

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1956

02.56.02

REPUBLICA ARGENTINA

PUBLICACIONES
DE LA
COMISION NACIONAL DE LA ENERGIA ATOMICA

SERIE FISICA
VOL. I — Nº 8

**INTENSIDADES Y REGLAS DE SELECCION
DE LAS RADIACIONES MULTIPOLARES**

POB CARLOS G. BOLLINI



BUENOS AIRES

1956

REPUBLICA ARGENTINA

PUBLICACIONES
DE LA
COMISION NACIONAL DE LA ENERGIA ATOMICA

SERIE FISICA
VOL. I — Nº 8

**INTENSIDADES Y REGLAS DE SELECCION
DE LAS RADIACIONES MULTIPOLARES**

POR CARLOS G. BOLLINI



BUENOS AIRES

1956

Imprenta y Casa Editora CONI, Perú 684, Buenos Aires

1009

INTENSIDADES Y REGLAS DE SELECCION DE LAS RADIACIONES MULTIPOLARES

POR CARLOS G. BOLLINI

Trabajo presentado para su publicación en Abril de 1955

SUMMARY

Interaction between an atomic electron and a radiation field is treated by representing the latter by means of electrical and magnetic spherical solutions from Maxwell equations. In this way it is achieved a suitable formalism for the attainment of intensities and the corresponding selection rules, taking into account the conservation of total angular momentum.

Thus appear, in the Schrödinger approximation, multipolar electric and magnetic radiations which orders are comprised between the addition and the difference of azimuthal quantum numbers from the initial and final states of a transition.

It is found the effects of spin and the purely relativistic produced on the selection rules and besides it is inferred accurate and approximate formulae for interaction matrixes corresponding to Schrödinger, Pauli and Dirac approximations.

Comparison among the last two allows to find the existing differences between relativistic formulae, for small energies, and Pauli approximation formulae.

INTRODUCCIÓN

Nos proponemos encontrar las intensidades y las reglas de selección de las radiaciones multipolares emitidas por un electrón en un átomo hidrogenoide, limitándonos a procesos de primer orden.

En el cálculo corriente de las probabilidades de transición, se desarrolla el operador de campo en ondas planas. No obstante, cuando se desea dar cuenta de la conservación del impulso angular total del electrón y del campo, la representación en ondas planas no es adecuada porque éstas no tienen el impulso angular definido. Las ondas que tienen definido su impulso angular son las soluciones

esféricas de las ecuaciones de Maxwell, es decir, precisamente, las ondas multipolares. Si cada radiación multipolar de un cierto orden λ se subdivide en ondas de paridades definidas, se tienen las radiaciones eléctricas, de paridad $(-1)^\lambda$ y las magnéticas, de paridad $-(-1)^\lambda$. La división en los tipos eléctrico y magnético permitirá, entonces, dar cuenta también de la conservación de la paridad.

Habitualmente se considera que en transiciones orbitales se producen únicamente radiaciones de carácter eléctrico. W. Heitler (1), por ejemplo, afirma que cuando no hay inversión de espín no existe la posibilidad de una emisión de carácter magnético (*Loc., cit.* pág. 123). Sin embargo, si se considera la conservación del impulso angular total del sistema electrón-fotón, aparecen superpuestas a una radiación eléctrica (predominante) radiaciones magnéticas y eléctricas de órdenes multipolares superiores. Es entonces de interés discutir con cierto detalle lo que sucede con la aproximación de Schrödinger, es decir, sin tener en cuenta efectos de espín o relativistas. Por otra parte, existen influencias puramente relativistas que es conveniente separar para su mejor estudio de las que provienen de la existencia del espín. Por estas razones se trata el problema propuesto, sucesivamente en las aproximaciones de Schrödinger, Pauli y Dirac.

El desarrollo del potencial vectorial del campo (\mathbf{A}) en ondas multipolares eléctricas y magnéticas ($\mathbf{A}_{\lambda\mu}^E$ y $\mathbf{A}_{\lambda\mu}^M$) tiene la forma:

$$\mathbf{A} = \sum_{\lambda, \mu, \nu} \{ q_{\lambda\mu, \nu}^E \cdot \mathbf{A}_{\lambda\mu, \nu}^E(\mathbf{r}) + q_{\lambda\mu, \nu}^M \cdot \mathbf{A}_{\lambda\mu, \nu}^M(\mathbf{r}) \} + c. c.$$

donde $q_{\lambda\mu}^E$ y $q_{\lambda\mu}^M$ son, respectivamente, los operadores de emisión de fotones de tipos eléctrico y magnético, de impulso angular de valor λ y cuya componente según el eje z es μ .

Simbolizando con φ a los estados del electrón y con Γ a los del fotón, podemos formar un conjunto ortonormal del sistema electrón-fotón, mediante los productos $\Gamma \cdot \varphi$. La interacción entre el electrón y el campo está especificada por un operador H' , cuya forma depende de la aproximación que se considere, siendo en general un producto de magnitudes del electrón (P), por una función del operador del campo ($F(\mathbf{A})$).

$$H' = P \cdot F(\mathbf{A})$$

La única parte de $F(\mathbf{A})$ que interesa en los procesos de primer orden es la lineal en las q , esto es

$$\sum_{\lambda, \mu, \nu} \{ q^E F_1(\mathbf{A}^E) + q^M F_2(\mathbf{A}^M) \} + c. c.$$

Por lo tanto, la matriz de H' en el sistema $\Gamma \cdot \varphi$ es

$$\begin{aligned} (\Gamma' \varphi' | H' | \Gamma \varphi) &= \sum_{\lambda, \mu, \nu} (\Gamma' \varphi' | P \cdot (q^E F_1^E + q^M F_2^M + c \cdot e) | \Gamma \cdot \varphi) = \\ &= \sum_{\lambda, \mu, \nu} \{ (\Gamma' | q^E | \Gamma) (\varphi' | P \cdot F_1^E | \varphi) + (\Gamma' | q^M | \Gamma) (\varphi' | P \cdot F_2^M | \varphi) \} \end{aligned}$$

La matriz $(\Gamma' | q_{\lambda, \mu}^E | \Gamma)$ es diferente de cero sólo en las emisiones de un fotón de tipo eléctrico (del carácter fijado por los subíndices) y análogamente la matriz $(\Gamma' | q_{\lambda, \mu}^M | \Gamma)$. Al estudiar entonces los procesos que se refieren a emisiones de tipo eléctrico, sólo es necesario encarrar el cálculo de $(\varphi' | P \cdot F_1^E | \varphi)$ y de modo parecido en emisiones magnéticas con $(\varphi' | P \cdot F_2^M | \varphi)$. Esto se ha calculado para las diferentes aproximaciones. La principal diferencia entre ellas se encuentra en el significado de los coeficientes D que figuran en las fórmulas finales de los elementos de matriz (comparar las fórmulas (I, 16) y (I, 17); (II, 12) y (II, 13); (III, 9) y (III, 10)). Es de destacar en particular, las diferencias existentes entre las fórmulas relativistas para pequeñas energías y las fórmulas de la aproximación de Pauli.

Por su parte, las reglas de selección se obtienen a causa de la circunstancia siguiente. Ni el operador que representa el impulso angular del electrón, ni aquel que representa el del fotón, conmutan con el hamiltoniano de la interacción; mientras que sí lo hace la suma de ambos, es decir, el operador \mathbf{J} de impulso angular total (en campos centrales). Esto significa que la última magnitud mencionada es una constante de movimiento mientras que las correspondientes al electrón y al fotón no lo son. Por lo tanto, si \mathbf{J} estaba inicialmente referido a sus ejes principales también lo estará luego la transición. Ahora bien, los productos $\Gamma_{\lambda, \mu} \varphi_{jm}$ no son funciones propias de \mathbf{J} (salvo para $\Gamma_{0,0}$, que se refiere a la ausencia de fotones) de manera que es necesario efectuar una transformación unitaria que lleve esos productos a estados propios de \mathbf{J} . Las funciones resultantes son (2)

$$\Psi_{JM(j,\lambda)} = \sum_{m+\mu=M} C_{j\lambda}(JM, m\mu) \Gamma_{\lambda, \mu} \varphi_{jm}. \quad (1)$$

La transformación contraria es

$$\Gamma_{\lambda, \mu} \varphi_{jm} = \sum_{J=|j-\lambda|}^{j+\lambda} C_{j\lambda}(JM, m\mu) \Psi_{JM(j,\lambda)} \quad (M = m + \mu) \quad (2)$$

No habiendo fotón presente, el estado inicial está representado por

$$\Psi_{JM} = \varphi_{jm} \Gamma_{00}$$

y el impulso angular pertenece por entero al electrón: $J=j$; $M=m$. Al aplicar el operador H' de la interacción a esta función, debe resultar una autofunción de J , por las razones señaladas. Cuando se efectúa el producto escalar de $H' \Psi_{JM}^{inic.}$ por la función $\Gamma_{\lambda\mu} \varphi_{jm}$, el producto es nulo, si la última función no contiene en su desarrollo (2) alguna función con $J=j$ y $M=m$. Observando el citado desarrollo se obtienen las reglas de selección.

Como antecedente de nuestro trabajo podemos citar el de H. C. Brinkman (3) que sigue un tratamiento diferente del nuestro, hallando las intensidades mediante el principio de correspondencia y sin ocuparse de las partes radiales de las integrales.

Un esquema del tratamiento habitual, así como otras referencias, pueden ser encontradas en el libro de A. Sommerfeld (4). La cuestión del impulso angular llevado por la radiación está discutida en un artículo de W. Heitler (1) y desde otro punto de vista también por J. A. Balseiro (5).

I. APROXIMACIÓN DE SCHRÖDINGER

La energía total del electrón de un átomo hidrogenoide, en interacción con el campo de radiación, es

$$H = \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \cdot \mathbf{A} \right)^2 + e \cdot V$$

Que puede separarse en una parte correspondiente al átomo

$$H_a = \frac{1}{2 \cdot m} \cdot p^2 + e \cdot V$$

y en una interacción

$$H' = \frac{-e}{mc} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$$

No tomamos en cuenta al término en A^2 pues éste involucra procesos de segundo orden.

Las funciones propias de H_a son

$$\Psi_{nl}^m = R_{nl}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi) = R_{nl}(r) \Theta_l^m e^{im\varphi}.$$

Para encontrar la matriz de H' en el sistema formado por estas funciones, ponemos previamente

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{2} \cdot (\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y)(p_x + ip_y) + \frac{1}{2} \cdot (\mathbf{A}_x + i\mathbf{A}_y)(p_x - ip_y) + \mathbf{A}_z \cdot p_z \quad (I, 1)$$

y procedemos luego al cálculo de la matriz de cada uno de los términos de la suma. Este desarrollo permite utilizar las siguientes propiedades del operador de impulso (5)

$$(p_x + ip_y) \Psi_{nl}^m = ih \cdot A_{lm}^1 \cdot R_{nl}^1 \cdot Y_{l+1}^{m+1} + ih \cdot A_{lm}^2 \cdot R_{nl}^2 \cdot Y_{l-1}^{m+1} \quad (\text{I,2})$$

$$(p_x - ip_y) \Psi_{nl}^m = ih \cdot B_{lm}^1 \cdot R_{nl}^1 \cdot Y_{l+1}^{m-1} + ih \cdot B_{lm}^2 \cdot R_{nl}^2 \cdot Y_{l-1}^{m-1} \quad (\text{I,3})$$

$$p_z \Psi_{nl}^m = ih \cdot C_{lm}^1 \cdot R_{nl}^1 \cdot Y_{l+1}^m + ih \cdot C_{lm}^2 \cdot R_{nl}^2 \cdot Y_{l-1}^m$$

donde

$$R_{nl}^1 = \frac{d}{dr} R_{nl} - \frac{l}{r} R_{nl}; \quad R_{nl}^2 = \frac{d}{dr} R_{nl} + \frac{l+1}{r} R_{nl}.$$

Trataremos ahora separadamente la interacción del átomo con las partes eléctrica y magnética de la radiación, utilizando para esta última las expresiones del potencial vectorial (j es la función esférica de Bessel: $j(kr)$)

$$(\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y)_{\lambda\mu} = a_{\lambda\mu}^1 \cdot j_{\lambda+1} \cdot Y_{\lambda+1}^{\mu+1} + a_{\lambda\mu}^2 \cdot j_{\lambda-1} \cdot Y_{\lambda-1}^{\mu+1} \quad (\text{I, 6})$$

$$(\mathbf{A}_x + i\mathbf{A}_y)_{\lambda\mu} = b_{\lambda\mu}^1 \cdot j_{\lambda+1} \cdot Y_{\lambda+1}^{\mu-1} + b_{\lambda\mu}^2 \cdot j_{\lambda-1} \cdot Y_{\lambda-1}^{\mu-1} \quad (\text{I, 7})$$

$$(\mathbf{A}_z)_{\lambda\mu} = c_{\lambda\mu}^1 \cdot j_{\lambda+1} \cdot Y_{\lambda+1}^{\mu} + c_{\lambda\mu}^2 \cdot j_{\lambda-1} \cdot Y_{\lambda-1}^{\mu} \quad (\text{I, 8})$$

válidas para la parte eléctrica. A la parte magnética corresponde, en cambio, las expresiones

$$(\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y)_{\lambda\mu} = a_{\lambda\mu} \cdot j_{\lambda} \cdot Y_{\lambda}^{\mu+1} \quad (\text{I, 9})$$

$$(\mathbf{A}_k + i\mathbf{A}_y)_{\lambda\mu} = b_{\lambda\mu} \cdot j_{\lambda} \cdot Y_{\lambda}^{\mu-1} \quad (\text{I, 10})$$

$$(\mathbf{A}_z)_{\lambda\mu} = c_{\lambda\mu} \cdot j_{\lambda} \cdot Y_{\lambda}^{\mu} \quad (\text{I, 11})$$

Los sub-índices λ y μ fijan el carácter de la onda multipolar.

Elementos de matriz. — a) Parte eléctrica.

Multiplicando la (I, 6) por la (I, 2) se obtiene la suma

$$\begin{aligned} & ih \cdot a_{\lambda\mu}^1 \cdot A_{lm}^1 \cdot j_{\lambda+1} \cdot R_{nl}^1 \cdot Y_{\lambda+1}^{\mu+1} \cdot Y_{l+1}^{m+1} + \\ & ih \cdot a_{\lambda\mu}^1 \cdot A_{lm}^2 \cdot j_{\lambda+1} \cdot R_{nl}^2 \cdot Y_{\lambda+1}^{\mu+1} \cdot Y_{l-1}^{m+1} + \\ & ih \cdot a_{\lambda\mu}^2 \cdot A_{lm}^1 \cdot j_{\lambda-1} \cdot R_{nl}^1 \cdot Y_{\lambda-1}^{\mu+1} \cdot Y_{l+1}^{m+1} + \\ & ih \cdot a_{\lambda\mu}^2 \cdot A_{lm}^2 \cdot j_{\lambda-1} \cdot R_{nl}^2 \cdot Y_{\lambda-1}^{\mu+1} \cdot Y_{l-1}^{m+1} \end{aligned}$$

Efectuando el producto de esta suma por la conjugada de $\Psi_{n'l}^{m'}$ e integrando sobre todo el espacio * resulta

$$\begin{aligned} & \left(\Psi_{n'l}^{m'} | (A_x - iA_y)_{\lambda\mu} (p_x + ip_y) | \Psi_{n'l}^m \right) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ & a_{\lambda\mu}^1 A_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu+1} \Theta_{l+1}^{m+1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & a_{\lambda\mu}^1 A_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu+1} \cdot \Theta_{l-1}^{m+1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & a_{\lambda\mu}^2 A_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu+1} \cdot \Theta_{l+1}^{m+1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & a_{\lambda\mu}^2 A_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu+1} \cdot \Theta_{l-1}^{m+1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta \left. \right\} \end{aligned}$$

Procediendo de manera análoga con (I, 7) y (I, 3) deducimos

$$\begin{aligned} & \left(\Psi_{n'l}^{m'} | (A_x + iA_y)_{\lambda\mu} (p_x - ip_y) | \Psi_{n'l}^m \right) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ & b_{\lambda\mu}^1 B_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu-1} \cdot \Theta_{l+1}^{m-1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & b_{\lambda\mu}^1 B_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu-1} \cdot \Theta_{l-1}^{m-1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & b_{\lambda\mu}^2 B_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu-1} \cdot \Theta_{l+1}^{m-1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & b_{\lambda\mu}^2 B_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu-1} \cdot \Theta_{l-1}^{m-1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta \left. \right\} \end{aligned}$$

Repitiendo el procedimiento con (I, 8) y (I, 4) obtenemos

$$\begin{aligned} & \left(\Psi_{n'l}^{m'} | (A_z)_{\lambda\mu} p_z | \Psi_{n'l}^m \right) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ & c_{\lambda\mu}^1 C_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda+\mu} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \cdot \Theta_{l+1}^m \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & c_{\lambda\mu}^1 C_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \cdot \Theta_{l-1}^m \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & c_{\lambda\mu}^2 C_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \cdot \Theta_{l+1}^m \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\ & c_{\lambda\mu}^2 C_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \cdot \Theta_{l-1}^m \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta \left. \right\} \end{aligned}$$

Efectuando ahora la suma indicada en el miembro de la derecha de (I, 1) y sacando a las integrales radiales como factores comunes, queda

* Utilizamos la notación $(f | X | g) = \int \bar{f} \cdot X \cdot g \cdot dv$.

$$\begin{aligned}
 & \left. (\Psi_{n'l}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \right\} \\
 \mathbf{E}_{11} & \cdot \int j_{\lambda+1} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr + \mathbf{E}_{12} \cdot \int j_{\lambda+1} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr + \\
 & \mathbf{E}_{21} \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr + \mathbf{E}_{22} \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \left\{ \dots \dots \text{(I, 12)} \right.
 \end{aligned}$$

Donde hemos puesto, por ejemplo,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_{11} = \mathbf{E}_{11}(\lambda\mu, lm, l'm') & = \frac{1}{2} \cdot a_{\lambda\mu}^1 \mathbf{A}_{lm}^1 \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu+1} \cdot \Theta_{l+1}^{m+1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\
 & \frac{1}{2} \cdot b_{\lambda\mu}^1 \mathbf{B}_{lm}^1 \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu-1} \cdot \Theta_{l+1}^{m-1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu}^1 \mathbf{C}_{lm}^1 \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \cdot \Theta_{l+1}^m \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta
 \end{aligned}$$

(Para la obtención explícita de estos coeficientes ver Apéndice A).

b) Parte magnética

Partiendo de las fórmulas (I, 9)-(I, 11) y siguiendo desarrollos enteramente similares a los anteriores, tendremos

$$\begin{aligned}
 & \left. (\Psi_{n'l}^{m'} | (\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y)_{\lambda\mu} (\mathbf{p}_x + i\mathbf{p}_y) | \Psi_{nl}^m) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \right\} \\
 a_{\lambda\mu} \mathbf{A}_{lm}^1 & \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu+1} \cdot \Theta_{l+1}^{m+1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\
 & a_{\lambda\mu} \mathbf{A}_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu+1} \cdot \Theta_{l-1}^{m+1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta \left\{ \right. \\
 & \left. (\Psi_{n'l}^{m'} | (\mathbf{A}_x + i\mathbf{A}_y)_{\lambda\mu} (\mathbf{p}_x - i\mathbf{p}_y) | \Psi_{nl}^m) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \right\} \\
 b_{\lambda\mu} \mathbf{B}_{lm}^1 & \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu-1} \cdot \Theta_{l+1}^{m-1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\
 & b_{\lambda\mu} \mathbf{B}_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu-1} \cdot \Theta_{l-1}^{m-1} \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta \left\{ \right. \\
 & \left. (\Psi_{n'l}^{m'} | (\mathbf{A}_z)_{\lambda\mu} \mathbf{p}_z | \Psi_{nl}^m) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \right\} \\
 c_{\lambda\mu} \mathbf{C}_{lm}^1 & \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu} \cdot \Theta_{l+1}^m \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu} \mathbf{C}_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu} \cdot \Theta_{l-1}^m \cdot \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta \cdot d\theta \left\{ \right. \\
 & \left. (\Psi_{n'l}^{m'} | \mathbf{A}_{i\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \right\} \\
 \mathbf{M}_{01} & \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr + \mathbf{M}_{02} \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \left\{ \dots \dots \text{(I, 13)} \right.
 \end{aligned}$$

Reglas de selección. — Las fórmulas (I, 12) y (I, 13) permiten establecer las siguientes reglas de selección :

Para que un electrón atómico posea una probabilidad no nula de pasar de un estado Ψ_{nl}^{sm} a un estado $\Psi_{n'l'}^{s'm'}$, emitiendo en la transición un fotón caracterizado por λ y μ , es *necesario* que

$$1^\circ) \quad \mu = m - m'$$

Esta regla se deduce de la aparición del factor $\delta_{m, m'+\mu}$ en todos los elementos de matriz y físicamente significa que se conserva la componente z del impulso angular total.

$$2^\circ) \quad |l - l'| \leq \lambda \leq l + l'$$

Pues los coeficientes E y M son nulos de no cumplirse esta condición (ver Apéndice A). Esta regla tiene por significado físico la conservación del impulso angular total, expresando, en el triángulo formado por los tres vectores de impulso angular, la condición de que un lado cualquiera debe ser mayor o igual que la diferencia y menor o igual que la suma de los otros dos.

3°) Si $\lambda + l + l'$ es par la radiación emitida es de tipo eléctrico, de lo contrario es de tipo magnético.

Ello es así porque cuando dicha suma es impar se anulan los coeficientes E, mientras que en el otro caso son nulos los coeficientes M.

La regla enunciada proviene de la conservación de la paridad. Si en la transición no hay cambio de paridad en los estados del electrón, entonces $l + l'$ es par y el fotón emitido debe estar en un estado par, pero para que esto último ocurra es necesario que λ sea par en las radiaciones de tipo eléctrico e impar en las de tipo magnético, ya que ambos tipos de radiación tienen sus paridades fijadas por $(-1)^\lambda$ y $(-1)^{\lambda+1}$ respectivamente. De análoga manera se razona cuando $l + l'$ es impar.

4°) Si $l \neq l'$ entonces $\lambda = |l - l'|$ corresponde a una radiación eléctrica pues $\lambda + l + l' = l + l' + |l - l'| = 2 \cdot \max(l, l')$ que es un número par. De aquí se sigue que $\lambda = |l - l'| + 1$ está asociado a una radiación magnética, $\lambda = |l - l'| + 2$ a una eléctrica y así sucesivamente hasta llegar a $\lambda = l + l'$ que corresponde a una radiación de tipo eléctrico ($\lambda + l + l' = 2l + 2l'$).

Resumiendo: En una transición en la que $l \neq l'$ son posibles los siguientes tipos de radiaciones

$\lambda = l - l' $	Eléctrico
$\lambda = l - l' + 1$	Magnético
$\lambda = l - l' + 2$	Eléctrico
.		
$\lambda = l + l' - 1$	Magnético
$\lambda = l + l'$	Eléctrico

5°) Cuando $l = l' \neq 0$, está ausente de la lista anterior la línea que la encabeza, pues no existe radiación alguna con $\lambda = 0$.

6°) Entre dos estados con $l = l' = 0$ no hay transición (radiante) posible.

La razón es la misma que la que explica el punto 5°.

Intensidades.

Retomando ahora las fórmulas (I, 12) y (I, 13) introduciremos las notaciones

$$\begin{aligned} E_{11}R_{nl}^1 + E_{12}R_{nl}^2 &= R_{nl}^3 \\ E_{21}R_{nl}^1 + E_{22}R_{nl}^2 &= R_{nl}^4 \\ M_{01}R_{nl}^1 + M_{02}R_{nl}^2 &= R_{nl}^5 \end{aligned}$$

Quedando entonces para la parte eléctrica

$$\begin{aligned} (\Psi_{n'l'}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) &= ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \left\{ j_{\lambda+1} R_{nl}^3 R_{n'l'} \cdot r^2 dr + \right. \\ &\quad \left. + j_{\lambda-1} R_{nl}^4 R_{n'l'} \cdot r^2 dr \right\} \end{aligned}$$

y para la parte magnética

$$(\Psi_{n'l'}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \int j_{\lambda} R_{nl}^5 R_{n'l'} \cdot r^2 dr$$

Las integraciones pueden ser efectuadas siguiendo las transformaciones detalladas en el apéndice B, de las que resultan finalmente:

Para la parte eléctrica

$$\begin{aligned} (\Psi_{n'l'}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) &= -ih \cdot 2^{-\frac{1}{2}} \cdot a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l'} \cdot (b/2a)^{\lambda-1} \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ &\quad \frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \cdot \sum_t D_t^3 \cdot \frac{\Gamma(t + \lambda + 2)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \cdot \\ &\quad \left. F\left(\frac{\lambda-t}{2} - 1, \frac{\lambda-t}{2} - \frac{1}{2}; \lambda + \frac{1}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) + \right\} \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{5}{2}\right)} \cdot \sum_t D_t^4 \cdot \frac{\Gamma(t + \lambda + 4)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \cdot F\left(\frac{\lambda-t}{2}, \frac{\lambda-t}{2} + \frac{1}{2}; \lambda + \frac{5}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \cdot \left. \vphantom{\frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{5}{2}\right)}} \right\} \quad (\text{I, 14})$$

y para la parte magnética

$$\begin{aligned} & (\Psi_{n'l}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) = -ih \cdot 2^{-\frac{1}{2}} \cdot a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l} \cdot (b/2a)^\lambda \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left. \vphantom{(\Psi_{n'l}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m)} \right\} \\ & \frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \cdot \sum_t D_t^5 \cdot \frac{\Gamma(t + \lambda + 3)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \cdot F\left(\frac{\lambda-t}{2} - \frac{1}{2}, \frac{\lambda-t}{2}; \lambda + \frac{3}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \cdot \left. \vphantom{\frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{I, 15})$$

Estas expresiones permiten efectuar el cálculo con el grado de exactitud requerido en cualquier circunstancia. Sin embargo, pueden ser simplificadas considerablemente tomando aproximaciones adecuadas. A ese fin notemos que, siendo $b = ka_0$ y $hck = \mathbf{E}_n - \mathbf{E}_{n'}$ será

$$\begin{aligned} b/a &= \frac{Z \cdot e^2}{2hc} \cdot \frac{n - n'}{nn'} \\ (b/a)^2 &= \frac{Z^2}{4 \cdot 137^2} \left(\frac{n' - n}{nn'}\right)^2 \end{aligned}$$

La intervención del factor $1/137^2$ hace que $(b/a)^2$ sea generalmente muy pequeño. Por ese motivo es suficiente tomar el primer término (la unidad) en los desarrollos respectivos de la función hipergeométrica y de la función $(1 + b^2/a^2)^{t+2}$. También despreciaremos, en la matriz de la parte eléctrica, al término que contiene la segunda sumatoria. En esta aproximación, los elementos de matriz adquieren la forma:

Para la parte eléctrica

$$\begin{aligned} (\Psi_{n'l}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) &= -ih \cdot a_0^2 \cdot \frac{N_{nl} N_{n'l} \cdot (b/2a)^{\lambda-1}}{2^{\frac{1}{2}} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \cdot \delta_{m, m'+\mu} \sum_t D_t^4 \frac{\Gamma(t + \lambda + 2)}{a^{t+3}} \end{aligned} \quad (\text{I, 16})$$

Para la parte magnética

$$(\Psi_{n'l}^{m'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^m) = -ih \cdot a_0^2 \cdot \frac{N_{nl} N_{n'l} \cdot (b/2a)^\lambda}{2^{\frac{1}{2}} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \delta_{m, m'+\mu} \sum_t D_t^5 \frac{\Gamma(t + \lambda + 3)}{a^{t+3}} \quad (\text{I, 17})$$

La aproximación efectuada es equivalente a la habitual de suponer que la longitud de onda de la radiación emitida es mucho mayor que las dimensiones del átomo que irradia. El tratamiento seguido permite, además, conservar las partes principales de todas las radiaciones multipolares.

Cotejando (I, 16) con (I, 17) se advierte que la matriz de la interacción magnética de orden λ' es de magnitud análoga a la eléctrica de orden $\lambda'+1$; mientras que comparada con la eléctrica de orden $\lambda'-1$ es aproximadamente $(b/2a)^2$ veces menor. Debido a que las intensidades de las radiaciones emitidas son proporcionales a los cuadrados de los elementos de matriz, resulta en definitiva que en la lista mencionada en el punto 4° de las reglas de selección, cada radiación magnética es $(b/2a)^4$ veces menos intensa que la radiación eléctrica que la antecede, siendo aproximadamente de la misma intensidad que la eléctrica que le sigue.

II. APROXIMACIÓN DE PAULI

Si se toma en cuenta el espín, la interacción con el campo electromagnético comprende no solamente el término orbital $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ sino también otros términos debidos al acoplamiento entre el mencionado campo y el espín. Con estos nuevos términos la energía total de interacción es

$$H' = \frac{-e}{mc} \cdot \left(\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{2} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H} - \frac{\hbar}{2mc} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} \right) \quad (\text{II, 1})$$

Donde \mathbf{E} y \mathbf{H} son respectivamente los campos eléctrico y magnético de la radiación. $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector formado por las tres matrices de Pauli.

Las funciones propias del hamiltoniano del átomo son ahora

$$\Psi_{nl}^{m+} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{lm}^+ \cdot \Psi_{nl}^m \\ \mathbf{H}_{lm}^+ \cdot \Psi_{nl}^{m+1} \end{pmatrix}, \quad (j = l + 1/2);$$

$$\Psi_{nl}^{m-} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{lm}^- \cdot \Psi_{nl}^m \\ \mathbf{H}_m^- \cdot \Psi_{nl}^{m+1} \end{pmatrix}, \quad (j = l - 1/2)$$

Calcularemos en el sistema de estas funciones, las matrices de cada uno de los sumandos que componen H' .

Matriz de A. p. — Esta no ofrece dificultades puesto que

$$(\Psi_{n'l'}^{sm'\pm} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{sm\pm}) = G_m^\pm G_{l'm'}^\pm (\Psi_{n'l'}^{sm'} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{sm}) + \\ + H_{lm}^\pm H_{l'm'}^\pm (\Psi_{n'l'}^{sm'+1} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{sm+1})$$

Las dos últimas matrices fueron determinadas en la sección I. Efectuando la suma y poniendo por ejemplo

$$E_{11}^{\pm\pm}(\lambda\mu, lm, l'm') = G_{lm}^\pm G_{l'm'}^\pm E_{11}(\lambda\mu, lm, l'm') + \\ + H_{lm}^\pm H_{l'm'}^\pm E_{11}(\lambda\mu, lm+1, l'm'+1)$$

obtenemos

a) Parte eléctrica.

$$(\Psi_{n'l'}^{sm'\pm} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{sm\pm}) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ E_{11}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^1 R_{n'l'} R_{n'l'} \cdot r^2 dr + E_{12}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l'} R_{n'l'} \cdot r^2 dr + \\ \left. E_{21}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^1 R_{n'l'} R_{n'l'} \cdot r^2 dr + E_{22}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l'} R_{n'l'} \cdot r^2 dr \right\} \quad (\text{II, 2})$$

b) Parte magnética.

$$(\Psi_{n'l'}^{sm'\pm} | \mathbf{A}_{\lambda\mu} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{sm\pm}) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ \left. M_{01}^{\pm\pm} \cdot \int j_\lambda R_{nl}^1 R_{n'l'} R_{n'l'} \cdot r^2 dr + M_{02}^{\pm\pm} \cdot \int j_\lambda R_{nl}^2 R_{n'l'} R_{n'l'} \cdot r^2 dr \right\} \quad (\text{II, 3})$$

Matriz de $\sigma \cdot \mathbf{H}$. — El producto escalar $\sigma \cdot \mathbf{H}$ es

$$\sigma \cdot \mathbf{H} = \begin{pmatrix} H_z & H_x - iH_y \\ H_x + iH_y & -H_z \end{pmatrix}$$

y de aquí deducimos

$$(\Psi_{n'l'}^{sm'\pm} | \sigma \cdot \mathbf{H} | \Psi_{nl}^{sm\pm}) = G_{lm}^\pm G_{l'm'}^\pm (\Psi_{n'l'}^{sm'} | H_z | \Psi_{nl}^{sm}) - \\ - H_{lm}^\pm H_{l'm'}^\pm (\Psi_{n'l'}^{sm'+1} | H_z | \Psi_{nl}^{sm+1}) + H_{lm}^\pm G_{l'm'}^\pm (\Psi_{n'l'}^{sm'} | H_x - iH_y | \Psi_{nl}^{sm+1}) + \\ + G_{lm}^\pm H_{l'm'}^\pm (\Psi_{n'l'}^{sm'+1} | H_x + iH_y | \Psi_{nl}^{sm})$$

a) Parte eléctrica.

Teniendo presente que $\mathbf{H}_{\text{eléc.}} = -ik \cdot \mathbf{A}_{\text{mag.}}$, y procediendo como en la sección I se llega fácilmente a

$$(\Psi_{n'l'}^{sm'\pm} | \sigma \cdot \mathbf{H}_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{sm\pm}) = -ik \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ \left. G_{lm}^\pm G_{l'm'}^\pm c_{\lambda\mu} \cdot \int \Theta_\lambda^\mu \Theta_l^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta - \right\}$$

$$\begin{aligned}
 & - H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} c_{\lambda\mu} \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu} \Theta_l^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} a_{\lambda\mu} \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu-1} \Theta_l^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & + G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} b_{\lambda\mu} \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu-1} \Theta_l^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta \}
 \end{aligned}$$

y simbolizando con $E_{00}^{\pm\pm}(\lambda\mu lm'l'm')$ a todo lo encerrado entre las llaves, nos queda

$$(\Psi_{n'l'}^{m'\pm} | \sigma \cdot \mathbf{H}_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = - ik \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot E_{00}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda} \mathbf{R}_{nl} \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \quad (\text{II, 4})$$

b) Parte magnética.

Ahora, con procedimientos enteramente similares a los anteriores y sabiendo que $\mathbf{H}_{\text{mag.}} = ik \cdot \mathbf{A}_{\text{eléc.}}$ resulta

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{n'l'}^{m'\pm} | \sigma \cdot \mathbf{H}_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = - ik \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \{ \\
 & \mathbf{M}_{10}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda+1} \mathbf{R}_{nl} \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr + \mathbf{M}_{20}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl} \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \} \quad (\text{II, 5})
 \end{aligned}$$

Donde hemos puesto

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{M}_{10}^{\pm\pm}(\lambda\mu lm'l'm') = \\
 & c_{\lambda\mu}^1 G_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \Theta_l^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta - \\
 & - e_{\lambda\mu}^1 H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \Theta_l^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta. \\
 & a_{\lambda\mu}^1 H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu+1} \Theta_l^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & + b_{\lambda\mu}^1 G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu-1} \Theta_l^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta. \\
 & \mathbf{M}_{20}^{\pm\pm}(\lambda\mu lm'l'm') = \\
 & c_{\lambda\mu}^2 G_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \Theta_l^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta - \\
 & - c_{\lambda\mu}^2 H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \Theta_l^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & a_{\lambda\mu}^2 H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu+1} \Theta_l^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & + b_{\lambda\mu}^2 G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu-1} \Theta_l^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta.
 \end{aligned}$$

Matriz de $\sigma \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p}$. — Efectuando el producto triple y haciendo uso de algunas identidades algebraicas vemos que $\sigma \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p}$ tiene la siguiente expresión matricial

$$i \left(\begin{array}{l} \frac{1}{2} (\mathbf{E}_x + i\mathbf{E}_y) (p_x - ip_y) - \frac{1}{2} (\mathbf{E}_x - i\mathbf{E}_y) (p_x + ip_y) \\ (\mathbf{E}_x - i\mathbf{E}_y) p_z - \mathbf{E}_z (p_x - ip_y) \\ \mathbf{E}_z \cdot (p_x + ip_y) - (\mathbf{E}_x + i\mathbf{E}_y) p_z \\ \frac{1}{2} (\mathbf{E}_x - i\mathbf{E}_y) (p_x + ip_y) - \frac{1}{2} (\mathbf{E}_x + i\mathbf{E}_y) (p_x - ip_y) \end{array} \right)$$

la que, conjuntamente con $\mathbf{E} = -ik \cdot \mathbf{A}$, nos permite deducir

$$\begin{aligned} & (\Psi_{n'l}^{m'\pm} | \sigma \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = k/2 \cdot \left\{ \right. \\ & \mathbf{G}_{lm}^{\pm} \mathbf{G}_{l'm'}^{\pm} \left[(\Psi_{n'l}^{m'} | (\mathbf{A}_x + i\mathbf{A}_y) (p_x - ip_y) | \Psi_{nl}^m) - \right. \\ & \quad \left. - (\Psi_{n'l}^{m'} | (\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y) (p_x + ip_y) | \Psi_{nl}^m) \right] + \\ & \mathbf{H}_{lm}^{\pm} \mathbf{H}_{l'm'}^{\pm} \left[(\Psi_{n'l}^{m'+1} | (\mathbf{A}_x + i\mathbf{A}_y) (p_x - ip_y) | \Psi_{nl}^{m+1}) - \right. \\ & \quad \left. - (\Psi_{n'l}^{m'+1} | (\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y) (p_x + ip_y) | \Psi_{nl}^{m+1}) \right] + \\ & 2 \cdot \mathbf{H}_{lm}^{\pm} \mathbf{G}_{l'm'}^{\pm} \left[(\Psi_{n'l}^{m'} | (\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y) p_z | \Psi_{nl}^{m-1}) - \right. \\ & \quad \left. - (\Psi_{n'l}^{m'} | \mathbf{A}_z (p_x - ip_y) | \Psi_{nl}^{m+1}) \right] - \\ & 2 \cdot \mathbf{G}_{lm}^{\pm} \mathbf{H}_{l'm'}^{\pm} \left[(\Psi_{n'l}^{m'+1} | (\mathbf{A}_x + i\mathbf{A}_y) p_z | \Psi_{nl}^m) - \right. \\ & \quad \left. - (\Psi_{n'l}^{m'+1} | \mathbf{A}_z (p_x + ip_y) | \Psi_{nl}^m) \right] \left. \right\} \end{aligned}$$

Las cuatro primeras matrices fueron ya determinadas en la sección I; las cuatro restantes tienen el siguiente desarrollo

a) Parte eléctrica.

$$\begin{aligned} & (\Psi_{n'l}^{m'} | (\mathbf{A}_x - i\mathbf{A}_y)_{i\mu} \cdot p_z | \Psi_{nl}^{m+1}) = -ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ & a_{i\mu}^1 \mathbf{C}_{lm+1}^1 \cdot \int j_{\lambda+1} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{s+1} \Theta_{l+1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\ & a_{i\mu}^1 \mathbf{C}_{lm+1}^2 \cdot \int j_{\lambda+1} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{s+1} \Theta_{l-1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\ & a_{i\mu}^2 \mathbf{C}_{lm+1}^1 \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{s+1} \Theta_{l+1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\ & a_{i\mu}^2 \mathbf{C}_{lm+1}^2 \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{s+1} \Theta_{l-1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta \left. \right\} \\ & (\Psi_{n'l}^{m'+1} | (\mathbf{A}_x + i\mathbf{A}_y)_{i\mu} \cdot p_z | \Psi_{nl}^m) = -ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ & b_{i\mu}^1 \mathbf{C}_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda+1} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{s-1} \Theta_{l+1}^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & b_{\lambda\mu}^1 C_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu-1} \Theta_{l-1}^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & b_{\lambda\mu}^2 C_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{ln}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu-1} \Theta_{l+1}^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & b_{\lambda\mu}^2 C_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu-1} \Theta_{l-1}^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta \} \\
 & (\Psi_{n'l}^{m'+1} | (A_z)_{\lambda\mu} \cdot (px + ip_y) | \Psi_{nl}^m) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \{ \\
 & c_{\lambda\mu}^1 A_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \Theta_{l+1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu}^1 A_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \Theta_{l-1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu}^2 A_{lm}^1 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \Theta_{l+1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu}^2 A_{lm}^2 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \Theta_{l-1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta \} \\
 & (\Psi_{n'l}^{m'} | (A_z)_{\lambda\mu} \cdot (px - ip_y) | \Psi_{nl}^{m+1}) = ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \{ \\
 & c_{\lambda\mu}^1 B_{lm+1}^1 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \Theta_{l+1}^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu}^1 B_{lm+1}^2 \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda+1}^{\mu} \Theta_{l-1}^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu}^2 B_{lm+1}^1 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \Theta_{l+1}^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu}^2 B_{lm+1}^2 \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda-1}^{\mu} \Theta_{l-1}^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta \}
 \end{aligned}$$

Sumando estas cuatro matrices a las que ya teníamos y agrupando los términos que contienen la misma integral radial, obtenemos

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{n'l}^{m'\pm} | \sigma \cdot \mathbf{E}_{\lambda\mu} \cdot \times \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = -ihk \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \{ \\
 & E'_{11}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr + E'_{12}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda+1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr + \\
 & E'_{21}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr + E'_{22}^{\pm\pm} \cdot \int j_{\lambda-1} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \} \quad (\text{II,6})
 \end{aligned}$$

El significado de los coeficientes E' es obvio.

b) Parte magnética.

Las nuevas matrices necesarias son

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{n'l}^{m'} | (A_x - iA_y)_{\lambda\mu} \cdot p_z | \Psi_{nl}^m) = -ih \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \{ \\
 & a_{\lambda\mu} C_{lm+1}^1 \cdot \int j_{\lambda} R_{nl}^1 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu+1} \Theta_{l+1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & a_{\lambda\mu} C_{lm+1}^2 \cdot \int j_{\lambda} R_{nl}^2 R_{n'l} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_{\lambda}^{\mu+1} \Theta_{l-1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta \}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{n'l'}^{m'+1} | (\mathbf{Ax} + i\mathbf{Ay})_{i\mu} \cdot \mathbf{p}_z | \Psi_{nl}^m) = -ih \cdot \hat{z}_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\
 & b_{\lambda\mu} \mathbf{C}_{lm}^1 \cdot \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_\lambda^{\mu-1} \Theta_{l+1}^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & b_{\lambda\mu} \mathbf{C}_{lm}^2 \cdot \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_\lambda^{\mu+1} \Theta_{l-1}^m \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta \left. \right\} \\
 & (\Psi_{n'l'}^{m'+1} | (\mathbf{Az})_{i\mu} \cdot (\mathbf{p}_x + i\mathbf{p}_y) | \Psi_{nl}^m) = -ih \cdot \hat{z}_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\
 & c_{\lambda\mu} \mathbf{A}_{lm}^1 \cdot \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_\lambda^\mu \Theta_{l+1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu} \mathbf{A}_{lm}^2 \cdot \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_\lambda^\mu \Theta_{l-1}^{m+1} \Theta_{l'}^{m'+1} \cdot \text{sen } \theta d\theta \left. \right\} \\
 & (\Psi_{n'l'}^{m'} | (\mathbf{Az})_{i\mu} \cdot (\mathbf{p}_x - i\mathbf{p}_y) | \Psi_{nl}^{m+1}) = -ih \cdot \hat{z}_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\
 & c_{\lambda\mu} \mathbf{B}_{lm}^1 \cdot \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_\lambda^\mu \Theta_{l+1}^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta + \\
 & c_{\lambda\mu} \mathbf{B}_{lm}^2 \cdot \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \cdot \int \Theta_\lambda^\mu \Theta_{l-1}^m \Theta_{l'}^{m'} \cdot \text{sen } \theta d\theta \left. \right\}
 \end{aligned}$$

De aquí, procediendo como se ha señalado en la parte eléctrica, se llega a la matriz

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{n'l'}^{m'\pm} | \sigma \cdot \mathbf{E}_{i\mu} \times \mathbf{p} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = -ihk \cdot \hat{z}_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\
 & \mathbf{M}'_{01}{}^{\pm\pm} \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr + \mathbf{M}'_{02}{}^{\pm\pm} \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \left. \right\} \quad (\text{II, 7})
 \end{aligned}$$

Matriz de H'.— Para conseguir la matriz de la interacción total H', sumamos las tres matrices parciales anteriormente encontradas.

a) Parte eléctrica.

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{n'l'}^{m'\pm} | \mathbf{H}'_{i\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = -ie\hbar/mc \cdot \hat{z}_{m, m'+\mu} \cdot \int \frac{k}{2} \cdot \mathbf{E}_{00}{}^{\pm\pm} \int j_\lambda \mathbf{R}_{nl} \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr + \\
 & (\mathbf{E}_{11}{}^{\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot \mathbf{E}'_{11}{}^{\pm\pm}) \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr + \\
 & + (\mathbf{E}_{12}{}^{\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot \mathbf{E}'_{12}{}^{\pm\pm}) \cdot \int j_{\lambda+1} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr + \\
 & (\mathbf{E}_{21}{}^{\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot \mathbf{E}'_{21}{}^{\pm\pm}) \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl}^1 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr + \\
 & + (\mathbf{E}_{22}{}^{\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot \mathbf{E}'_{22}{}^{\pm\pm}) \cdot \int j_{\lambda-1} \mathbf{R}_{nl}^2 \mathbf{R}_{n'l'} \cdot r^2 dr \left\{ \right.
 \end{aligned}$$

b) Parte magnética.

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_{n'l'}^{m'\pm} | H'_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = -ie\hbar/mc \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \{ \\
 & \frac{k}{2} \cdot M_{10}^{\pm\pm} \int j_{\lambda+1} R_{nl} R_{n'l'} \cdot r^2 dr + \frac{k}{2} \cdot M_{20}^{\pm\pm} \int j_{\lambda-1} R_{nl} R_{n'l'} \cdot r^2 dr + \\
 & (M_{01}^{\pm\pm} - \frac{\hbar \cdot k}{2mc} \cdot M'_{01}{}^{\pm\pm}) \cdot \int j_{\lambda} R_{nl}^1 R_{n'l'} \cdot r^2 dr + \\
 & + (M_{02}^{\pm\pm} - \frac{\hbar \cdot k}{2mc} \cdot M'_{02}{}^{\pm\pm}) \cdot \int j_{\lambda} R_{nl}^2 R_{n'l'} \cdot r^2 dr \} \quad (\text{II, 9})
 \end{aligned}$$

Reglas de selección. — Para enunciar algunas de las reglas de selección convendremos en decir que hay inversión de espín cuando se pasa de un estado Ψ^+ a un estado Ψ^- o viceversa. Nótese además que el índice m de $\Psi_{nl}^{m\pm}$ da la componente z del impulso angular total del electrón disminuída en $\frac{1}{2}$: $m = m_j - \frac{1}{2}$.

De (II, 8) y (II, 9) deducimos entonces:

Para que un electrón atómico posea una probabilidad no nula de pasar de un estado $\Psi_{nl}^{m\pm}$ a un estado $\Psi_{n'l'}^{m'\pm}$, emitiendo en la transición un fotón caracterizado por λ y μ , es necesario que:

$$1^\circ) \quad \mu = m_j - m'_j$$

Pues debido al factor $\delta_{m, m'+\mu}$ debe ser $\mu = m - m' = m + \frac{1}{2} - (m' + \frac{1}{2})$.

$$2^\circ) \quad |j - j'| \leq \lambda \leq j + j'$$

Estas desigualdades se deducen de las propiedades de los coeficientes E y M (ver Apéndice A). Los coeficientes E^{++} y M^{++} son todos nulos a menos que $|l - l'| \leq \lambda \leq l + l' + 1$, pero como $j = l + \frac{1}{2}$ y $j' = l' + \frac{1}{2}$, la última fórmula mencionada es en realidad idéntica a la que encabeza este párrafo. Por otra parte, E^{--} y M^{--} se anulan si no se cumple que $|l - l'| \leq \lambda \leq l + l' - 1$, desigualdad que se reduce nuevamente a la primitiva cuando se tiene en cuenta que ahora $j = l - \frac{1}{2}$ y $j' = l' - \frac{1}{2}$. De manera parecida procede la demostración en los casos de inversión de espín.

La única modificación que trae esta regla, comparada con la segunda de la sección I, es la extensión en dos unidades del rango de valores posibles de λ , ya que por lo recién explicado debe ser :

$$2^\circ) (b) \quad |l - l'| - 1 \leq \lambda \leq l + l' + 1$$

3º) Si $l + l' + \lambda$ es par la radiación emitida es de tipo eléctrico, de lo contrario es de tipo magnético.

Esta regla es la misma que la tratada en la sección I y proviene también de las propiedades generales de los coeficientes E y M. Ella puede, sin embargo, ser enunciada en función del número cuántico j pues de no existir inversión de espín $l + l' + \lambda = j + j' + \lambda \pm 1$; de lo contrario $l + l' + \lambda = j + j' + \lambda$. Por lo tanto :

3º) (b) Cuando no hay inversión de espín $j + j' + \lambda$ es impar en las radiaciones eléctricas y par en las magnéticas. Cuando hay inversión de espín $j + j' + \lambda$ es par en las radiaciones eléctricas e impar en las magnéticas.

4º) En una transición en la que $j \neq j'$ son posibles los siguientes tipos de radiaciones

Sin inversión de espín	Con inversión de espín
$\lambda = j - j' $... Eléctrico	... Magnético
$\lambda = j - j' + 1$... Magnético	... Eléctrico
$\lambda = j - j' + 2$... Eléctrico	... Magnético
.....	
$\lambda = j + j' - 1$... Eléctrico	... Magnético
$\lambda = j + j'$... Magnético	... Eléctrico

4º) (b) Los puntos 2º) (b) y 3º) permiten ahora agregar, a la lista del punto 4º) de la sección I, las siguientes radiaciones posibles

$$\begin{array}{ll} \lambda = |l' - l| - 1 & \text{de tipo magnético} \\ \text{y} & \\ \lambda = l + l' + 1 & \text{también de tipo magnético} \end{array}$$

5º) Cuando $j = j' \neq \frac{1}{2}$ está ausente de la lista del punto 4º) la línea que la encabeza.

6º a) Si $l = l' = 0$ ($j = j' = \frac{1}{2}$) sólo es posible una radiación dipolar magnética.

Intensidades. — Adoptaremos las siguientes definiciones :

$$\begin{aligned} E_{11}^{\pm\pm} R_{nl}^1 + E_{12}^{\pm\pm} R_{nl}^2 &= R_{nl}^{3\pm\pm}; & E'_{11}^{\pm\pm} R_{nl}^1 + E'_{12}^{\pm\pm} R_{nl}^2 &= R_{nl}^{3\pm\pm} \\ E_{21}^{\pm\pm} R_{nl}^1 + E_{22}^{\pm\pm} R_{nl}^2 &= R_{nl}^{4\pm\pm}; & E'_{21}^{\pm\pm} R_{nl}^1 + E'_{22}^{\pm\pm} R_{nl}^2 &= R_{nl}^{4\pm\pm} \\ \frac{1}{n \cdot a_0} \cdot E_{00}^{\pm\pm} R_{nl} &= R_{nl}^6; & \frac{1}{n \cdot a_0} \cdot M_{10}^{\pm\pm} R_{nl} &= R_{nl}^7; \\ & & \frac{1}{n \cdot a_0} \cdot M_{20}^{\pm\pm} R_{nl} &= R_{nl}^8 \end{aligned}$$

$$M_{01}^{\pm\pm} \cdot R_{nl}^1 + M_{02}^{\pm\pm} R_{nl}^2 = R_{nl}^{5\pm\pm}; \quad M'_{01}^{\pm\pm} \cdot R_{nl}^1 + M'_{02}^{\pm\pm} \cdot R_{nl}^2 = R_{nl}^{5\pm\pm}$$

Con ellas, las fórmulas (II, 8) y (II, 9) adquieren la forma

$$\begin{aligned} (\Psi_{nl}^{m'\pm} | H'_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) &= -ieh/mc \cdot \xi_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \frac{nka_0}{2} \cdot \left[j_\lambda R_{nl}^6 R_{nl} \cdot r^2 dr + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \int j_{\lambda+1} (R_{nl}^{3\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot R_{nl}^{3\pm\pm}) R_{nl} \cdot r^2 dr + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \int j_{\lambda-1} (R_{nl}^{4\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot R_{nl}^{4\pm\pm}) R_{nl} \cdot r^2 dr \right\} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} (\Psi_{nl}^{m'\pm} | H'_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) &= -ieh/mc \cdot \xi_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \frac{nka_0}{2} \cdot \left[j_{\lambda+1} R_{nl}^7 R_{nl} \cdot r^2 dr \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{nka_0}{2} \cdot j_{\lambda-1} R_{nl}^8 R_{nl} \cdot r^2 dr + \int j_\lambda (R_{nl}^{5\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot R_{nl}^{5\pm\pm}) R_{nl} \cdot r^2 dr \right\} \end{aligned}$$

respectivamente. Efectuando las integraciones como se indica en el apéndice B se obtiene

a) Parte eléctrica

$$\begin{aligned} (\Psi_{nl}^{m'\pm} | H'_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) &= ieh/mc \cdot 2^{-\frac{1}{2}} \cdot a_0^2 \cdot N_{nl} N_{nl} \cdot (b/2a)^{\lambda-1} \cdot \xi_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ &\quad \frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \cdot \sum_t \frac{\Gamma(t+\lambda+2)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \left(D_t^{3\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot D_t^{3\pm\pm} \right) \cdot \\ &\quad F\left(\frac{\lambda-t}{2} - 1, \frac{\lambda-t}{2} - \frac{1}{2}; \lambda + \frac{1}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) + \\ &\quad \frac{(b/2a)}{\Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \cdot \frac{nka_0}{2} \cdot \sum_t D_t^8 \cdot \frac{\Gamma(t+\lambda+3)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \\ &\quad \left. F\left(\frac{\lambda-t}{2} - \frac{1}{2}, \frac{\lambda-t}{2}; \lambda + \frac{3}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) + \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{(b/2a)^2}{\Gamma\left(\lambda + \frac{5}{2}\right)} \cdot \sum_t \left(D_t^{4\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot D_t^{4\pm\pm} \right) \cdot \frac{\Gamma(t + \lambda + 4)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \cdot \\
 & \cdot F\left(\frac{\lambda-t}{2}, \frac{\lambda-t}{2} + \frac{1}{2}; \lambda + \frac{5}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \} \quad (\text{II, 10})
 \end{aligned}$$

b) Parte magnética.

$$\begin{aligned}
 (\Psi_{n'v'}^{m'\pm} | H'_{\kappa\mu} | \Psi_{nt}^{m\pm}) & = ieh/mc \cdot 2^{-1/2} \cdot N_{nl} N_{n'v'} \cdot (b/2a)^{\lambda-1} \cdot \varepsilon_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\
 & \frac{n \cdot k \cdot a_0}{2 \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \cdot \sum_t D_t^7 \cdot \frac{\Gamma(t + \lambda + 2)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \cdot \\
 & \cdot F\left(\frac{\lambda-t}{2} - 1, \frac{\lambda-t}{2} - \frac{1}{2}; \lambda + \frac{1}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) + \\
 & + \frac{(b/2a)}{\Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \cdot \sum_t \left(D_t^{5\pm\pm} - \frac{h \cdot k}{2mc} \cdot D_t^{5\pm\pm} \right) \frac{\Gamma(t + \lambda + 3)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \\
 & \cdot F\left(\frac{\lambda-t}{2} - \frac{1}{2}, \frac{\lambda-t}{2}; \lambda + \frac{3}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) + \\
 & + \frac{(b/2a)^2}{\Gamma\left(\lambda + \frac{5}{2}\right)} \cdot \frac{nka_0}{2} \cdot \sum_t D_t^8 \cdot \frac{\Gamma(t + \lambda + 4)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \cdot \\
 & \cdot F\left(\frac{\lambda-t}{2}, \frac{\lambda-t}{2} + \frac{1}{2}; \lambda + \frac{5}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \left. \right\} \quad (\text{II, 11})
 \end{aligned}$$

Las expresiones dadas son exactas pero pueden ser simplificadas mediante procedimientos análogos a los empleados en la sección I. El factor h/mc es la longitud de onda de Compton del electrón y vale $2Za_0/137$. Por consiguiente es

$$\frac{h \cdot k}{2mc} = \frac{Z^2}{4 \cdot 137^2} \cdot \frac{n^2 - n'^2}{(nn')^2}$$

que tiene el mismo orden de magnitud que $(b/a)^2$. Esto implica que todos los términos que contienen el factor $hk/2mc$ pueden ser despreciados del mismo modo que los que contienen a $(b/2a)^2$ como factor. La segunda sumatoria de la parte eléctrica, si bien está multiplicada por la primera potencia de $b/2a$, contiene en cambio al

factor $nka_0/2 = (n+n')/2n' \cdot (b/2a)$, que también es del orden de $b/2a$. Dicha sumatoria puede, por lo tanto, ser despreciada. Nos restan entonces las expresiones aproximadas :

a) Parte eléctrica.

$$(\Psi_{n'l}^{m'\pm} | H'_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = \frac{ieh \cdot a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l} \cdot (b/2a)^{\lambda-1}}{mc \cdot 2^{1/2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \cdot \hat{z}_{m, m'+\mu} \cdot \sum_t D_t^{3\pm\pm} \frac{\Gamma(t+\lambda+2)}{a^{t+3}} \quad (\text{II}, 12)$$

b) Parte magnética.

$$(\Psi_{n'l}^{m'\pm} | H'_{\lambda\mu} | \Psi_{nl}^{m\pm}) = \frac{ieh \cdot a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l} \cdot (b/2a)^\lambda}{mc \cdot 2^{1/2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \cdot \hat{z}_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \sum_t \left(D_t^{5\pm\pm} + \frac{nka_0 \cdot \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)}{(b/a)(t+\lambda+1)} \cdot D_t^7 \right) \frac{\Gamma(t+\lambda+3)}{a^{t+3}} \right\} \quad (\text{II}, 13)$$

Aquí también valen, según se aprecia, las consideraciones relativas a las intensidades de las radiaciones eléctricas comparadas con las magnéticas que se han hecho en la sección I. Sin embargo, examinando la lista del punto 4º de las reglas de selección (sección II), se advierte que cuando hay inversión de espín ($yj \neq j'$) no existe predominio neto de las radiaciones de tipo eléctrico, como ocurre en la aproximación de Schrödinger.

III. APROXIMACIÓN DE DIRAC

En el tratamiento relativista de Dirac, la interacción entre el campo y el electrón adquiere la forma: $H' = -e \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}$; con

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} & 0 \end{pmatrix}$$

Las funciones propias del hamiltoniano de Dirac pueden darse de la siguiente manera

$$\Psi_{nz}^{n\pm} = \begin{pmatrix} \Psi_{nj+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} \\ \Psi_{nj-\frac{1}{2}}^{m-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} z = -1, -2, \dots, -(n-1) \\ j = |z| - \frac{1}{2} \end{matrix} ;$$

$$\Psi_{n\alpha}^{m-} = \begin{pmatrix} \Psi_{nj-\frac{1}{2}}^{m-} \\ \Psi_{nj+\frac{1}{2}}^{m+} \end{pmatrix} \begin{matrix} \alpha = 1, 2, \dots, n \\ j = \alpha - \frac{1}{2} \end{matrix}$$

Ambas se sintetizan en

$$\Psi_{n\alpha}^{m\pm} = \begin{pmatrix} \Psi_{nj\pm\frac{1}{2}}^{m\pm} \\ \Psi_{nj\mp\frac{1}{2}}^{m\mp} \end{pmatrix} \begin{matrix} \alpha = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm (n-1), n \\ j = |\alpha| - \frac{1}{2} \end{matrix}$$

Las funciones $\Psi_{n\mp\frac{1}{2}}^{m\pm}$ tienen la parte angular a la de las funciones $\Psi_{nl}^{m\pm}$ dadas en la teoría de Pauli (con $j \mp \frac{1}{2}$ en lugar de l). La parte radial está formada por las funciones $S_{n\alpha}^{\frac{1}{2}}$ anotadas en el Apéndice B (S^1 en la parte fuerte y S^2 en la parte débil).

La matriz de $\alpha \cdot \mathbf{A}$ en el sistema constituido por estas funciones se halla sin inconvenientes

$$(\Psi_{n'\alpha'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A} | \Psi_{n\alpha}^{m\pm}) = (\Psi_{n'j'\mp\frac{1}{2}}^{m'\mp} | \sigma \cdot \mathbf{A} | \Psi_{mj\pm\frac{1}{2}}^{m\mp}) + (\Psi_{n'j'\pm\frac{1}{2}}^{m'\mp} | \sigma \cdot \mathbf{A} | \Psi_{nj\mp\frac{1}{2}}^{m\pm})$$

Las dos matrices del miembro de la derecha pueden obtenerse, «mutatis mutandis», a partir de matrices ya calculadas en la sección II y observando que

$$\sigma \cdot \mathbf{A}_{\text{eléct.}} = -\frac{i}{k} \sigma \cdot \mathbf{H}_{\text{mag.}} \quad \sigma \cdot \mathbf{A}_{\text{mag.}} = \frac{i}{k} \sigma \cdot \mathbf{H}_{\text{eléct.}}$$

Elementos de matriz. — a) Parte eléctrica.

Cf. fórmula (II, 5).

$$\begin{aligned} & (\Psi_{n'\alpha'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{n\alpha} | \Psi_{n\alpha}^{m\pm}) = -\delta_{m, m'+\alpha} \cdot \left\{ \right. \\ & M_{10}^{\pm\mp} \left(j \pm \frac{1}{2}; j' \mp \frac{1}{2} \right) \cdot \int j_{\lambda+1} S_{n\alpha}^2 S_{n'\alpha'}^2 \cdot r^2 dr + \\ & \quad + M_{20}^{\pm\mp} \left(j \pm \frac{1}{2}; j' \mp \frac{1}{2} \right) \cdot \int j_{\lambda-1} S_{n\alpha}^2 S_{n'\alpha'}^1 \cdot r^2 dr + \\ & M_{10}^{\mp\pm} \left(j \mp \frac{1}{2}; j' \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \int j_{\lambda+1} S_{n\alpha}^1 S_{n'\alpha'}^2 \cdot r^2 dr + \\ & \quad + M_{20}^{\mp\pm} \left(j \mp \frac{1}{2}; j' \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \int j_{\lambda-1} S_{n\alpha}^1 S_{n'\alpha'}^2 \cdot r^2 dr \left. \right\} \quad (\text{III, 1}) \end{aligned}$$

b) Parte magnética.

Cf. fórmula (II, 4).

$$\begin{aligned} & (\Psi_{n'x'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{i\mu} | \Psi_{nx}^{m\pm}) = \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\ E_{00}^{\pm\mp} & \left(j \pm \frac{1}{2}; j' \mp \frac{1}{2} \right) \cdot \int j_\lambda \mathbf{S}_{nx}^2 \mathbf{S}_{n'x'}^1 \cdot r^2 dr + \\ & \left. + E_{00}^{\mp\pm} \left(j \mp \frac{1}{2}; j' \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \int j_\lambda \mathbf{S}_{nx}^1 \mathbf{S}_{n'x'}^2 \cdot r^2 dr \right\} \quad (\text{III, 2}) \end{aligned}$$

Reglas de selección. — Los coeficientes $E^{\pm\mp}$ y $M^{\pm\mp}$ que aparecen en (III, 1) y (III, 2) son los mismos que figuran en la sección II, salvo que aquí han sido expresados en función del número cuántico j en lugar del l . Prestando atención a este hecho se advierte que las reglas de selección de la aproximación de Dirac no difieren de las que resultan en la aproximación de Pauli, *siempre que ambas se expresen en función del número cuántico j* . Ello es comprensible puesto que en ambas teorías j tiene el mismo significado y representa a una integral de movimiento. En cambio, expresadas en función del número cuántico l las reglas de selección de ambas aproximaciones deben ser diferentes pues el impulso orbital es constante de movimiento en teoría de Pauli pero no en la de Dirac. En esta última, l puede tomar, en un estado Ψ^+ , los valores $l = j - \frac{1}{2}$ con probabilidad

«fuerte» y $l = j + \frac{1}{2}$ con probabilidad «débil»; en un estado Ψ^- ocurre a la inversa. El rango de valores de l que se deduce entonees de la segunda regla de la sección II es el mismo que el expresado por el punto 2° b) de la citada sección.

La tercera regla (siempre de la sección II) no es ahora válida pues según lo ya explicado (y lo que más adelante veremos), puede considerarse que en una transición en la que no hay inversión de espín $j + j' + \lambda$ puede valer tanto $l + l' + \lambda$ con probabilidad «fuerte» como $l + l' + \lambda \pm 1$ con probabilidad «débil», o viceversa de no haber inversión de espín.

Esto equivale a suponer que la transición es regida principalmente por las partes fuertes de Ψ' y Ψ'' , mientras que las partes débiles ejercen una influencia pequeña.

Por lo tanto, de la 3° (b) regla de selección de la sección II se deduce (Comparar con el punto 3° de las secciones I y II).

3° e) Si $l + l' + \lambda$ es par la radiación emitida es de tipo eléctrico con probabilidad fuerte y de tipo magnético con probabilidad «débil». Si dicha suma es impar se invierten ambas alternativas.

4° e) De aquí deducimos que la lista del punto 4° de la sección I, completada con 4° (b) de la sección II, se refiere a las radiaciones que tienen probabilidades «fuertes». Junto a ella existe otra lista semejante de radiaciones posibles pero con los tipos contrarios. Por ejemplo, para $\lambda = |l - l'| - 1$ es posible una radiación de tipo magnético con probabilidad «fuerte» y además una radiación de tipo eléctrico con probabilidad «débil»,

Si $l = l' = 0$ naturalmente tanto j como j' valen $1/2$ pero ahora la transición puede ser efectuada sin inversión de espín con probabilidad «fuerte» pero también con inversión de espín y probabilidad «débil»; como sería por ejemplo el caso en una transición $\alpha = +1 \rightarrow \alpha' = -1$ (o sea $l = 0$ con probabilidad débil y $l' = 0$ con probabilidad fuerte). Por consiguiente.

6° e) Si $l = l' = 0$ son posibles una radiación dipolar magnética «fuerte» y una radiación dipolar eléctrica «débil».

Intensidades. — La repetición de procedimientos utilizados en las secciones anteriores nos lleva a efectuar las integrales radiales en la forma explicada en el apéndice B, obteniéndose.

a) Parte eléctrica.

$$\begin{aligned}
 (\Psi_{n'x'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{\lambda\mu} | \Psi_{nx}^{m\pm}) &= 2^{-\frac{1}{2}} \cdot a_0^3 \cdot \tilde{N}_{nx} \tilde{N}_{n'x'} \cdot (b/2a)^{\lambda-1} \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot \left\{ \right. \\
 &\frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \cdot \sum_t D_t^{20} \frac{\Gamma(t' + \lambda + 2)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t'+2}} \cdot \\
 &\quad \cdot F\left(\frac{\lambda - t'}{2} - 1, \quad \frac{\lambda - t'}{2} - \frac{1}{2}; \quad \lambda + \frac{1}{2}; \quad -\frac{b^2}{a^2}\right) + \\
 &\frac{(b/2a)^2}{\Gamma\left(\lambda + \frac{5}{2}\right)} \cdot \sum_t D_t^{10} \frac{\Gamma(t' + \lambda + 4)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t'+2}} \cdot \\
 &\quad \cdot F\left(\frac{\lambda - t'}{2}, \quad \frac{\lambda - t'}{2} + \frac{1}{2}; \quad \lambda + \frac{5}{2}; \quad -\frac{b^2}{a^2}\right) \left. \right\} \quad (\text{III, 3})
 \end{aligned}$$

b) Parte magnética.

$$(\Psi_{n'x'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{\lambda\mu} | \Psi_{nx}^{m\pm}) = 2^{-\frac{1}{2}} \cdot a_0^3 \cdot \tilde{N}_{nx} \tilde{N}_{n'x'} \cdot (b/2a)^\lambda \cdot \delta_{m, m'+\mu} \cdot$$

$$\frac{1}{\Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \sum_t D_t^{00} \frac{\Gamma(t + \lambda + 3)}{a^{t+3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2}} \cdot F\left(\frac{\lambda - t'}{2} - \frac{1}{2}, \frac{\lambda - t'}{2}; \lambda + \frac{3}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \quad (\text{III, 4})$$

En estas fórmulas es $b = k \cdot a_0$ y $a = \frac{1}{2} \cdot (a_{nx} + a_{n'x})$, con

$$a_{nx} = \left\{ (n - |\alpha|)^2 + \alpha^2 + 2(n - |\alpha|) \cdot \sqrt{\alpha^2 + \alpha^2 Z^2} \right\}^{-\frac{1}{2}}$$

Si despreciamos el término $(\alpha Z)^2$ frente a la unidad tendremos

$$a_{nx} \cong \frac{1}{n}; \quad a \cong \frac{n + n'}{2nn'}$$

Esto significa que también ahora el cociente b/a , que tiene aproximadamente el mismo significado que en las secciones anteriores, es pequeño y su cuadrado puede ser despreciado con relación a la unidad, quedando así las expresiones aproximadas

a) Parte eléctrica.

$$\begin{aligned} (\Psi_{n'x'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{ix} | \Psi_{nx}^{m\pm}) &= \frac{a_0^3 \cdot \bar{N}_{nx} \bar{N}_{n'x'} \cdot (b/2a)^{\lambda-1}}{\sqrt{2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \\ &\cdot \sum_t D_t^{20} \frac{\Gamma(t + \lambda + 2)}{a^{t+3}} \quad (\text{III, 5}) \end{aligned}$$

b) Parte magnética.

$$\begin{aligned} (\Psi_{n'x'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{ix} | \Psi_{nx}^{m\pm}) &= \frac{a_0^3 \cdot \bar{N}_{nx} \bar{N}_{n'x'} \cdot (b/2a)^{\lambda-1}}{\sqrt{2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \\ &\cdot \sum_t D_t^{00} \frac{\Gamma(t + \lambda + 3)}{a^{t+3}} \quad (\text{III, 6}) \end{aligned}$$

Aquí, como en las secciones anteriores, el factor $(b/2a)^\lambda$ fija el orden de magnitud de las matrices. Por ser este factor aproximadamente igual al utilizado en la sección I, las explicaciones que entonces se dieron con respecto a las intensidades relativas de las radiaciones multipolares posibles, pueden ser trasladadas sin cambio a la presente sección.

Introducción del número cuántico azimutal. — De las matrices encontradas se deducen las intensidades de las radiaciones emitidas. Sin embargo, la clasificación espectroscópica no utiliza al número κ sino al número cuántico azimutal l . Por ese motivo es conveniente expresar las intensidades teniendo en cuenta la mencionada circunstancia. La manera de conseguirlo es notar que podemos poner

$$\Psi_{n\kappa}^{m\pm} = \begin{pmatrix} \Psi_{nj\pm\frac{1}{2}}^{m\pm} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_{nj\mp\frac{1}{2}}^{m\mp} \end{pmatrix}$$

Ambos sumandos son ortogonales entre sí y tienen un impulso orbital respectivamente igual a

$$j \pm \frac{1}{2} = |\kappa| \mp \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = \left| \kappa + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}$$

$$j \pm \frac{1}{2} = |\kappa| \pm \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = \left| \kappa - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}$$

Las correspondientes probabilidades de ambas alternativas dependen de los cuadrados de los módulos de $S_{n\kappa}^1$ y $S_{n\kappa}^2$; siendo aproximadamente $(E_0 + E)/2E_0$ y $(E_0 - E)/2E_0$.

Resumiendo: En un estado con κ definido; l puede valer tanto $\left| \kappa + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}$ con probabilidad $(E_0 + E)/2E_0$; como $\left| \kappa - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}$ con probabilidad $(E_0 - E)/2E_0$. Gracias a lo anterior, cada radiación emitida en una transición a la que llamaremos generatriz $\kappa' \rightarrow \kappa$ (dejamos de lado los otros números cuánticos), podemos suponerla dividida en las siguientes partes:

$$\alpha) \text{ Una transición } l' = \left| \kappa' + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} \rightarrow l = \left| \kappa + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}.$$

El producto de las probabilidades de que l y l' tengan los valores indicados es

$$(E_0 + E)(E_0 + E')/4E_0^2 \simeq 1 \quad (E \simeq E_0 \simeq E')$$

Lo que significa que la intensidad correspondiente es prácticamente igual a la de la transición generatriz.

$$\beta) \text{ Una transición } l' = \left| \kappa' + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} \rightarrow l = \left| \kappa - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}.$$

El producto de las probabilidades respectivas es

$$(E_0 + E')(E_0 - E)/4E_0^2 \cong (E_0^2 - E^2)/4E_0^2 \cong (\alpha Z)^2/4n^2 \quad (E' \cong E)$$

Y la probabilidad total es entonces $(\alpha Z)^2/4n^2$ veces menor que la de la transición anterior.

$$\gamma) \text{ transición } l' = \left| x' - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} \rightarrow l = \left| x + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}$$

Cuya probabilidad se encuentra de manera similar a la anterior.

$$(E_0 + E)(E_0 - E')/4E_0^2 \cong (E_0^2 - E'^2)/4E_0^2 \cong (\alpha Z)^2/4n'^2 \quad (E' \cong E)$$

La probabilidad total es $(\alpha Z)^2/4n'^2$ veces menor que la de la transición generatriz, siendo también menor que la del caso β en la relación $(n/n')^2$.

$$\delta) \text{ Una transición } l' = \left| x' - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} \rightarrow l = \left| x - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}$$

La probabilidad es aproximadamente el producto de la de los dos casos anteriores y vale $(\alpha Z)^4/(4nn')^2$.

El problema inverso, esto es la determinación de las posibles transiciones generatrices de una transición $l' \rightarrow l$ dada, se resuelve sabiendo que

$$l = \left| x + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} \quad (\text{con probabilidad « fuerte » } \cong 1)$$

$$l = \left| x - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2} \quad (\text{con probabilidad « débil »})$$

Fórmulas relativistas para pequeñas energías. — Con el objeto de encontrar fórmulas válidas para pequeñas energías, de las matrices de la interacción relativista (III, 5) y (III, 6), hallaremos previamente la forma de todos los términos (para pequeñas energías) que en ellas intervienen.

Teniendo en cuenta que $\frac{E_0^2 - E^2}{E_0} = \frac{\alpha Zhc}{2a_0n^2}$, los factores de normali-

zación \tilde{N}_{nx} dados en el apéndice B tienen, aproximadamente, el valor

$$\tilde{N}_{nx} = \frac{1}{\sqrt{E_0}} \cdot N_{nl} \quad (l = x \text{ si } x \text{ es negativo; } l = x - 1 \text{ si } x \text{ es positivo})$$

Por su parte, los coeficientes D_t^α provienen de combinaciones lineales del tipo

$$a^\alpha \cdot S_{n\alpha}^1 S_{n'\alpha'}^2 + b^\alpha \cdot S_{n\alpha}^2 S_{n'\alpha'}^1$$

En S^1 y S^2 aparecen polinomios cuyos coeficientes A_s^1 y A_s^2 valen, siempre en la aproximación que consideramos,

$$\begin{aligned} A_{n\alpha s}^1 &\cong A_{nls} \\ A_{n\alpha s}^2 &\cong A_{nls} \cdot \frac{2n-s-1+\alpha}{s+1+\alpha} \quad (\alpha = -l \text{ ó } \alpha = l+1) \end{aligned}$$

Los A_{nls} son los mismos que aparecen en las funciones radiales de las aproximaciones no relativistas.

Al efectuar la combinación lineal (III, 7) resultan términos de la forma

$$\begin{aligned} A_{nls} A_{n'ls'} \left(a^\alpha \cdot \sqrt{\frac{(E_0 + E)(E_0 - E')}{4}} \cdot \frac{2n' - s' - 1 + \alpha'}{s' + 1 + \alpha'} + \right. \\ \left. + b^\alpha \cdot \sqrt{\frac{(E_0 + E')(E_0 - E)}{4}} \cdot \frac{2n - s - 1 + \alpha}{s + 1 + \alpha} \right) \end{aligned}$$

Es decir, teniendo en cuenta expresiones aproximadas de las raíces,

$$\frac{hc}{2a_0} \cdot A_{nls} A_{n'ls'} \left(a^\alpha \cdot \frac{1 - \frac{s'+1-\alpha'}{2n'}}{s'+1+\alpha'} + b^\alpha \cdot \frac{1 - \frac{s+1-\alpha}{2n}}{s+1+\alpha} \right) \quad (\text{III, 8})$$

La suma sobre s , con $s' = t - s$, da los coeficientes D_t^α , pero introduciendo $\bar{D}_t^\alpha = \frac{2a_0}{hc} D_t^\alpha$, nos quedan las fórmulas buscadas

a) Parte eléctrica.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n'\alpha'}^{m'} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{\lambda\mu} | \Psi_{n\alpha}^{m\pm} \rangle &\cong \frac{h \cdot a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l'} \cdot (b/2a)^{\lambda-1}}{mc \cdot 2^{1/2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)} \cdot \xi_{m, m'+\mu} \cdot \\ &\cdot \sum_t \bar{D}_t^{20} \frac{\Gamma(t+\lambda+1)}{a^{t+3}} \quad (\text{III, 9}) \end{aligned}$$

b) Parte magnética.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n'\alpha'}^{m'\pm} | \alpha \cdot \mathbf{A}_{\lambda\mu} | \Psi_{n\alpha}^{m\pm} \rangle &\cong \frac{h \cdot a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l'} \cdot (b/2a)^\lambda}{mc \cdot 2^{1/2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \cdot \xi_{m, m'+\mu} \cdot \\ &\cdot \sum_t \bar{D}_t^{00} \frac{\Gamma(t+\lambda+2)}{a^{t+3}} \quad (\text{III, 10}) \end{aligned}$$

La única diferencia esencial entre estas fórmulas y las (II, 12) y (II, 13) reside en los coeficientes D_l , que en ambos casos tienen distintos significados.

Cuadro sinóptico. — En el siguiente esquema, hemos condensado el conjunto de las radiaciones multipolares permitidas en las diferentes aproximaciones y también el orden de magnitud de las intensidades respectivas. (Como siempre, α es la constante de estructura fina)

Valores posibles de λ en una transición $\nu \rightarrow l$

Aproximación de Dirac				
Aproximación de Pauli			Efectos relativistas	
λ	Tipo	Intensidad \sim	Tipo	Intensidad \sim
$ l - \nu - 1$	M	$\alpha^2 l - \nu - 2$	E	$\alpha^2 l - \nu $
$ l - \nu $	E	$\alpha^2 l - \nu - 2$	M	$\alpha^2 l - \nu $
$ l - \nu + 1$	M	$\alpha^2 l - \nu + 2$	E	$\alpha^2 l - \nu + 4$
$ l - \nu + 2$	E	$\alpha^2 l - \nu + 2$	M	$\alpha^2 l - \nu + 4$
...
$l + \nu - 1$	M	$\alpha^2 (l + \nu) - 2$	E	$\alpha^2 (l + \nu)$
$l + \nu$	E	$\alpha^2 (l + \nu) - 2$	M	$\alpha^2 (l + \nu)$
$l + \nu + 1$	M	$\alpha^2 (l + \nu) + 2$	E	$\alpha^2 (l + \nu) + 4$

La aproximación de Dirac da las reglas de selección completas. En la aproximación de Pauli faltan las dos últimas columnas (que son debidas a las partes débiles de los espinores de Dirac). En la aproximación de Schrödinger también faltan la primera y la última de las filas de valores de λ .

APÉNDICE A

Integrales angulares

Todas las integrales angulares que hemos necesitado son de la forma:

$$\int_0^\pi \Theta_{l_1}^{m_1} \Theta_{l_2}^{m_2} \Theta_{l_3}^{m_3} \text{sen } \theta d\theta$$

cuya evaluación puede verse por ejemplo en un artículo de la L. Infeld y T. E. Hull (7). Puesto el resultado en función de los coeficiente de Clebsh-Gordan será (8)

$$\int_0^\pi \Theta_{l_1}^{m_1} \Theta_{l_2}^{m_2} \Theta_{l_3}^{m_3} \cdot \text{sen } \theta d\theta = \left[\frac{(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)}{4\pi \cdot (2l_1 + 1)} \right]^{1/2} \cdot c_{l_2 l_3}(l_1 0; 00) \cdot c_{l_2 l_3}(l_1 m_1; m_2 m_3)$$

$$m_1 = m_2 + m_3$$

De esta manera pueden ser calculadas las integrales cuando se posee una tabla de coeficientes de Clebsh-Gordan (9). De lo contrario es conveniente la utilización de las expresiones simétricas dadas por G. Racah (10).

$$\int_0^\pi \Theta_{l_1}^{m_1} \Theta_{l_2}^{m_2} \Theta_{l_3}^{m_3} \cdot \text{sen } \theta d\theta = (-1)^{\frac{l_2 + l_3 - l_1}{2}} \cdot \left[\frac{4}{\pi} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1) \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{(l_1 + l_2 - l_3)!! (l_3 + l_1 - l_2)!! (l_2 + l_3 - l_1)!!}{(l_1 + l_2 + l_3 + 1)!!}$$

$$\cdot \sum_z \frac{(-1)^z \cdot [l_1 + m_1]! (l_1 - m_1)! (l_2 + m_2)! (l_2 - m_2)!}{(z + 1)! (l_2 + l_3 - l_1 - z + 1)! (l_2 - m_2 - z)! (l_3 + m_3 - z + 1)!}$$

$$\frac{(l_3 + m_3)! (l_3 - m_3)!^{\frac{1}{2}}}{(l_1 - l_3 + m_2 + z)! (l_1 - l_2 - m_3 + z)!}; \quad m_1 = m_2 + m_3$$

La integral es nula si no se cumple que :

$$l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par y } |l_1 - l_2| \leq l_3 \leq l_1 + l_2$$

Los coeficientes E y M introducidos en el desarrollo de este trabajo, pueden ser calculados a partir de la siguiente combinación lineal :

$$\int \left\{ \alpha \Theta_{l_1}^{m_1} \Theta_{l_2}^{m_2} \Theta_{l_3}^{m_3} + \beta \Theta_{l_1}^{m_1-1} \Theta_{l_2}^{m_2-1} \Theta_{l_3}^{m_3} + \gamma \Theta_{l_1}^{m_1+1} \Theta_{l_2}^{m_2+2} \Theta_{l_3}^{m_3} + \right.$$

$$\left. + \delta \Theta_{l_1}^{m_1+1} \Theta_{l_2}^{m_2} \Theta_{l_3}^{m_3+1} + \epsilon \Theta_{l_1}^{m_1} \Theta_{l_2}^{m_2-1} \Theta_{l_3}^{m_3+1} + i \Theta_{l_1}^{m_1+2} \Theta_{l_2}^{m_2+1} \Theta_{l_3}^{m_3+1} \right\}$$

$$\text{sen } \theta d\theta \quad (\text{A}, 1)$$

Que en función de los coeficientes de Clebsh-Gordan tiene el valor

$$\left[\frac{(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi(2l_1+1)} \right]^{\frac{1}{2}} c_{l_2 l_3}(l_1 0; 00) \left\{ \begin{aligned} & \alpha C_{l_2 l_3}(l_1 m_1; m_2 m_3) + \\ & + \beta C_{l_2 l_3}(l_1 m_1+1, m_2+1, m_3) + \gamma C_{l_2 l_3}(l_1 m_1+1, m_2+1, m_3) + \\ & + \delta C_{l_2 l_3}(l_1 m_1+1, m_2, m_3+1) + \varepsilon C_{l_2 l_3}(l_1 m_1, m_2-1, m_3+1) + \\ & + i C_{l_2 l_3}(l_1 m_1+2, m_2+1, m_3+1) \end{aligned} \right\} \quad (A, 2)$$

Las letras que figuran en (A, 2) tienen significados que dependen de los coeficientes que se deseen calcular.

1) Para $E_{11}(\lambda l l'; \mu m m')$

$$\alpha = c_{\lambda \mu}^1 C_{lm}^1; \quad \beta = \frac{1}{2} b_{\lambda \mu}^1 B_{lm}^1; \quad \gamma = \frac{1}{2} a_{\lambda \mu}^1 A_{lm}^1; \quad \delta = \varepsilon = i = 0;$$

$$l_1 = l+1; \quad l_2 = \lambda+1; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'.$$

Para que E_{11} no se anule deben cumplirse las relaciones comunes a todos los coeficientes de Clebsh-Gordan. Además, en este caso particular, también resulta nula la combinación (A, 2) cuando $l_3 = l_1 = l_2$. Por lo tanto, para que E_{11} no se anule es necesario que

$$\begin{aligned} l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par,} & \quad \text{es decir} \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ par} \\ |l_1 - l_2| \leq l_3 \leq l_1 + l_2 - 2 & \quad \gg \quad |l - \lambda| \leq l' \leq l + \lambda. \end{aligned}$$

2) Para $E_{12}(\lambda l l'; \mu m m')$

$$\alpha = c_{\lambda \mu}^1 C_{lm}^2; \quad \beta = \frac{1}{2} b_{\lambda \mu}^1 B_{lm}^2; \quad \gamma = \frac{1}{2} a_{\lambda \mu}^1 A_{lm}^2; \quad \delta = \varepsilon = i = 0;$$

$$l_1 = l-1; \quad l_2 = \lambda+1; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'.$$

Cuando $l_1 = l_3 + l_2$, E_{12} es nulo. Por consiguiente, para que E_{12} sea diferente de cero es necesario que

$$\begin{aligned} l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par,} & \quad \text{es decir} \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ par} \\ |l_3 - l_2| \leq l_1 \leq l_3 + l_2 - 2 & \quad \gg \quad |l' - \lambda| \leq l \leq l' + \lambda \end{aligned}$$

3) Para $E_{21}(\lambda l l'; \mu m m')$

$$\alpha = c_{\lambda \mu}^2 C_{lm}^1; \quad \beta = \frac{1}{2} b_{\lambda \mu}^2 B_{lm}^1; \quad \gamma = \frac{1}{2} a_{\lambda \mu}^2 A_{lm}^1; \quad \delta = \varepsilon = i = 0;$$

$$l_1 = l+1; \quad l_2 = \lambda-1; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'.$$

Condiciones para que no sea nulo :

$$l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par} \quad \text{es decir} \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ par}$$

$$|l_1 - l_3| \leq l_2 \leq l_1 + l_3 - 2 \quad \text{es decir} \quad |l - l'| \leq \lambda \leq l + l'$$

4) Para $E_{22}(\lambda l l'; \mu m m')$

$$\alpha = c_{\lambda\mu}^2 C_{lm}^2; \quad \beta = \frac{1}{2} b_{\lambda\mu}^2 B_{lm}^2; \quad \gamma = \frac{1}{2} a_{\lambda\mu}^2 A_{lm}^2; \quad \varepsilon = \varepsilon = i = 0;$$

$$l_1 = l - 1; \quad l_2 = \lambda - 1; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'.$$

Condiciones para que no sea nulo :

$$l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par} \quad \text{es decir} \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ par}$$

$$|l_1 - l_2| \leq l_3 \leq l_1 + l_2 \quad |l - \lambda| \leq l' \leq l + \lambda - 2$$

5) Para $M_{01}(\lambda l l'; \mu m m')$

$$\alpha = c_{\lambda\mu} C_{lm}^1; \quad \beta = \frac{1}{2} b_{\lambda\mu} B_{lm}^1; \quad \gamma = \frac{1}{2} a_{\lambda\mu} A_{lm}^1; \quad \varepsilon = \varepsilon = i = 0;$$

$$l_1 = l + 1; \quad l_2 = \lambda; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'.$$

Condiciones para que no sea nulo :

$$l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par} \quad \text{es decir} \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ impar}$$

$$|l_1 - l_3| \leq l_2 \leq l_1 + l_3 - 2 \quad \gg \quad |l - l'| + 1 \leq \lambda \leq l + l' - 1$$

6) Para $M_{02}(\lambda l l'; \mu m m')$

$$\alpha = c_{\lambda\mu} C_{lm}^1; \quad \beta = \frac{1}{2} b_{\lambda\mu} B_{lm}^2; \quad \gamma = \frac{1}{2} a_{\lambda\mu} A_{lm}^2; \quad \varepsilon = \varepsilon = i = 0;$$

$$l_1 = l - 1; \quad l_2 = \lambda; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'.$$

Condiciones para que no sea nulo :

$$l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par} \quad \text{es decir} \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ impar}$$

$$|l_2 - l_3| \leq l_1 \leq l_2 + l_3 - 2 \quad \gg \quad l' = \lambda + 1 \leq l \leq l + \lambda - 1$$

7) Para $E_{00}^{\pm\pm}(\lambda l l', \mu m m')$

$$\alpha = c_{\lambda\mu} G_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm}; \quad \beta = i = 0; \quad \gamma = a_{\lambda\mu} H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm}; \quad \varepsilon = -c_{\lambda\mu} H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm}$$

$$\varepsilon = b_{\lambda\mu} G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm}; \quad l_1 = l; \quad l_2 = \lambda; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'.$$

Condiciones para que no sea nulo :

$$l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par} \quad \text{es decir} \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ par}$$

$$|l_2 - l_3| \leq l_1 \leq l_2 + l_3 \quad \gg \quad |\lambda - l'| \leq l \leq \lambda + l'$$

8) Para $M_{10}^{\pm\pm}(\lambda l l', \mu m m')$

$$\begin{aligned} \alpha &= c_{\lambda\mu}^1 G_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm}; \quad \beta = i = 0, \quad \gamma = a_{\lambda\mu}^1 H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm}; \quad \delta = -c_{\lambda\mu}^1 H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} \\ \varepsilon &= b_{\lambda\mu}^1 G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm}; \quad l_1 = l; \quad l_2 = \lambda + 1; \quad l_3 = l'; \\ & \qquad \qquad \qquad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m' \end{aligned}$$

Condiciones para que no sea nulo :

$$\begin{aligned} l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par} & \quad \text{es decir} & \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ impar} \\ |l_2 - l_3| \leq l_1 \leq l_2 + l_3 - 2 & \quad \gg & \quad |\lambda - l'| + 1 \leq l \leq l' + \lambda - 1 \end{aligned}$$

9) Para $M_{20}^{\pm\pm}(\lambda l l'; \mu m m')$

$$\begin{aligned} \alpha &= c_{\lambda\mu}^2 G_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm}; \quad \beta = i = 0; \quad \gamma = a_{\lambda\mu}^2 H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm}; \quad \delta = -c_{\lambda\mu}^2 H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} \\ \varepsilon &= b_{\lambda\mu}^2 G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm}; \quad l_1 = l; \quad l_2 = \lambda - 1; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'. \end{aligned}$$

Condiciones para que no sea nulo :

$$\begin{aligned} l_1 + l_2 + l_3 = n^\circ \text{ par} & \quad \text{es decir} & \quad l + \lambda + l' = n^\circ \text{ impar} \\ |l_1 - l_3| \leq l_2 \leq l_1 + l_3 - 2 & \quad \gg & \quad l + l' + 1 \leq \lambda \leq l + l' - 1 \end{aligned}$$

10) Para $E'_{ij}^{\pm\pm}(\lambda l l'; \mu m m') \quad (i, j = 1; 2)$

$$\begin{aligned} \alpha &= -2 H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} c_{\lambda\mu}^i B_{lm+1}^j; \quad \beta = G_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} b_{\lambda\mu}^i B_{lm}^j \\ \gamma &= -G_{l'm'}^{\pm} a_{\lambda\mu}^i (G_{lm}^{\pm} A_{lm}^j + 2 H_{lm}^{\pm} C_{lm+1}^j); \quad \delta = -2 G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} c_{\lambda\mu}^i A_{lm}^j; \\ \varepsilon &= H_{l'm'}^{\pm} b_{\lambda\mu}^i (H_{lm}^{\pm} B_{lm+1}^j - 2 G_{lm}^{\pm} C_{lm}^j); \quad i = -H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} a_{\lambda\mu}^i A_{lm+1}^j; \\ l_1 &= l - (-1)^j; \quad l_2 = \lambda - (-1)^i; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m' \end{aligned}$$

11) Para $M'_{oi}^{\pm\pm}(\lambda l l'; \mu m m') \quad (i = 1; 2)$

$$\begin{aligned} \alpha &= -2 H_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} c_{\lambda\mu}^i B_{lm+1}^i; \quad \beta = G_{lm}^{\pm} G_{l'm'}^{\pm} b_{\lambda\mu}^i B_{lm}^i; \\ \gamma &= -G_{l'm'}^{\pm} a_{\lambda\mu}^i (G_{lm}^{\pm} A_{lm}^i + 2 H_{lm}^{\pm} C_{lm+1}^i); \quad \delta = -2 G_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} c_{\lambda\mu}^i A_{lm}^i; \\ \varepsilon &= H_{l'm'}^{\pm} b_{\lambda\mu}^i (H_{lm}^{\pm} B_{lm+1}^i - 2 G_{lm}^{\pm} C_{lm}^i); \quad i = -H_{lm}^{\pm} H_{l'm'}^{\pm} a_{\lambda\mu}^i A_{lm+1}^i; \\ l_1 &= l - (-1)^i; \quad l_1 = \lambda; \quad l_3 = l'; \quad m_1 = m; \quad m_2 = \mu; \quad m_3 = m'. \end{aligned}$$

APÉNDICE B

Integrales radiales

Si tenemos dos polinomios cualesquiera

$$P_1(x) = \sum_{r=l}^n a_r x^r; \quad P_2(x) = \sum_{s=l}^{n'} b_s x^s$$

y los multiplicamos entre sí, obtendremos otro polinomio

$$P_3(x) = P_1(x) \cdot P_2(x) = \sum_r \sum_s a_r b_s x^{r+s} = \sum_{t=l+l}^{n+n'} c_t x^t$$

Los coeficientes del nuevo polinomio son

$$c_t = \sum_{\substack{\text{mín. } (t-n, n') \\ \text{máx. } (t-l, l)}} a_{t-s} b_s = \sum_{\substack{\text{mín. } (t-n', n) \\ \text{máx. } (t-l, l)}} a_r b_{t-r} \quad (\text{B, 1}),$$

Las funciones radiales que aparecen en las secciones I y II son

$$R_{nl}(r) = -N_{nl} \cdot e^{-\epsilon/2n} \cdot \sum_{s=l}^{n-1} A_{nls} \rho^s$$

Donde

$$\rho = r/a_0; \quad N_{nl} = \left\{ \frac{(n-l-1)!(n+l)!}{2a_0^3 n_4} \right\}^{1/2};$$

$$A_{nls} = (-1)^s \frac{n^{-s}}{(n-s-1)!(l+s+1)!(s-l)!}$$

Hemos introducido además las funciones

$$R_{nl}^1(r) = \frac{dR_{nl}}{dr} - l \cdot \frac{R_{nl}}{r}; \quad R_{nl}^2(r) = \frac{dR_{nl}}{dr} + (l+1) \cdot \frac{R_{nl}}{r}$$

Las que, efectuando las operaciones indicadas adquieren la forma

$$R_{nl}^1(r) = \frac{-N_{nl}}{a_0} \cdot e^{-\epsilon/2n} \cdot \sum_{s=l}^{n-1} A_{nls}^1 \rho^s$$

$$R_{nl}^2(r) = \frac{-N_{nl}}{a_0} e^{-\epsilon/2n} \cdot \sum_{s=l-1}^{n-1} A_{nls}^2 \rho^s$$

$$A_{nls}^1 = \frac{1-s-l}{s+2+l} \cdot A_{nls}; \quad A_{nls}^2 = \frac{1-s+1+l}{s-l+1} \cdot A_{nls} \quad (s \neq l-1).$$

$$A_{nl, l-1}^2 = \frac{n^{-l}}{(n-l-1)!(2l)!}$$

Cualquier combinación lineal entre R^1 y R^2 :

$$a^\alpha R^1 + b^\alpha R^2 = R^\alpha$$

es expresable de la siguiente manera

$$R_{nl}^\alpha = - \frac{N_{nl}}{a_0} \cdot e^{-\rho/2n} \sum_{s=l-1}^{n-l} A_{nls}^\alpha \cdot \rho^s$$

Con
$$A_{nls}^\alpha = a^\alpha A_{nls}^1 + b^\alpha A_{nls}^2$$

$$A_{nls}^\alpha = A_{nls} (a^\alpha \cdot \frac{1 - \frac{s-l}{2n}}{s+2+l} + b^\alpha \cdot \frac{1 - \frac{s+1+l}{2n}}{s+1-l}) \quad (s \neq l-1)$$

$$A_{nls}^\alpha = - b^\alpha \cdot \frac{n^{-l}}{(n-1-l)!(2l)!} \quad (s = l-1) \quad (B, 2)$$

El producto de las funciones radiales R_{nl}^α y $R_{n'l'}$ es entonces

$$R_{nl}^\alpha R_{n'l'} = - \frac{N_{nl} N_{n'l'}}{a_0} \cdot e^{-\frac{n+n'}{2nn'} \rho} \cdot \sum_{t=l+l'-1}^{n+n'-2} D_t^\alpha \cdot \rho^t \quad (B, 3)$$

Siendo, de acuerdo con (B, 1)

$$D_t^\alpha = \sum_{\substack{\text{mín } (t-n'+1, n-1) \\ \text{máx } (t-l', l-1)}} A_{nls}^\alpha A_{n'l', t-s} \quad (B, 4)$$

Las integrales radiales se calculan por intermedio de (B, 3)

$$\int_0^\infty j_\lambda \cdot R_{nl}^\alpha R_{n'l'} \cdot r^2 dr = - \frac{N_{nl} N_{n'l'}}{a_0} \sum_t D_t^\alpha \cdot \int_0^\infty e^{-\frac{n+n'}{2nn'} \rho} j_\lambda(kr) \cdot \rho^t \cdot r^2 dr$$

y como $r = a_0 \rho$, $j_\lambda(kr) = \frac{J_{\lambda+1/2}(kr)}{\sqrt{kr}}$, donde $J_{\lambda+1/2}$ es la función de Bessel de orden $\lambda + 1/2$; nos queda

$$\int_0^\infty j_\lambda \cdot R_{nl}^\alpha R_{n'l'} \cdot r^2 dr = - \frac{N_{nl} N_{n'l'}}{\sqrt{kr}} a_0^{3/2} \cdot \sum D_t^\alpha \int_0^\infty e^{-\frac{n+n'}{2nn'} \rho} \cdot J_{\lambda+1/2}(ka_0 \rho) \rho^{t+\frac{3}{2}} d\rho$$

Las integrales del segundo miembro son calculables mediante la fórmula (11)

$$\int e^{-a\rho} \cdot J_\nu(b\rho) \rho^\mu d\rho = \frac{(b/2a)^\nu \Gamma(\mu + \nu + 1)}{\left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{\mu + \frac{1}{2}} a^{\mu+1} \cdot \Gamma(\nu + 1)} \cdot F\left(\frac{\nu - \mu}{2}, \frac{\nu - \mu}{2} + \frac{1}{2}, \nu + 1, -\frac{b^2}{a^2}\right) \quad (\text{B, 5})$$

En nuestro caso es $a = \frac{n+n'}{2nn'}$; $b = ka_0$; $\nu = \lambda + \frac{1}{2}$; $\mu = t + \frac{3}{2}$; y la función hipergeométrica se reduce a un polinomio cuyo grado es la parte entera de $\frac{\mu - \nu}{2}$.

Mediante (B, 5) las integrales radiales pueden ser escritas

$$\begin{aligned} \int j_k R_{nl}^a R_{n'l'} \cdot r^2 dr &= - \frac{N_{nl} N_{n'l'} \cdot a_0^{3/2} \cdot (b/2a)^{\lambda+1/2}}{|\bar{k} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \\ &= - \frac{a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l'} \cdot (b/2a)^\lambda}{\sqrt{2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \sum_t D_t^\alpha \frac{\Gamma(t + \lambda + 3)}{\left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2} a^{t+5/2}} F\left(\frac{\lambda - t}{2} - \frac{1}{2}, \frac{\lambda - t}{2}; \lambda + \frac{3}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \\ &= - \frac{a_0^2 \cdot N_{nl} N_{n'l'} \cdot (b/2a)^\lambda}{\sqrt{2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \sum_t D_t^\alpha \frac{\Gamma(t + \lambda + 3)}{\left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)^{t+2} \cdot a^{t+3}} F\left(\frac{\lambda - t}{2} - \frac{1}{2}, \frac{\lambda - t}{2}; \lambda + \frac{3}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \quad (\text{B, 6}) \end{aligned}$$

Las funciones radiales necesarias para la tercera sección son :

$$S_{nx}^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{E_0 \pm E}{2}} \tilde{N}_{nx} \cdot e^{-\frac{1}{2} a_{nx} \rho} \sum_{s=|\chi|-1}^{n-1} A_{nxs}^{\frac{1}{2}} \cdot \rho^{s-|\chi| + \sqrt{x^2 - a^2 z^2}}$$

Con

$$\begin{aligned} \tilde{N}_{nx} &= 2 \cdot \frac{E_0^2 - E^2}{E_0} \left\{ \frac{(n - |\chi|)! \Gamma(2\sqrt{x^2 - \alpha^2 z^2} + n - |\chi| + 1)}{\alpha \cdot Z \cdot h^3 \cdot e^3 (\chi + 1/a_{nx})} \right\}^{1/2} \\ A_{nxs}^{\frac{1}{2}} &= \frac{(-1)^{s-|\chi|+1} [n - s - 1] \mp (\chi + 1/a_{nx}) a_{nx}^{s-|\chi| + \sqrt{x^2 - \alpha^2 z^2}}}{(n - s - 1)! (s - |\chi| + 1)! \Gamma(2\sqrt{x^2 - \alpha^2 z^2} - |\chi| + s + 2)} \\ a_{nx} &= \left\{ (n - |\chi|)^2 + \chi^2 + 2(n - |\chi|) \sqrt{x^2 - \alpha^2 z^2} \right\}^{-1/2} \\ \rho &= r/a_0; \quad \alpha \cdot Z \cdot E/\sqrt{E_0^2 - E^2} = n - |\chi| + \sqrt{x^2 - \alpha^2 z^2}; \quad E_0 = mc^2 \end{aligned}$$

El producto de dos funciones radiales S es entonces

$$S_{n_x}^1 S_{n'_x t}^2 = \tilde{N}_{n_x} \tilde{N}_{n'_x t} \cdot \sqrt{\frac{1}{4} (E_0 \pm E) (E_0 \mp E')} \cdot e^{-\frac{1}{2} (a_{n_x} + a_{n'_x t}) \varrho} \sum_t D_t^{12} \varrho^{t'}$$

Donde

$$D_t^{12} = \sum_{s} \begin{matrix} \text{mín } (t-n'+1, n-1) \\ \text{máx}(t-|x'|+1, |x|-1) \end{matrix} A_{n_x s}^1 A_{n'_x t-s}^2; \quad t' = t + \sqrt{\chi^2 - \alpha^2 z^2} + \sqrt{\chi'^2 - \alpha^2 z'^2} - |x| - |x'|$$

La combinación lineal $a^\alpha S_{n_x}^1 S_{n'_x t}^2 + b^\alpha S_{n_x}^2 S_{n'_x t}^1$, resulta entonces

$$a^\alpha S_{n_x}^1 S_{n'_x t}^2 + b^\alpha S_{n_x}^2 S_{n'_x t}^1 = \tilde{N}_{n_x} \tilde{N}_{n'_x t} \cdot e^{-\frac{1}{2} (a_{n_x} + a_{n'_x t}) \varrho} \sum_t D_t^\alpha \cdot \varrho^{t'} \quad (\text{B},7)$$

Siendo ahora

$$D_t^\alpha = \sum_s \left[a^\alpha \cdot \sqrt{\frac{1}{4} (E_0 \pm E) (E_0 \mp E')} \cdot A_{n_x s}^1 A_{n'_x t-s}^2 + b^\alpha \cdot \sqrt{\frac{1}{4} (E_0 \mp E) (E_0 \pm E')} \cdot A_{n_x s}^2 A_{n'_x t-s}^1 \right]$$

Las integrales radiales de la sección III son del tipo

$$\begin{aligned} a^\alpha \int j_\lambda S_{n_x}^1 S_{n'_x t}^2 \cdot r^2 dr + b^\alpha \int j_\lambda S_{n_x}^2 S_{n'_x t}^1 \cdot r^2 dr = \\ = \int j_\lambda (a^\alpha S_{n_x}^1 S_{n'_x t}^2 + b^\alpha S_{n_x}^2 S_{n'_x t}^1) \cdot r dr \end{aligned}$$

Que con la ayuda de (B, 7) y (B, 5) se transforma en (Comparar (B, 7) con (B, 3))

$$\begin{aligned} \int j_\lambda (a^\alpha S_{n_x}^1 S_{n'_x t}^2 + b^\alpha S_{n_x}^2 S_{n'_x t}^1) \cdot r^2 dr = \frac{a_0^3 \cdot \tilde{N}_{n_x} \tilde{N}_{n'_x t} \cdot (b/2a)^\lambda}{2^{3/2} \cdot \Gamma\left(\lambda + \frac{3}{2}\right)} \\ \cdot \sum D_t^\alpha \frac{\Gamma(t' + \lambda + 3)}{(1 + b^2/a^2)^{t'+2} a^{t'+3}} \cdot F\left(\frac{\lambda - t'}{2} - \frac{1}{2}, \frac{\lambda - t'}{2}; \lambda + \frac{3}{2}; -\frac{b^2}{a^2}\right) \quad (\text{B},8) \end{aligned}$$

Lista de constantes numéricas utilizadas

$$a_{i,\mu}^1 = - \left[\frac{\lambda(\lambda - \mu + 2)(\lambda - \mu + 1)}{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda + 3)} \right]^{1/2}; \quad a_{i,\mu}^2 = \left[\frac{(\lambda + 1)(\lambda + \mu)(\lambda + \mu - 1)}{\lambda(2\lambda - 1)(2\lambda + 1)} \right]^{1/2}$$

$$\begin{aligned}
 b_{\lambda\mu}^1 &= \left[\frac{\lambda(\lambda + \mu + 2)(\lambda + \mu + 1)}{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda + 3)} \right]^{1/2}; & b_{\lambda\mu}^2 &= - \left[\frac{(\lambda + 1)(\lambda - \mu)(\lambda - \mu - 1)}{\lambda(2\lambda - 1)(2\lambda + 1)} \right]^{1/2} \\
 c_{\lambda\mu}^1 &= - \left[\frac{\lambda(\lambda + \mu + 1)(\lambda - \mu + 1)}{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda + 3)} \right]^{1/2}; & c_{\lambda\mu}^2 &= - \left[\frac{(\lambda + 1)(\lambda + \mu)(\lambda - \mu)}{\lambda(2\lambda - 1)(2\lambda + 1)} \right]^{1/2} \\
 a_{\lambda\mu} &= \left[\frac{(\lambda - \mu + 1)(\lambda + \mu)}{\lambda(\lambda + 1)} \right]^{1/2}; & b_{\lambda\mu} &= \left[\frac{(\lambda + \mu + 1)(\lambda - \mu)}{\lambda(\lambda + 1)} \right]^{1/2}; \\
 c_{\lambda\mu} &= \frac{\mu}{[\lambda(\lambda + 1)]^{1/2}} \\
 A_{lm}^1 &= \left[\frac{(l + m + 1)(l + m + 2)}{(2l + 1)(2l + 3)} \right]^{1/2}; & A_{lm}^2 &= - \left[\frac{(l - m)(l - m - 1)}{(2l - 1)(2l + 1)} \right]^{1/2} \\
 B_{lm}^1 &= - \left[\frac{(l - m + 1)(l - m + 2)}{(2l + 1)(2l + 3)} \right]^{1/2}; & B_{lm}^2 &= \left[\frac{(l + m)(l + m - 1)}{(2l - 1)(2l + 1)} \right]^{1/2} \\
 C_{lm}^1 &= - \left[\frac{(l + m + 1)(l - m + 1)}{(2l + 1)(2l + 3)} \right]^{1/2}; & C_{lm}^2 &= - \left[\frac{(l + m)(l - m)}{(2l - 1)(2l + 1)} \right]^{1/2} \\
 G_{lm}^+ &= H_{lm}^- = \left[\frac{(l + m + 1)}{2l + 1} \right]^{1/2} \\
 H_{lm}^+ &= - G_{lm}^- = \left[\frac{l - m}{2l + 1} \right]^{1/2}
 \end{aligned}$$

BIBLIOGRAFIA

- (1) W. HEITLER, Proc. of the Camb. Phil. Soc., 32, 112, 1936.
- (2) J. M. BLATT y V. F. WEISSKOPF, Theoretical Nuclear Physics, 790.
- (3) H. C. BRINKMAN, « Zur Quantenmechanik der Multipolstrahlung ». Proefschrift, Utrech, 1932.
- (4) A. SOMMERFELD, « Atombau und Spektrallinien ». II Band.
- (5) J. A. BALSEIRO, Rev. de la Unión Mat. Argentina, 12, 153, 1947.
- (6) Ver, p. ej., el art. de H. BETHE en Handbuch der Physik, 24, 1.
- (7) L. INFELD y T. E. HULL, Rev. of Mod. Phys., 23, 21, 1951.
- (8) J. M. BLATT y V. F. WEISSKOPF, Theoretical Nuclear Physics, 793.
- (9) Ver, p. ej., E. U. CONDON y G. H. SHORTLEY, The Theory of Atomic Spectra, 76.
- (10) G. RACAH, Phys. Rev., 62, 440, 1942.
- (11) G. N. WATSON, « Bessel Functions », 384.