

快报

利用子体系的变换系数计算四体系统的超球谐变换系数*

鲍 诚 光

(中山大学, 广州; 中国科学院理论物理所, 北京)

王 淮 淮

(中国科学院理论物理所, 北京)

摘 要

本文引入了四体系统内部变换系数和准欧拉角的概念, 从而简化了四体系统的超球谐变换系数的计算。

一、引 言

众所周知, 在解少体问题时, 超球谐形式是一种十分有用的工具。超球谐变换系数在超球谐形式的实际应用中起重要作用^[1]。本文在文献[1]的基础上, 引入了四体系统的内部变换系数和准欧拉角概念, 并利用三体系统的超球谐变换系数, 导出了简化计算四体系统的超球谐变换系数的第二方案。

二、内部变换系数和准欧拉角

考虑一个质量可互不相等的四体系统。

令 $r_i (i = 1, 2, 3)$ 是一族 Jacobi 坐标, 引入约化质量 μ_i 和系统总质量

$$M = \sum_{j=1}^4 m_j,$$

m_j 是第 j 个粒子的质量。引入矢量

$$\xi_i = \sqrt{\frac{\mu_i}{M}} r_i \quad (1)$$

于是, 在超球坐标中

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \xi \cos \phi_1 \\ \xi_2 &= \xi \sin \phi_1 \cos \phi_2 \quad (0 \leq \phi_1, \phi_2 \leq \pi/2) \end{aligned} \quad (2)$$

* 国家自然科学基金资助的课题
本文 1987 年 9 月 28 日收到。

$$\xi_3 = \xi \sin \phi_1 \sin \phi_2$$

其中 ξ 是超半径, ϕ_1, ϕ_2 是超角.

在超球谐形式下, 四体系统的总动能算子为

$$-T = \partial^2 / \partial^2 \xi + \frac{8}{\xi} \partial / \partial \xi + \frac{1}{\xi^2} L^2(Q) \quad (3)$$

这里, 为方便省略了常数 $\hbar^2 / 2M$, 其中 $L^2(Q)$ 是巨轨道角动量算子

$$L^2(Q) = \partial^2 / \partial^2 \phi_1 + \left(\frac{5 \cos \phi_1}{\sin \phi_1} - \frac{2 \sin \phi_1}{\cos \phi_1} \right) \partial / \partial \phi_1 - \frac{L^2(\xi_1)}{\cos^2 \phi_1} \\ + \frac{1}{\sin^2 \phi_1} \left[\partial^2 / \partial^2 \phi_2 + 2 \left(\frac{\cos \phi_2}{\sin \phi_2} - \frac{\sin \phi_2}{\cos \phi_2} \right) \partial / \partial \phi_2 - \frac{L^2(\xi_2)}{\cos^2 \phi_2} - \frac{L^2(\xi_3)}{\sin^2 \phi_2} \right] \quad (4)$$

其中超球角变量 $Q(\phi_1, \phi_2, \xi_1, \xi_2, \xi_3)$ 是只与形状和取向有关的一组 8 个变量. $L^2(\xi_i)$ 是与 ξ_i 相联系的轨道角动量算子. $L^2(Q)$ 的本征函数是所谓的超球谐函数 $Y_{[K]}(Q)$, 其表达式见[1], 其本征方程为

$$L^2(Q) Y_{[K]}(Q) = -\lambda_{[K]}(\lambda_{[K]} + 7) Y_{[K]}(Q) \quad (5)$$

其中 $[K]$ 表示一组 8 个量子数 $n_1 n_2 l_1 l_2 l_3 l_0 L M_L$, $\lambda_{[K]} = 2n_1 + 2n_2 + l_1 + l_2 + l_3$.

在同一族 Jacobi 坐标中, 超角的定义不是唯一的(例如可将(2)式左方的下标 123 依次改为 231 或 312, 由此得到另两族超角), 因而存在相互等价但超球角变量 Q 不同的三个坐标族, 以下用附加上标区分之. 显然, 对巨轨道算子 $L^2(Q)$ 存在

$$L^2(Q^i) = L^2(Q^j) = L^2(Q^k) \quad (6)$$

其中 Q^i 表示 $\phi_1^{(i)} \phi_2^{(i)} \xi_1 \xi_2 \xi_3$. 这表明, 属于同一本征值的不同的超球谐函数之间是可以互相展开的, 即:

$$Y_{[K]}(Q^i) = \sum_{[K']} Z_{[K]}^{[K']} Y_{[K']}(Q^j) \quad (7)$$

和

$$Y_{[K]}(Q^i) = \sum_{[K']} \tilde{Z}_{[K]}^{[K']} Y_{[K']}(Q^k) \quad (8)$$

我们称上两式中的展开系数 $Z_{[K]}^{[K']}$ 和 $\tilde{Z}_{[K]}^{[K']}$ 为四体系统的内部变换系数. 它们在求四体超球谐变换系数中起重要作用. 经推导可以得到内部变换系数为

$$Z_{[K]}^{[K']} = \delta_{n_1' n_2' n_1 n_2} \theta_{n_1}^{2k+3/2, l} \theta_{n_2}^{l_3 l_2} \sum_{m_1=0}^{n_1} \sum_{k=0}^{n_1-m_1} \sum_{m_2=0}^{n_2-m_2} (-1)^{n_1+n_2-m_1-m_2} \\ \cdot \begin{pmatrix} n_1 + \lambda_k + 2 \\ m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 + l_1 + 1/2 \\ n_1 - m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 - m_1 \\ k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_2 + l_3 + 1/2 \\ m_2 \end{pmatrix} \\ \cdot \begin{pmatrix} n_2 + l_2 + 1/2 \\ n_2 - m_2 \end{pmatrix} \cdot Q \quad (9)$$

其中

$$Q = \delta_{l_1' l_2} \delta_{l_2' l_3} \delta_{l_3' l_1} (-1)^{l_1+l_2+l_3} \hat{l}_0 \hat{l}'_0 W(l_2 l_3 L l_1; l_0 l'_0) \\ \cdot f_{2n_2'+l_1+l_3+3/2, l_2, n_1'}^{2(n_1+n_2-m_2+k)+l_1+l_3+3/2, 2(m_2+k)+l_2} \cdot f_{l_1' l_3' n_2'}^{2m_1+l_1, 2(n_1+n_2-m_1-m_2-k)+l_3} \quad (10)$$

数在
的内
体系

(1)

(2)

$$l_0 = (2l_0 + 1)^{1/2}, \quad l'_0 = (2l'_0 + 1)^{1/2}.$$

$\tilde{Z}^{[K]}$ 的表达式与 $Z^{[K]}$ 相同, 只是将 Q 变为 \tilde{Q} , 即

$$\begin{aligned} \tilde{Q} = & \delta_{l'_1 l_1} \delta_{l'_2 l_2} \delta_{l'_3 l_3} (-1)^{l_3 + l'_0 + L} l_0 l'_0 W(l_1 l_2 l_3; l'_0 l_0) \\ & \cdot f_{2n'_2 + l_1 + l_2 + 3/2, l_3, n'_1}^{2(m_1 + m_2 + k) + l_1 + l_2 + 3/2, 2(n_1 + n_2 - m_1 - m_2 - k) + l_3} \cdot f_{l_2, l_1, n'_2}^{2(m_2 + k) + l_2, 2m_1 + l_1} \end{aligned} \quad (11)$$

其中归一化常数 θ 和展开系数 f 等的定义与文献[1]一致。

由定义及超球谐函数的正交归一性可得到内部变换系数的如下性质:

$$Z^{[K]} = \tilde{Z}^{[K]} \quad (12.1)$$

$$\sum_{[K']} Z^{[K]} \tilde{Z}^{[K']} = \delta_{[K], [K']} \quad (12.2)$$

$$\sum_{[K']} \tilde{Z}^{[K]} Z^{[K']} = \delta_{[K], [K']} \quad (12.3)$$

$$\sum_{[K']} Z^{[K]} Z^{[K']} = \tilde{Z}^{[K]} \quad (12.4)$$

及

$$\sum_{[K']} \tilde{Z}^{[K]} \tilde{Z}^{[K']} = Z^{[K]} \quad (12.5)$$

下面讨论 α 和 β 两族不同的 Jacobi 坐标, 它们由正交矩阵 A 相联系,

$$\begin{pmatrix} \xi_i^\alpha \\ \xi_k^\alpha \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \xi_i^\beta \\ \xi_k^\beta \end{pmatrix} \quad (13)$$

A 同时也可以分解为 3 维正交矩阵之积

$$A = \begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \eta_1 & \sin \eta_1 \\ 0 & -\sin \eta_1 & \cos \eta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \eta_2 & \sin \eta_2 & 0 \\ -\sin \eta_2 & \cos \eta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \eta_3 & \sin \eta_3 \\ 0 & -\sin \eta_3 & \cos \eta_3 \end{pmatrix} \quad (14)$$

由于 A 不代表系统空间取向的欧拉转动, 故称 η_1, η_2, η_3 是准欧拉角, 分别代表在三体系统中的坐标变换。通常由 A 求 η_i 是容易的。因此, 一个四体系统不同的 Jacobi 坐标间的变换可以看成是三个子变换的依次乘积, 每一子变换只在一个三体子系统中进行。

三、四体系统的超球谐变换系数

利用上节引入的内部变换系数和准欧拉角概念, 并以三体系统的超球谐变换系数, 即 Raynal-Revai 系数^[2]为构件, 可以重新求得具有任意不同质量的四体系统的超球谐变换系数^[1]。

在 α_i Jacobi 坐标中的超球谐函数 $Y_{[K]}(Q^{\alpha_i})$ 为

$$Y_{[K]}(Q^{\alpha_i}) = \sin^{-3/2} \phi_1^{\alpha_i} P_{n_1}^{\lambda_k + 3/2, l_1}(\phi_1^{\alpha_i}) [Y_{l_1}(\xi_i^{\alpha_i}) \mathcal{Y}_{n_2, l_2, l_3}(\omega^{\alpha_i})]_L \quad (15)$$

其中 $P_n^{\lambda_k + 3/2, l_1}$ 的定义见文献[1], ω^{α_i} 表示 $\phi_2^{\alpha_i}, \xi_i^{\alpha_i}, \xi_k^{\alpha_i}$ (这里 $\tan \phi_2^{\alpha_i} = \xi_k^{\alpha_i} / \xi_i^{\alpha_i}$), $\mathcal{Y}_{n_2, l_2, l_3}$

是一个三体系统的超球谐函数^[3], ω^{a_i} 只与此三体系统有关, 因此在变换

$$\begin{pmatrix} \xi_i^{a_i} \\ \xi_j^{a_i} \\ \xi_k^{a_i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \eta_1 & \sin \eta_1 \\ 0 & -\sin \eta_1 & \cos \eta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_i' \\ \xi_j' \\ \xi_k' \end{pmatrix} \quad (16)$$

下, 超球角 Q^{a_i} 变为 Q' . 相应的超球谐函数间的变换可利用三体 Raynal-Revai 系数求得.

再观察(14)式可知下一个坐标变换(即与 η_2 相联系的变换)将在 ξ_i' 和 ξ_j' 之间进行, 为此可利用前一节所推导出的内部变换系数, 把与 ξ_i', ξ_j' 相联系的子系统孤立起来(即把超角重新选择为 $\tan \phi_2^{(k)} = \xi_i'/\xi_j'$, $\tan \phi_1^{(k)} = \sqrt{\xi_i'^2 + \xi_j'^2}/\xi_k'$). 利用这样的步骤, 经过三次准欧拉角转动和两次夹在其间的内部变换, 最终得到

$$Y_{[K]}(Q^{a_i}) = \sum_{[K]} a_{[K]}^{[K]}(A) Y_{[K]}(Q^{b_i}) \quad (17)$$

其中 a_i, β_i 代表两个不同的 Jacobi 坐标族. 展开系数正是所求的四体超球谐变换系数,

$$\begin{aligned} a_{[K]}^{[K]}(A) &= a_{[\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{l}_1, \tilde{l}_2, \tilde{l}_3, \tilde{l}_0]}^{[n_1, n_2, l_1, l_2, l_3, l_0]}(\eta_1, \eta_2, \eta_3) \\ &= \sum_{\substack{n_1' l_1' l_2' \\ n_2' l_2' l_3'}} R_{n_2' l_2' l_3'}^{n_2 l_2 l_3}(\eta_1) \sum_{\tilde{n}_1 \tilde{n}_2 l_0} \tilde{Z}_{[\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{l}_1, \tilde{l}_2, \tilde{l}_3, \tilde{l}_0]}^{[n_1, n_2, l_1, l_2, l_3, l_0]} \sum_{\substack{n_2'' l_2'' \\ n_2' l_2'}} R_{n_2'' l_2''}^{n_2 l_2 l_0}(\eta_2) \\ &\quad \cdot \sum_{\tilde{n}_2} \tilde{Z}_{[\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{l}_1, \tilde{l}_2, \tilde{l}_3, \tilde{l}_0]}^{[\tilde{n}_1, n_2', \tilde{l}_1, \tilde{l}_2, \tilde{l}_3, \tilde{l}_0]} R_{\tilde{n}_2' l_2' l_3'}^{\tilde{n}_2 l_2 l_3}(\eta_3) \end{aligned} \quad (18)$$

上式中求和的约束条件是下列五个恒等式:

$$\begin{aligned} 2n_2 + l_2 + l_3 &= 2n_2' + l_2' + l_3', & n_1 + n_2 &= \tilde{n}_1 + \tilde{n}_2, \\ 2\tilde{n}_2 + l_1 + l_2 &= 2n_2'' + \tilde{l}_1 + l_2'', & \tilde{n}_1 + n_2'' &= \tilde{n}_1 + \tilde{n}_2, \\ 2\tilde{n}_2 + l_2'' + l_3' &= 2\tilde{n}_2 + \tilde{l}_2 + \tilde{l}_3. \end{aligned} \quad (19)$$

此外, 求和还受角动量耦合的限制. 其中的 Raynal-Revai 系数 R 非常容易计算, 在文献[3]中给出了一个计算三体超球谐变换系数的一个 FORTRAN 程序.

内部变换系数和将整体变换分解的概念是普遍有用的概念. 本文提出的方法可用来计算 $N > 4$ 体系统的超球谐变换系数.

参 考 文 献

- [1] 鲍诚光, 中国科学 A 辑, 4(1987), 381.
- [2] J. Raynal and J. Revai, *Nuovo Cimento*, A68(1970), 612.
- [3] C. G. Bao, Y. P. Gan, and X. H. Liu, *Computer Phys. Comm.*, 36(1985), 401.

CALCULATIONS OF THE HYPERSPHERICAL TRANSFORMATION BRACKETS OF 4-BODY SYSTEMS BY USING THOSE OF THEIR SUBSYSTEMS

BAO CHENGGUANG

(Zhongshan University, Guangzhou, and Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica, Beijing)

WANG WEIWEI

(Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica, Beijing)

ABSTRACT

The concepts of internal transformation brackets of 4-body systems and quasi-Eular angle have been introduced in this paper. With their aid, the calculation of the 4-body hyperspherical transformation brackets can be greatly simplified by using those of the subsystems as building blocks.