-символы удовлетворяют следующим соотношениям:

$$(-1)^{j_1+j_2+j_3}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}, \qquad (24.10)$$

т. е. при перестановке двух j с одновременной перестановкой соответствующих m („перестановка столбцов“) значение символа не меняется, если $j_1+j_2+j_3$ четно; оно меняет знак, если $j_1+j_2+j_3$ нечетно. Отсюда можно заключить, что значение символа не меняется, если j подвергаются вместе с соответствующими m циклической перестановке:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}. \qquad (24.10а)$$

Наконец, если у всех индексов строк изменить знак, получим

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \qquad (24.10б)$$

Таким образом, в общем случае (т. е. когда все три j различны и, по крайней мере, одно из соответствующих им m не равно

нулю) из значения одного символа можно получить значения еще одиннадцати. Если некоторые из j равны между собой или если все m равны нулю, значение символа должно обращаться в нуль в силу указанных выше соотношений.

Равенства (24.10), (24.10а) и (24.10б) можно доказать следующим образом. Введение $3j$-символов в (24.8г) дает

$$\int \mathfrak{D}^{(j_1)}(R)_{n_1m_1}\mathfrak{D}^{(j_2)}(R)_{n_2m_2}\mathfrak{D}^{(j_3)}(R)_{n_3m_3}\,dR = h\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \tag{24.11}$$

Левая часть последнего соотношения не меняется, если переставить любую пару индексов j с одновременной перестановкой соответствующих индексов n и m, сопутствующих им. Это должно быть верно также и для правой части, притом для любых значений n. Если положить все n равными соответствующим m, правая часть становится квадратом $3j$-символа, причем он не меняется при перестановке любых двух j, сопровождаемой перестановкой соответствующих индексов нижних строк m. С точностью до знака это выполняется и для самих $3j$-символов. Чтобы найти соотношение между знаками, можно положить $n_1 = -j_1$, $n_2 = j_1 - j_3$, $n_3 = j_3$. Это такой набор значений, для которого $3j$-символ может быть определен особенно просто, так как вся сумма (17.27) для соответствующего s содержит лишь один член с $\varkappa = 0$, отличный от нуля. Фактически нам нужен только знак символа

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -j_1 & j_1-j_3 & j_3 \end{pmatrix}, \tag{24.E.2}$$

а он содержит $(-1)^{j_1-j_2-j_3}$ из (24.9а) и $(-1)^{j_2+j_1-j_3}$ из (17.27). Следовательно, знак выражения (24.E.2) определяется выражением $(-1)^{2j_1-2j_3}$. Аналогично знаки символов

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ j_1-j_3 & -j_1 & j_3 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & l_2 \\ -j_1 & j_3 & j_1-j_3 \end{pmatrix} \tag{24.E.3}$$

определяются выражениями $(-1)^{j_2-j_1-j_3}$ и $(-1)^{-j_3-j_1+j_2}$. Следовательно, перестановка первых двух столбцов символа (24.E.2) приводит к умножению этого символа на $(-1)^{j_2-j_1-j_3}/(-1)^{2j_1-2j_3} = (-1)^{j_1+j_2+j_3}$. Поскольку произведения двух символов в (24.11) должно оставаться без изменения при такой перестановке, второй символ тоже должен меняться на тот же множитель при перестановке первых двух столбцов. Подобным образом перестановка последних двух столбцов дает множитель

$$(-1)^{-j_3-j_1+j_2}/(-1)^{2j_1-2j_3} = (-1)^{-3j_1+j_2+j_3} = (-1)^{j_1+j_2+j_3},$$

так как $(-1)^{4j_1} = 1$. Это показывает, что перестановка последних двух столбцов меняет $3j$-символ на множитель $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$. Это доказывает равенство первого, второго и последнего из выражений (24.10). Отсюда вытекают равенство третьего выражения (24.10) и равенства (24.10а). Назначение множителя $(-1)^{j_1-j_2-m_3}$ заключается как раз в том, чтобы обеспечить выполнение соотношений (24.10) и (24.10а).

Чтобы доказать (24.10б), заметим, что правая часть (24.11) вещественна. Следовательно, правая часть может быть заменена комплексно-сопряженным выражением, а $\mathfrak{D}^*$ можно снова выразить через $\mathfrak{D}$ с помощью (24.7). Это дает множитель $(-1)^{n_1+n_2+n_3-m_1-m_2-m_3}$, который может

быть, однако, опущен, так как обе части равенства не равны нулю только при $n_1+n_2+n_3=0$ и $m_1+m_2+m_3=0$. Следовательно,

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -n_1 & -n_2 & -n_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.12)$$

Если снова положить $n_1=-j_1$, $n_2=j_1-j_3$, $n_3=j_3$, то знак первого символа в правой части (24.12) становится равным $(-1)^{2j_1-2j_3}$. Символ в левой части также приобретает вид (24.Е.2), если переставить первый столбец с последним. Следовательно, его знак определяется выражением $(-1)^{j_1+j_2+j_3}(-1)^{2j_3-2j_1}=(-1)^{-j_1+j_2-j_3}$. Поэтому отношение первых множителей имеет знак $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$. Это доказывает изменение знака, указанное в (24.10б); замена чисел n соответствующими m показывает, что абсолютные значения обеих частей (24.10б) также равны. Более абстрактный вывод этих соотношений дан в статье, указанной в примечании на стр. 343.

Ковариантные и контравариантные коэффициенты векторного сложения

Связь между орбитальным и спиновым моментами, приводящая к полному моменту количества движения и данная в соотношении (24.8), может быть выражена с помощью $3j$-символов:

$$\Psi^J_m=(-1)^{L+\mu+(m-\mu-S)}\sqrt{2J+1}\sum_\mu\begin{pmatrix} L & S & J \\ \mu & m-\mu & -m \end{pmatrix}\Xi^{SL}_{m-\mu\mu}. \quad (24.13)$$

Показатель степени первого множителя записан в таком виде потому, что $L+\mu$ и $m-\mu-S$ являются целыми числами. Нет необходимости указывать пределы суммирования по μ, если пользоваться условием, что все $3j$-символы, у которых абсолютное значение индекса строки превосходит соответствующий индекс представления, равны нулю. Первый и последний столбцы $3j$-символа можно переставить с помощью (24.10). Это не вызывает никакого изменения, если одновременно изменить знаки всех индексов строк. Кроме того, можно заменить $m-\mu$ на ν и производить суммирование также и по ν. $3j$-Символы будут обращаться в нуль во всех случаях, кроме $\mu+\nu-m=0$. Таким путем (24.13) можно привести к виду

$$\Psi^J_m=\sum_{\nu\mu}(-1)^{L+\mu+(\nu-S)}\sqrt{2J+1}\begin{pmatrix} J & S & L \\ m & -\nu & -\mu \end{pmatrix}\Xi^{SL}_{\nu\mu}. \quad (24.13а)$$

Если, наконец, заменить Ψ^J_m на $(-1)^{2L}\Psi^J_m$, а показатели — их величиной с обратным знаком (что допустимо, поскольку они целые), то найдем

$$\Psi^J_m=\sum_{\nu\mu}(-1)^{L-\mu}(-1)^{S-\nu}\sqrt{2J+1}\begin{pmatrix} J & S & L \\ m & -\nu & -\mu \end{pmatrix}\Xi^{SL}_{\nu\mu}. \quad (24.13б)$$

Дальнейшее усовершенствование обозначений может быть достигнуто введением понятий ковариантных и контравариантных компонент волновой функции и $3j$-символов [1]). Ковариантным метрическим тензором, естественным образом приспособленным для этой цели, является $C^{(J)}_{mn}$; он определен в (24.3) и имеет явный вид (24.6). Такой тензор позволяет опускать индексы вектора, выражая ковариантные компоненты f^J_m вектора через его контравариантные компоненты $f^{m'}_J$:

$$f^J_m = \sum_{m'} C^{(J)}_{mm'} f^{m'}_J. \tag{24.14}$$

Следует заметить, что тензор $C^J_{mm'} = (-1)^{J+m}\delta_{m', -m}$ симметричен только при целых J, так что два индекса m, m' переставлять нельзя. Переход от ковариантных компонент к контравариантным производится аналогичным образом:

$$f^n_J = \sum_{n'} C^{nn'}_J f^J_{n'}, \tag{24.14а}$$

где [2])

$$C^{nn'}_J = (-1)^{J-n}\,\delta_{n,\ -n'} = (-1)^{J+n'}\,\delta_{n,\ -n'}. \tag{24.14б}$$

Мы будем пользоваться только ковариантными компонентами волновых функций, но как ковариантными, так и контравариантными компонентами $3j$-символов. Например, компонента $3j$-символа, контравариантная по последнему индексу, есть

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m \\ m_1 & m_2 & j \end{pmatrix} = \sum_{m'} C^{mm'}_j \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m' \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}. \tag{24.15}$$

Выражение (24.13б) с помощью таких обозначений может быть, очевидно, записано в виде

$$\Psi^J_m = \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J & \nu & \mu \\ m & S & L \end{pmatrix} \Xi^{SL}_{\nu\mu} \tag{24.15а}$$

или, короче,

$$\Psi^J_m = \sqrt{2J+1}\,(J_m S^\nu L^\mu)\,\Xi^{SL}_{\nu\mu}. \tag{24.15б}$$

В (24.15а) и (24.15б) в отношении индексов строк (т. е. индексов ν, μ и т. д., указывающих строку представления) использован принятый в общей теории относительности прием обозначе-

---

[1]) Они первоначально были предложены К. Херрингом.

[2]) Можно предложить следующее мнемоническое правило для запоминания знака в (24.14б): первый индекс (n) контравариантного (*con*travariant) метрического тензора входит в показатель с отрицательным (*n*egative) знаком.

ния суммирования: по повторяющимся индексам строк производится суммирование. Один из индексов в каждой суммируемой паре всегда ковариантный (нижний), а второй — контравариантный (верхний). Свободные индексы строк, т. е. индексы строк, по которым не производится суммирование, ковариантны в обеих частях этого равенства или контравариантны в обеих частях. Поскольку ковариантные индексы поднимаются в обеих частях с помощью одного и того же метрического тензора, свободные ковариантные индексы можно заменить в обеих частях любого равенства на свободные контравариантные индексы, и наоборот. В результате свободные индексы можно фактически опустить в обеих частях. Соотношение вида (24.15а) или (24.15б), имеющее „релятивистски инвариантный вид", остается справедливым и в том случае, если представления не приведены к виду, указанному в гл. 15, а лишь эквивалентны этим представлениям. Следует заметить, что величины s в гл. 17 являются по существу смешанными $3j$-символами

$$s^{(l\bar{l})}_{L\mu\nu} = \sqrt{2L+1}\,(-1)^{l-\bar{l}+L}\begin{pmatrix} l & \bar{l} & \mu+\nu \\ \mu & \nu & L \end{pmatrix} = \\ = \sqrt{2L+1}\,(-1)^{l-\bar{l}-L}\begin{pmatrix} L & \mu & \nu \\ \mu+\nu & l & \bar{l} \end{pmatrix}. \qquad (24.16)$$

Несмотря на большое сходство принятых обозначений с обозначениями, используемыми в общей теории относительности, между ними имеется существенная разница. Индексы векторов и тензоров теории относительности пробегают всегда одни и те же значения (0, 1, 2, 3); они относятся к осям в одном и том же пространстве. Индексы m, n, μ и т. д. все связаны с некоторым представлением; они относятся к различным партнерам, принадлежащим некоторому неприводимому представлению. Каждый индекс может принимать столько значений, сколько строк и столбцов имеет представление, с которым он связан. Суммирование („свертка") всегда производится по индексам, относящимся к одному и тому же представлению; свободные индексы в обеих частях соотношения — как, например, m в (24.15б) — относятся к одному и тому же представлению (в данном случае к $\mathfrak{D}^{(J)}$). Естественным следствием этого является то, что не существует единого метрического тензора; каждое представление имеет свой метрический тензор. Разница между индексами, связанными с различными представлениями, находит свое отражение также в симметричности или антисимметричности тензоров; эти соотношения, записанные в (24.10) и (24.10а), не зависят от вида представления только в том случае, если переставляемые индексы относятся к одному и тому же представлению. Однако в этом же случае они действительно *не зависят*

от вида представления, и соотношение

$$\begin{pmatrix} J & j & j \\ m & \nu & \mu \end{pmatrix} = (-1)^{J+2j} \begin{pmatrix} J & j & j \\ m & \mu & \nu \end{pmatrix} \tag{24.17}$$

справедливо независимо от того, в каком виде взято используемое представление. Это обстоятельство и приводит к тому условию относительно знаков $3j$-символов, которое было принято.

Соотношение (24.17) имеет интересное прямое следствие: если связываются две частицы, волновые функции которых являются партнерами одного и того же представления („эквивалентные орбиты"), образуя состояние с полным моментом количества движения J,

$$\Psi^J_m(1,\ 2) = (J_m,\ j^\nu,\ j^\mu)\,\psi^j_\nu(1)\,\psi^j_\mu(2) \tag{24.17a}$$

(здесь цифрами 1 и 2 обозначены переменные двух рассматриваемых частиц), то получающееся при этом состояние будет симметричным относительно перестановки двух частиц, если $J+2j$ четно, и антисимметричным, если $J+2j$ нечетно. Так, два $2p$-электрона дают симметричные S- и D-состояния и антисимметричное P-состояние. Это соответствует случаю j (в данном случае называемого l) равного 1 и J (в данном случае называемого L) равного 0 или 2 в симметричном случае и равного 1 в антисимметричном случае. Аналогично в результате связи двух спинов электронов получаем симметричное состояние $S=1$ и антисимметричное состояние $S=0$.

Запишем, наконец, полностью контравариантную форму $3j$-символа:

$$\begin{aligned}(J^m,\ S^\nu,\ L^\mu) &= C_J^{mm'} C_S^{\nu\nu'} C_L^{\mu\mu'} (J_{m'},\ S_{\nu'},\ L_{\mu'}) = \\ &= (-1)^{J-m+S-\nu+L-\mu} (J_{-m},\ S_{-\nu},\ L_{-\mu}).\end{aligned} \tag{24.18}$$

Множитель $(-1)^{-m-\nu-\mu}$ может быть опущен, так как $3j$-символы не обращаются в нуль только при $m+\nu+\mu=0$. Поэтому (24.10б) дает

$$(J^m,\ S^\nu,\ L^\mu) = (J_m,\ S_\nu,\ L_\mu); \tag{24.18a}$$

полностью ковариантные и полностью контравариантные $3j$-символы равны. Эта теорема зависит от вида представлений, принятого в гл. 15. Однако она позволяет нам записать (24.11) в ковариантном виде. С этой целью прежде всего заметим, что хотя индексы коэффициентов представления записаны как нижние индексы, в действительности первый индекс является контравариантным индексом. Это очевидно уже из основной формулы

$$\mathrm{O}_R \psi^j_m = \sum_{m'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{m'm} \psi^j_{m'}.$$

Суммирование по m' показывает, что этот индекс следовало бы писать как верхний. Поэтому представляется естественным вместо (24.11) писать

$$\int \mathfrak{D}^{(j_1)}(R)_{n_1m_1}\mathfrak{D}^{(j_2)}(R)_{n_2m_2}\mathfrak{D}^{(j_3)}(R)_{n_3m_3}\,dR = \\ = h\begin{pmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \qquad (24.18б)$$

Вычислим ковариантно-контравариантные компоненты представления $\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{nm}$:

$$C^j_{nn'}C^{mm'}_j\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{n'm'} = \left(\mathbf{C}\mathfrak{D}^{(j)}\mathbf{C}^{T^{-1}}\right)^m_n, \qquad (24.18в)$$

так как контравариантный метрический тензор является обратным по отношению к ковариантному метрическому тензору. Так как $\mathbf{C}^T = (-1)^{2j}\mathbf{C}$ и так как $\mathbf{C}^{-1}$ преобразует $\mathfrak{D}$ в $\mathfrak{D}^*$, находим, что *ковариантно-контравариантная nm-компонента представления* $\mathfrak{D}^{(j)}(R)$ отличается множителем $(-1)^{2j}$ от комплексно-сопряженной контравариантно-ковариантной компоненты $\mathfrak{D}^{(j)}(R)$ [т. е. обычной $\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{nm}$]. Для первоначального вида интеграла от трех коэффициентов представлений это дает

$$\int \mathfrak{D}^{(j_1)}(R)_{n_1m_1}\mathfrak{D}^{(j_2)}(R)_{n_2m_2}\mathfrak{D}^{(j)}(R)^*_{nm}\,dR = \\ = (-1)^{2j}h\begin{pmatrix} n_1 & n_2 & j \\ j_1 & j_2 & n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m \\ m_1 & m_2 & j \end{pmatrix}. \qquad (24.18г)$$

Разумеется, (24.18г) могло бы быть получено и непосредственно.

Теорема о равенстве полностью ковариантных и полностью контравариантных компонент $3j$-символа позволяет записать соотношения ортогональности (17.28) в инвариантном виде:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_1 & m_2 & m' \\ j_1 & j_2 & j' \end{pmatrix} = \frac{\delta_{jj'}\delta_{mm'}}{2j+1}. \qquad (24.19)$$

При $m = m'$ это соотношение эквивалентно первому из соотношений (17.28); при $m \neq m'$ каждый член суммы обращается в нуль, так как $m_1 + m_2$ не может быть равным как $-m$, так и $-m'$. Другое соотношение ортогональности приобретает вид, не зависящий от вида представления:

$$\sum_j \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m'_1 & m'_2 & m \\ j_1 & j_2 & j \end{pmatrix} = \frac{\delta_{m_1m'_1}\delta_{m_2m'_2}}{2j+1}. \qquad (24.19а)$$

Здесь подразумевается суммирование по m в силу сокращенного обозначения суммирования. Ковариантные обозначения используются

не только и, может быть, не столько потому, что они приводят к соотношениям, которые не меняются, когда представления подвергаются преобразованиям подобия. Их главная задача состоит в том, чтобы облегчить запоминание этих соотношений. Из них следуют также весьма сжатые обозначения, которые будут введены в следующем разделе.

Коэффициенты Рака́

Предыдущие расчеты указывают более симметричный вид коэффициентов векторного сложения, но не дают еще соотношений, которые позволили бы без труда и с наименьшими вычислениями получить формулы последней главы. Как уже упоминалось в первом разделе настоящей главы, между коэффициентами векторного сложения должно существовать некоторое общее соотношение, которое при полном его использовании может сделать совершенно прозрачными выводы формул Хёнля — Кронига, правила интервалов Ланде и других аналогичных выражений. Имеется много способов вывести искомые формулы; некоторые формулы уже следуют из расчетов последней главы.

Рассмотрение трех частиц, движущихся в сферически симметричном поле, приводит к вышеупомянутым соотношениям наиболее естественным путем [1]). Первая частица имеет значение энергии, которому принадлежат волновые функции $\psi_\varkappa$ при $\varkappa = -j_1, -j_1+1, \ldots, j_1-1, j_1$; функции $\psi_\varkappa$ являются партнерами и принадлежат представлению $\mathfrak{D}^{(j_1)}$. Волновыми функциями, соответствующими энергии второй частицы, являются φ_λ; эти функции принадлежат представлению $\mathfrak{D}^{(j_2)}$. Соответствующими величинами для третьей частицы являются χ_μ и $\mathfrak{D}^{(j_3)}$. Волновая функция всей системы является линейной комбинацией функций

$$\psi_\varkappa(1)\varphi_\lambda(2)\chi_\mu(3), \tag{24.E.4}$$

где цифрами 1, 2, 3 обозначены координаты трех частиц. Поскольку функции $\psi_\varkappa(1)$ всегда будут зависеть от координат первой частицы, в дальнейшем ее аргумент будет опускаться. Подобным образом вместо $\varphi_\lambda(2)$ и $\chi_\mu(3)$ будем писать φ_λ и χ_μ. Рассматриваемая ситуация является крайне схематичной и не описывает какой-либо реальной физической системы. Однако связанные с ней соображения полезны для получения искомых соотношений.

---

[1]) См. цитированные выше работы Рака́ (стр. 227) и монографию Эдмондса (стр. 338), гл. 6; см. также L. C. Biedenharn, J. M. Blatt, M. E. Rose, Rev. Mod. Phys., **24**, 249 (1952).

Образуем линейные комбинации волновых функций (24.Е.4), которые преобразуются по неприводимому представлению J при вращении координат всех трех частиц. Такие волновые функции можно получить тремя различными путями. Во-первых, можно связать моменты количества движения первых двух частиц в результирующий момент j, согласно (24.15а),

$$X_m^j(1,\ 2) = \sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} j & \varkappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix}\psi_\varkappa\varphi_\lambda, \tag{24.20}$$

и затем связать третью частицу с полученным моментом j, так чтобы образовать полный момент количества движения J,

$$X_M^{jJ}(1,\ 2,\ 3) = \sqrt{2J+1}\begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix}\chi_\mu X_m^j(1,\ 2) =$$

$$= \sqrt{2J+1}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & \varkappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix}\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu. \tag{24.21}$$

Индекс j указывает полный момент частиц 1 и 2, посредством которых было получено состояние X_M^{jJ}. Волновая функция (24.21) была бы естественным предметом рассмотрения, если бы взаимодействие между частицами 1 и 2 было сильнее, чем взаимодействие каждой из этих частиц с частицей 3.

С другой стороны, состояния с моментом J могут быть получены, если связать сначала частицы 2 и 3, а результирующее состояние — с частицей 1 или если связать частицы 1 и 3, а затем получить окончательную волновую функцию, связывая полученное таким образом состояние с частицей 2. Эти схемы соответствуют более сильному взаимодействию между частицами 2, 3 и частицами 1, 3 соответственно, однако мы не будем рассматривать эту мотивировку более подробно. Полученные таким путем волновые функции имеют вид

$$\Psi_M^{jJ}(1,\ 2,\ 3) = \sqrt{2J+1}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} J & \varkappa & m \\ M & j_1 & j \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & \lambda & \mu \\ m & j_2 & j_3 \end{pmatrix}\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu. \tag{24.21а}$$

$$\Phi_M^{jJ}(1,\ 2,\ 3) = \sqrt{2J+1}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & \varkappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix}\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu. \tag{24.21б}$$

Индекс j в (24.21а) означает совместный момент частиц 2 и 3. Подобным образом j в (24.21б) дает совместный момент частиц 1 и 3.

Три состояния Ψ_M^{jJ}, Φ_M^{jJ} и X_M^{jJ} не совпадают, хотя полный момент количества движения и его Z-компонента равны $J\hbar$ и $M\hbar$ для каждого из них. Однако поскольку каждое состояние (24.E.4) может быть выражено в виде линейной комбинации всех $\Phi_{M'}^{j'J'}$, то это справедливо также и для Ψ_M^{jJ} или X_M^{jJ}. Кроме того, если выразить, например,

$$X_M^{jJ} = \sum_{j'} \sum_{J'M'} c(jJM;\ j'J'M')\, \Phi_{M'}^{j'J'} \tag{24.22}$$

через функции Φ, то коэффициенты при $\Phi_{M'}^{j'J'}$ с $J' \neq J$ или $M' \neq M$ будут обращаться в нуль, так как эти функции Φ принадлежат либо представлению, отличному от представления $\mathfrak{D}^{(J)}$ функций X_M^{jJ}, либо иной строке этого представления. Следовательно, суммирование по J', M' в (24.22) может быть опущено, а эти индексы можно заменить на J и M. Далее, коэффициенты $c(jJM;\ j'JM)$ не зависят от M, так как и X_M^{jJ} и $\Phi_M^{j'J}$ являются партнерами, принадлежащими одному и тому же представлению $\mathfrak{D}^{(J)}$. Скалярные произведения $(X_M^{jJ},\ \Phi_M^{j'J})$ не зависят от M. Поэтому и коэффициенты c не зависят от M.

Следовательно, если всюду опустить множитель $\sqrt{2J+1}$, (24.22) дает соотношение вида

$$\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & \varkappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix}\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu =$$

$$= \sum_{j'} c^J(j;\ j')\sqrt{2j'+1}\begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j' & \varkappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix}\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu. \tag{24.22a}$$

В обеих частях последнего соотношения подразумевается суммирование по m, $\varkappa$, λ, μ. Однако, в силу линейной независимости функций $\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu$, коэффициенты при каждом произведении $\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu$ в обеих частях равны

$$\begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & \varkappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} =$$

$$= \sum_{j'} (-1)^{2j_1}(2j'+1)\begin{Bmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j' & \varkappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix}, \tag{24.23}$$

где

$$\begin{Bmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{2j_1} c^J(j;\ j')}{\sqrt{2j+1}\sqrt{2j'+1}}. \tag{24.23a}$$

Эти величины называются $6j$-символами, или коэффициентами Рака́[1]) или коэффициентами повторной связи (recoupling coefficients). Последнее название указывает на связь с настоящим выводом, который заключается в переходе от волновой функции X к волновой функции Ф. В первом случае сильно связаны частицы 1 и 2, а во втором — частицы 1 и 3. Из вывода следует, что $6j$-символы не зависят от $\varkappa$, λ, μ [эти индексы вошли только при переходе от (24.22а) к (24.23)], а также не зависят от M (как уже было указано). Ниже мы покажем это еще раз. Следовательно, (24.23) является тождеством по $\varkappa$, λ, μ, и $6j$-символ является универсальной функцией шести j, входящих в него; он полностью (численно) определяется этими шестью числами. Заметим, что в обеих частях равенства (24.23) подразумевается суммирование по m. Фактически же, поскольку в (24.23) последний $3j$-символ не обращается в нуль только при $m=\varkappa+\mu$, для каждого j' лишь один член отличен от нуля, и правая часть содержит по существу только суммирование по j'. Кроме того, в силу наличия $3j$-символов в правой части, даже член с $m=\varkappa+\mu$ исчезает, если не выполнено равенство $M=\lambda+m=\varkappa+\lambda+\mu$. Левая часть содержит только один член — член с $m=\varkappa+\lambda$ — и обращается в нуль, кроме случая $M=\mu+m=\varkappa+\lambda+\mu$. Таким образом, (24.23) является нетривиальным соотношением только при $M=\varkappa+\lambda+\mu$. Это не удивительно, так как X_M^{jj} и $\Phi_M^{j'j}$ содержат только произведения $\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu$ с $\varkappa+\lambda+\mu=M$, так что сравнение коэффициентов при остальных $\psi_\varkappa\varphi_\lambda\chi_\mu$ не может дать никакой дополнительной информации.

Равенство (24.23) содержит искомое соотношение. Придадим ему теперь различные формы, а также запишем его в более симметричном виде. С этой целью заменим сначала в обеих частях контравариантные индексы $\varkappa$, λ, μ ковариантными индексами и произведем циклическую перестановку в обеих частях во втором $3j$-символе. Заменим также различные виды j другими символами и получим

$$\begin{pmatrix} j_1 & l_2 & \lambda \\ \mu_1 & \lambda_2 & l \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l \\ \lambda_1 & \mu_2 & \lambda \end{pmatrix} =$$

$$= \sum_j (-1)^{2l_1}(2j+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & \mu \\ \mu_1 & \mu_2 & j \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \mu \end{pmatrix}. \quad (24.24)$$

---

[1]) Фактически коэффициент W Рака́ не равен в точности $6j$-символу; они связаны соотношением

$$W(j_1j_2l_2l_1;\ j_3l_3) = (-1)^{j_1+j_2+l_1+l_2}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}.$$

В это соотношение входят четыре $3j$-символа и соответственно имеются четыре тройки чисел j и l, которые должны образовывать векторные треугольники. Три члена каждой тройки (например, $l_1 j_2 l$) входят в различные столбцы $6j$-символов и либо все три находятся в верхней строке, либо два из них стоят в нижней строке, а третий — в верхней. Наоборот, $6j$-символы были определены только для тех случаев, когда эти четыре тройки (т. е. $j_1 j_2 j$, $j_1 l_2 l$, $l_1 j_2 l$, $l_1 l_2 j$) образуют векторные треугольники. Все остальные $6j$-символы мы положим теперь равными нулю. Было бы довольно трудно запомнить положение каждого j и l в $6j$-символе в (24.24), но мы сразу же покажем, что все те $6j$-символы, которые составлены из одних и тех же j и в которых одни и те же тройки должны образовывать векторные треугольники, равны. В результате (если отвлечься от знака) оказывается довольно легко запомнить соотношение (24.24), которое ясно показывает переход от связи j_1 с j_2 (и l_1 с l_2) к связи j_1 с l_2 и l_1 с j_2. Все эти числа могут быть целыми или полуцелыми.

Введем теперь сокращенное обозначение, упомянутое в конце предыдущего раздела. Оно заключается, в сущности, в опускании всех индексов строк. *Свободные* индексы строк одинаковы в обеих частях и могут иметь любое значение, поэтому их можно не выписывать. Далее, нет необходимости указывать, являются ли они ковариантными или контравариантными, если только запомнить, что они имеют одну и ту же природу в обеих частях. Индексы, по которым производится *свертка*, можно также не выписывать, так как по ним в любом случае производится суммирование. Однако в этом случае необходимо указать, какие индексы являются ковариантными, а какие — контравариантными; это будет делаться с помощью точки сверху или снизу. *При перестановке двух точек у двух j, по индексам которых произведено суммирование, возникает множитель* $(-1)^{2j}$, так как

$$f^j_\mu g^\mu_j = C^j_{\mu\nu} f^\nu_j C^{\mu\lambda}_j g^j_\lambda = (-1)^{j+\mu} f^{-\mu}_j (-1)^{j-\mu} g^j_{-\mu} = (-1)^{2j} f^\mu_j g^j_\mu.$$

Следовательно, соотношение (24.24) в сокращенных обозначениях имеет вид

$$(j_1 l_2 l^{\cdot})(l_1 j_2 l_{\cdot}) = (-1)^{2l_1} \sum_j (2j+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} (j_1 j_2 j^{\cdot})(l_1 l_2 j_{\cdot}). \tag{24.24a}$$

Если изменить положение точек в левой части равенства, возникает множитель $(-1)^{2l} = (-1)^{2l_1+2j_2}$; при изменении их положения в правой части возникает множитель $(-1)^{2j} = (-1)^{2j_1+2j_2}$.

Соотношения ортогональности (24.19) в сокращенных обозначениях принимают вид

$$(j_{1\cdot}j_{2\cdot}j)(j'_1j'_2j') = (2j+1)^{-1}\delta(j_{\cdot},\ j'\cdot), \tag{24.25}$$

где символ $\delta(j_{\cdot},\ j'\cdot)$ равен нулю, если $j \neq j'$ или если соответствующие индексы не равны, и равен 1, если $j = j'$ и соответствующие индексы равны и стоят на тех местах в левой части равенства, которые указаны точками в правой части. Следовательно,

$$\delta(j_{\cdot},\ j'\cdot) = (-1)^{2j}\delta(j'_{\cdot},\ j_{\cdot}). \tag{24.25а}$$

Разумеется, не всегда можно пользоваться сокращенными обозначениями; в частности, ими нельзя пользоваться в случае, когда одно и то же j входит дважды в одну и ту же часть соотношения, причем по индексу соответствующей проекции суммирование не производится. В этом случае одно и то же j встречается дважды и в другой части равенства, так что в вопросе о том, какой из индексов должен быть отождествлен с j, возникает неоднозначность. По этой причине сокращенными обозначениями нельзя пользоваться в релятивистских расчетах (там все индексы относятся к одному и тому же пространству). В настоящем же случае использование сокращенных обозначений делает многие вычисления более прозрачными.

Ввиду наличия суммирования по j в правой части (24.24) оно не дает явного выражения $6j$-символа. Такое выражение может быть получено, если умножить (24.24а) на $(l_1l_2j_3)$ и свернуть по индексам моментов l_1 и l_2:

$$(j_1l_{2\cdot}l') (l_{1\cdot}j_2l_{\cdot})(l'_1l'_2j_3) = \\ = (-1)^{2l_1}\sum_j (2j+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix}(j_1j_2j')(l_{1\cdot}l_{2\cdot}j_{\cdot})(l'_1l'_2j_3).$$

Точки у l_1 в левой части можно поменять местами; при этом исчезнет множитель $(-1)^{2l_1}$ в правой части. Последние два множителя справа сокращаются после суммирования с $2j+1$ в силу (24.25); j следует заменить на j_3, а его индекс, где он свободен, будет иметь то же самое положение, что и индекс момента j_3. Следовательно,

$$(j_1l_{2\cdot}l'_3)(l'_1j_2l_{3\cdot})(l_{1\cdot}l'_2j_3) = \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}(j_1j_2j_3). \tag{24.24б}$$

Это, по-видимому, наиболее важное соотношение, содержащее коэффициенты Рака́; мы воспользуемся им в следующем разделе при вычислении матричных элементов неприводимых тензорных операторов. Оно показывает, что вследствие циклической симметрии $3j$-символов столбцы $6j$-символа можно подвергать циклической перестановке. Аналогичным образом перестановка j_1 с j_2 и l_1 с l_2

в (24.24) приводит к появлению в левой части множителя $(-1)^{j_1+j_2+l_1+l_2}$, а в правой — множителя $(-1)^{2l_2-2l_1+j_1+j_2+l_1+l_2+2j}$. Отношения этих $3j$-символов, входящих в обе части равенства, изменяются так, что появляется множитель $(-1)^{2l_2-2l_1+2j}$, который равен 1, поскольку векторы l_1, l_2, j должны образовывать векторный треугольник. Сочетание этих двух результатов показывает, что *$6j$-символ остается неизменным, если его столбцы переставлены произвольным образом.* Наконец, перестановка j_1 с l_1 и j_2 с l_2 приводит к появлению в левой части (24.24) множителя $(-1)^{2l}$ (вследствие перестановки ковариантного и контравариантного λ) и в правой части — множителя $(-1)^{2j_r-2l_1+2j}$. Отношение этих множителей также равно 1, поскольку обе пары j_1j и l_1l образуют векторные треугольники с j_2. Следовательно, $6j$-символ не меняется, если переставить первые два столбца. Комбинация этого результата с предыдущим показывает, что *$6j$-символ не меняется при перестановке любых двух столбцов.* Всего имеется 24 перестановки j, не меняющих $6j$-символ; это все те перестановки, которые переставляют произвольным образом четыре тройки векторных треугольников[1]). Между $6j$-символами существуют другие соотношения. В частности, соотношения симметрии могут быть записаны в более явном виде, если (24.24б) умножить на полностью контравариантный $3j$-символ от $j_1j_2j_3$ и свернуть по всем относящимся к ним индексам.

Наиболее простая общая формула для вычисления $6j$-символа следует из (24.24б). Чтобы получить ее, выберем некоторые специальные значения для μ_1, μ_2, μ_3; положим $\mu_1=-j_1$, $\mu_2=j_1-j_3$, $\mu_3=j_3$, что обеспечивает наиболее простые выражения для $3j$-символов, которые только могут быть получены в общем случае. На аналогичном выборе μ неявно основано вычисление $6j$-символов при выводе формул Хёнля — Кронига. Несколько иное выражение для $3j$-символов было дано в работе Raká[2]). Тем не менее вычисление остается весьма трудоемким. Однако имеются обширные таблицы $6j$-символов или эквивалентных им величин. Таблица Шарпа и др.[3]) является, пожалуй, наиболее приемлемой. Отметим

---

[1]) Подробности см. в цитированной на стр. 338 монографии Эдмондса и в цитированной на стр. 352 работе Биденхарна, Блатта и Роуза.

[2]) См. цитированную на стр. 227 работу Raká.

[3]) Sharp, Kennedy, Sears, Hoyle, Tables of Coefficients for Angular Distribution Analysis, CRT-556, Atomic Energy of Canada, 1954. См. также Simon, Van der Sluis, Biedenharn, Oak Ridge National Laboratory Report 1679, 1954; Obi, Ishidzu, Horie, Yanagowa, Tanabe, Sato, Ann. Tokyo Astron. Obs., 1953—1955; Rotenberg, Bivins, Metropolis, Wooten, The 3-j and 6-j Symbols, Cambridge (в печати); K. M. Howell, Tables of 6-j Symbols, University of Southampton.

лишь три довольно тривиальных случая. Если $j_2=0$, то векторы l_1, j_2, l_3 будут составлять векторный треугольник только при $l_3=l_1$. Аналогично из треугольника j_1, j_2, j_3 следует $j_1=j_3$. Поэтому при $j_2=0$ все не обращающиеся в нуль $6j$-символы будут иметь вид

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 0 & j_1 \\ j_2 & j & j_2 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{j+j_1+j_2}}{\sqrt{2j_1+1}\sqrt{2j_2+1}}. \tag{24.26}$$

Симметрия $6j$-символов позволяет сместить 0 в любое положение При $j_2={}^1/_2$ имеем два типа $6j$-символов:

$$\begin{Bmatrix} j_1-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & j_1 \\ j_2 & j & j_2-\frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^J \left[\frac{(J+1)(J-2j)}{2j_1(2j_1+1)2j_2(2j_2+1)}\right]^{1/2}, \tag{24.26а}$$

$$\begin{Bmatrix} j_1-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & j_1 \\ j_2-\frac{1}{2} & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{J-\frac{1}{2}} \left[\frac{\left(J-2j_1+\frac{1}{2}\right)\left(J-2j_2+\frac{1}{2}\right)}{2j_1(2j_1+1)2j_2(2j_2+1)}\right]^{1/2}, \tag{24.26б}$$

где $J=j_1+j_2+j$.

Наконец, при $j_2=1$ имеются четыре типа $6j$-символов

$$\begin{Bmatrix} j_1-1 & 1 & j_1 \\ j_2 & j & j_2-1 \end{Bmatrix} = (-1)^J \left[\frac{J(J+1)(J-2j-1)(J-2j)}{(2j_1-1)2j_1(2j_1+1)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)}\right]^{1/2}, \tag{24.26в}$$

$$\begin{Bmatrix} j_1-1 & 1 & j_1 \\ j_2-1 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{J-1} \left[\frac{(J-2j_1)(J-2j_1+1)(J-2j_2)(J-2j_2+1)}{(2j_1-1)2j_1(2j_1+1)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)}\right]^{1/2}, \tag{24.26г}$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j_1 \\ j_2-1 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^J \left[\frac{2(J+1)(J-2j)(J-2j_1)(J-2j_2+1)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)}\right]^{1/2}, \tag{24.26д}$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j_1 \\ j_2 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^J \frac{j(j+1)-j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)}{[j_1(2j_1+1)(2j_1+2)j_2(2j_2+1)(2j_2+2)]^{1/2}}. \tag{24.26е}$$

Последняя формула, если подставить $j_1 = L$, $j_2 = S$, $j = J$, будет эквивалентна правилу интервалов Ланде.

Поскольку $6j$-символы не зависят от вида, в котором взяты неприводимые представления, то, казалось бы, можно найти их, исходя из характеров представлений. Это не вполне верно, так как при определении этих символов были наложены условия на знак. Однако имеются выражения с $6j$-символами, которые не зависят от этих условий относительно знака, как, например, квадрат $6j$-символа. Действительно, квадрат $6j$-символа может быть выражен в виде тройного интеграла по группе

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}^2 =$$

$$= h^{-3} \int\int\int \chi_1(R_1)\,\chi_2(R_2)\,\chi_3(R_3)\,\chi_1'\left(R_2R_3^{-1}\right)\chi_2'\left(R_3R_1^{-1}\right)\times$$
$$\times\,\chi_3'\left(R_1R_2^{-1}\right)dR_1\,dR_2\,dR_3,$$

где χ_l — характер представления $\mathfrak{D}^{(j_i)}$, а χ_l' — характер представления $\mathfrak{D}^{(l_i)}$. Мы не будем приводить здесь подробного вывода этой формулы.

Кроме упомянутых выше, $6j$-символы удовлетворяют большому числу других соотношений. В частности, можно показать, что матрица

$$(R_{lj}) = \sqrt{2l+1}\,\sqrt{2j+1}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix}$$

ортогональна. Вследствие того, что столбцы $6j$-символов могут быть переставлены, каждый такой символ является элементом трех вещественных ортогональных матриц, если отвлечься от множителей, аналогичных

$$(2l+1)^{1/2}\,(2j+1)^{1/2}.$$

$6j$-символы могут быть определены для довольно большого класса групп. В связи с этим возникает вопрос о том, определяют ли их значения группу. Этот вопрос до настоящего времени еще не решен.

Матричные элементы бесспиновых тензорных операторов

Формулу (21.19) для матричных элементов тензорного оператора можно было бы переписать с помощью $3j$-символов; однако проще вывести ее заново. Так как рассматриваемый оператор является скаляром по отношению к вращениям спиновых координат, его ранг ω по отношению к вращениям всех координат равен его рангу p по отношению к вращениям обычных координат. Мы опустим все квантовые числа N, N' и т. д., которые не существенны в настоящий момент, и напишем

$$\left(\Psi_m^J,\ \mathsf{T}^\sigma\Psi_{m'}^{J'}\right) = \left(\mathsf{O}_R\Psi_m^J,\ \mathsf{O}_R\mathsf{T}^\sigma\mathsf{O}_R^{-1}\mathsf{O}_R\Psi_{m'}^{J'}\right). \qquad (24.27)$$

Обе части этого соотношения равны, так как оператор O_R является унитарным. Поскольку $\Psi_M^{J'}$ и Ψ_M^J принадлежат пред-

ставлениям $\mathfrak{D}^{(J')}$ и $\mathfrak{D}^{(J)}$, а T^{σ} является тензорным оператором порядка p [см. (21.16б)],

$$(\Psi^J_m, \mathsf{T}^{\sigma}\Psi^{J'}_{m'}) = \sum_{\tau}\sum_{\mu,\mu'} \mathfrak{D}^{(J)}(R)^*_{\mu m}\, \mathfrak{D}^{(p)}(R^{-1})_{\sigma\tau}\, \mathfrak{D}^{(J')}(R)_{\mu' m'} (\Psi^J_{\mu}, \mathsf{T}^{\tau}\Psi^{J'}_{\mu'}).$$

В силу унитарности представления $\mathfrak{D}^{(p)}(R^{-1})_{\sigma\tau} = \mathfrak{D}^{(p)}(R)^*_{\tau\sigma}$. Интеграл по всей группе слева дает множитель $\int dR = h$. Справа получаются дважды контравариантный и ковариантный, а также контравариантный и дважды ковариантный $3j$-символы. Поэтому

$$(\Psi^J_m, \mathsf{T}^{\sigma}\Psi^{J'}_{m'}) = (J^m, p^{\sigma}, J'_{m'})\, T_{JJ'}, \tag{24.27а}$$

где

$$T_{JJ'} = \sum_{\tau}\sum_{\mu\mu'} (-1)^{2J+2p} (J_{\mu}, p_{\tau}, J'^{\mu'}) (\Psi^J_{\mu}, \mathsf{T}^{\tau}\Psi^{J'}_{\mu'})$$

не зависит от m, m' и σ. Эта формула требует только, чтобы J и J' были хорошими квантовыми числами и чтобы T был неприводимым тензорным оператором ранга $\omega = p$ по отношению к вращениям всех координат. Величина $T_{JJ'}$ в (24.27а) представляет произведение $(-1)^{J-p-J'}\sqrt{2J'+1}$ на соответствующую величину из (21.19); в остальном эти два соотношения полностью эквивалентны. Заметим, что ковариантная компонента первого сомножителя скалярного произведения играет роль контравариантной компоненты. Причина этого заключается в том, что при вычислении скалярного произведения нужно взять величину, комплексно-сопряженную первому множителю.

Предположим теперь, что имеет место связь Рессела — Саундерса и что Ψ^J_m и $\Psi^{J'}_{m'}$ могут быть выражены с помощью (24.15б) через функции $\Xi^{SL}_{\nu\mu}$ и $\Xi^{S'L'}_{\nu'\mu'}$, имеющие соответствующие квантовые числа для спина и орбитального момента. Так как T^{σ} является бесспиновым оператором или по крайней мере скаляром относительно вращений спиновых координат, матричный элемент (24.27) не обращается в нуль только при $S = S'$. Поэтому положим $S = S'$ и, в силу (24.15б), получим

$$(\Psi^J_m, \mathsf{T}^{\sigma}\Psi^{J'}_{m'}) = \sqrt{2J+1}\sqrt{2J'+1}\times$$
$$\times (J_m, S^{\nu}, L^{\mu})(J'_{m'}, S^{\nu'}, L'^{\mu'})(\Xi^{SL}_{\nu\mu}, \mathsf{T}^{\sigma}\Xi^{SL'}_{\nu'\mu'}). \tag{24.28}$$

Скалярное произведение в правой части не зависит от J и J', так что это выражение позволит нам сравнивать не только матричные элементы между состояниями с определенными J и J', но также и матричные элементы между всеми состояниями двух мультиплетов. Рассматриваемые состояния отличаются не только магнитными квантовыми числами m и m', но также и значениями

полного момента количества движения; J может принимать все значения от $|S-L|$ до $S+L$, а J' — все значения от $|S-L'|$ до $S+L'$.

Первый $3j$-символ в (24.28) происходит от первого множителя скалярного произведения. Чтобы придать этому соотношению „релятивистски инвариантный вид", превратим ковариантные индексы в контравариантные, и наоборот. Вычисление, сходное с вычислением, приводящим к (24.18а), показывает, что

$$(J_m,\ S^\nu,\ L^\mu)=(-1)^{2J}(J^m,\ S_\nu,\ L_\mu). \tag{24.28а}$$

[Вместо $(-1)^{2J}$ можно было бы написать $(-1)^{2S+2L}$, причем в показатель входят *либо* ковариантные, *либо* контравариантные векторы.] Поскольку T^σ также является неприводимым тензором ранга p относительно вращений обычных координат, к нему применимо и соотношение (24.27а). Запишем его в виде

$$(\Xi^{SL}_{\nu\mu},\ \mathsf{T}^\sigma\Xi^{SL'}_{\nu'\mu'})=\delta_{\nu\nu'}(L^\mu,\ p^\sigma,\ L'_{\mu'})\,T_{SL,\,SL'}. \tag{24.29}$$

$T_{SL,\,SL'}$ не только не зависит от μ, σ, μ', как и раньше, но также не зависит от ν, поскольку T^σ является скаляром по отношению к спиновым переменным. Комбинируя (24.27а) и (24.29) с (24.28), получаем

$$\begin{aligned}(J^m,\ p^\sigma,\ J'_{m'})\,T_{JJ'}&=\\ =(-1)^{2J}\sqrt{2J+1}\sqrt{2J'+1}\,&(J^m,\ S_\nu,\ L_\mu)(J'_{m'},\ S^\nu,\ L'^{\mu'})\times\\ &\times(L^\mu,\ p^\sigma,\ L'_{\mu'})\,T_{SL,\,SL'}.\end{aligned} \tag{24.29а}$$

Это равенство должно быть тождеством по m, m', σ. В самом деле, ясно, что участвующим здесь тождеством является (24.24б), и после приведения знаков находим

$$T_{JJ'}=(-1)^{2J-L+S+J'+p}\begin{Bmatrix}J & p & J'\\ L' & S & L\end{Bmatrix}\sqrt{2J+1}\sqrt{2J'+1}\,T_{SL,\,SL'}. \tag{24.30}$$

Эта общая формула применима в случае связи Рессела — Саундерса и дает отношения матричных элементов между всеми состояниями двух мультиплетов для оператора, который является неприводимым тензором ранга p относительно обычных координат, но инвариантен при вращениях спинов. При $p=1$ она содержит формулы Хёнля — Кронига. Аналогичное соотношение с заменой ролей L и S применимо к оператору, который инвариантен относительно вращений обычных координат, но преобразуется как неприводимый тензор ранга q при вращениях спиновых координат.

Взаимодействие между спином и внешним магнитным полем является таким оператором (с $q=1$), а множитель в формуле Ланде (23.24) является, в сущности, коэффициентом Ракá, или $6j$-символом. Мы не будем дальше рассматривать этот вопрос, так как наиболее важные результаты уже были получены в предыдущей главе путем прямых вычислений.

Общие двусторонние тензорные операторы

Свойства $6j$-символов представляют значительный принципиальный интерес. Практическая их польза зависит от числа конкретных задач, которые они упрощают, от значения этих задач и от простоты пользования этими символами. Таблицы $6j$-символов, очевидно, более громоздки, чем большинство математических таблиц, поскольку они зависят от шести переменных. В этом отношении они более сложны, чем даже коэффициенты векторного сложения, которые зависят по существу только от пяти переменных. Задача настоящего раздела приводит к понятиям, которые часто называют $9j$-символами и которые зависят от девяти переменных, причем предшествующие замечания относятся к ним в еще большей степени [1]).

Рассмотрим теперь двусторонний тензорный оператор $\mathsf{T}^{\rho\sigma}_{qp}$ или, вернее, как уже указано в (24.1), неприводимый тензор [2])

$$\mathsf{T}^{\tau}_{\omega}=(\omega^{\tau},\ q_{\rho},\ p_{\sigma})\,\mathsf{T}^{\rho\sigma}_{qp}, \tag{24.31}$$

который преобразуется согласно (24.1а) при одновременных вращениях спиновых и обычных координат. Предположив связь Рессела — Саундерса, выразим Ψ^{J}_{m} и $\Psi^{J'}_{m'}$ через соответствующие Ξ с помощью (24.15б) и, пользуясь сокращенными обозначениями, получаем

$$\begin{aligned}(\Psi^{J}_{m},\ \mathsf{T}^{\tau}_{\omega}\Psi^{J'}_{m'})=&\sqrt{2J+1}\sqrt{2J'+1}\times\\ &\times(J_m S^{\cdot} L^{\cdot})(\omega^{\tau} q_{\cdot} p_{\cdot})(J'_{m'} S'^{\cdot} L'^{\cdot})(\Xi^{SL}_{\cdot\cdot},\ \mathsf{T}^{\cdot\cdot}_{qp}\Xi^{S'L'}_{\cdot\cdot}).\end{aligned} \tag{24.32}$$

Поскольку мы не определили контравариантных компонент волновых функций, все их индексы являются нижними. Последний матричный элемент может быть записан в виде

$$(\Xi^{SL}_{\nu\mu},\ \mathsf{T}^{\rho\sigma}_{qp}\Xi^{S'L'}_{\nu'\mu'})=(S^{\nu},\ q^{\rho},\ S'_{\nu'})(L^{\mu},\ p^{\sigma},\ L'_{\mu'})\,T_{SL,\,S'L'}, \tag{24.32а}$$

---

[1]) См. K. Smith, J. W. Stevenson, Argonne National Laboratory Report 5776.

[2]) Заметим, что оператор (24.31) отличается от оператора (24.1) множителем $(-1)^{q-p-\omega}\sqrt{2\omega+1}$, который входит в (24.16).

что аналогично (24.27а) или (24.29). Напишем также

$$\left(\Psi^{J}_{m},\ \mathrm{T}^{\tau}_{\omega}\Psi^{J'}_{m'}\right)=\left(J^{m},\ \omega^{\tau},\ J'_{m'}\right)T_{JJ'}. \qquad (24.32б)$$

Это соотношение по-прежнему справедливо, так как оно опирается только на предположение, что J и J' являются хорошими квантовыми числами. Мы хотим снова выразить $T_{JJ'}$ через $T_{SL,S'L'}$, а также показать, что правые части (24.32) и (24.32б) одинаковым образом зависят от m, m' и τ. Чтобы получить „релятивистски инвариантный" вид соотношения, отождествляющего (24.32) с (24.32б), следует изменить положение всех индексов первого $3j$-символа в (24.32). Это всегда следует делать по отношению к символам, происходящим от первого множителя скалярного произведения; в данном случае это вводит множитель $(-1)^{2J}$. Мы получаем

$$(J,\ \omega,\ J')\,T_{JJ'}=(-1)^{2J}\sqrt{2J+1}\sqrt{2J'+1}\,(JS.L.)(\omega q.p.)\times$$
$$\times(J'S'^{\cdot}L'^{\cdot})(S^{\cdot}q^{\cdot}S'_{\cdot})(L^{\cdot}p^{\cdot}L'_{\cdot})\,T_{SL,S'L'}. \qquad (24.33)$$

Отношение суммы произведений пяти $3j$-символов в правой части к $3j$-символу в левой части есть в сущности $9j$-символ:

$$\begin{Bmatrix} J & S & L \\ \omega & q & p \\ J' & S' & L' \end{Bmatrix}. \qquad (24.E.5)$$

$9j$-символ не обращается в нуль только в том случае, когда векторы каждой строки и каждого столбца образуют векторные треугольники. Мы не будем подробно обсуждать определение и свойства $9j$-символов. Покажем лишь, как выражение в правой части (24.33) может быть сведено с помощью $6j$-символов к одному $3j$-символу. Тот же прием может применяться ко всем выражениям, которые могут приводить к инвариантным соотношениям с отдельными $3j$-символами.

Произведение первого и последнего $3j$-символов в правой части (24.33) имеет вид произведения, входящего в (24.24а), за исключением циклической перестановки j, которая может быть компенсирована с помощью (24.10а). Поэтому

$$(pL'L^{\cdot})(JSL.)=(-1)^{2J}\sum_{j}(2j+1)\begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix}(pSj^{\cdot})(JL'j_{\cdot}). \qquad (24.34)$$

Мы замечаем, что второй $3j$-символ в правой части (24.33) содержит p, четвертый содержит S и оба они содержат q. Следова-

тельно, p и S могут быть переведены в один $3j$-символ с помощью коэффициента Рака́:

$$(S'Sq^{\cdot})(p\omega q_{\cdot})=(-1)^{2p}\sum_j(2j+1)\begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix}(S'\omega j^{\cdot})(pSj_{\cdot}). \tag{24.34а}$$

Произведение двух последних соотношений, просуммированное должным образом по индексам, соответствующим p и S, может быть упрощено с помощью соотношений ортогональности (24.25):

$$(p^{\cdot}L'L^{\cdot})(JS^{\cdot}L_{\cdot})(S'S_{\cdot}q^{\cdot})(p_{\cdot}\omega q_{\cdot})=$$
$$=(-1)^{2J+2p}\sum_j(2j+1)\begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix}(JL'j_{\cdot})(S'\omega j^{\cdot}). \tag{24.35}$$

Чтобы отождествить это выражение с правой частью (24.33), следует изменить положение индексов, соответствующих S. Это вводит лишь множитель $(-1)^{2S}$. После этого умножение на $(J'S'L')=$ $=(S'L'J')$ и соответствующая свертка по индексам величин S' и L' дает для произведения пяти $3j$-символов в (24.33) выражение

$$(-1)^{2J+2p+2S}\sum_j(2j+1)\begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix}(JL'_{\cdot}j_{\cdot})(S'_{\cdot}\omega j^{\cdot})(S'^{\cdot}L'^{\cdot}J').$$

Оно имеет теперь вид (24.24б) и равно

$$(-1)^{2J+2\omega}\sum_j(-1)^{2j}(2j+1)\begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} J & \omega & J' \\ S' & L' & j \end{Bmatrix}(J\omega J').$$

Положение индексов величин j и S' следует сместить, а это вводит множитель $(-1)^{2j+2S'}$. Однако показатель может быть упрощен с помощью различных условий для квантовых чисел, образующих векторные треугольники. Окончательно получаем

$$T_{JJ'}=(-1)^{2\omega}\sqrt{2J+1}\sqrt{2J'+1}\times$$
$$\times\sum_j(-1)^{2j}(2j+1)\begin{Bmatrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} J & \omega & J' \\ S' & L' & j \end{Bmatrix}T_{SL,S'L'}. \tag{24.36}$$

Следует заметить, что имеются три существенно различных способа группировки множителей в правой части (24.33) и соответственно имеются три различных способа представить $9j$-символ

в виде суммы произведений трех $6j$-символов. Данный способ группировки был выбран здесь, чтобы упростить дальнейшие расчеты.

Интересный частный случай имеет место при $\omega = 0$, т. е. если оператор T является инвариантом относительно одновременного вращения спиновых и обычных координат. Это имеет место, в частности, для энергии взаимодействия спина с орбитальным движением. Если $\omega = 0$, то должно быть $p = q$ и $J = J'$. Кроме того, поскольку второй $6j$-символ не обращается в нуль только в том случае, если S', ω и j образуют векторный треугольник, вклад в сумму дает только член с $j = S'$. Пользуясь выражением (24.26) для второго и третьего $6j$-символов, после преобразования $6j$-символа получаем

$$T_{JJ'} = (-1)^{J+L'+S+p} \frac{\sqrt{2J+1}}{\sqrt{2p+1}} \begin{Bmatrix} L & J & S \\ S' & p & L' \end{Bmatrix} T_{SL,S'L'}, \qquad (24.36а)$$

что в сущности снова представляет собой $6j$-символ. При $p = 1$ это дает правило интервалов Ланде, а случай $p = 2$ соответствует спин-спиновому взаимодействию. $6j$-символы появляются также в других разделах спектроскопии, таких, как определение волновых функций в сложных атомах. Они играют важную роль также в теории структуры ядра, β-распада, угловой корреляции между частицами или квантами, испущенными последовательно, в теории ядерных реакций и, последнее по счету, но не по важности, в определении ядерных волновых функций. Более подробные обзоры по данному вопросу упоминались ранее в настоящей главе.